

Inaugural-Dissertation

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

vorgelegt von
Dipl.-Ing. Martin C. Simon
aus Wien, Österreich

Tag der mündlichen Prüfung: 21.04.2010

Photoionisation
hochgeladener Ionen
durch weiche Röntgenstrahlung
in einer Elektronenstrahl-Ionenfalle

Gutachter:

PD Dr. José R. Crespo López-Urrutia

Prof. Dr. Klaus Blaum

Kurzfassung:

Gegenstand der vorliegenden Arbeit ist die Photoionisation von mehrfach bis hochgeladenen Ionen durch den Einsatz einer Elektronenstrahl-Ionenfalle am Elektronen-Speicherring für Synchrotronstrahlung BESSY II. Die hier vorgestellte, neue Methode erweitert den Bereich der Ionen, deren Photoionisations-Spektren vermessen werden können, weit über die Möglichkeiten bisheriger Verfahren hinaus, indem ein gut kontrolliertes Ensemble von Target-Ionen mit Flächendichten, die in etwa drei Größenordnungen über jenen von Ionsstrahlen liegen, bereitgestellt wird. Resultate für N^{3+} , $\text{Ar}^{8,10,12+}$ und $\text{Fe}^{12,14+}$ zeigen ausgezeichnete Auflösung und Sensitivität. Damit wird eine experimentelle Überprüfung theoretischer Verfahren zur Berechnung der Photoionisations-Wirkungsquerschnitte im Bereich hoher Ladungszustände und Ionisationspotentiale erstmals möglich. Die Identifizierung der Emissions- und Absorptionslinien in astrophysikalischen Röntgenspektren wird dadurch stichhaltiger. Hervorzuheben sind die Ergebnisse für das hierzu relevante Fe^{14+} , in dem *L*-Schalen Anregungen bis in den keV Bereich gemessen wurden. Ein Auflösungsvermögen von $E/\Delta E$ 6500 wurde dabei erreicht, wodurch Resonanzenergien und Aufspaltungen auf 100 bzw. 10 ppm bestimmt werden konnten. Darüber hinaus wurde ein vielversprechender Zugang zur Bestimmung absoluter Wirkungsquerschnitte demonstriert.

Abstract:

In this work photoionization of multiply and highly charged ions is studied using an electron beam ion trap and synchrotron radiation at the BESSY II electron storage ring. The new method introduced here extends the range of ions accessible for photoionization investigations beyond current limitations by providing a well controllable target of ions at about three orders of magnitude higher densities compared to ion beam targets. Data on N^{3+} , $\text{Ar}^{8,10,12+}$ and $\text{Fe}^{12,14+}$ show excellent resolution and sensitivity. This enables to benchmark numerous theoretical methods for the calculation of photoionization cross section in the range of high charge states and ionisation potentials for the first time. Thus the identification of emission and absorption lines in astrophysical spectra can be improved significantly. In this regard, a special emphasis should be given to the results of Fe^{14+} , where *L*-shell excitations could be measured up to the keV regime. A resolving power of $E/\Delta E$ 6500 was achieved, allowing for the accurate determination of resonance energies and splittings on a 100 and 10 ppm level, respectively. Moreover, a very promising approach toward the determination of absolute cross section was demonstrated.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Theorie	9
2.1	Wasserstoff-artige Systeme	10
2.2	Mehr-Elektronensysteme	12
2.3	Photoionisation	15
2.3.1	Direkte und resonante Photoionisation	15
2.3.2	Fano-Profile	17
2.3.3	Berechnung von PI-Wirkungsquerschnitten	18
2.3.4	Wirkungsquerschnitte und Resonanzstärke	20
2.4	Theoretische Methoden	21
2.4.1	MCDF - Multiconfiguration Dirac-Fock	21
2.4.2	Räumlich aufgeteilte Ansätze	22
2.4.3	Kompletter-Raum Ansätze	23
3	Status quo der Photoionisations-Experimente mit Ionen	25
3.1	Photoabsorption in dichten Plasmen	25
3.2	Die Merged-Beam Methode	27
3.3	Ionenfallen	29
3.4	Gegenüberstellung der Methoden	30
4	Experiment	31
4.1	Aufbau des Photoionisation-Experiments	32
4.2	Synchrotronstrahlung	35
4.2.1	Teilchenbeschleuniger	35
4.2.2	Moderne Synchrotron-Strahlungsquellen	37

4.2.2.1	Dipolmagnete, Undulatoren und Wiggler	39
4.2.3	BESSY	42
4.2.3.1	Synchrotronstrahlung in Berlin	42
4.2.3.2	Aufbau und Betrieb	42
4.2.3.3	Die verwendeten Strahlrohre	46
4.3	Elektronenstrahl-Ionenfallen	51
4.3.1	Grundprinzip	51
4.3.1.1	Ladungszustands-Verteilung	53
4.3.1.2	Raumladung und Ionendichte	54
4.3.2	Eine kurze Geschichte der EBIT	57
4.3.3	Einsatzgebiete	57
4.3.4	Die FLASH-EBIT	59
4.4	Photonen-Ionen Überlappung	60
4.5	Ionen-Extraktion	64
4.5.1	Ionenoptik	65
4.5.2	Elektrostatischer Ablenker	67
4.5.3	Sikler Linse	69
4.5.4	Wien Filter	71
4.5.5	Positionsempfindlicher Detektor	74
4.6	Messung	78
4.6.1	Datenaufnahme	78
4.6.2	Ionenidentifikation	80
4.6.3	Messmethoden	83
4.6.3.1	Zyklische Extraktion: niedrige Ladungszustände	84
4.6.3.2	Kontinuierliche Extraktion: hohe Ladungszustände	87
4.6.4	Kalibrierung der Photonen-Energie	88
4.6.4.1	Gaszellen Absorption	88
4.6.4.2	PhoBIS-Modus	89
4.6.4.3	Schrittweitenabhängige Verschiebung	90
4.6.4.4	Photonen zweiter Ordnung	94
4.6.4.5	Fehlerabschätzung für angegebene Photonen-Energien	95
4.7	Datenanalyse	98
4.7.1	Normierung auf den Photonenfluss	98
4.7.2	Allgemeines zur Auswertung	98

4.7.3	Vorläufige Auswertung	99
4.7.4	MPANT-Replay: Nachträgliche Analyse der Ereignislisten	100
4.7.5	Detaillierte Auswertung mit LabView-Programmen	100
5	Ergebnisse und Diskussion	103
5.1	Be-artige Stickstoff-Ionen: N^{3+}	105
5.2	Ne-artige Argon-Ionen: Ar^{8+}	112
5.3	O-artige und C-artige Argon-Ionen: Ar^{10+} und Ar^{12+}	117
5.4	Si-artige Eisen-Ionen: Fe^{12+}	119
5.5	Mg-artige Eisen-Ionen: Fe^{14+}	121
5.5.1	Absolute Wirkungsquerschnitte	121
5.5.1.1	Wechselwirkungszeit	122
5.5.1.2	Skalierung über die Ionisationskante	126
5.5.2	Photoionisations-Spektren	126
6	Zusammenfassung und Ausblick	137
A	Herleitungen und mathematische Betrachtungen	141
B	Erweiterte Ausführungen und nützliche Informationen	149
	Literaturverzeichnis	159

Konventionen für die vorliegende Arbeit

Relevante Abkürzungen und Akronyme

Institutionen, Datenbanken, Apparaturen

BESSY	Berliner Elektronenspeicherring für Synchrotronstrahlung
EBIS	Electron Beam Ion Source
EBIT	Electron Beam Ion Trap (Elektronenstrahl-Ionenfalle)
ECRIS	Electron Cyclotron Resonance Ion Source
FLASH	Freie Elektronen Laser in Hamburg
ID	Insertion Device
MPIK	Max-Planck-Institut für Kernphysik
NIST	National Institute of Standards and Technology
NORAD	Nahar Ohio State University Radiative Atomic Database
OP (TOP)	The Opacity Project
PSD	Position Sensitive Detector (Positionsempfindlicher Detektor)
PTB	Physikalisch Technische Bundesanstalt
TOPbase	Datenbank von TOP

Physikalische Größen, Prozesse, Theorien und Methoden

CATS	Cowans Atomic Structure Code
DLP (DLPP)	Dual Laser Produced Plasma
DR	Dielektronische Rekombination
FWHM	Full Width Half Maximum, Halbwertsbreite
HCI	Highly Charged Ions (hochgeladene Ionen)
HULLAC	Hebrew University Lawrence Livermore Atomic Codes
IP	Ionisationspotential
MB	Merged-Beam (Doppelbelegung: Multi Bunch)
MBPT (RMBPT)	Many Body Perturbation Theory (Relativistic)
MCDF	Multi-Configuration Dirac-Fock
PI	Photoionisation
QDT	Quanten Defekt Theory
QED	Quantenelektrodynamik
R Matrix	
RPA	Random Phase Approximation
(RPAE/RRPA)	RPA (with Exchange/Relativistic)
RR	Radiative Rekombination
WQ	Wirkungsquerschnitt

Aus dem Englischen übernommene Begriffe

Scan, scannen	Abtastung, abtasten, Abrasterung, rastern
Target	(beschossenes) Untersuchungsobjekt
Trigger	Auslöser, Auslösesignal
Beamline	Strahlrohr (synonym in Verwendung)
Insertion Device	Magnetfeldstruktur im linearen Speicherring-Abschnitt

Hervorhebungen, Farbcode, Definitionen

Programmnamen und Dateinamen werden in Schreibmaschinenschrift gedruckt
FIRMEN- UND PRODUKTNAMEN werden in Kapitälchen gedruckt
(Zahlen) in Klammern verweisen auf Gleichungen

Soweit wie möglich wurde versucht einen einheitlichen Farbcode für die Abbildungen einzuhalten. Die am häufigsten vorkommende farbliche Trennung betrifft:

rot	Elektronen	negative Potentiale
grün	Ionen	positive Potentiale
blau	Photonen (Synchrotronstrahlung)	Erdpotential

Messung wird als übergeordneter Begriff zu *Scan* verwendet (Eine Messung besteht aus mehreren Scans)

Belegte mathematische Symbole

α	Feinstrukturkonstante
α_e	Fitparameter (Index definiert näher)
f	Oszillatorstärke
f_q	Faktor (Index definiert näher)
Γ	Linienbreite
γ	relativistischer Faktor
k	Impuls, Ratenkoeffizient
m_e, m	Elektronenmasse
m	Magnetquantenzahl
N	Teilchenzahl (dimensionslos)
n	Hauptquantenzahl
n	Teilchendichte (Index definiert näher)
Ψ, ϕ	Wellenfunktionen
Φ_ν	Photonenflussdichte
q	Ladungszustand (dimensionslos)
q_F	Fanoparameter
s, \vec{S}	Spin (Gesamtspin)
s, a, b	Steigung, Fitparameter (linear)
S	Resonanzstärke
σ	Wirkungsquerschnitt
τ	Lebendauer, Zeitkonstante
Z	Kernladung

Deutsche Rechtschreibung

Die schriftliche Arbeit orientiert sich an der neuen deutschen Rechtschreibung, welche am 1. August 2006 in Kraft trat. In der aktuellen Form ist dem Schreibenden in vielen Punkten die Freiheit eingeräumt worden, sich für die eine oder andere Schreibweise zu entscheiden. Dies betrifft in erster Linie die Verwendung von Komma, Getrennt- oder Zusammenschreibung sowie der Einsatz von Bindestrichen:

§ 45: Man kann einen Bindestrich setzen zur Hervorhebung einzelner Bestandteile, zur Gliederung unübersichtlicher Zusammensetzungen, zur Vermeidung von Missverständnissen oder beim Zusammentreffen von drei gleichen Buchstaben.

Speziell in den Fällen, wo zusammengesetzte Wörter aus drei oder mehr einzelnen Wörtern bestehen, werden in dieser Arbeit Bindestriche gesetzt:

- *Elektronenstrahlenergie* → *Elektronenstrahl-Energie*,
- *Synchrotronstrahlungsquellen* → *Synchrotron-Strahlungsquellen*,
- *Targetionenflächendichte* → *Targetionen-Flächendichte*.

Bei zusammengesetzten Wörtern aus zwei Bestandteilen werden nur Ausnahmen gemacht, um entweder die Lesbarkeit zu erleichtern

- *Targetion* ⇔ *Target-Ion* (t trifft auf Ion → Ähnlichkeit mit Nation udgl.),
- *Photonenenergie* ⇔ *Photonen-Energie* (Photo(ne)³rgie)
- *Elektronen-Geschwindigkeit* (lange Wörter),

oder um Bedeutungsunterschiede erkennbar zu machen

- *Ionen-Extraktion* ⇔ *Ionenextraktion* (Experimenteller Aufbau ⇔ Methode).

Flüchtigkeits- und Rechtschreibfehler, sowie Wiederholungen, Inkonsistenzen und österreichische Stilblüten wurden nach besten Wissen und Gewissen gesucht und behoben. Eine vollständige Beseitigung ist wohl kaum gelungen, daher bitte ich um Entschuldigung und hoffe, in Hinblick auf die Veröffentlichungen in *Journal of Physics* und *Physical Review Letters*, welche gegen Ende dieser Dissertation Priorität hatten, auch auf Verständnis.

Kapitel 1

Einleitung

"Den Rest meines Lebens werde ich darüber nachdenken, was Licht ist!"

Albert Einstein, 1917

Licht und *Materie* waren von Anfang im Zentrum menschlichen Bemühens um ein Verständnis der physikalischen Wirklichkeit. Die Reifung dieser Konzepte in den Wissenschaften ging mit berühmten Streitfragen und der Entwicklung neuer Theorien einher. Noch an der Schwelle zum 20. Jahrhundert war die Existenz des Atoms nicht unumstritten und auch die entschieden geglaubte Debatte über den Wellen- oder Teilchencharakter des Lichts entflammte neu. Bis dahin galt, nach der Entdeckung von Interferenzerscheinungen und mit den berühmten Gleichungen, die *James C. Maxwell* in den Jahren 1861-1864 formulierte [1; 2; 3], Licht als elektromagnetische Welle perfekt verstanden. Es waren Phänomene der *Wechselwirkung* von Licht mit Materie, welche Teilcheneigenschaften offenbarten und eine Weiterentwicklung der Theorie des Lichts erforderten.

Im Jahr 1900 postulierte *Max Planck* zur Erklärung des Spektrums eines schwarzen Strahlers in der Herleitung seines Strahlungsgesetzes zum ersten Mal die Idee einer Wechselwirkung in Portionen (*Quanten*) des Lichts mit Materie [4]. Dies gilt als die Geburtsstunde der höchst erfolgreichen *Quantentheorie* und markiert den Beginn einer Entwicklung die unsere Auffassung vom Aufbau der Materie revolutionierte. Noch offensichtlicher zeigte sich der Teilchencharakter des Lichts beim *photoelektrischen Effekt*. Fällt elektromagnetische Strahlung auf eine Metalloberfläche, so kann dies zur Emission von Elektronen führen (Photoelektronen). Dabei wurden im Wesentlichen folgende Zusammenhänge festgestellt, die nicht zum Wellenbild passten. Das Einsetzen der Emission und die kinetische Energie der Photoelektronen E_{kin}^e hängen nicht von der Intensität der Strahlung ab, sondern von ihrer Frequenz ν . Der Emissionsstrom hingegen ist proportional zur Intensität. *Albert Einstein* zeigte 1905 in einer seiner bahnbrechenden Veröffentlichungen dieses berühmten Jahres [5], dass dieses Verhalten mittels der von Planck postulierten Lichtteilchen (Photonen) über eine simple Energiebilanz verständlich wird:

$$E_{kin}^e = h\nu - \Phi_W , \quad (1.1)$$

wobei h das Planck'sche Wirkungsquantum und Φ_W die materialabhängige Austrittsarbeit

beit ist. Führt man dieses Experiment nicht an einem Festkörper, sondern an Atomen, Molekülen bzw. Ionen durch, so spricht man vom *atomaren Photoeffekt* oder von *Photoionisation*. Die Wechselwirkung von Licht mit Materie in Form der Photoionisation hochgeladener Ionen durch Synchrotronstrahlung ist Thema der vorliegenden Arbeit, wobei es auch um die Einführung einer neuen experimentellen Methode geht, die dieses Feld entscheidend voran bringt.

Die Photoionisation wird mit den Methoden der (Photonen-) Spektroskopie untersucht, welche auf der Analyse des Lichts basiert, das von Materie ausgesandt oder absorbiert wird. Nach den Entdeckungen am Beginn des letzten Jahrhunderts und speziell durch die Entwicklung der Atomtheorie stieg diese Disziplin von einer empirischen zu einer quantitativen Wissenschaft auf. Die Beobachtung von Emissions- bzw. Absorptionslinien werden Übergängen zwischen Energieniveaus gebundener Elektronen zugeordnet. Die Spektroskopie liefert bis heute wie kaum ein andere Disziplin umfangreiche, detaillierte und präzise Informationen über physikalische Systeme. Die unzähligen Methoden, Anwendungen und Teilbereiche der Spektroskopie sind Ausdruck ihrer Vielseitigkeit und Bedeutung. Besonders hervorzuheben ist die *Resonanzspektroskopie*, da sie die genauesten Untersuchungen zulässt. Dazu wird die Emission von Licht nicht passiv beobachtet, sondern der zugehörige Übergang aktiv angeregt. Bei der Photoionisation der Ionen erfolgt diese aktive Anregung durch Synchrotronstrahlung. Diese Wechselwirkungen von atomaren Ionen mit dem elektromagnetischen Feld gehört zweifelsfrei zu den fundamentalsten und gleichzeitig relevantesten Prozessen der Atomphysik. Fundamental, weil es sich um die einfachsten Elektronenstrukturen von realer Bedeutung handelt und relevant, weil Ionen unter anderem in astrophysikalischen Plasmen omnipresent sind.

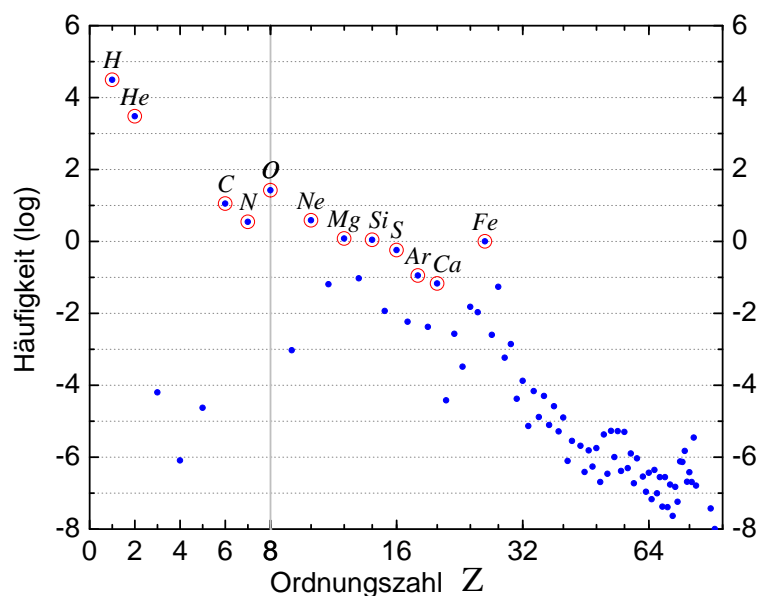


Abbildung 1.1: Übersicht der Häufigkeit der Elemente in unserem Sonnensystem [6; 7; 8]. Die Häufigkeiten sind auf Eisen normiert ($\text{Fe} \equiv 10^0 = 1$) und logarithmisch dargestellt. Die zwölf häufigsten und dementsprechend astrophysikalisch bedeutendsten Elemente [9] sind rot markiert. Die Ordnungszahl Z auf der Abszisse wechselt von einer linearen Skala für $Z \leq 8$ auf eine logarithmische für $Z \geq 8$.

So beruht der Erkenntnisgewinn in der Astronomie als beobachtende Wissenschaft beinahe ausschließlich auf der spektralen Analyse der elektromagnetischen Strahlung, welche aus den verschiedensten Bereichen des Kosmos zur Erde vordringt. Aus der Analyse dieser Spektren wird deutlich, dass die baryonische Materie im Kosmos fast gänzlich im ionisierten bis hochionisierten Zustand vorliegt [10]. Aus dem Blickwinkel der Astrophysik sind es vor allem die wesentlich häufiger vorkommenden leichten Elemente, welche detailliert untersucht werden müssen [9]. Abbildung 1.1 zeigt Häufigkeitsverteilung für unser Sonnensystem [6; 7; 8]. Jenseits von Argon bzw. Kalzium sticht die auffällige Überhöhung für Eisen ins Auge. In den astrophysikalischen Spektren treten Emissions- und Absorptionslinien der Ionen dieser Elemente zahlreich auf und erlauben Rückschlüsse auf relative Häufigkeiten der Elemente und die Verteilung der Ionisationszustände, sowie Temperaturen, Dichten und Geschwindigkeiten. Allerdings erfordern solch weitreichende Interpretationen gute Kenntnis der Linienpositionen und -stärken, zumal die Zuordnung gegebenenfalls unter Mitberücksichtigung der expansionsbedingten Rotverschiebungen erfolgen muss. Die in diesem sowie in anderen Gebieten der Astrophysik (z.B. Simulation astrophysikalischer Plasmen, Opazitäten in der Hülle von Sternen, ...) benötigten atomphysikalischen Daten sind so umfangreich, dass sie praktisch nur mittels Berechnungen bereit gestellt werden können. Zu den bekanntesten Bemühungen dieser Art zählt das "Opacity Project" [11; 12], welches danach strebt, zuverlässige Vorhersagen aller relevanten Elemente in den verschiedenen Ionisationszuständen zu erzeugen. Dennoch müssen diese Berechnungen mit gezielten Messungen stichprobenartig überprüft werden, um entscheidende Impulse zur kontinuierlichen Verbesserung der theoretischen Methoden zu geben. Speziell im Fall der Photoionisation hochgeladener Ionen klafft eine große Lücke in unserem experimentell gesicherten Wissen, obwohl diese Prozesse wichtige Absorptionmechanismen im Vakuumultraviolett (VUV) und Röntgenbereich sind.

In jüngster Zeit erlebt die Astrophysik gerade bei diesen Energien eine spannende Blütezeit. Die Röntgenobservatorien *Chandra* und *XMM-Newton* [13; 14], welche im Juni bzw. Dezember 1999 auf ihre Umlaufbahnen gebracht wurden, liefern Beobachtungen von hervorragender Qualität, die leider häufig durch die Ungenauigkeiten und Unsicherheiten der zur Interpretation der Daten herangezogenen theoretischen Modelle konterkariert wird.

Zu den intensiv diskutierten Fragen des vergangenen Jahrzehnts gehört die "Suche nach den fehlenden Baryonen" [17; 18; 19; 20]. Im Vergleich zum Baryonieninhalt des früheren Universums (höhere Rotverschiebungen), welche auch mit Analysen des *Kosmischen Mikrowellen Hintergrunds* (engl.: *cosmic microwave background - CMB*) übereinstimmen, konnten bei geringen Rotverschiebungen weniger als 10% der erwarteten Menge an Baryonen detektiert werden. Simulationen ergaben, dass rund die Hälfte der Baryonen in riesigen, filamentartigen Strukturen bei geringer Dichte zwischen den Galaxien und Galaxiehaufen verbleibt, welche einen wesentlichen Teil der fehlenden Baryonen beherbergen könnten. Die Temperaturen dieses schwer detektierbaren intergalaktischen Mediums liegen im Bereich von 10^5 bis 10^7 K, was zur Bezeichnung WHIM führte (engl.: *warm hot intergalactic medium*). Abbildung 1.2 zeigt eine graphische Darstellung zur Verteilung des WHIM, wie sie aus einer solchen Simulation folgt [15; 16]. Einer der vertrauenswürdigsten Nachweise dieser Strukturen basiert auf Absorptionslinien von O^{5+} [21].

Eine weiteres aktuelles Problem ergab sich bei der Analyse der Röntgenspektren aktiver Galaxienkerne (engl.: *active galactic nuclei - AGNs*), welche Absorptionslinien von

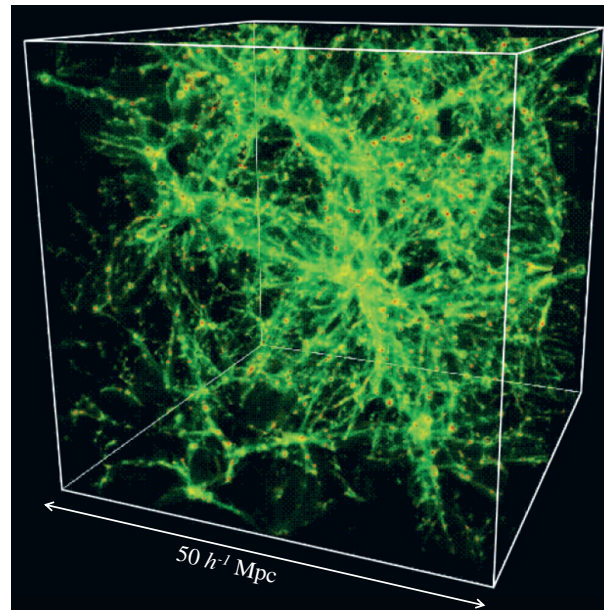


Abbildung 1.2: Das Kosmische Netz (engl.: *cosmic web*). Simulation der Dichteverteilung des WHIM (Gas bei Temperaturen von 10^5 bis 10^7 K) im Universum farbcodiert dargestellt [15; 16]. Zwischen den Galaxien bzw. Galaxiehaufen besonders hoher Dichte liegen riesige Strukturen die bei nur leicht erhöhter Dichte, welche rund 50% der baryonischen Materie enthalten. Mit freundlicher Genehmigung von *Romeel Davé*.

ausströmenden Ionen enthalten. L -Schalen Anregungen hochgeladener Eisenionen sind in den Spektren von *Chandra* als nicht aufgelöste, breite Strukturen (engl.: *unresolved transition arrays - UTAs*) sichtbar. Basierend auf Berechnungen mit dem Atomstruktur-Code HULLAC [22] wollte man Aussagen über die Austrittsgeschwindigkeit der Ionen machen [23]. Unerkannte Ungenauigkeiten dieser Vorhersagen führten zu der falschen Schlussfolgerung, dass die hochgeladenen Eisenionen Teil eines ruhenden Halos sein könnten und nicht dem ausströmenden Gas angehören. Die Autoren dieser Publikation weisen explizit darauf hin, dass bestätigende experimentelle Vergleichsdaten noch ausstehen und erwähnen die Schwierigkeit solcher Labormessungen. Erst erheblich verbesserte Rechnungen von Gu *et al.* [24], die eine bisher selten vollbrachte Kombination aus rechnerischem Aufwand und theoretischer Gründlichkeit darstellen, konnten das fragwürdige Resultat korrigieren. Die endgültige Klärung von experimenteller Seite wurde in der vorliegenden Arbeit mittels der Ergebnisse zu Fe^{14+} erbracht.

Neben der astrophysikalischen Relevanz ist die fundamentale Bedeutung der präzisen Kenntnis der elektronischen Struktur von Ionen hervorzuheben. Alle positiven atomaren Ionen bilden ausgehend von den rund 80 stabilen Elementen ein Arsenal von über 3000 Untersuchungsobjekten. Unterscheidet man zusätzlich die stabilen Isotope, so kommt man sogar auf über 13 000. Vom Ein-Elektronensystem, als im Rahmen der Quantenelektrodynamik nahezu exakt lösbares Problem, bis hin zum Vielteilchensystem mit komplexen Elektronen-Korrelationen in Form von Inter- und Intraschalen Wechselwirkungen stehen damit in allen Abstufungen Studienobjekte zur Verfügung. Besonders aufschlussreich sind vergleichende Untersuchungen entlang bestimmter Sequenzen, bei denen Systeme mit gleicher Anzahl an Elektronen (*isoelektronisch*), das gleiche Element in verschiedenen La-

dungszuständen (*isonuklear*) oder auch Ionen mit gleichem Ladungszustand (*isoionisch*) verglichen werden. Bindungsenergien von wenigen Elektronenvolt (eV) bis 132 keV im Extremfall von 91-fach geladenem Uran sind vertreten. Die im letzteren Fall involvierte Energie ist mit der Ruhemasse des Elektrons vergleichbar (511 keV). Relativistische Effekte, welche im Rahmen der Dirac-Theorie erfasst werden, führen hier zu beträchtlichen Verschiebungen und Aufspaltungen der Energieniveaus. Weitere Beiträge, die sich erst durch quantenfeldtheoretische Behandlungen erklären lassen, sowie anschaulichere Effekte, wie beispielsweise Einflüsse der endlichen Kerngröße, skalieren mit hohen Potenzen der Kernladungszahl Z und können daher an schweren hochgeladenen Ionen am besten untersucht werden [25].

Die Erforschung der Photoionisation ein und mehrfach geladener Ionen hat eine vergleichsweise kurze Geschichte [26]. Dagegen begann die Untersuchung der Photoionisation neutraler Atome bzw. Moleküle in der Gasphase bereits im Jahr 1887 mit der Entdeckung des photoelektrischen Effekts durch *Heinrich Hertz*. Bahnbrechende Fortschritte wurden auf theoretischer Seite erst durch die Theorie der Atomstruktur von *Nils Bohr* [27] eingeleitet und auf experimenteller Seite mit der Entwicklung der Vakuumtechnik und speziell durch die Verfügbarkeit intensiver, monochromatischer Synchrotronstrahlung möglich. Solche Untersuchungen atomarer Systeme gestalten sich an Edelgasen am einfachsten und erfolgten schon 1963 [28]. Nach wie vor sind Photoionisations-Experimente zur Klärung fundamentaler Fragen in der Atomtheorie von höchster Aktualität. Ein prominentes, viel diskutiertes Beispiel ist die Helium Zwei-Photonen Doppelionisation. Experimente hierzu messen die Energie- und Winkelverteilung der beiden Photoelektronen (vielfach differentielle Wirkungsquerschnitte) [29; 30] und die Ergebnisse werden mit theoretischen Berechnungen verglichen [31; 32; 33; 34]. Dazu sind Reaktionsmikroskope [35], welche kinematisch vollständige Analysen des physikalischen Prozesses ermöglichen, an den stärksten bzw. brilliantesten derzeit verfügbaren Strahlungsquellen, sogenannten *Freie Elektronen Lasern* im Einsatz. Solche Messungen bieten besonders spannende Einblicke in die Korrelation der beiden Elektronen des Heliumatoms.

Sollen Photoionisations-Experimente an Ionen durchgeführt werden, so steht man vor der Herausforderung die einander abstoßenden Ionen in hohen Dichten präparieren zu müssen, was mit zunehmenden Ladungszustand erhöhte Schwierigkeiten bereitet. Daher beschränken sich bisherige Studien an Ionen fast ausschließlich auf die Vermessung (einfach differentieller) Wirkungsquerschnitte als Funktion der Photonen-Energie und auf schwache Felder (Ein-Photon Prozesse). Vermessung der Winkel- und Energieverteilung der Photoelektronen sind bisher die Ausnahme [36; 37] [38; 39]¹. Jedoch bieten bereits die energiedifferentiellen Untersuchungen insbesondere zu den auftretenden *resonanten Prozessen* detaillierte Einblicke in die elektronische Struktur der atomaren Ionen und deren Wechselwirkung mit dem elektromagnetischen Feld. Zum Beispiel haben Photoionisations-Studien an den Übergangsmetallen der vierten Periode (Kalzium bis Nickel) entscheidend zum besseren Verständnis der wetteifernden $3d$ und $4s$ Zustände beigetragen [40].

Im Wesentlichen waren bisher zwei etablierte Methoden im Einsatz [41; 42]. Die eine basiert auf Photoabsorption in einem dichten Plasma, welches typischerweise mittels Laser erzeugt wird (*dual laser produced plasma*). Dabei ist die Genauigkeit jedoch begrenzt, weil

¹wobei dort genau genommen *neutrales* Neon doppelionisiert wurde

verschiedene Ionen zur Absorption beitragen. Wesentlich selektiver und exakter arbeitet die sogenannte MB Methode, bei der ein Ionenstrahl mit monochromatisierter Synchrotronstrahlung coaxial zusammengeführt wird. Mit dieser Technik konnten auch absolute Wirkungsquerschnitte vermessen werden, wobei die Genauigkeit allerdings häufig durch eine unvermeidliche Beimengung von Ionen in metastabilen Zuständen reduziert wird. Wie bereits erwähnt wird es zu höheren Ladungszuständen immer schwieriger die erforderlichen Ionendichten in Form eines Ionenstrahls bereitzustellen. *John B. West* propagierte 2001 in seinem Überblickswerk zur Photoionisation atomarer Ionen [41] die Ausweitung der Experimente auf höhere Ladungszustände neben der Spektroskopie der Photoelektronen als eine der Haupt-Herausforderungen.

Tatsächlich wurden seit 2001 auch wesentliche Fortschritte mit der MB Methode erzielt und Ionen bis in Ladungszustände von $q=9$ im Falle des Elements Cerium (${}_{58}\text{Ce}$) vermessen [43; 44]. Allerdings liegt hier ein schweres Ion vor, bei dem selbst solch relativ hohe Ladungszustände noch nicht mit besonders hohen Ionisationspotentialen verbunden sind ($E_{IP}^{\text{Ce}9+} \approx 141$ eV). Für das astrophysikalisch äußerst relevante Eisen reicht eine aktuelle Studie der isonuklearen Sequenz bis zum sechsfach geladenem Ion ($E_{IP}^{\text{Fe}6+} \approx 122$ eV) [45], wobei für Fe^{5+} und Fe^{6+} keine absoluten Messungen möglich waren. Die Erweiterung zu höheren Ionisationspotentialen hin scheitert in erster Linie an den Targetdichten, welche in Ionenstrahlen zu höheren Ladungszuständen stark abnehmen, da die erforderlichen Photonen-Energien an den Synchrotron-Strahlungsquellen, an denen MB Apparaturen aufgebaut sind, prinzipiell verfügbar sind. Das zeigen Untersuchungen zur Innerschalen-Anregungen von Ionen niedriger Ladungszustände. Beispielsweise wurden Anregungen der K-Schalen in C^{2+} [46] und Ne^+ sowie Ne^{2+} [47] bei 293 eV bzw. 850 eV vermessen.

Die vorliegende Arbeit zeigt nun auf, wie Photoionisations-Experimente an mehrfach, hoch- und in Zukunft auch höchstgeladenen Ionen durch den Einsatz einer Elektronenstrahl-Ionenfalle (engl.: *electron beam ion trap* - *EBIT*) an modernen Strahlungsquellen bewerkstelligt werden können. Dieser Typ von Falle übernimmt gleichzeitig die Produktion der hochgeladenen Ionen und erreicht Ionendichten, die in etwa drei Größenordnungen über denjenigen in den bekannteren Penning- bzw. Paul-Fallen sowie von Ionenstrahlen der MB Apparaturen liegen. Darüber hinaus bieten Elektronenstrahl-Ionenfallen ausgezeichnete Kontrolle über die Ladungszustandsverteilung sowie über Wechselwirkungszeiten. Diese Eigenschaften sind von besonderer Relevanz für Photoionisations-Experimente mit einer EBIT bzw. für die Bestimmung absoluter Wirkungsquerschnitte. Konkret wurde die transportable, sogenannte FLASH-EBIT² am Berliner Elektronenspeicherring für Synchrotron Strahlung (BESSY II) eingesetzt, um innerhalb von zwei Kampagnen insgesamt drei verschiedene Elemente (N, Ar, Fe) in Ladungszuständen bis zu $q=14$ bei Photonen-Energien, die bis in das keV-Regime reichen, zu vermessen. Für eine Resonanz in Fe^{14+} bei 807 eV wurde dabei ein Auflösungsvermögen von $E/\Delta E=6500$ erreicht. Die FLASH-EBIT wurde am Max-Planck-Institut für Kernphysik in Heidelberg zum externen Einsatz an modernen Strahlungsquellen entwickelt und von *Sascha Epp* im Rahmen seiner Doktorarbeit aufgebaut [49]. Zwei wesentliche Merkmale dieser EBIT sind erstens die waagrechte Lage des Elektronenstrahls, die eine axiale Überlappung der Ionen mit Photonenstrahlen moderner

²Die Namensgebung hängt mit dem ursprünglichen Einsatz am VUV Freie Elektronen Laser in Hamburg (FLASH) zusammen, wobei u.a. Resonanzspektroskopie an Fe^{23+} erfolgreich durchgeführt wurde [48; 49]

Strahlungsquellen ermöglicht und damit höchstmögliche Ionenflächendichten garantiert. Zweitens hält der geschlossene kryogene Heliumkreislauf die im Vakuum integrierten supraleitenden Spulen unterbrechungsfrei und wartungsarm auf Temperaturen von rund 4 K und erzeugt damit gleichzeitig beste Vakuumbedingungen.

Die Idee eine Elektronenstrahl-Ionenfalle an Synchrotron-Strahlungsquellen einzusetzen, um Photoionisations-Experimente an hochgeladenen Ionen durchzuführen ist keineswegs neu. Bereits 1994 stellte eine Gruppe in Tokyo um *Scott D. Kravis* eine Elektronenstrahl-Ionenquelle (engl.: *electron beam ion source - EBIS*) vor, welche speziell für Messungen an der *photon factory synchrotron radiation facility* konzipiert wurde [50]. Einige Berichte über Testmessungen liegen vor [51], bei denen ausgehend vom neutralen Atom sukzessive Photoionisation zur Erzeugung höherer Ladungszustände genutzt wurde. Gezielte Photoionisations-Messungen nach Erzeugung und Speicherung der Ionen mit der EBIS lassen sich in der Literatur allerdings nicht finden. Deshalb ist davon auszugehen, dass die Durchführung zum damaligen Zeitpunkt nicht geglückt ist. In diesem Zusammenhang ist auch der Einsatz einer Penning-Falle an der *National Synchrotron Light Source* (NSLS) in Brookhaven einer Gruppe um *David A. Church* erwähnenswert. Ausgehend von Ar^{2+} wurden über Photoionisation durch Breitband Wiggler-Strahlung Argonionen in Ladungszuständen bis $q=8$ erzeugt und nachgewiesen [52; 53; 54; 55]. Fallen scheinen dann für diese Anwendungen in Vergessenheit geraten zu sein. Vermutlich besteht ein Zusammenhang mit den zeitgleich aufkommenden MB Experimenten durch *I. C. Lyon et al.* bzw. *B. Peart et al.* an der *Daresbury Synchrotron Radiation Source* [56; 57; 58; 59; 60], wo von Anfang an absolute Wirkungsquerschnitte bestimmt werden konnten. Kürzlich sind Vorteile der Ionenfallen für Photoionisations-Experimente wiederentdeckt worden. *Thissen et al.* zeigten an Xe^+ -Ionen, dass zum Beispiel die Unterdrückung von Target-Ionen in metastabilen Zuständen in einer Penning-Falle möglich ist [61].

Abbildung 1.3 gibt einen Überblick über Ionen, welche in den letzten Jahren mittels MB, *dual laser produced plasma* und in Einzelfällen auch mit Ionenfallen vermessen wurden und vergleicht dazu die Ergebnisse der vorliegenden Arbeit. Die Darstellung gibt die Ordnungszahl Z des Elements auf der Ordinate und den Ladungszustand q auf der Abszisse an und verdeutlicht damit eindrucksvoll die beträchtliche Ausweitung der durch die neue Methode der Photoionisation zugänglichen Systeme.

Die Ergebnisse zu Fe^{14+} verdeutlichen das Potential der Elektronenstrahl-Ionenfallen. Bei einem hohen Ionisationspotential von 456 eV wurde Sensitivität auf Wirkungsquerschnitte im kbarn-Bereich gezeigt. Resonante Photoionisation konnte bei Photonen-Energien gemessen werden, die bis in das keV Regime reichen. Eine Resonanz ($2p3d$) bei rund 800 eV wurde demonstriert, das sehr genaue Bestimmungen von absoluten Wirkungsquerschnitten prinzipiell möglich sind. Hier konnte außerdem ein Auflösungsvermögen von $E/\Delta E=6500$ erreicht werden, ein Wert der im Energiebereich von 300 eV bis 2.5 keV für hochgeladene Ionen kaum übertroffen wird und welcher sehr genaue Energie Bestimmungen ermöglichen soll.

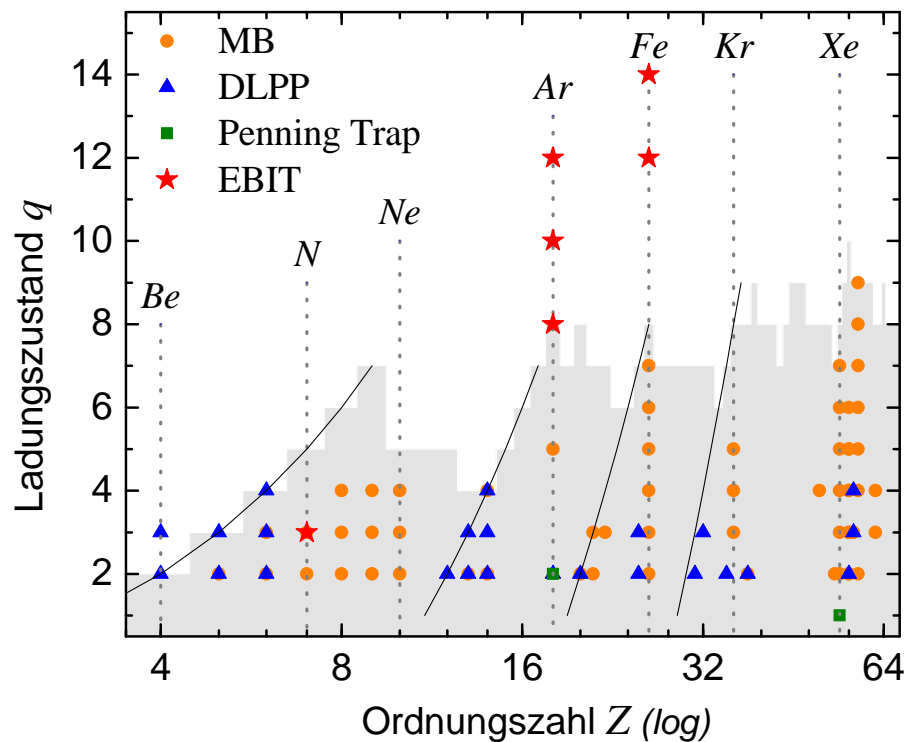


Abbildung 1.3: Übersicht der Ionen, mit denen Photoionisations-Experimente durchgeführt wurden anhand der Darstellung der vermessenen Ladungszustände q gegenüber der Ordnungszahl Z des jeweiligen Elements logarithmisch aufgetragen. Die graue Schattierung markiert Ionen, deren (erstes) Ionisationspotential unterhalb von 150 eV liegt. Bisherige Experimente mit der MB Methode (orange Kreise), der *dual laser produced plasma* Methode (blaue Dreiecke) sowie zwei Ergebnisse mit Penning-Fallen (grüne Quadrate) sind im Wesentlichen nicht über diesen Bereich (grau schattiert) hinaus gekommen. Ergebnisse der vorliegenden Arbeit (rote Sterne) zeigen die deutliche Ausweitung des Bereichs, welcher durch die vorgestellte Methode für Photoionisations-Experimente zugänglich ist. Die durchgezogenen Linien markieren Schalenabschlüsse.

Die Arbeit ist folgendermaßen aufgebaut: Zunächst werden im Kapitel *Theorie* die Grundlagen zu hochgeladenen Ionen und zur Photoionisation vorgestellt und erarbeitet. Da es sich hier auch um die Einführung einer neuen Methode handelt, werden die wichtigsten etablierten Methoden in einem eigenen Kapitel vorgestellt. Aus dem selben Grund fällt das nachfolgende Kapitel *Experiment* etwas länger aus. Es deckt sowohl den Versuchsaufbau, als auch die Durchführung der Messung und die Datenanalyse ab. Nach der Präsentation und Diskussion der *Ergebnisse* schließt die Arbeit mit *Zusammenfassung und Ausblick*.

Kapitel 2

Theorie

Um die Resultate der durchgeführten Photoionisations-Experimente mit Ionen und hochgeladenen Ionen (bzw. auch mit Atomen) interpretieren zu können, ist ein Grundverständnis der Atomstruktur Voraussetzung. Hier geht es vor allem um den Übergang vom exakt löslichen Wasserstoff-artigen System (kurz: H-artig) zu den Mehr-Elektronensystemen, die mittels Näherungen und numerischer Verfahren behandelt werden müssen. Auf diese Weise wird gleichzeitig die fundamentale Bedeutung der Untersuchungen an hochgeladenen Ionen verdeutlicht. Darauf aufbauend werden die Prozesse diskutiert, welche bei der Photoionisation (PI) solcher Systeme auftreten. Es folgt eine Skizze und ein Vergleich der theoretischen Ansätze, auf denen computerunterstützte Berechnungen beruhen. Das Hauptziel dieses Kapitels ist es, die Grundlagen für ein qualitatives Verständnis der Resultate zu vermitteln und einen Einblick in die Komplexität des Problems zu geben. Anders gesagt, die Theorie wird vom Blickwinkel des Experimentalphysikers aus vorgestellt. Eine detaillierte Beschreibung sei den Experten überlassen (z.B. [62; 63; 64]), gemäß dem Grundsatz:

"Schuster, bleib bei Deinem Leisten."

Apelles, Maler im antiken Griechenland

Wenn nicht anders angegeben werden hier atomare Einheiten verwendet:

$$\text{Atomare Einheiten: } m_e = \hbar = |e| = 4\pi\epsilon_0 = 1. \quad (2.1)$$

2.1 Wasserstoff-artige Systeme

Bereits ein Proton und ein gebundenes Elektron bieten in ihrem Zusammenspiel einen Facettenreichtum, dessen Beschreibung gewaltige Leistungen und Geniestreiche namhafter Physiker erforderte. An vorderster Front stehen *Bohr*, *Schrödinger*, *Dirac* und *Feynman*, deren Namen Meilensteine in der Entwicklung der Atomtheorie markieren. Da diese Grundlagen dem geeigneten Leser mit großer Wahrscheinlichkeit bekannt sein dürften, werden hier nur die Resultate zusammengefasst. Ansätzen und Lösungswege sind in zahlreichen Lehrbüchern der Grundlagenphysik bzw. der theoretischen Physik ausgeführt.

Aus den *Bohr'sche Postulaten* [27] konnten die Bindungsenergie des Elektrons in der n -ten Schale bereits hergeleitet werden:

$$E_n = -\frac{Z^2}{2 n^2}, \quad (2.2)$$

wobei Z die Kernladungszahl ist und n auch als Hauptquantenzahl bezeichnet wird. Die *Schrödinger-Gleichung* [65; 66; 67] liefert mit einem revolutionären Zugang und der Idee von Wellenfunktionen noch die gleichen Werte. Die Energieniveaus sind nun (ohne Spin) n^2 -fach entartet. Zur vollständigen Charakterisierung der Zustände werden daher zusätzlich zur Hauptquantenzahl n (Schale) die Bahndrehimpuls-Quantenzahl l (Unterschale) und die Magnetquantenzahl m eingeführt. Dirac gelang eine kovariante Formulierung der Schrödinger-Gleichung. Die *Dirac-Gleichung* genügt also den Prinzipien der speziellen Relativitätstheorie und hat weitreichende Konsequenzen. Die Wellenfunktion musste zu einem Spinor erweitert werden, welcher von theoretischer Seite die Einführung von Spin und Antiteilchen der Elektronen sozusagen "erzwingt". Außerdem treten bei hohen Energien Effekte auf (Kleinsches Paradoxon) die später zur Entwicklung der Feldtheorie Anlass gaben. Die Dirac-Theorie bewirkt eine Verschiebung aller Energieniveaus und eine Aufhebung der Entartung nach dem Gesamtdrehimpuls $j = l \pm \frac{1}{2}$ (Feinstruktur). Die exakte Lösung im idealen $\frac{1}{r}$ Zentralpotential

$$E_{n,j} = \frac{1}{\alpha^2} \left(1 + \frac{(\alpha Z)^2}{\left(n - j - \frac{1}{2} + \sqrt{\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - (\alpha Z)^2} \right)^2} \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (2.3)$$

kann nach den dominanten Termen entwickelt werden

$$E_{n,j} = \frac{1}{\alpha^2} - \frac{Z^2}{2 n^2} - \frac{\alpha^2 Z^4}{2 n^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4 n} \right) + \dots, \quad (2.4)$$

wobei $\alpha \approx 1/137$ für die Feinstrukturkonstante steht. Hier erkennt man die Ruheenergie des Elektrons ($1/\alpha^2 \equiv m_e c^2$), die Bindungsenergien, wie sie die Schrödinger Theorie ergibt (2.2) und einen dritten Term der j enthält und beispielsweise im Wasserstoff-Atom ($Z=1$) Beiträge liefert, die in etwa vier Größenordnungen unter den typischen Bindungsenergien liegen. Für schwere Elemente hingegen ($\alpha Z \approx 1$) sind die relativen Beiträge wesentlich größer, was mit ein Grund für das Interesse an schweren hochgeladenen Ionen ist. Der Ausdruck in Klammern ist immer positiv ($j + \frac{1}{2} \leq l + 1 \leq n$) und wird für größere Werte von j kleiner. Das bedeutet, dass nach Dirac alle Elektronen stärker gebunden

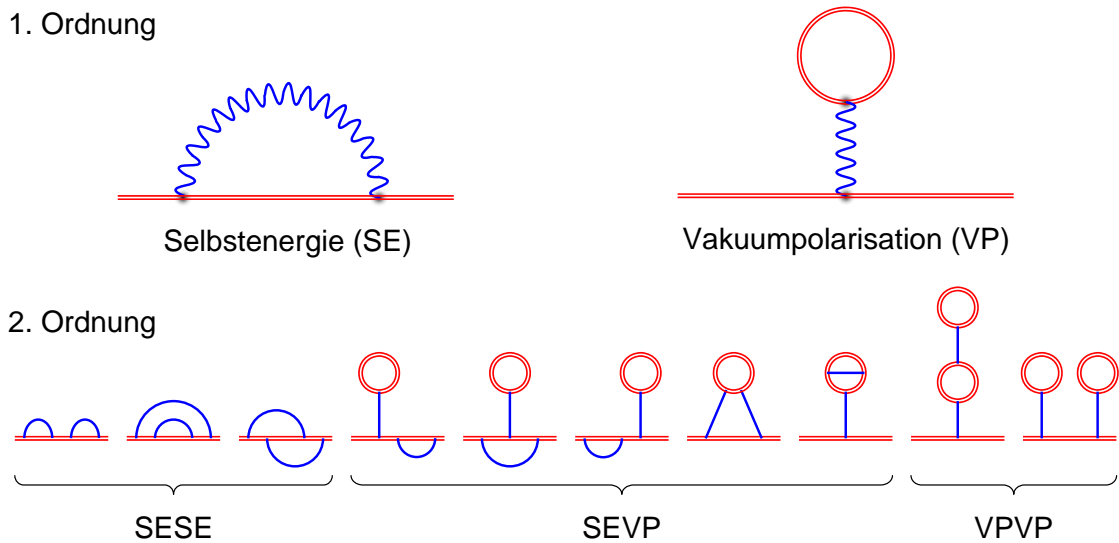


Abbildung 2.1: Feynman-Diagramme für die QED-Beiträge erster und zweiter Ordnung. Die rote Doppellinie steht für gebundene Elektronen, die blauen Linien (bzw. Wellen) für Photonen. Zur Berechnung des Beitrages kann jedes Diagramm mittels der Feynman-Regeln in den entsprechenden mathematischen Ausdruck übersetzt werden. Beispielsweise ist jeder Wechselwirkungsknoten (engl.: *vortex*) mit einem Faktor $-ie\gamma_\mu$ verbunden. Die beiden dominanten Prozesse erster Ordnung (zwei Knoten), welche näherungsweise in Berechnungen zur Photoionisation von Ionen mitberücksichtigt werden sollten, sind *Selbstenergie* (engl.: *self energy* - *SV*) und *Vakuumpolarisation* (engl.: *vacuum polarization* - *VP*).

(Verschiebung) sind und insbesondere jene mit kleinem Gesamtdrehimpuls, wodurch die Entartung nach j aufgehoben wird (Aufspaltung).

Die Dirac-Theorie stimmt mit den experimentellen Befunden wesentlich besser überein, als nicht relativistische Berechnungen. Es zeigen sich aber weitere Verschiebungen und Aufspaltungen, die zusammen als die *Lamb-shift* bezeichnet werden. Sie fasst anschauliche Terme, wie Kerngrößen-Effekte und Wechselwirkung mit dem Kernspin (Hyperfeinstruktur), sowie die Effekte der *Quantenelektrodynamik* (QED) zusammen. Letztere ist die Beschreibung der elektromagnetischen Wechselwirkung im Rahmen der Quantenfeldtheorien und berücksichtigt die ständige Wechselwirkung mit dem Strahlungsfeld. Die Beiträge der QED können nach Ordnungen, welche die Anzahl der beteiligten virtuellen Photonen angeben, entwickelt werden. Mitberücksichtigung der Terme erster Ordnung, *Selbstenergie* (engl.: *self energy* - *SV*) und *Vakuumpolarisation* (engl.: *vacuum polarization* - *VP*), ist in vielen Fällen ausreichend (z.B. bei der Photoionisation). Die Beiträge können mittels der *Feynman-Diagramme* veranschaulicht werden. Abbildung 2.1 zeigt Terme erster und zweiter Ordnung.

Zusammenfassend sind die Aufspaltung und Verschiebung der Energieniveaus, die sich mit der jeweiligen erweiterten theoretischen Beschreibung ergaben, in Abbildung 2.2 dargestellt. Zahlenwerte für die beiden "Extremfälle" Wasserstoff-Atom und H-artiges Uran U^{91+} geben eine Vorstellung der involvierten Energien und relativen Verhältnisse.

Die gängige Notation für den Zustand des einzelnen Elektrons soll vor dem Übergang zu

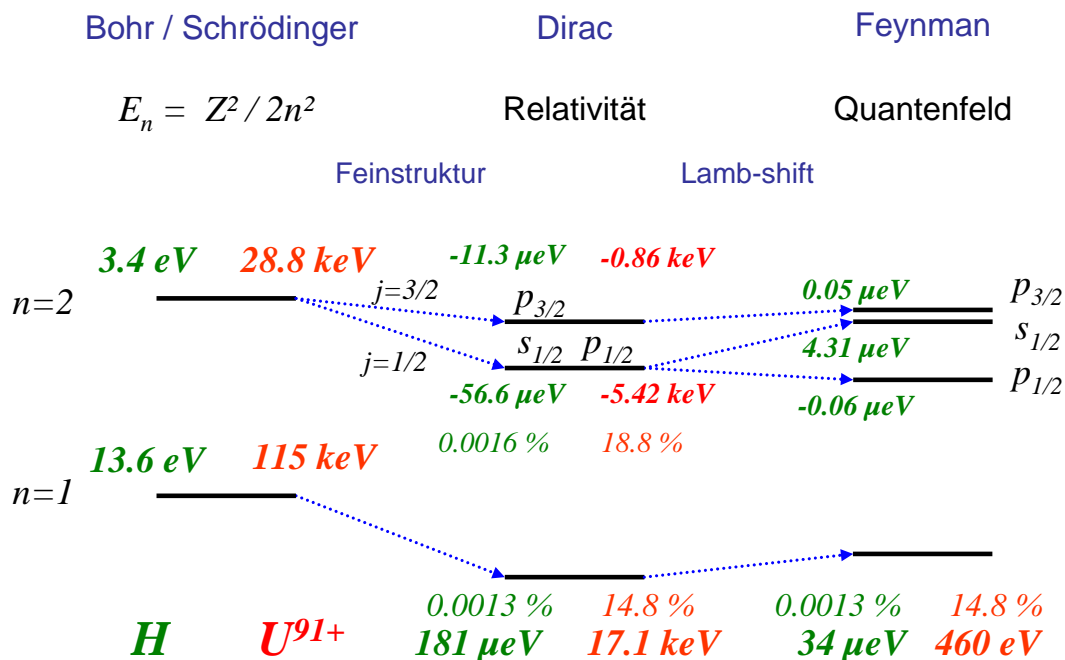


Abbildung 2.2: Die Verschiebung und Aufspaltung der Energieniveaus für H-artige Systeme durch die Feinstruktur (Dirac-Gleichung) und die QED (nicht maßstäblich). Für die Extremfälle Wasserstoff und H-artiges Uran U^{91+} sind einige Bindungsenergien bzw. Verschiebungen angegeben. Prozentuelle Angaben beziehen sich auf die Bohr/Schrödinger Bindungsenergien. Die Hyperfeinstruktur, die für Wasserstoff in der Größenordnung der Lamb-shift liegt, wurde zwecks Übersichtlichkeit nicht eingezeichnet.

den Mehr-Elektronensystemen noch angeben werden:

$$n l_j \dots (1s_{1/2}, 2s_{1/2}, 2p_{1/2}, 2p_{3/2}, 3s_{1/2}, 3p_{1/2}, 3p_{3/2}, 3d_{3/2}, 3d_{5/2}, \dots), \quad (2.5)$$

wobei für den Bahndrehimpuls l die gängigen spektroskopischen Bezeichnungen verwendet werden, welche sich historisch aus der Charakterisierung der beobachteten Serien ergeben hat (sharp s , principal p , diffuse d , fundamental f , alphabetisch fortgesetzt) Da j im Ein-Elektronensystem nur die Werte $l - \frac{1}{2}$ oder $l + \frac{1}{2}$ annehmen kann, ist es ohne Informationsverlust möglich j durch \pm zu ersetzen. In diesen Notationen sind die statistischen Gewichte der Zustände mit $(2j + 1)$ gegeben. Für die eindeutige Identifikation fehlt die Magnetquantenzahl m_l , die in einer weniger gebräuchlichen Notation mitberücksichtigt wird

$$n l_{m_l}^{sign(s)} \dots (1s_0^+, 1s_0^-, 2s_0^+, 2s_0^-, 2p_{-1}^+, 2p_{-1}^-, 2p_0^+, \dots), \quad (2.6)$$

2.2 Mehr-Elektronensysteme

Im Rahmen der Schrödinger-Gleichung (und unter Berücksichtigung des Spin) sollen die wesentlichen Aspekte der Mehr-Elektronensysteme vorgestellt sowie Unterschiede zum H-Atom aufgezeigt werden, denn gewisse Ähnlichkeiten sorgen manchmal für Verwirrung.

Der Hamilton-Operator muss folgender Maßen erweitert werden:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_i^N \Delta_i - Z \sum_i^N \frac{1}{|\vec{r}_i|} + \sum_{i<j}^N \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}, \quad (2.7)$$

wobei die erste Summe die kinetischen Energien der N Elektronen berücksichtigt, die zweite Summe die potentielle Energie der Elektronen im Coulomb-Feld des anziehenden Kerns und die letzte Doppelsumme die potentiellen Energien der einander abstoßenden Elektronen. Die zugehörige Wellenfunktion Ψ ist im Produktraum aus den N Hilberträumen zu den Ein-Elektron Wellenfunktionen φ_i definiert ($\mathcal{H}^N = \bigcup_i^N \mathcal{H}_i$). Auf Grund der Ununterscheidbarkeit der Elektronen hat der Zustand eines einzelnen Elektrons im Mehr-Elektronensystem streng genommen keine Bedeutung mehr. Genau diese Ununterscheidbarkeit zusammen mit der Forderung nach einer antisymmetrischen Gesamtwellenfunktion für Fermionen führt zum Ausschließungs-Prinzip nach *Wolfgang Pauli* (Pauli-Prinzip) und ist Ursache für den komplexen Schalenaufbau der atomaren Elektronenhüllen. Mathematisch betrachtet ist Ψ ein Element des antisymmetrischen Unterraums von \mathcal{H}^N .

Stellt man sich den Grundzustand¹ (energetisch günstigste Konfiguration) zunächst dennoch vor, indem man nach und nach die tiefsten gebundenen Zustände im Potential des Z -fach geladenen Kerns mit Elektronen besetzt, so scheint eine jeweilige Zuordnung von Ein-Elektronen-Zustände möglich und sinnvoll. Auf diese Weise teilt man den einzelnen ($i = 1 \dots N$) Elektronen "eigene" Bahndrehimpulse \vec{l}_i und Spins \vec{s}_i zu. Der Mehr-Elektronen Zustand Ψ erhält dann folgende Notation:

$$\Psi : \quad (\text{Ein-Elektronen Zustände}) \quad {}^{2S+1}L_J^\pi, \quad (2.8)$$

wobei

$$\vec{L} = \sum_i^N \vec{l}_i \quad , \quad \vec{S} = \sum_i^N \vec{s}_i \quad , \quad \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}, \quad (2.9)$$

und die Quantenzahlen L , S und J hängen folgender Maßen mit dem orts- (Ψ_L) bzw. spinabhängigen (Ψ_S) Anteil der Gesamtwellenfunktion zusammen:

$$\begin{aligned} \vec{L}^2 \Psi_L &= L(L+1) \Psi_L, \\ \vec{S}^2 \Psi_S &= S(S+1) \Psi_S, \\ \vec{J}^2 \Psi &= J(J+1) \Psi. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Die Parität von Ψ wird mit π gekennzeichnet ($\pi\Psi = \pm\Psi$) mit e zum Eigenwert $+1$ (engl.: *even*) und o zum Eigenwert -1 (engl.: *odd*). Ein Mg-artiges System mit zwölf Elektronen (wie beispielsweise Fe^{14+}) hat die Grundzustand-Konfiguration

$$1s_{1/2}^2 2s_{1/2}^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3s_{1/2}^2 {}^1S_0^e.$$

Die Ein-Elektronen Zustände sind aber nicht mit den Lösungen des H-artigen Systems zu verwechseln, worauf etwas weiter unten nochmals eingegangen wird. In vielen Fällen kann die detaillierte Angabe von j entfallen ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$) bzw. geschlossene Schalen durch das

¹die Idee funktioniert auch mit angeregten Zuständen, wobei dann die die tiefsten Zustände besetzt werden.

entsprechende Edelgas abgekürzt werden ($Ne\ 3s^2$), oder ganz wegfallen ($3s^2$). Stellt man sich nun vor, dass beispielsweise ein $2p$ Elektron in einen ns Zustand angeregt wird so kann man den den Übergang angeben ($2p \rightarrow ns$), oder die Konfiguration des neuen Zustands. Im letzteren Fall können entweder die besetzten Zustände gelistet werden ($1s^2 2s^2 2p^5 3s^2 ns$) oder man gibt das entstehende "Loch" durch einen negativen Exponenten an ($2p^{-1} ns$), wodurch eine Ähnlichkeit mit der Angabe des Übergangs entsteht, obwohl ein Zustand kodiert wird. Die Notation könnte nahe legen, dass die Anregung nur einen Ein-Elektronen Zustand verändert (bzw. zwei: Loch-Elektron). Tatsächlich lässt so ein Übergang nur die Notation der anderen Ein-Elektronenzustände unberührt, nicht aber deren physikalische Wellenfunktionen.

Antisymmetrische Produkte der Ein-Elektronen-Wellenfunktionen können als Slater-Determinante dargestellt werden:

$$\Psi_{Slater}(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(\vec{r}_1) & \dots & \varphi_1(\vec{r}_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_N(\vec{r}_1) & \dots & \varphi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} . \quad (2.11)$$

Es ist allerdings nicht gesagt, und im Allgemeinen auch nicht der Fall, dass die exakte Lösung als Slater-Determinanten angegeben werden kann. Daraus resultiert eine prinzipielle Unterteilung der Näherungsverfahren:

- Unabhängige Teilchen Modell (engl.: *independent particle modell*)
- Berücksichtigung von Elektron-Elektron-Korrelationen

Im ersten Fall sucht man die Ein-Elektron-Wellenfunktionen, die als Slater-Determinante die exakte Lösung Ψ bestmöglich nähern. Dazu hat sich das Hartree-Fock Verfahren (HF) bewährt, welches auch als Verfahren des selbstkonsistenten Feldes bezeichnet wird. Für die Berechnung der Ein-Elektronen-Wellenfunktionen werden die Beiträge der anderen Elektronen in Form eines mittleren Feldes berücksichtigt. Wenn selbiges aus den Ein-Teilchen-Wellenfunktionen ermittelt wird, entsteht ein iteratives Verfahren. Die exakte Lösung kann mit dieser Methode prinzipiell nicht gefunden werden. Physikalisch betrachtet werden in solchen Modellen Korrelationen zwischen den Elektronen ignoriert.

Um diese Wechselwirkung zu berücksichtigen kann beispielsweise ein erweiterter Ansatz für die Produkt-Wellenfunktionen gesucht werden, typischerweise in Form einer Korrelationsfunktion

$$\Phi_{corr}(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N) = \Phi_{Slater}(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N) \cdot f_{corr}(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N) . \quad (2.12)$$

Für Systeme mit wenigen Teilchen (z.B. Helium) [68] ist die Methode oft ausreichend effektiv. Ein allgemeinerer Ansatz verwendet Superpositionen von Slater-Determinaten (Konfigurationen), wobei nur solche zusammengesetzt werden dürfen, welche die gleichen Quantenzahlen L , S , J und π haben

$$\Psi = \sum_k^{N_Z} a_k \Psi_{Slater}^k . \quad (2.13)$$

Die Aufgabe reduziert sich auf die Bestimmung der Koeffizienten a_k . Der Elektron-Elektron Korrelation wird hier durch Wechselwirkung der Konfigurationen (engl.: *configuration interaction* - CI) Rechnung getragen. Mit dieser Methode kann man der exakten Lösung beliebig nahe kommen, wozu allerdings unendlich viele Slater-Determinanten superponiert werden müssten. Die praktisch erreichbare Genauigkeit hängt davon ab, wie viele Zustände in die Entwicklung eingebunden werden, also vom Zeit- und Rechenaufwand. Die beiden Methoden, HF und IC, können auch kombiniert werden. Im sogenannten *Multi-Konfigurations Hartree-Fock* Verfahren werden sowohl die Koeffizienten a_k als auch die Slater-Determinanten optimiert. Die relativistische Variante heißt *Multi-Konfigurations Dirac-Fock* Verfahren und ist unter der Abkürzung MCDF geläufig (engl.: *multiconfiguration Dirac-Fock*). Die erreichten Genauigkeiten bei der Vorhersage der Energie-Eigenwerte liegen für diese Verfahren typischerweise bei 0.1%.

2.3 Photoionisation

Bevor auf die quantenmechanische Beschreibung des Photoionisations-Prozesses eingegangen wird, sollen Photoionisations-Spektren, welche aus Messungen in Abhängigkeit der Photonen-Energie resultieren, qualitativ erklärt werden. Dabei werden die Prozesse der *direkten* und der *resonanten* Photoionisation unterschieden, deren Interferenz zu den bekannten Fano-Profilen führt. Anschließend quantitative Ausführungen beziehen sich in erster Linie auf den direkten Prozess. Grundlagen zu Wirkungsquerschnitten und Resonanzstärken werden besprochen, weil sie für das Verständnis der Messung zur Bestimmung absoluter Photoionisations-Wirkungsquerschnitte hilfreich sind.

Im Unterschied zu Gleichung (1.1) wird die Photonen-Energie hier mit ω notiert (atomare Einheiten), während $h\nu$ als symbolisches Zeichen für Photonen Verwendung findet (bzw. SI-Einheiten andeutet).

2.3.1 Direkte und resonante Photoionisation

Betrachtet man Licht im Teilchenbild, so ist der untersuchte Photoionisations-Prozess eines q -fach geladenen Ions (Z^q) die Reaktion, bei der ein Photon absorbiert wird und dabei seine Energie auf ein Elektron überträgt, welches darauf hin nicht mehr gebunden ist:



Damit es zur Photoionisation kommen kann muss die Energie des Photons (ω) größer sein als das Ionisationspotential $E_{PI}^{Z^q}$. In Analogie zum Photoeffekt (1.1) ergibt sich aus der Energieerhaltung folgender Zusammenhang mit der klassischen kinetischen Energie des Elektrons $E_{kin}^e = k^2/2$

$$\omega = E_{PI}^{Z^q} + \frac{k^2}{2} . \quad (2.15)$$

In Abbildung 2.3 ist dieser Prozess schematisch dargestellt. Der zeitinverse Prozess zur Photoionisation ist die *radiative Rekombination* (RR). Qualitativ zeigt der Wirkungsquerschnitt der direkten Photoionisation einen scharfen Anstieg an der Schwellenenergie

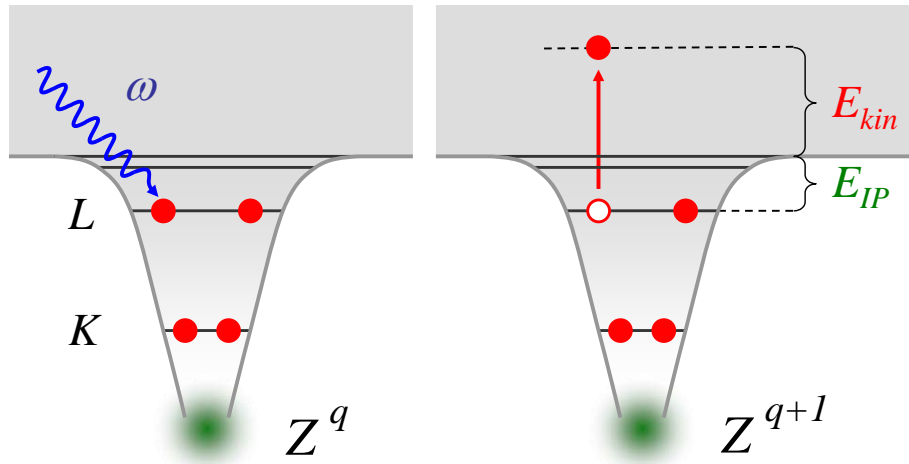


Abbildung 2.3: Die direkte Photoionisation. Ein Photon wird von einem Ion Z^q absorbiert und überträgt seine gesamte Energie direkt auf ein Elektron, welches dadurch nicht mehr gebunden ist. Der Ladungszustand des Ions wird dadurch um 1 erhöht Z^{q+1} (Ionisation).

$\omega = E_{IP}^{Z^q}$ (Ionisationskante) und ab dann einen kontinuierlich abfallenden Verlauf mit in etwa der dritten Potenz der Photonen-Energie. Weitere Ionisationskanten treten jeweils auf, wenn die Photonen-Energie ausreicht, um auch tiefer gebundene Elektronen direkt ins Kontinuum zu befördern. Die Ionisation innerer Elektronen hinterlässt einen angeregten Zwischenzustand, weshalb die Beobachtung des zeitinversen Prozesses hierzu höchst unwahrscheinlich ist. Dieser Zwischenzustand kann sich radiativ abregen oder über einen Auger-Prozess zerfallen (Autoionisation). Im letzteren Fall erscheint die gesamte Reaktion als Doppelionisation.

Ein angeregter Zustand, kann aber auch entstehen, wenn das Photon ein tiefer gebundenes Elektron in einen angeregten Zustand hebt (Z^q)*. Dazu muss die Photonen-Energie gleich der entsprechenden Übergangsenergie sein (Resonanzenergie). Auch in diesem Fall kann der angeregte Zustand durch Abstrahlung oder Autoionisation relaxieren, $\omega = E_{res} > E_{IP}$ vorausgesetzt. Im ersten Fall ist das Resultat resonante Streuung. Im zweiten Fall gelangt man zum gleichen Endzustand, wie bei der direkten Photoionisation. Dies führt zu quantenmechanischen Interferenzen, die im Anschluss näher besprochen werden. Die Schritte des resonanten Prozesses sind in Abbildung 2.4 schematisch dargestellt. Der zeitinverse Prozess zur resonanten Photoionisation ist die *dielektronische Rekombination* (DR). Autoionisierende Zustände können aber nicht nur über Anregung eines tief gebundenen Elektrons erzeugt werden, wie in Abbildung 2.4 dargestellt, sondern auch über Doppelanregung (Z^q)** zweier Elektronen der äußersten (Unter-) Schale. Solche sogenannten *Ein-Photon-Zwei-Elektron* Prozesse werden beispielsweise bei Be-artigem N^{3+} beobachtet: $1s^2 2s^2 \rightarrow 1s^2 2pn s$. Der zeitinverse Prozess entspricht in diesem Fall der *trielektronischen Rekombination* (TR).

$$h\nu + Z^q \rightarrow (Z^q)^* \text{ bzw. } (Z^q)^{**} \rightarrow Z^{q+1} + e, \quad (2.16)$$

Die Resonanzen hängen mit Elektronenübergängen im Target-Ion zusammen und liefern daher genaue Informationen über dessen Struktur. Ergänzend liefern Ionisationskanten

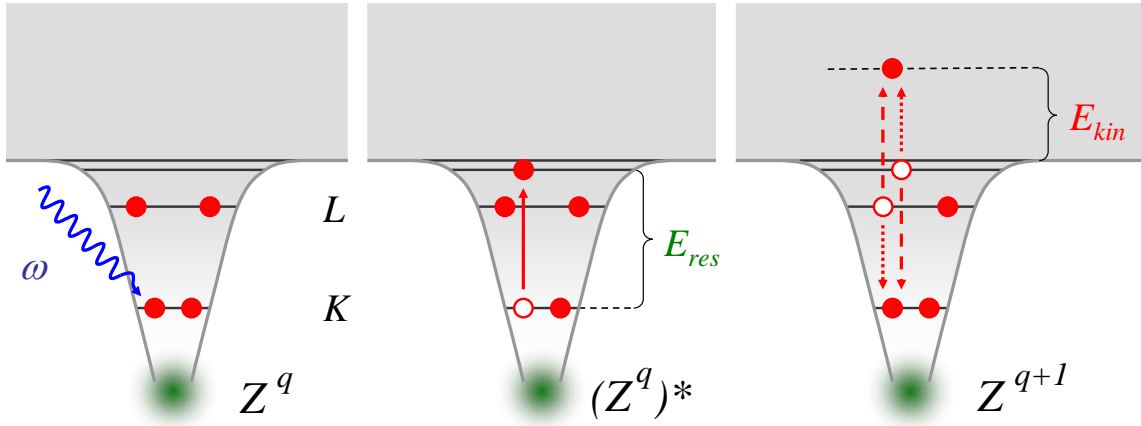


Abbildung 2.4: Die resonante Photoionisation. Ein Photon passender Energie versetzt das Ion Z^q in einen angeregten Zustand $(Z^q)^*$. Ist die Anregungsenergie größer als das Ionisationspotential, so kann die Abregung in Form eines Auger-Prozesses (Autoionisation) erfolgen, wodurch der Ladungszustand des Ions um 1 erhöht wird (Z^{q+1}).

Informationen über die absoluten Bindungsenergien. Der Beitrag der Resonanzen zum gesamten Wirkungsquerschnitt ist keineswegs gering. Die Photoionisations-Raten, die durch die Wechselwirkung eines thermischen Strahlungskontinuums mit den Ionen entstehen, können durchaus dominante Beiträge der Resonanzen aufweisen.

2.3.2 Fano-Profil

Da resonante und direkte Photoionisation den gleichen Anfangs- und Endzustand haben, kommt es zu quantenmechanischen Interferenzen, die sich auf die Form des Linienprofils auswirken. Ugo Fano hat das resultierende asymmetrische Profil in einer viel zitierten Arbeit [69] theoretisch erklärt und gibt folgende Formel an, welche ausgezeichnete Übereinstimmung mit den experimentellen Befunden liefert:

$$\frac{(q_F + \epsilon)^2}{1 + \epsilon^2}, \quad \epsilon = \frac{E_{res} - \omega}{2\Gamma}, \quad (2.17)$$

wobei q_F der Fano Asymmetrie-Faktor und Γ die Breite der Resonanz sind und die skalierte Energie ϵ verwendet wurde. Das Fano-Profil geht für $|q_F| \rightarrow \infty$ in ein Lorentz-Profil über. $q_F=0$ entspricht dem Fall destruktiver Interferenz, woraus ein negatives Lorentz-Profil resultiert (negativ bedeutet, dass die Interferenz in Summe zu niedrigeren Wirkungsquerschnitten führt, als der direkte Prozess alleine liefert). Das Maximum liegt nicht bei der Resonanzenergie E_{res} ($\epsilon=0$), sondern bei $\epsilon=1/q_F$. Das Vorzeichen von q_F legt fest, ob das Maximum zu höheren oder niedrigeren Photonen-Energien verschoben wird. In Abbildung 2.5 sind Profile für einige Werte von q_F dargestellt. Um aus experimentellen Resonanzkurven mit erkennbarer Asymmetrie die Resonanzenergie richtig bestimmen zu können, muss für den Fit ein Fano-Profil verwendet werden. Im Anhang (Seite 146) finden sich Anmerkungen wie dazu im Einzelfall eine experimentelle Verbreiterung mitberücksichtigt wurde. Interferenzeffekte sind immer dann am ausgeprägtesten, wenn die

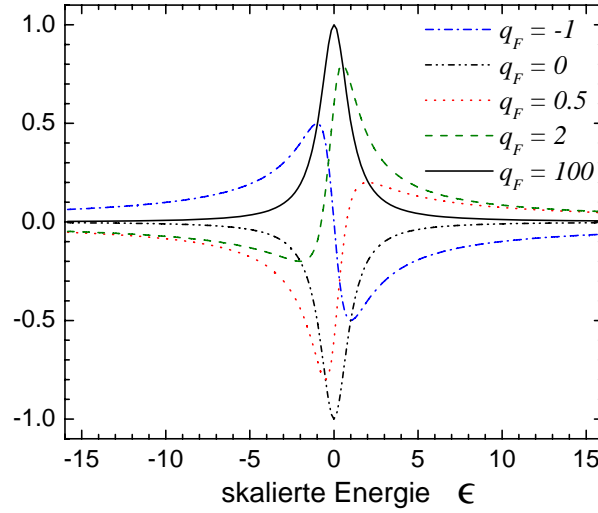


Abbildung 2.5: Darstellung einiger Fano-Profile mit unterschiedlichen Werten für den Fano Parameter q_F . Man sieht den Übergang in ein Lorentz-Profil bei betragsmäßig großen Werten für q_F , bzw. in ein invertiertes Lorentzprofil für $q_F=0$. Das Vorzeichen von q_F bestimmt die Richtung der Verschiebung des Maximums. Damit die Funktion asymptotisch gegen Null geht wurde das Fano-Beutler Profil verwendet: Fano-Profil - 1. Um die Profile mit vergleichbaren Größen darstellen zu können wurde außerdem mit $(q^2 + 1)$ normiert.

Wahrscheinlichkeits-Amplituden der interferierenden Prozesse ähnliche Beträge aufweisen. Sehr starke Resonanzen mit Energien deutlich oberhalb der Ionisationskante, werden erwartungsgemäß keine deutlichen Asymmetrien zeigen. Das Profil der Resonanzen enthält zusätzliche Informationen über die Prozesse und das untersuchte System: Lebensdauern, Konkurrenz zwischen radiativer und autoionisierender Abregung, und Zusammenspiel der direkten und resonanten Photoionisation.

2.3.3 Berechnung von PI-Wirkungsquerschnitten

Um nun die Wechselwirkung des Mehr-Elektronensystems mit dem elektromagnetischen Feld zu untersuchen, muss der "isolierte" Hamilton-Operator gemäß (2.7) um den Term erweitert werden, der diese Wechselwirkung beschreibt (\hat{H}_{int}). Dies geschieht durch die Substitution

$$\vec{p}_i \rightarrow \vec{p}_i + \frac{1}{c}\vec{A}(\vec{r}_i, t) \quad \text{bzw.} \quad \vec{\nabla}_i \rightarrow \vec{\nabla}_i + \frac{i}{c}\vec{A}(\vec{r}_i, t), \quad (2.18)$$

wobei $\vec{A}(\vec{r}_i, t)$ für das Vektorpotential steht, welches die einfallende Strahlung beschreibt und der Index i wieder die Elektronen durchnummeriert. Da \vec{p}_i in dem Hamilton-Operator (2.7) quadratisch auftritt entstehen drei neue Terme, die zusammen den Wechselwirkungs-Operator bilden:

$$\hat{H}_{int} = -\frac{1}{2} \sum_i^N \left(\frac{i}{c} \vec{\nabla}_i \vec{A} + \frac{i}{c} \vec{A} \vec{\nabla}_i + -\frac{1}{c^2} |\vec{A}|^2 \right). \quad (2.19)$$

Der letzte Term, welcher Zwei-Photonen Prozesse beschreibt, muss nur im Falle starker elektromagnetischer Felder berücksichtigt werden. Verwendet man das Vektorpotential in

2.3. Photoionisation

Coulomb-Eichung ($\vec{\nabla}\vec{A}=0$), so erhält man

$$\hat{H}_{int} = -\frac{i}{c} \sum_i^N \vec{A} \vec{\nabla}_i . \quad (2.20)$$

Betrachtet man den Fall einer linear polarisierten ebenen Welle (Polarisationsrichtung $\hat{\varepsilon}$) mit Wellenvektor (ω, \vec{k}) und beschreibt den Anfangszustand des N -Elektronensystems mit Ψ° und den Endzustand mit $\Psi_{\vec{k}}^{(-)}$ als ein $(N-1)$ -Elektronensystem und ein freies Elektron mit Impuls \vec{k} , so folgt mittels *Fermi's Goldener Regel* (bzw. zeitabhängiger Störungstheorie erster Ordnung) für den differentiellen Wirkungsquerschnitt²

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4 \pi^2 \alpha |k|}{\omega} \left| \sum_i^N \langle \Psi_{\vec{k}}^{(-)} | \hat{\varepsilon} \vec{\nabla}_i | \Psi^\circ \rangle \right|^2 . \quad (2.21)$$

Eine weitere Voraussetzung für diese Ableitung ist dass die Wellenlänge der Strahlung deutlich größer ist, als die Ausdehnung des Mehr-Elektronensystems, was für Photonen-Energien im oberen keV-Bereich nicht mehr gegeben ist.

Der einfachste Fall, das H-artige System, kann noch analytisch behandelt werden. Der Endzustand besteht nur aus einem freien Elektron, welches am passendsten mit Coulomb-Wellen beschrieben wird (die Verwendung von ebenen Wellen entspricht dem Fall, wenn die Coulomb-Wechselwirkung im Endzustand vernachlässigt wird, was für hohe Photonen-Energien gerechtfertigt ist). Für Photoionisation aus dem Grundzustand ($1s$) erhält man

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = C \cdot \underbrace{32 \alpha Z^{-2} \left(\frac{|E(1s)|}{\omega} \right)^{\frac{7}{2}} \sin^2 \theta}_{\frac{d\sigma^\circ}{d\Omega}, \text{ ohne Coulomb-WW im Endzustand}} , \quad (2.22)$$

wobei

$$C = 2 \pi \left(\frac{|E(1s)|}{\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{e^{-\frac{4\chi}{\cot(\chi)}}}{1 - e^{-2\pi\chi}} , \quad \chi = \frac{Z}{\omega - |E(1s)|} , \quad (2.23)$$

und θ ist der Winkel zwischen der Richtung des einlaufenden Photons und der des auslaufenden Elektrons. Entwicklung in der Nähe der Ionisationskante ($\omega = |E(1s)| + \delta$, $\chi \rightarrow \infty$) liefert

$$C \approx 2 \pi e^{-4} \left(1 + \frac{5}{6} \frac{\delta}{|E(1s)|} + \dots \right) , \quad \frac{d\sigma^\circ}{d\Omega} \approx 32 \alpha Z^{-2} \left(1 - \frac{7}{2} \frac{\delta}{|E(1s)|} \right) \sin^2 \theta , \quad (2.24)$$

wodurch sich der totale Wirkungsquerschnitt wie folgt ergibt

$$\sigma_{tot} \approx \frac{512}{3} \pi e^{-4} \alpha Z^{-2} \left(1 - \frac{8}{3} \frac{\omega - |E(1s)|}{|E(1s)|} \dots \right) . \quad (2.25)$$

Diese Analyse zeigt, dass der maximale Wirkungsquerschnitt direkt an der Ionisationskante auftritt. Die Abnahme zu höheren Photonen-Energien beginnt an der Kante mit einem Abfall gemäß $(\omega/|E(1s)|)^{-8/3}$, also in etwa mit der dritten Potenz der Photonen-Energie.

²unter den viele hier ausgelassenen Zwischenschritte verbirgt sich auch eine Normierung auf den Photonenfluss, um auf einen Wirkungsquerschnitt zu kommen

Für den Wirkungsquerschnitt der direkten Photoionisation von Mehr-Elektronensystemen werden typischerweise Formeln folgender Form verwendet (in SI-Einheiten)

$$\sigma(h\nu) = a \cdot (\omega + b)^g . \quad (2.26)$$

Ein Beispiel für die Größenordnung der Parameter a , b und g kann für die Ionisationspotentiale ($3s$, $2p_{\pm}$ und $2s$) in Fe^{14+} aus der Tabelle 2.1 entnommen werden.

Tabelle 2.1: Theoretische Werte für die Parameter der Formel (2.26), zur Berechnung des direkten Photoionisations-Wirkungsquerschnitts von Fe^{14+} -Ionen.

Ionisationskante	a (cm ²)	b (eV)	g (1)	E_{IP} (eV)
$3s$	$2.475 \cdot 10^{-13}$	$1.696 \cdot 10^2$	-2.242	$4.526 \cdot 10^2$
$2p_+$	$3.524 \cdot 10^{-8}$	$3.305 \cdot 10^2$	-3.476	$1.170 \cdot 10^3$
$2p_-$	$1.601 \cdot 10^{-8}$	$3.367 \cdot 10^2$	-3.457	$1.183 \cdot 10^3$
$2s$	$1.787 \cdot 10^{-11}$	$5.668 \cdot 10^2$	-2.537	$1.309 \cdot 10^3$

2.3.4 Wirkungsquerschnitte und Resonanzstärke

Spricht man von dem natürlichen Linienprofil (Fano oder Lorentz) einer Photoionisations-Resonanz, so betrachtet man den Wirkungsquerschnitt in Abhängigkeit der Photonen-Energie $\sigma(E=\omega)$ bzw. Wellenlänge, wobei absolut monochromatische Strahlung angenommen wird. Da diese Annahme real nie zutrifft, kommt es zu einer experimentellen Verbreiterung durch begrenztes Auflösungsvermögen der Synchrotronstrahlung einerseits und Effekte, wie die thermisch bedingte Dopplerverbreiterung andererseits. Liegt die natürliche Linienbreite deutlich unterhalb der Auflösung, so misst man effektiv die integrale Photoionisations-Resonanzstärke S_{ij}^{PI} mit der Dimension eVbarn (Energie×Fläche). Der Zusammenhang zwischen Photoionisations-Resonanzstärke und gesamter Resonanzstärke (Übergang zum angeregten Zustand $i \rightarrow j$ im Target-Ion) ist über das *Verzweigungsverhältnis* (engl.: *branching ratio*) gegeben, welches mit den Übergangsraten für Autoionisation (A_a) und radiative Abregung (A_r) angegeben werden kann

$$S_{ij}^{PI} = \frac{A_a}{A_a + A_r} S_{ij} = \int dE \sigma^{PI}(E) . \quad (2.27)$$

Der Zusammenhang mit dem Wirkungsquerschnitt am Maximum einer Resonanz σ_0^{PI} ergibt sich im Falle eines Lorentzprofils mit Breite Γ (FWHM) zu

$$\sigma^{PI}(E) = \frac{\sigma_0^{PI}}{1 + \left(\frac{E-E_{res}}{\Gamma/2}\right)^2} \rightarrow S_{ij}^{PI} = \frac{\pi}{2} \sigma_0^{PI} \Gamma . \quad (2.28)$$

Häufig wird auch die dimensionslose Oszillatorstärke (*f-value*) verwendet, welche über einen konstanten Faktor mit der Resonanzstärke verknüpft ist (in SI Einheiten)

$$S_{ij}^{PI} = \underbrace{\frac{h e^2}{\epsilon_0 m_e c}}_{\approx 1.1 \cdot 10^8 \text{ eVbarn}} f_{ij}^{PI} . \quad (2.29)$$

Praktisch bedeutet dies nun, dass die Darstellung experimenteller Ergebnisse als Wirkungsquerschnitt gegenüber der Energie, wie sie typischerweise in Veröffentlichungen erfolgt, streng genommen nur dann Sinn macht, wenn die erreichte Auflösung deutlich kleiner ist, als das Linienprofil ($\Delta E \ll \Gamma$). Ist dies nicht der Fall, so sollte die Höhe des Signals nicht mit dem maximalen Wirkungsquerschnitt, sondern mit der Resonanzstärke verglichen werden. Anschaulich gesprochen erscheinen die Signale zweier Resonanzen mit gleicher Resonanzstärke S aber unterschiedlicher Breite Γ bei hoher Auflösung verschieden (Profil zeigt maximalen Wirkungsquerschnitt, welcher unterschiedlich ist) und bei schlechter Auflösung gleich hoch (Vermessung der Resonanzstärke; das Profil zeigt die spektrale Verteilung der untersuchenden Strahlung). Für den praktischen Beitrag zur gesamten Photoionisation ist die Resonanzstärke die entscheidendere Größe.

2.4 Theoretische Methoden

Für die Berechnung der Photoionisations-Wirkungsquerschnitte von Atomen und Ionen (Mehr-Elektronensysteme) sind Näherungen und numerische Verfahren erforderlich. Je nachdem ob die Elektronen-Korrelationen, speziell für den Endzustand, über den ganzen Raum berücksichtigt werden, oder eine Trennung erfolgt, da die wesentlichen Effekte der Korrelationen über kurze Distanzen auftreten, können die verschiedenen Methoden in zwei Gruppen zugeordnet werden:

aufgeteilter Raum-Methoden :

QDT (engl.: *quantum defect theory*)
R-Matrix Methode

kompletter Raum-Methoden :

RPA (engl.: *random phase approximation*)
MBPT (engl.: *many-body perturbation theory*)
MCDF (engl.: *multiconfiguration Dirac-Fock*)

Einen einführenden Überblick zu diesen Methoden erhält man beispielsweise in [41]. Für eine umfangreiche Darstellung bietet sich die Arbeit von *Starace* [62] an.

Am Max-Planck-Institut für Kernphysik wurden durch *Zoltan Harman* Berechnungen der Resonanzenergien und -stärken unter Verwendung der MCDF Methode vorgenommen [70; 71; 72; 73; 74]. Der direkte Photoionisations-Prozess ist in den momentan vorliegenden Rechnungen allerdings noch nicht implementiert, deshalb konnten bisher keine Linienprofile für gesamte Wirkungsquerschnitte mit diesen Berechnungen angegeben werden. Beim Vergleich dieser theoretischen Vorhersagen mit den vorliegenden experimentellen Ergebnissen konnten in persönlichen Diskussionen interessante Einblicke in die tatsächliche Vorgehensweise gewonnen werden.

2.4.1 MCDF - Multiconfiguration Dirac-Fock

Im Abschnitt 2.2 "Mehr-Elektronensysteme" wurde erklärt, wie man ausgehend von einem *unabhängige-Teilchen-Modell* über das Verfahren des selbstkonsistenten Feldes die opti-

malen Ein-Teilchen-Wellenfunktionen findet, über die Mehr-Elektronen Zustände gemäß (2.11) aufgebaut werden können. Solche Lösungen bilden auch häufig den Ausgangspunkt für die anderen Methoden, die nachfolgend besprochen werden. Durch Superposition mehrere Konfigurationen können dann auch Korrelationen mitberücksichtigt werden, die über das unabhängige-Teilchen-Modell hinausgehen. Die präsentierten MCDF-Rechnungen konzentrieren sich auf die Photoionisations-Resonanzen. Dazu reicht zunächst die Betrachtung des Target-Ions, um Grundzustand und angeregte Zwischenzustände zu ermitteln, denn daraus folgen bereits die Resonanzenergien. Die Übergangs-Wahrscheinlichkeit ergeben jedoch noch nicht die Resonanzstärke der Photoionisation, da noch das *Verzweigungsverhältnis* (engl.: *branching ratio*) auf die beiden möglichen Kanäle, radiative und autoionisierende Abregung, zu berücksichtigen ist, wozu nun auch der Endzustand bekannt sein muss. Interferenzen mit dem direkten Photoionisations-Prozess können die Resonanzstärke allerdings beeinflussen. Im Gegensatz zu Resonanzenergien sollten Ergebnisse dieser Rechnungen zu Resonanzstärken streng genommen nur dann mit dem Experiment verglichen werden, wenn die Vernachlässigung des direkten Prozesses gerechtfertigt ist. Der Erfolg der Methode hängt entscheidend von der Anzahl (und der Auswahl) der Konfigurationen ab, die in die Rechnung eingehen.

Da es sich um die *Dirac-Fock* und nicht um die *Hatree-Fock* Methode handelt, wird relativistischen Effekten bereits im Ansatz im vollen Umfang Rechnung getragen. Die *Lamb-shift* hingegen wird für die dominanten Prozesse (Selbstenergie, Vakuumpolarisation, Kerngrößen Effekte) durch semi-empirische Ansätze berücksichtigt. Die Vakuumpolarisation (VP) kann sehr effektiv auf *lokaler* Ebene der Ein-Elektronen-Wellenfunktionen erfasst werden, indem das sog. Uehling-Potential zum Kernpotential addiert wird [75]. Für die Selbstenergie (SE) in Mehrteilchen-Systemen kann die effektive Kernladung Z_{eff} der Einteilchenorbitale zur Abschätzung des Beitrags herangezogen werden. In Tabelle 2.2 sind die diese Korrekturen gelistet und typische Größenordnungen angegeben.

Tabelle 2.2: Art und Größenordnung verschiedener qualitativ erfasster Beiträge der *Lamb-shift* in den MCDF Berechnungen für Ar^{8+} .

Beitrag	Art der Berücksichtigung	Korrektur
Breit-Wechselwirkung	störungstheoretisch	3.3 eV
VP	Uehling-Potential	
SE	Literaturwerte	
Einteilchen-QED	SE+VP	2.6 eV
QED screening	Uehling-Potential und Z_{eff} (s. Text)	0.2 eV
Massen-Korrektur	nichtrelativistischer Operator für die normale und spezifische Massenverschiebung	0.2 eV

2.4.2 Räumlich aufgeteilte Ansätze

Die räumliche Aufteilung des Problems der Photoionisation eines Ions (und äquivalenter Prozesse) erfolgt in einen äußeren Bereich $r > r_0$, in dem mit sehr guter Näherung ein

Coulomb-Potential vorliegt und einen inneren Bereich $r < r_0$, in dem Elektron-Elektron Korrelationen möglichst vollständig erfasst werden. Dies erwies sich als wesentliche Vereinfachung des Problems, ohne merklich auf Kosten der Genauigkeit zu gehen. Dabei muss r_0 lediglich einige Bohrradien betragen.

Die QDT wurde von *Michael J. Seaton* vorgestellt [76]. Im Außenbereich wird ausgenutzt, dass analytische Ausdrücke für die Wellenfunktion des Photoelektrons angegeben werden können (Coulomb-Potential), wodurch sich die Beschreibung der Prozesse auf wenige Parameter reduziert. Randbedingungen werden bei $r = \infty$ angegeben. Die QDT liefert vor allem in der Nähe des Ionisationspotentials ausgezeichnete Übereinstimmung mit dem Experiment.

Bei der R -Matrix Methode [77; 78] liegt der Fokus auf dem Innenbereich. Anschlussbedingung zum Außenbereich werden an der Stelle $r = r_0$ gestellt (wo die R -Matrix definiert ist). Mit einem kompletten Satz diskreter Radialfunktionen kann der Innenbereich mittels Entwicklungskoeffizienten beschrieben werden. Diese Vereinfachungen gestatten *ab initio* Berechnungen. Die R -Matrix Methode liefert über den ganzen Energiebereich für manche Anwendungen ausreichend gute Übereinstimmung mit den Experimenten, weicht aber merklich von den experimentellen Daten ab, wenn nicht genügend Targetzustände berücksichtigt werden, oder starke relativistische (bzw. QED) Beiträge vorliegen.

Werte wichtiger atomphysikalischer Datenbanken beruhen auf Berechnungen mit dieser Methode. Zu den bekanntesten zählen *TOPbase* und *TIPTOP*, welche im Rahmen des *Opacity Project* (OP) und *IRON Project* erstellt wurde [11; 79; 80]. Im Jahr 1983 hat eine rund 30-köpfige internationale Gruppe theoretischer Physiker um *Seaton* dieses umfangreiche Projekt in Angriff genommen [12]. Die Dimension dieses Vorhabens verlangte Näherungen (z.B. nichtrelativistische Ansätze), welche sich teilweise auf die Genauigkeit der Vorhersagen niederschlugen. Inzwischen sind auch modernere, wenn auch weniger vollständige Datenbanken zugänglich, wie beispielsweise NORAD von *Nahar* und *Pradhan* [81; 82].

2.4.3 Kompletter-Raum Ansätze

Zu den Ansätzen, welche die Korrelationen über den gesamten Raum berücksichtigen gehören u.a. RPA und MBPT. Erstere Methode wurde von *Altick* und *Glassgold* aus der Kernphysik adaptiert [83] und nutzt den Umstand, dass gewisse Matrix-Elemente vernachlässigt werden können, da Beiträge vieler Elektronen mit "zufälliger Phase" einander aufheben. Es handelt sich also um einen Ansatz, welcher den Viel-Teilchen-Charakter des Problems nutzt. Austausch-Matrix-Elemente, welche bei Anwendungen auf ein Elektronengas ebenfalls vernachlässigt werden können, sind bei atomphysikalischen Verwendungen sehr wohl enthalten. Um das hervorzuheben wird häufig die Abkürzung RPAE verwendet (engl.: *with exchange*). *Amusia* und *Cherepkov* konnten mit einigen Verbesserungen als erste Vorhersagen machen, die mit experimentelle Befunden auf 10% genau übereinstimmten [84].

Wie aus dem Namen hervorgeht ist die MBPT eine Störungstheorie. Das bedeutet die gesamte Hamilton Funktion (\hat{H}) wird in einen Anteil aufgespalten, dessen Eigenfunktionen (Ψ_0) bekannt sind (\hat{H}_0) und einen Störungsterm (\hat{H}_P). Im Falle der Mehr-Elektronensysteme bietet es sich an die Elektron-Elektron Wechselwirkung zunächst über das selbst-

konsistente Feld zu lösen und die Korrelationen und die Wechselwirkung mit der einfallenden Strahlung als Störung zu betrachten. Typischerweise wird die Störung durch die Strahlung in erster Ordnung berücksichtigt, während die Korrelationen in höheren Ordnungen eingehen. Diese Vorgehensweise läßt sich folgendermaßen zusammenfassen:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_P, \quad \hat{H}_P = \sum_{i < j}^N \frac{1}{r_{ij}} - \sum_i^N V_i^{mean} + \hat{H}_\omega, \quad \lambda : 0 \rightarrow 1. \quad (2.30)$$

Die relativistische Form trägt die Abkürzung RMBPT. Beim Vergleich der hier vorgestellten experimentellen Daten zu Fe^{14+} mit diversen Theorien zeigt sich, dass neuere RMBPT-Rechnung zweiter Ordnung als einzige die Resultate innerhalb der experimentellen Fehlerbalken reproduzieren konnte [24].

Kapitel 3

Status quo der Photoionisations-Experimente mit Ionen

Die hier demonstrierte Untersuchung der Photoionisation von mehrfach bis hochgeladenen Ionen unter Verwendung einer Elektronenstrahl-Ionenfalle und Synchrotronstrahlung begründet eine neue Methode auf diesem Forschungsgebiet (nachfolgend kurz als "EBIT-Methode" bezeichnet). In diesem Zusammenhang scheint es angebracht kurz darauf einzugehen, wie die Photoionisation von Ionen bisher erforscht wurde. Überblickswerke zu diesem Thema wurden 2001 von *John B. West* und 2006 von *Henrik Kjeldsen* veröffentlicht [41; 42].

Das Hauptaugenmerk liegt auf dem Vergleich mit der sogenannten MB Methode (zusammengeführter Ionen- und Photonenstrahl), welche mit der EBIT-Methode den Einsatz von Synchrotronstrahlung und die Möglichkeit zur Bestimmung absoluter Wirkungsquerschnitte gemein hat. Die zweite wichtige Gruppe von Experimenten untersucht nicht explizit Photoionisation an Ionen, sondern Photoabsorption in Plasmen. Eine Gegenüberstellung dieser beiden etablierten Methoden erfolgte in [85].

3.1 Photoabsorption in dichten Plasmen

Die experimentelle Untersuchung der Photoabsorption in Plasmen hat bereits vor gut einem halben Jahrhundert begonnen. In Abbildung 3.1 ist das Grundprinzip solcher Messungen dargestellt. Durch Beschuss eines Substrats aus dem zu untersuchenden Element wird ein dichtes, kurzlebiges Plasma erzeugt, welches als Absorptionsmedium dient. Zeitversetzt (Δt) wird ein zweites Plasma erzeugt, um als möglichst gut reproduzierbare Kontinuumslichtquelle im gewünschten Wellenlängen-Bereich zu dienen. Die Strahlung des zweiten Plasmas propagiert durch das erste Plasma und wird anschließend spektroskopisch untersucht. Durch Variation des Zeitversatzes Δt des probenden Lichtpulses, kann die Zeitentwicklung des primären Plasmas untersucht werden. Da sich die Population verschiedener Ladungszustände über die Zeit ändert, kann damit eine entsprechende Separation erreicht

werden.

Bei den ersten Experimenten wurden Entladungen benutzt, um die Plasmen zu erzeugen [26; 86]. Mit dem Einsatz von Lasern konnte die wichtige Kontrolle über den Zeitversatz deutlich verbessert werden [87]. Schließlich wurde durch die Verwendung von zwei Lasern größere Flexibilität bei der Einstellung des Zeitversatzes (250 ns - 10 ms) erreicht [88]. Außerdem konnten die Parameter der Laser und damit die Eigenschaften Plasmen besser an die beiden Zwecke, Absorptionsmedium bzw. Kontinuums-Lichtquelle, angepasst werden. Mit dieser ausgereiften Form der Photoabsorption in Plasmen, welche unter der Abkürzung DLPP oder DLP (engl.: dual laser produced plasma) geläufig ist, wurden umfangreiche Untersuchungen durchgeführt.

Im Prinzip können mit dieser Methode auch Ionen in höheren Ladungszuständen vermessen werden [89; 90]. Da die Selektivität des Ladungszustandes jedoch eingeschränkt ist, wird die Identifikation der Absorptionslinien mit steigender Zahl an beitragenden Ionisationszuständen immer schwieriger. Durch die hohe Elektronendichte im Plasma werden die Linien breiter und Satellitenlinien erschweren deren Analyse. Hohe Temperatur- sowie Dichtegradienten verlangen den Einsatz von sowohl räumlich als auch zeitlich auflösenden Spektrometern und verursachen einen hohen Aufwand bei der Inversion der experimentellen Daten. Die Auflösung, welche im Vergleich dazu an Synchrotron-Strahlungsquellen zur Verfügung steht, kann mit dieser Methode nicht erreicht werden. Während die Zahl der MB Apparaturen wächst, stagnieren die Untersuchungen mit der DLPP Technik. Bezeichnend ist, dass in dem aktuellsten Überblickswerk zur Photoionisation von Ionen nur noch auf die MB Methode eingegangen wird [42]. Dafür sind in den letzten Jahren einige erfolgreiche Experimente mit einer vergleichbaren Methode, welche intensive *Z-pinches* benutzt, durchgeführt worden [91; 92; 93; 94]. Eisenionen in sehr hohen Ladungszuständen wurden beobachtet. Diese äußerst aufwändigen Experimente dienen in erster Linie als Simulation des Sternplasmas im Labor, können aber einzelne Ladungszustände nicht selektiv ansprechen und sind in der erreichbaren Auflösung des Absorptionsspektrums weiterhin begrenzt.

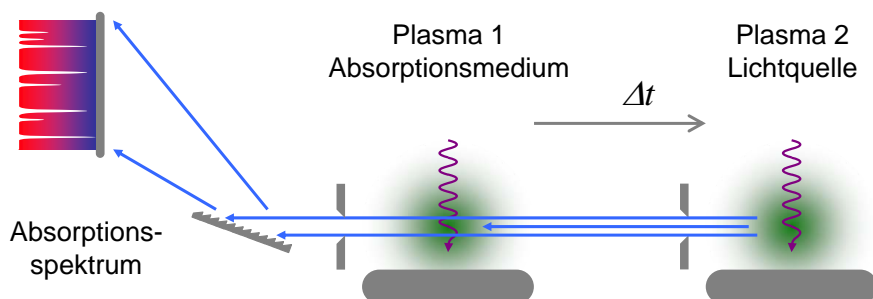


Abbildung 3.1: Durch Beschuss eines Substrats wird ein Plasma (1) erzeugt und dient als Absorptionsmedium für Strahlung, die mittels eines zeitversetzt erzeugten Plasmas (2) bereit gestellt wird. Anschließende Spektralanalyse offenbart die Absorptionslinien.

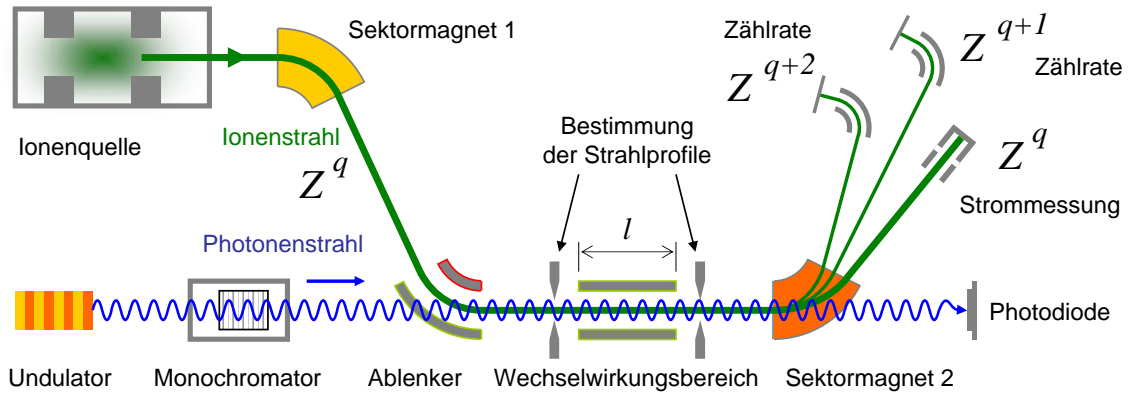


Abbildung 3.2: Prinzipieller Aufbau eines MB Experiments. Mittels Ionenquelle und Sektormagnet (1) wird das gewünschte Ion Z^q bereitgestellt und im Wechselwirkungsbereich axial mit dem Photonenstrahl einer monochromatisierten Undulator-Beamline axial überlagert. Ein weiter Sektormagnet (2) trennt die Ionen vom Photonenstrahl und gleichzeitig die Target-Ionen Z^q von den Photoionen Z^{q+n} . Die Target-Ionen werden als Strom gemessen, die Photoionen werden einzeln nachgewiesen, der Photonfluss wird auf einer Photodiode ständig miterfasst.

3.2 Die Merged-Beam Methode

Einer Gruppe um *Ken Dolder*, welche bereits Erfahrungen mit Ionenstrahl-Experimenten in Form von Elektronstoß-Ionisation von Ionen in *gekreuzter Stahl* Geometrie (engl.: *crossed beams*) [95] hatte, gelang 1986 das erste erfolgreiche MB Experiment am Daresbury Synchrotron [56; 57; 58; 59; 60]. Ionen- und Photonenstrahl wurden bei dieser Methode koaxial überlagert. Diese ersten Experimente wurden noch an einer Dipolmagnet Beamline aufgebaut und erreichte auf Grund des geringeren Photonenflusses sowie größeren Divergenz noch nicht die Auflösung und Genauigkeit späterer Experimente an Undulator-Strahlrohren. Dafür konnte schon bei den ersten Messungen die Bestimmung von absoluten Wirkungsquerschnitten demonstriert werden, was ein großer Vorteil dieser Methode ist.

In Abbildung 3.2 sind die wesentlichen Komponenten moderner MB Apparaturen dargestellt. Als Ionenquellen sind meist Elektron Zyklotronresonanz Ionenquellen im Einsatz (engl.: *electron cyclotron resonance ion source - ECRIS*). Mittels Sektormagnet wird der zu untersuchende Ladungszustand Z^q (Target-Ion) aus dem Strahl der Ionenquelle selektiert. Der Strahl aus einer Ionensorte mit einem Durchmesser im Bereich von 2 bis 6 mm wird mittels elektrostatischem Ablenker koaxial mit einem monochromatischen Photonenstrahl einer Undulator-Beamline zusammengeführt. Über die gemeinsame Wegstrecke hinweg gelangt ein Teil der Ionen durch Photoionisation in einen höheren Ladungszustand Z^{q+1} (Z^{q+2} ...). Diese Ionen werden auch als *Photoion* bezeichnet. Am Ende des Wechselwirkungsbereichs trennt ein zweiter Sektormagnet die Ionen vom Photonenstrahl und gleichzeitig die verschiedenen Ladungszustände. Der Photonfluss wird mit einer Photodiode gemessen und Target-Ionen werden als Strom in einem Faraday-Cup erfasst. Die Photoionen werden als einzelne Ereignisse registriert.

Wie bereits erwähnt ermöglicht die MB Methode die Bestimmung absoluter Wirkungsquerschnitte. Neben dem Photonenfluss Φ_ν , dem Target-Ionenstrom I und der Photoionen-

Zählrate \dot{N}_{q+1} muss noch die Überlappung der beiden Strahlen genau bekannt sein. Die Länge des Wechselwirkungsbereichs kann auf eine gut bekannte Teilstrecke l eingeschränkt werden, indem diese Zone auf elektrisches Potential gelegt wird. Dadurch erhalten Ionen, welche in dieser Teilstrecke photoionisiert werden eine "Energimarkierung". Es ist vorteilhaft den Ionenstrahl in diesem Bereich zu verzögern, weil somit einerseits die Wechselwirkungszeit erhöht wird und andererseits die Photoionen in Summe einen Energiegewinn erfahren. Schwieriger gestaltet sich die Ermittlung der Strahlprofile. Dazu sind an mehreren Stellen z_i (vor und nach der Teilstrecke bzw. oft zusätzlich auch innerhalb) verstellbare Spalte oder rotierende Drähte vorhanden. Mit diesen Messungen wird der sogenannte *Formfaktor* $F_{xy}(z_i)$ bestimmt und der Wirkungsquerschnitt errechnet sich zu

$$\sigma_{PI} = \dot{N}_{q+1} \cdot \frac{Q v F_{xy}(z_i)}{I \Phi_\nu l}, \quad (3.1)$$

wobei v die Geschwindigkeit und $Q = qe$ die Ladung der Target-Ionen sind. Detektoreffizienzen wurden zwecks Übersichtlichkeit ausgespart. Für den Formfaktor gilt

$$F_{xy}(z_i) = \frac{\iint i(x, y) dx dy \iint \phi(x, y) dx dy}{\iint i(x, y) \phi(x, y) dx dy} \Big|_{z_i} \approx \frac{\sum \sum i(x, y) \sum \sum \phi(x, y) \Delta x \Delta y}{\sum \sum i(x, y) \phi(x, y)} \Big|_{z_i}, \quad (3.2)$$

wobei die in diskreten Schritten $\Delta x \Delta y$ vermessenen Profile des Target-Ionenstroms $i(x, y)$ und des Photoionenflusses $\phi(x, y)$ verwendet wurden. Für die z Abhängigkeit des Formfaktors wird zwischen den Profil-Messpunkten z_i interpoliert. Für relativ gemessene Photoionisations-Spektren wird die Wechselwirkungszone nicht auf Spannung gelegt, wodurch die gesamte Überlappungslänge genutzt werden kann. Über Absolutbestimmungen bei ausgewählten Photonen-Energien wird anschließend auf absolute Wirkungsquerschnitte skaliert. Zusätzlich zu diesen Möglichkeiten, welche die MB Methode bietet, wurden exzellente Auflösungen erreicht [96]. Tabelle 3.1 listet aus der Literatur bekannte MB Apparaturen.

Tabelle 3.1: Aus der Literatur bekannteste MB Apparaturen im Vergleich.

Synchrotron	Standort	$h\nu$ (eV)	Z^q	einige Referenzen
ASTRID	Aarhus, Dänemark	$\approx 20-185$	$\text{Si}^{4+}, \text{Fe}^{6+}, \text{N}^{3+}$	[97; 45; 98]
ALS	Berkeley, USA	$\approx 70-290$	$\text{C}^{2+}, \text{N}^{3+}, \text{Ar}^{5+}$	[46; 96; 99; 100; 101]
SPring8	Harima, Japan	≈ 1000	$\text{Ne}^{1,2,3+}, \text{O}^{1+}$	[47; 102]
ACO	Orsay, Frankreich	$\approx 20-185$	$\text{Si}^{4+}, \text{O}^{2,4+}$	[97; 103]
SOLEIS	Paris, Frankreich	≈ 1000	*	

*derzeit im Aufbau

Allerdings unterliegt die MB Methode auch einigen Einschränkungen:

Targetdichte: Die erreichbaren Ionen-Flächendichten sind durch die Raumladung begrenzt und liegen selbst für einfach geladene Ionen meist unter 10^7 cm^{-2} .

Ladungszustände: Zu höheren Ladungszuständen nehmen die Ionenströme ($I = Q \cdot N_{ion}$) sehr stark ab und die Divergenz des Ionenstrahls nimmt zu. Trotz der Verwendung immer stärkerer Ionenquellen ist die Ausweitung zu hochgeladenen Ionen mit hohen Ionisationspotentialen ein großes Problem.

Untergrund: Die kinetische Energie der Ionen reicht aus, um bei Stößen mit Restgas weiter ionisiert zu werden. Ionen, welche auf diese Weise in höhere Ladungszustände gelangen, sind von Photoionen nicht zu unterscheiden. Um diesen Untergrund gering zu halten muss die kinetische Energie des Ionenstrahls möglichst niedrig sein (typischerweise 2 keV pro q).

Metastabile Target-Ionen: Aus den Ionenquellen (ECRIS) werden nicht nur Ionen im Grundzustand, sondern auch solche in angeregten Zuständen extrahiert. Metastabile Zustände haben Lebensdauern, die oft deutlich über dem kurzen Zeitintervall zwischen Austritt aus der Ionenquelle und Erreichen der Wechselwirkungszone (μ s) liegen. Vor allem die Genauigkeit der Bestimmung absoluter Wirkungsquerschnitte kann unter diesem Effekt leiden.

3.3 Ionenfallen

Das Wesentliche zur bisherigen Anwendung von Ionenfallen für Photoionisations-Experimente wurde bereits in der Einleitung erwähnt. Im Vergleich zu DLPP und MB, wo die Zeitdauer zwischen Ionenproduktion und Ionisation schlecht bis gar nicht kontrolliert werden kann, ist dies bei Ionenfallen in einem weiten Rahmen möglich. Daraus resultieren zwei wichtige Anwendungen:

Metastabile Zustände Die Unterdrückung von Target-Ionen in metastabilen Zuständen kann für moderate Lebensdauern (Sekundenbereich) erreicht werden, indem man zwischen Ionenerzeugung und Wechselwirkung eine passende Zeitspanne vergehen lässt. Dies wurde vor kurzem in einer Penning-Falle für Xe^+ demonstriert [61]. Das Signal der erzeugten Photoionen wurde durch Fouriertransformation aus der gemessenen Ionen-Zyklotronfrequenz (4.4) extrahiert.

Absolute Wirkungsquerschnitte Über die kontrollierbare Wechselwirkungszeit ist ein weiterer Zugang zur Bestimmung absoluter Wirkungsquerschnitte gegeben, der bereits von *Kravis* beschrieben wurde [51]. Wenn die Target-Ionen z ch von einem homogenen Photonenstrahl komplett ausgeleuchtet werden, so entfällt die Bestimmung eines Formfaktors. Dies ist vor allem für das kleine Volumen der Ionenwolke in einer Ionenfalle durchaus möglich.

Eine Diskussion zu metastabilen Zuständen findet sich im Zusammenhang mit den Ergebnissen zu N^{3+} (siehe Abschnitt 5.1 "Be-artige Stickstoff-Ionen"). Für Fe^{14+} erfolgte die Bestimmung eines absoluten Wirkungsquerschnitts einer Resonanz, welche in Abschnitt 5.5.1 "Absolute Wirkungsquerschnitte" beschrieben wird.

3.4 Gegenüberstellung der Methoden

Ein Vergleich der Methoden zur Untersuchung der Photoionisation von Ionen, der hier in tabellarischer Form gegeben wird (Tabelle 3.2) verdeutlicht, dass die EBIT-Methode im Prinzip viele Vorteile der bisherigen Experimenttypen vereinigt.

Tabelle 3.2: Gegenüberstellung der verschiedenen Methoden zur Untersuchung der Photoionisation.

	DLPP (Z-Pinch)	MB	Penning Fallen	EBIT-Methode
ρ (cm ⁻²)	10 ¹² - 10 ¹⁵	10 ⁶ - 10 ⁷	$\approx 10^6$	10 ⁹ - 10 ¹⁰
q	≈ 5 (≈ 12)	bisher ≤ 9	bisher $q=1$	bisher ≤ 14
σ_{abs}	–	10-20%	–	3% (bisher 50%)
MS	–	Anteile bis 50%	[61]	siehe N ³⁺
$E/\Delta E$	1000 (≤ 300)	20 000 (bei 70 eV)	≤ 400	6500 (bei 800 eV)

Ergänzend zur Darstellung in der Einleitung, bei der die involvierten Ionisationspotentiale nur indirekt durch den Ladungszustand zum Ausdruck kommen, zeigt Abbildung 3.3 direkt diesen Wert gegenüber der Ordnungszahl Z aufgetragen.

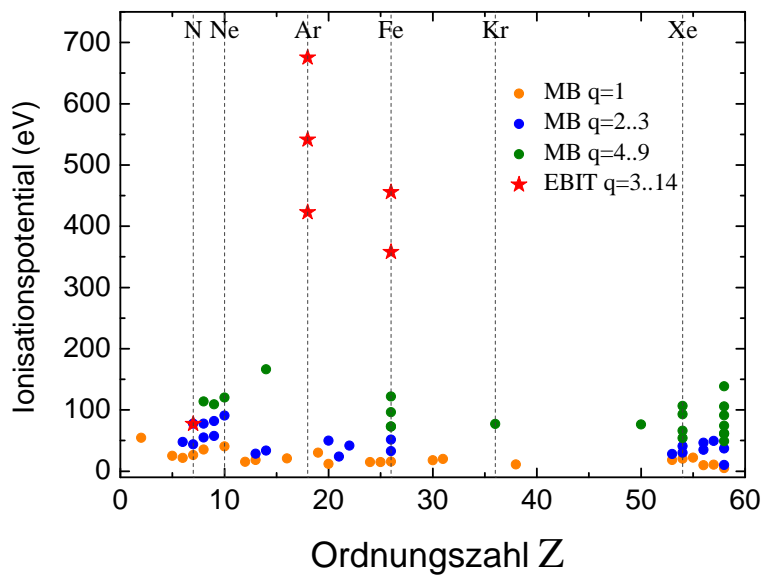


Abbildung 3.3: Verdeutlichung des Sprungs in den erreichbaren Systemen durch die neue EBIT-Methode. Representative Übersicht der Ionen, mit denen MB Experimente durchgeführt wurden anhand der Darstellung der vermessenen Ionisationspotentiale der Ionen gegenüber der Ordnungszahl Z des jeweiligen Elements. Die Ladungszustände sind in Gruppen farbcodiert. Rote Sterne markieren Ionen, welche im Rahmen dieser Arbeit untersucht wurden.

Kapitel 4

Experiment

In den vorangegangenen Kapiteln wurde deutlich gemacht, dass die experimentelle Untersuchung der Photoionisation von hochgeladene Ionen bisher nur eingeschränkt möglich war, obwohl solche Daten in diversen Bereichen der Physik sowohl von praktischer als auch theoretischer Relevanz sind. Hier soll nun darauf eingegangen werden, wie der Einsatz einer Elektronenstrahl-Ionenfalle bei modernen Strahlungsquellen dazu beitragen kann, den über Photoionisation experimentell zugänglichen Bereich an Ionen in Hinblick auf Ladungszustände bzw. Ionisationspotential wesentlich zu erweitern. Die Idee zu derartigen Messung wurde bereits vor eineinhalb Jahrzehnten in Veröffentlichungen einer Gruppe am RIKEN (Rikagaku Kenkyusho - The Institute of Physical and Chemical Research) in Japan diskutiert [50; 55; 104; 105]. Diese Gruppe führte auch Test-Messungen mit einer eigens entwickelten Elektronenstrahl-Ionenfalle an der *Photon Factory Synchrotron Radiation Facility* (Japan) durch. Einige Publikationen dokumentieren erzielte Teilerfolge [51], jedoch scheint die Demonstration des geplanten Photoionisations-Experiments an hochgeladene Ionen nicht geglückt zu sein.

Die Experimentbeschreibung beginnt mit Grundprinzip und Aufbau unseres Photoionisations-Experiments. Dabei werden die Protagonisten Elektronenstrahl-Ionenfalle und Synchrotronstrahlung zunächst als bekannt vorausgesetzt und erst danach im Detail erläutert. Allgemeinen Prinzipien und Möglichkeiten dieser Apparate gehen dabei jeweils den Beschreibungen der Gerätschaften, welche hier konkret zum Einsatz kamen, voraus. Alle Messergebnisse, deren Präsentation im anschließenden Kapitel folgt, wurden mit der mobilen FLASH-EBIT (siehe 4.3.4) im Rahmen zweier Kampagnen am Berliner Elektronen-Speicherring BESSY II erzielt. Die Kombination dieser beiden Technologien erfordert die Herstellung einer Überlappung der EBIT-Ionenwolke und des Photonenstrahls. Ein kurzer Abschnitt widmet sich der Methode, die dazu entwickelt wurde. Einen wesentlichen Teil dieser Doktorarbeit nahm die Erweiterung der FLASH-EBIT um eine Ionen-Extraktion ein, welche die dritte Hauptkomponente des Photoionisations-Experiments darstellt. Nach der kompletten Beschreibung des Aufbaus werden in diesem Kapitel noch Kalibrierungsmethoden sowie Datenaufnahme und -analyse behandelt.

4.1 Aufbau des Photoionisations-Experiments

Wie in Abbildung 4.1 durch punktierte Kästchen angedeutet, kann der Aufbau des Photoionisations-Experiments in drei Hauptkomponenten unterteilt werden:

- (a) **EBIT:** *Preparation der Target-Ionen*
- (b) **Photonen-Quelle:** *Bereitstellung der Photonen* (Synchrotron-Strahlung)
- (c) **Ionen-Extraktion:** *Nachweis der Photoionisation*

Diese Komponenten werden in anschließenden Abschnitten einzeln unter die Lupe genommen.

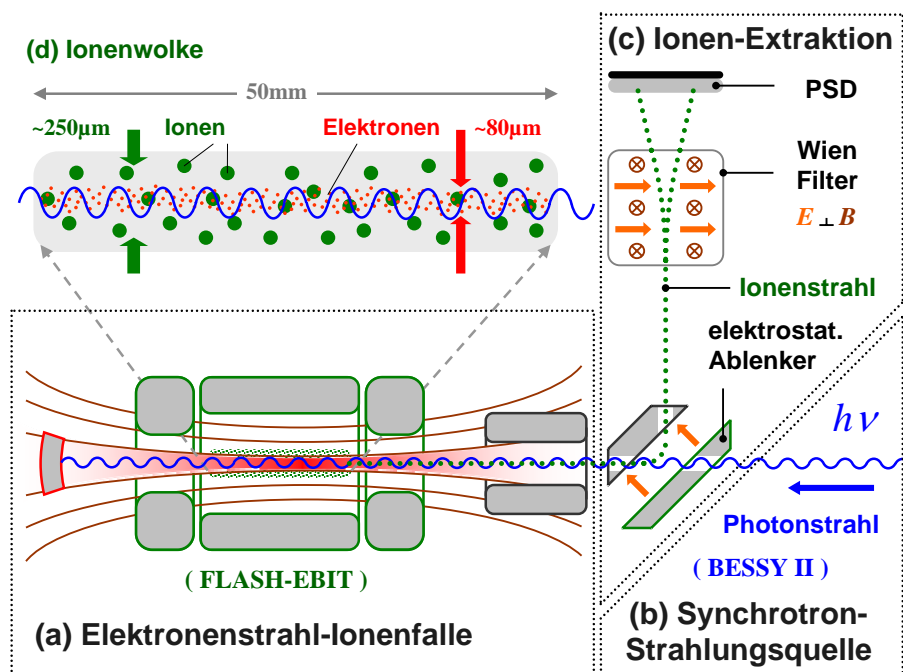


Abbildung 4.1: Grundprinzip des Photoionisations-Experiments: Die Ionenwolke (d) der EBIT (a) wird mit dem Photonenstrahl (b) axial überlappt, welcher von der Kollektorseite Zugang zur Falle hat. Die Analyse des Falleninhalts wird über Extraktion der Ionen (c) bewerkstelligt.

Die Ionenwolke der EBIT ist ein Ensemble aus Ionen in verschiedenen Ladungszuständen. Die Flächendichte für einzelne Ladungszustände liegt dabei drei bis vier Größenordnungen über jenen, die in Ionenstrahl-Tragets erreicht werden (typische Werte bei MB-Experimenten sind 10^5 - 10^7 Ionen pro cm^2 , für EBIT Werte siehe Tabelle 4.7). Daher beruht der Erfolg unseres Photoionisations-Experiments auf der direkten Überlappung der Ionenwolke mit dem Photonenstrahl. Wie diese nicht einfach zu bewerkstelligende Überlappung gewährleistet wird, beschreibt Abschnitt 4.4 "Photonen-Ionen Überlappung". Die Beobachtung des Photoionisations-Prozesses (2.14) kann prinzipiell auf der Detektion der Reaktionsprodukte (Elektron und/oder Photoion) basieren oder über Absorptionmessungen am Photonenstrahl laufen:

Elektronen: Eine Separation der Photoelektronen von jenen des Elektronenstrahls des EBIT ist bei den starken Magnetfeldern im Fallenbereich keine praktikable Option. Anordnungen, ähnlich einem Reaktionsmikroskop [35; 106; 107] mit gekreuzten Strahlen (kleines Reaktionsvolumen) erscheinen dafür sinnvoller, weil damit auch interessante Informationen über Energie- und Winkelverteilung der Photoelektronen extrahiert werden können.

Photoabsorption: Für Photoabsorptions-Messungen sind Ionendichten, wie bei lasererzeugten, kurzlebigen Plasmen notwendig (siehe Abschnitt 3.1 "Photoabsorption in dichten Plasmen"), welche in einer EBIT nicht erreicht werden können. Zusätzlich kann beim aktuellen Aufbau des Photoionisations-Experiments der Photonenstrahl, welcher von der Kollektorseite eintritt, nach der Wechselwirkungszone nicht vermessen werden. Außerdem besteht ein qualitativer Unterschied zu Photoionisations-Experimenten, da weitere Prozesse zur Absorption beitragen.

Photoionen: Eine Elektronenstrahl-Ionenfalle kann auch als Ionenquelle betrieben werden. Damit steht eine simple und hoch effiziente Nachweismöglichkeit zur Verfügung.

Entscheidend für das Gelingen des Photoionisations-Experiments über den Nachweis der Photoionen ist des weiteren eine passende Wahl der Elektronenstrahl-Energie E_{kin}^e (4.16). Das Target-Ion Z^q soll in möglichst großer Häufigkeit vorkommen, allerdings sollen Ionen im nächst höheren Ladungszustand $(q + 1)$, sprich potentielle Photoionen, nicht über Elektronenstoß-Ionisation (engl.: *electron impact ionization - EII*) erzeugt werden können. Letzt genannter Prozess würde die Photoionisation, die eigentlich untersucht werden will, komplett überdecken und dominieren.

$$j_e \cdot \sigma_{EII}(E_{kin}) \gg \Phi_\gamma \cdot \sigma_{PI-direct}(h\nu) \quad . \quad (4.1)$$

Damit ergibt sich folgende Einschränkung für E_{kin}^e :

$$E_{IP}^{Z^{q-1}} < E_{kin}^e < E_{IP}^{Z^q} \quad . \quad (4.2)$$

Speziell für Elektronenkonfigurationen mit offenen Schalen lässt diese Bedingung nur ein kleines Fenster für E_{kin}^e . Da EII-Wirkungsquerschnitte beim Schwellwert linear mit dem Energieüberschuss $(E_{kin}^e - E_{IP}^{Z^{q-1}})$ ansteigen, ist es experimentell meist notwendig, E_{kin}^e möglichst knapp unter das Ionisationspotential $E_{IP}^{Z^q}$ des Target-Ions einzustellen. Das Maximum des Wirkungsquerschnitts, das beim zwei- bis dreifachen von $E_{IP}^{Z^{q-1}}$ liegt [108; 109], kann praktisch nur im Falle von He- bzw. Ne-artigen Target-Ionen erreicht werden. In Tabelle 4.1 können diese Sachverhalte für die Ionen, welche für diese Arbeit am systematischsten vermessen wurden, nachvollzogen werden.

Streng genommen kann man bei erfüllter Bedingung (4.2) nur garantieren, dass keine Photoionen über EII von Target-Ionen im Grundzustand (engl.: *ground-state GS*) erzeugt werden. Elektronenstöße führen auch ständig zur Anregung der Elektronen auf Niveaus, von denen aus ein weiterer Elektronenstoß E_{kin}^e zur Ionisation ausreichen würde. Die meisten angeregten Zustände haben sehr kurze Lebensdauern und zerfallen radiativ so rasch,

Tabelle 4.1: Zahlenbeispiele für die Bedingungen an die Elektronenstrahl-Energie bei einem Photoionisations-Experiment mit einer EBIT.

Ion Z^q (Strahlzeit)	N^{3+} (BESSY 2008)	Ar^{8+} (BESSY 2009)	Fe^{14+} (BESSY 2009)
I_e	2.0 mA	8.0 mA	6.6 mA
E_{kin}^e	50 eV	400 eV	445 eV
$E_{IP}^{Z^{q-1}}$ *	43.9 eV	143.4 eV	390 eV
$E_{IP}^{Z^q}$ *	77.4 eV	422.5 eV	456 eV
$E_{kin}^e/E_{IP}^{Z^{q-1}}$	1.14	2.8	1.14
$\Phi_\gamma(h\nu = E_{IP}^{Z^q})$	$1.6 \cdot 10^{16} s^{-1} cm^{-2}$	$1.6 \cdot 10^{16} s^{-1} cm^{-2}$	$1.6 \cdot 10^{16} s^{-1} cm^{-2}$
$\sigma_{PI}^{q \rightarrow q+1}(h\nu = E_{IP}^{Z^q})$ **	1.0 Mbarn	1.5 Mbarn	140 kbarn
j_e	$1.6 \cdot 10^{20} s^{-1} cm^{-2}$	$6.4 \cdot 10^{20} s^{-1} cm^{-2}$	$5.2 \cdot 10^{20} s^{-1} cm^{-2}$
$\sigma_{EII}^{q-1 \rightarrow q}(E_{kin}^e)$ ***	$5.3 \cdot 10^{-18} cm^2$	$8.0 \cdot 10^{-19} cm^2$	$3.4 \cdot 10^{-20} cm^2$
$j_e \sigma_{EII}/\Phi_\gamma \sigma_{PI}$	21 000	8500	3200

* Werte aus Tabelle nach *Scofield* [110]

** ungefähre Werte von NORAD [81; 82], TOPbase [11], NASA [111]

*** mittels Lotz Formel [108; 109]

dass ein weiterer Elektronenstoß in diesem Zeitraum verschwindend geringe Wahrscheinlichkeiten hat. Anders ist die Situation bei langlebigen, metastabilen Zuständen (engl.: *metastable states* - *MS*). Die Untergrund-Zählraten, die auf diese Weise zustande kommen, liegen in einer ähnlichen Größenordnung wie die Zählraten des Photoionisations-Prozesses. Deshalb wird der Nachweis der Photoionisation durch diesen Effekt nicht wesentlich beeinträchtigt wird, denn der Anstieg der Zählrate von Ionen in einem inkrementierten Ladungszustand ($q + 1$) durch den Photonenstrahl kann auf Photoionisation zurückgeführt werden.

4.2 Synchrotronstrahlung

Die klassische Elektrodynamik [2; 3] lehrt uns, dass die Ursache für elektromagnetische Abstrahlung in der Beschleunigung von Ladungen liegt. Für eine beliebig bewegte Punktladung mit Teilchenbahn $\vec{r}_0(t)$ erhält man über die *Liénard-Wiechert-Potentiale* folgenden Ausdruck für das elektromagnetische Feld

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{q(\hat{R} - \vec{\beta})}{R^2 \gamma^2 (1 - \vec{\beta} \cdot \hat{R})^3} \Big|_{ret} + \frac{q \hat{R} \times [(\hat{R} - \vec{\beta}) \times \dot{\vec{\beta}}]}{c R (1 - \vec{\beta} \cdot \hat{R})^3} \Big|_{ret}, \quad \vec{B}(\vec{r}, t) = \hat{R} \times \vec{E}(\vec{r}, t), \quad (4.3)$$

wobei

$$\beta = \frac{v}{c}, \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad \vec{R}(t_{ret}) = \vec{r} - \vec{r}_0(t_{ret}), \quad t_{ret} = t - \frac{|\vec{R}(t_{ret})|}{c}, \quad \hat{R} = \frac{\vec{R}}{|\vec{R}|}.$$

Entscheidend ist die Feststellung, dass der zweite Term $\dot{\vec{\beta}}$ enthält und proportional zu R^{-1} ist. Er tritt also nur im Falle von Geschwindigkeitsänderungen, sprich Beschleunigungen, auf und führt dann zu einer Energiestromdichte (Pointing-Vektor) die proportional zu R^{-2} ist, was einem effektiven Energietransport entspricht. Wirklich nennenswerte Abstrahlleistungen erhält man experimentell allerdings nur im Falle der kreisförmigen Bewegung von Elektronen (bzw. Positronen) mit hoch relativistischen Geschwindigkeiten ($\gamma \gg 1$). Lineare Beschleunigung führt nur zu äußerst geringfügiger Abstrahlung und bei der Kreisbewegung skaliert die Abstrahlung invers mit der vierten Potenz der Masse, weshalb für Protonen, Ionen bzw. Atomkerne erst bei viel extremeren Energien nennenswerte Abstrahlleistungen auftreten¹. Dementsprechend trat Synchrotronstrahlung zunächst als unangenehmer Nebeneffekt in Beschleunigerringen für Elektronen auf (Synchrotron). Zusätzlich zur Herkunft der Synchrotronstrahlung spielen Teilchenbeschleuniger (vor allem für Elektronen) in modernen Strahlungsquellen eine herausragende Rolle. Daher geht der Beschreibung moderner Synchrotron-Strahlungsquellen ein Abriss über Teilchenbeschleuniger voraus. Die Betrachtungen lehnen sich an jene der Bücher von Klaus Wille [112], David Attwood [113], bzw. Albert Hofmann [114].

4.2.1 Teilchenbeschleuniger

Das physikalisch einfachste Prinzip zur Beschleunigung geladener Teilchen beruht auf statischen Feldern. Den erreichbaren Teilchenenergien ist hier durch die maximal erzeugbaren Gleichspannungen bzw. durch das unvermeidliche Auftreten von Koronaentladungen eine natürliche Grenze gesetzt. Die höchsten Energien erreichen sogenannte *Tandem-Beschleuniger* mit *Van de Graaff* Generatoren unter Schutzgas (z.B.: SF₆) zur Erhöhung

¹selbst beim LHC am CERN für Protonen im TeV-Bereich noch ca. sechs Größenordnungen niedriger als für Elektronen bei BESSY II

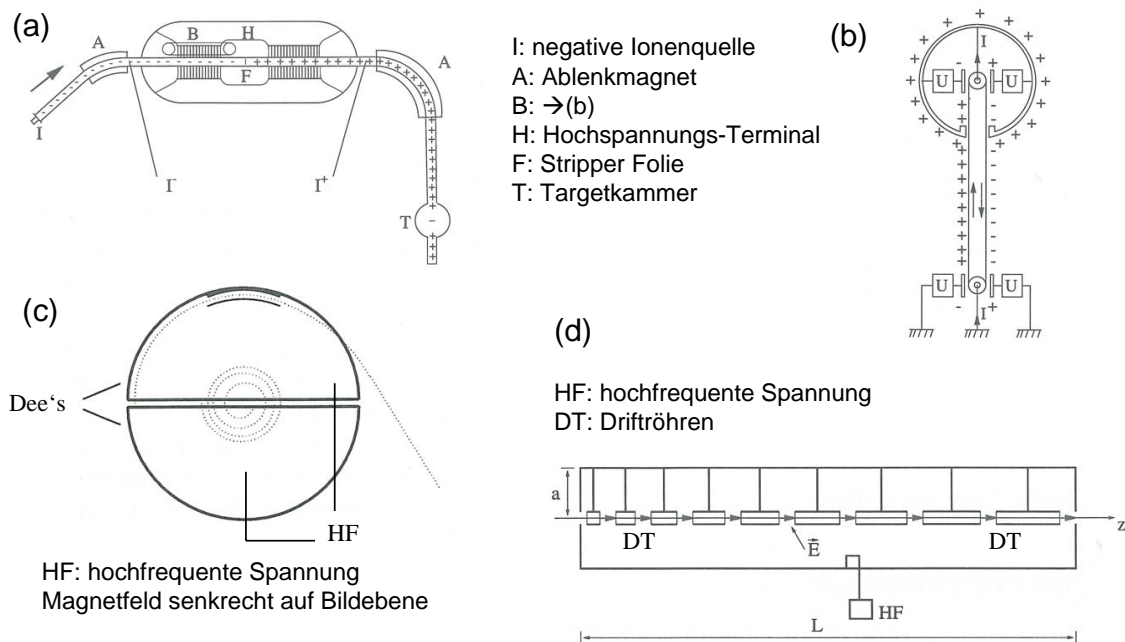


Abbildung 4.2: Prinzip einiger Teilchenbeschleuniger. Tandem-Beschleuniger (a) verwenden häufig Van de Graaff Generatoren (b), um die notwendige Hochspannung zu erzeugen. Linearbeschleuniger (c) und Zyklotron (d) verwenden Wechselspannungen um geladenen Teilchen periodisch Energie zuzuführen. [116].

der Überschlagspannung. Auch am Max-Planck-Institut für Kernphysik in Heidelberg ist dieser Typ von Beschleuniger im Einsatz [115]. Beim Tandem-Prinzip werden negative Ionen zu einem Terminal auf positiven Potential beschleunigt (mehrere MV), wo die Elektronen an sogenannten Stripper-Folien abgestreift werden. Die dabei entstehenden hochgeladenen Ionen werden anschließend durch die Potentialdifferenz weiter beschleunigt. Teilchenenergien an der Grenze zum GeV-Bereich sind möglich. Abbildung 4.2 zeigt ein Schema des Tandem-Prinzips (a) und des Van de Graaff Generators (b).

Fast allen anderen Konzepten zur Teilchenbeschleunigung ist gemein, dass hohe Spannungen vermieden werden, indem eine hochfrequente Wechselspannung genutzt wird, um geladenen Teilchen periodisch Energie zuzuführen. Ein wichtiges Prinzip, um eine stabile Beschleunigung in solchen Anordnungen zu gewährleisten, ist die *Phasenfokussierung*. Sie gibt vor, dass die periodische Beschleunigung nicht zum Zeitpunkt maximaler Amplitude stattfinden darf, sondern im Bereich ansteigender Spannungswerte. Dadurch nehmen vorausseilende (schnellere) Teilchen weniger Energie auf als später eintreffende (langsamere) und eine Angleichung der Geschwindigkeiten erfolgt. Da Linearbeschleuniger dargestellt in Abbildung 4.2 (c), für hohe Teilchenenergien gigantische Längen erreichen, gab es schon früh erste Bemühungen, die periodische Energiezufuhr auf einer gekrümmten oder sogar geschlossenen Bahn vollziehen. Beim *Zyklotron* erfolgt die Beschleunigung in einem homogenen Magnetfeld. Die beiden Elektroden, die mit der Wechselspannung beaufschlagt werden, haben in etwa die Form einer durchgeschnittenen, flachen Dose (*Dee's*). Die offene Kreisbahn der geladenen Teilchen liegt je zur Hälfte in einer der beiden Elektroden. Die Frequenz der Wechselspannung wird so gewählt, dass sich vom Eintritt des Teilchens in

eine Elektrode bis zum Wiederaustritt (halbe Kreisbahn) die Spannung umkehrt (halbe Periode) und somit für die Teilchen immer eine beschleunigende Spannung zwischen den Elektroden anliegt. Den prinzipiellen Aufbau zeigt Abbildung 4.2 (d). Die Unabhängigkeit der *Zyklotronfrequenz* ω_z von der Teilchen-Geschwindigkeit (gültig im nichtrelativistischen Bereich) wird im Zyklotron genutzt und hat auch zur Namensgebung geführt:

$$\omega_z = \frac{q}{m} B \quad . \quad (4.4)$$

Speziell für Elektronen erreicht man schnell relativistische Energien. In diesem Bereich muss die Frequenz passend reduziert werden (*Synchro-Zyklotron*), oder man verwendet abgestimmte Magnetfelder, die zum Rand hin zunehmen und so die Umlauffrequenz konstant halten (*Isozyklotron*). Alternativ dazu wählt man beim *Mikrotron* die Frequenz der Beschleunigungsspannung deutlich über der Zyklotronfrequenz und dimensioniert den Energiegewinn immer so, dass eine ungerade Anzahl an Spannungswechseln erfolgt, bis das Teilchen wieder von einem Elektrodenbreich in den anderen wechselt. Ganz ohne Anlegen einer Beschleunigungsspannung kommt das *Betatron* aus, welches vor allem für Elektronen geeignet ist. Hier wird ein Magnetfeld so hochgefahren, dass der Radius der Teilchenbahn konstant bleibt. Dabei werden die Elektronen gleichzeitig beschleunigt, da sie die Funktion einer Sekundärspule in einem Wechselspannungstransformator übernehmen (äquivalent zum *Tokamak*-Prinzip). Mit dem Betatron, welches vor allem im medizinischen Bereich häufig Anwendung findet, sind Elektronen-Energien bis zu 200 MeV erreichbar.

Ab gewissen Teilchenenergien kann die erforderliche Größe bzw. Stärke des Magnetfeldes nicht mehr in einer einzelnen Anordnung realisiert werden und man geht zum Bau von ringförmigen Beschleunigern mit mehreren Ablenkmagneten über. Damit ist die Entwicklung beim *Synchrotron* gelandet, dessen Namen vom Konzept stammt, die Magnete mit der Teilchenenergie *synchro*n zu erhöhen, um immer auf der vorgegebenen Teilchenbahn zu bleiben. Ein Synchrotron benötigt einen Vorbeschleuniger (Linearbeschleuniger, Mikrotron), da es äußerst schwierig ist Magnete herzustellen, die sowohl für schwache, als auch starke Magnetfelder präzise arbeiten. Elektronen-Energien im GeV-Bereich ($\gamma \approx 10^3 - 10^4$) sind erreichbar. Da die Abstrahlung mit der vierten Potenz der Teilchenenergie anwächst, stößt man bei rund 10 GeV an eine Grenze, ab der das Zuführen der abgestrahlten Leistung technisch problematisch wird. Die Kompensation des Energieverlusts durch Strahlung erfolgt in sogenannten *Kavitäten* oder *Hohlraumresonatoren* (engl.: *cavities*), die in ein bis mehreren geradlinigen Teilstrecken des Speicherrings untergebracht sind. Diese Weiterentwicklung der ersten Linearbeschleuniger benutzt starke, stehende Wellen, die mittels Hochfrequenz angeregt werden.

4.2.2 Moderne Synchrotron-Strahlungsquellen

Die erste experimentelle Nutzung von Synchrotron-Strahlung erfolgte in parasitärer Form an Synchrotrons bzw. Elektronen-Speicherringen, deren primärer Zweck die Beschleunigung von Elektronen für Untersuchungen in den Bereichen Kern- und Hochenergiephysik war. Zu den ersten Untersuchungen zählte die Photoionisation von Helium, Neon und Argon durch Madden und Codling [28] am 180 MeV Synchrotron des NIST: *Synchrotron Ultraviolet Radiation Facility* (SURF I) in Gaithersburg, Maryland, US. Die auftreten-

den asymmetrischen Linienprofile wurden erfolgreich von Ugo Fano interpretiert und auf ein theoretisches Fundament gestellt [69; 117]. Der erste Speicherring, welcher als Prototyp der heutigen *Multiuser* Synchrotron-Strahlungsquellen gilt, entstand in den späten 1960er Jahren am heutigen *Synchrotron Radiation Center der University of Wisconsin-Madison*. Zunächst als Protonen-Speicherring geplant, wäre das Projekt beinahe knapp vor der Fertigstellung an der Finanzierung gescheitert. Gestützt vom wachsenden Interesse an Synchrotron-Strahlungsquellen, speziell im Bereich der Festkörperphysik, wurde der Speicherring unter dem symbolträchtigen Namen *Tantalus I* doch noch fertig gestellt. Diese Einrichtungen, welche nicht speziell für die Nutzung als Strahlungsquellen konzipiert und errichtet wurden, bezeichnet man heute als die *erste Generation* der Synchrotron-Strahlungsquellen.

Der große Bedarf an Synchrotron-Strahlung und die häufig nicht zusammenpassenden Anforderungen des *in-Ring* Experiments und der parasitären Strahlungsnutzung führte in den 1970er und 1980er Jahren zur Errichtung von Elektronen-Speicherringen, die ausschließlich als Synchrotron-Strahlungsquellen dienen sollten. Immer deutlicher wurde, dass nicht nur der gesamte Photonenfluss und die erreichbaren Photonen-Energien von Relevanz für wissenschaftliche Untersuchungen sind, sondern auch Strahlgröße, Divergenz und Dispersion. Diese Charakteristika finden in der Definition der *Brillanz* (engl.: *brilliance* or *spectral brightness*) ihren Platz:

$$\text{Brillanz} \equiv \frac{\text{Photonenrate}}{\text{Fläche} \cdot \text{Divergenz} \cdot \text{Bandbreite}} \rightarrow \frac{s^{-1}}{mm^2 \text{ mrad}^2 \text{ meV/eV}} \quad (4.5)$$

Die ersten Ansätze für kompliziertere Magnetstrukturen als Dipolmagnete zur Erzeugung von Strahlung nahmen Gestalt an. Mit der Entwicklung der sogenannten *Insertion Devices* (ID) zeichnete sich bereits die *dritte Generation* der Synchrotron-Strahlungsquellen am Horizont ab. Die IDs verdanken ihren Namen dem Umstand, dass sie in die geraden Strecken des Speicherrings zwischen Dipolmagneten eingesetzt werden können. Details zu den beiden Typen, *Undulatoren* und *Wiggler*, werden weiter unten zusammen mit den Dipolmagneten diskutiert. Charakteristika der verwendeten Magnetfeldstrukturen sind in der nachfolgenden Tabelle 4.2 zusammengefasst und in Abbildung 4.3 veranschaulicht.

Eine logische Weiterentwicklung der IDs ist der *Freie Elektronen Laser* (FEL). Er kann als die *vierte Generation* der modernen Strahlungsquellen angesehen werden. Im Anhang (Seite 153) findet sich aus folgenden Gründen einige Informationen zum FEL: (i) FELs sind von hoher Aktualität (ii) die FLASH-EBIT wurde für den Einsatz bei FELs gebaut und hat erfolgreich Experimente beim FEL in Hamburg (FLASH) absolviert und soll demnächst beim Röntgen FEL bei SLAC (Linac Coherent Light Source - LCLS) zum Einsatz kommen, wo erst vor kurzem der Nutzerbetrieb aufgenommen wurde (iii) mit dem FEL Prinzip wird die Diskussion der IDs abgeschlossen.

Heute sind weltweit mehrere Dutzend Synchrotron-Strahlungsquellen der dritten Generation im Einsatz und tragen in vielen Bereichen der Forschung an vorderster Front zum Fortschritt bei. Im besonderen Maße profitieren sind die Festkörperphysik, die Oberflächenphysik, die Chemie, die Biologie, die Materialforschung und -prüfung sowie die Radiometrie. Die vorliegende Arbeit wurde bei BESSY II, einer Strahlungsquelle der dritten Generation, durchgeführt.

4.2. Synchrotronstrahlung

Tabelle 4.2: Vergleich der Eigenschaften von Magnetfeldstrukturen die zur Erzeugung von Strahlung im Einsatz sind.

	Dipolmagnet	Undulator	Wiggler	FEL-Undulator
K^*	–	< 1	$\gg 1$	< 1
Intensität	$I_e K$	$I_e N^2$	$I_e N K$	$I_e^2 N^2$
N^{**}	1	10 - 100	10 - 100	$\approx 10\,000$

*dimensionslose Magnetfeldstärke: siehe (4.10)

**Anzahl alternierend gepolter Magnetfelder (Undulatorperioden)

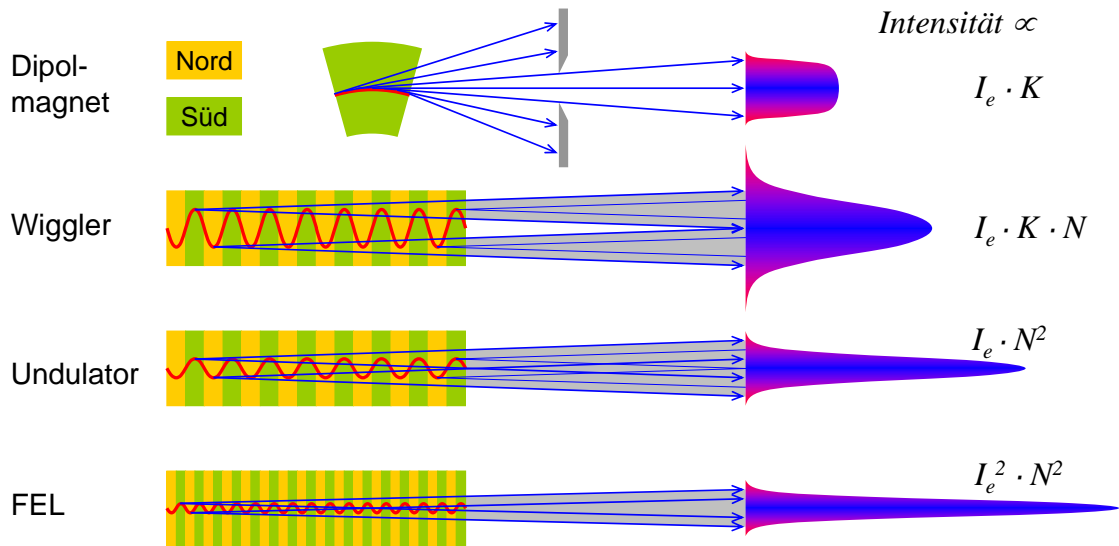


Abbildung 4.3: Unterschiede zwischen Ablenkmagneten, Wiggler und Undulatoren, wie sie bei Synchrotron-Strahlungsquellen der dritten Generation verwendet werden, sowie von FEL-Undulatoren sind hier veranschaulicht.

4.2.2.1 Dipolmagnete, Undulatoren und Wiggler

Wichtige Eigenschaften der Synchrotron-Strahlung, wie die Vorwärtsrichtung und spektrale Breite, werden bereits bei einer einfachen Betrachtung der Dipolmagnete ersichtlich und dienen als wertvolle Basis zur Behandlung der IDs. Da die Elektronen eine geschlossene Bahn durchlaufen sollen, findet man Dipolmagnete und angeschlossene Dipol-Beamlines auch in Strahlungsquellen späterer Generationen. Im Ruhesystem des Elektrons (S') wirkt im homogenen Magnetfeld eine konstante Beschleunigung, die zur einer Abstrahlung mit der typischen Dipol-Charakteristik führt

$$\frac{dP'}{d\Omega} = \frac{q^2}{4\pi c} \beta^2 \sin^2(\theta') . \quad (4.6)$$

Über eine Lorentz-Transformation gelangt man in das Laborsystem (S), wo der Großteil der Strahlung innerhalb eines schmalen, vorwärts gerichteten Kegels liegt, dessen halber

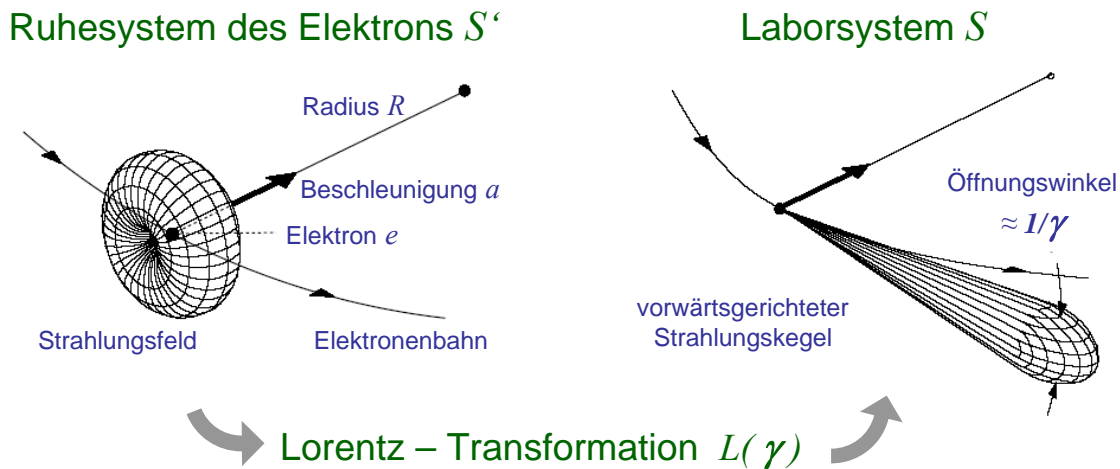


Abbildung 4.4: Die Abstrahlung einer Punktladung im homogenen Magnetfeld hat im Ruhesystem (S') Dipol-Charakteristik. Nach Transformation ins Laborsystem (S) zeigt die Abstrahlung die vorwärtsgerichtete Kegelform mit einem Öffnungswinkel von $\approx \frac{1}{\gamma}$ [112].

Öffnungswinkel invers mit dem γ -Faktor skaliert

$$\tan\theta = \frac{\sin\theta'}{\gamma(\beta + \sin\theta')} \quad \rightarrow \quad \theta_K \approx \frac{1}{2\gamma} \quad . \quad (4.7)$$

In Abbildung 4.4 ist der Effekt der Lorentz-Transformation auf die Abstrahlcharakteristik dargestellt. Auf Grund der Dopplerverschiebung stellt der Beobachter im Laborsystem (S) auch höhere Photonen-Energien fest, als im Ruhesystem (S') auftreten. Brauchbare Werte für die spektrale Breite erhält man bereits aus einer einfachen aber interessanten Abschätzung, die auf der *Heisenberg'schen Unbestimmtheitsrelation* beruht (siehe Anhang, Seite 141). Detailliertere Informationen über spektrale Verteilung und Polarisierung in Abhängigkeit der Strahlrichtung geben die sogenannten *Schwinger-Gleichungen* [118]. Für die gesamte abgestrahlte Leistung auf einer Kreisbahn erhält man

$$P_s = \frac{e^2 c}{6\pi\epsilon_0 R^2} \gamma^4 \quad . \quad (4.8)$$

Um mehr Photonen in die gleiche Richtung abzustrahlen, und damit den Fluss und die Brillanz zu erhöhen, verwendet man Magnetfeldstrukturen, die den Elektronenstrahl auf einen "Slalom"-Kurs zwingen. Dazu verwendet man Anordnungen alternierend gepolter Dipolmagnete. Je nach Stärke der Auslenkung von der geradlinigen Bahn, welche mit der Stärke des Magnetfelds zusammenhängt, unterscheidet man *Undulatoren* und *Wiggler*. Schwache Auslenkungen, die zu keiner Vergrößerung des Abstrahlkegels führen, werden im Undulator genutzt. Hier ist eine kohärente Überlagerung vieler Wellenzüge möglich, wodurch ein Spektrum mit ausgeprägten Maxima entsteht. Im Gegensatz dazu erreichen Wiggler (bei entsprechend höheren Strahldivergenzen) hohe Photonen-Energien und -flüsse. Wichtige Charakteristika der IDs sind die Magnetfeldstärke, die Undulatorperiodenlänge λ_u und die Anzahl der Perioden N . Der Abstand der Magnetpole, das

sogenannte *Gap* g kann verändert werden, wodurch die Variation der Magnetfeldstärke auf einfache Weise ermöglicht wird.

Die "Slalom"-Bewegung führt zur Abstrahlung bestimmter Frequenzen. Dabei führen die Lorentz-Kontraktion der Magnetfeldstruktur, wie sie das Elektron sieht, sowie die winkelabhängige Dopplerverschiebung bei der Transformation ins Laborsystem zu einer vielfach kürzeren Photonenwellenlänge λ im Vergleich zu λ_u

$$\frac{c}{\nu} = \lambda = \lambda_u \frac{1}{2\gamma^2} (1 + \gamma^2 \theta^2) \quad . \quad (4.9)$$

Die spektrale Breite ist im mitbewegten Bezugssystem (S') mit der Anzahl der Perioden N verknüpft: $\frac{\Delta\nu}{\nu} = \frac{1}{N}$ (folgt aus Fourier-Transformation). Je nach Größe des zugelassenen Öffnungswinkels (Akzeptanz) führt die Winkelabhängigkeit der beobachteten Photonen-Energien im Laborsystem (S) zu einer weiteren, mehr oder weniger starken Verbreiterung. Das Aufstellen der Bewegungsgleichung führt in erster Näherung zu folgendem Ausdruck für die Transversalgeschwindigkeit v_x , welche Rückschlüsse auf Winkelauslenkung im Vergleich zum Öffnungswinkel des Strahlkegels zulässt

$$v_x = \frac{c}{\gamma} \underbrace{\frac{e B \lambda_u}{2 \pi m c}}_{\equiv K} \sin\left(\frac{2 \pi z}{\lambda_u}\right) \rightarrow \tan(\alpha) = \frac{v_x^{max}}{c} = \frac{K}{\gamma} \quad . \quad (4.10)$$

Die hier definierte Größe K bezeichnet man als *dimensionslose Magnetfeldstärke* (engl.: *non-dimensional magnetic strength*) einer periodischen magnetischen Struktur, oder auch als Auslenkparameter (engl.: *deflection parameter*). Mit K lässt sich eine formale Grenze zwischen Undulatoren ($K \leq 1$) und Wigglern ($K \gg 1$) ziehen. Hier wurde angenommen, dass die longitudinale Geschwindigkeit auf der Kreisbahn v_z sich nicht ändert und praktisch gleich der Lichtgeschwindigkeit ist. Genaugenommen erreicht v_z während einer Undulatorperiode zweimal einen Maximalwert (am Extrempunkt der Auslenkung, wenn $v_x = 0$) und zweimal einen Minimalwert (beim Nulldurchgang). Also läuft diese Bewegung mit der doppelten Frequenz ab. Dies ist die Ursache für das Auftreten der zweiten Harmonischen im Undulator-Spektrum, dessen Winkelverteilung, im Gegensatz zur ersten Harmonischen, bei $\theta = 0$ kein Maximum hat, da die Abstrahl-Charakteristik einem Dipol entspricht, der entlang der z -Achse (Kreisbahnrichtung) schwingt. Nach der Lorentz-Transformation wird daraus ein hohler Kegel, welcher auf der Strahlachse ein Minimum aufweist, weshalb die zweite Harmonische als Strahlungsquelle weniger gut geeignet ist. Berücksichtigt man höhere Ordnungen in den Bewegungsgleichungen, so erklärt sich auch das Auftreten höherer Harmonischer im Spektrum, wobei die unterschiedliche Winkelcharakteristik für gerade und ungerade Harmonische von allgemeiner Gültigkeit ist. Die Wellenlängen aller Harmonischen lassen sich mit der erweiterten *Undulator-Gleichung* in erster Näherung berechnen (im Anhang (Seite 142) erfolgt eine einfache Herleitung)

$$\lambda_n = \frac{\lambda_u}{2\gamma^2 n} \left(1 + \frac{K^2}{2} + \gamma^2 \theta^2 \right) \quad . \quad (4.11)$$

Die starken Auslenkungen bei Wigglern ($K \gg 1$) sind gleichbedeutend mit einer Be-

wegung, die sehr deutlich von der Sinusform abweicht. Dementsprechend stark sind auch die Beiträge der höheren Harmonischen, wodurch sich das Spektrum insgesamt zu höheren Energien verschiebt. Außerdem kommt es durch die winkelabhängige Energie-Verbreiterung zur Durchmischung der einzelnen Harmonischen, wodurch ein quasi-kontinuierliches Spektrum entsteht. Tatsächlich ähnelt die Form des resultierenden Wiggler Spektrums jenem des Dipolmagneten, wobei es zu höheren Photonen-Energien ($\approx 2\times$) und Flüssen ($\approx 2N\times$) verschoben ist.

4.2.3 BESSY

4.2.3.1 Synchrotronstrahlung in Berlin

Die Rufe nach einem rein als Strahlungsquelle dienende Speicherring (engl.: *dedicated source*) wurden in den 1970er Jahren immer lauter (zweite Generation). Anfangs schien es unwahrscheinlich, dass Berlin ein neues Zentrum für Synchrotronstrahlung werden könnte. Starker Befürworter war jedoch die *Physikalisch Technische Bundesanstalt* (PTB), die schon länger versuchte, einen 300 MeV Ring zu realisieren, da sie das große Potential der Synchrotronstrahlung als neuer Standard über weite Energiebereiche in der Photometrie sah. Schließlich wurde in einer Zusammenarbeit mehrerer Forschungsinstitute sowie einiger Industriepartner im Jahre 1979 die *Berliner Elektronenspeicherring-Gesellschaft für Synchrotron Strahlung m. b. H.* ins Leben gerufen und der Bau eines 750 MeV Speicherrings beschlossen. Untergebracht in Berlin-Wilmersdorf, ging BESSY I 1982 erstmals für Nutzer in Betrieb. Die Ergebnisse übertrafen alle Erwartungen. Angetrieben durch den stetig wachsende Bedarf an Synchrotron-Strahlung und die weiter fortschreitende Entwicklung der *Insertion Devices* begann 1993 die Planung eines 1.7 GeV Speicherrings der dritten Generation, welcher auf einem Gelände im traditionsreichen Wissenschaftstandort Berlin-Adlershof entstehen sollte. Der BESSY Speicherring und die Undulatoren wurden erstmals 1998 getestet und mit Januar 1999 begann der offizielle Nutzer-Betrieb bei BESSY II. BESSY I blieb noch bis Ende des selbigen Jahres in Betrieb². BESSY beschäftigt knapp 300 Personen und jedes Jahr werden rund 650 Wissenschaftler bzw. 220 Nutzergruppen mit Synchrotronstrahlung versorgt.

4.2.3.2 Aufbau und Betrieb

Der Aufbau von BESSY II ist in Abbildung 4.6 schematisch dargestellt. Der Speicherring mit 240 m Umfang besitzt 16 geradlinige Teilabschnitte, von denen 14 von IDs genutzt werden können. Die Undulatoren haben Längen von über 4 m. In einer der weiteren freien Geraden sind die Radiofrequenz-Hohlraumresonatoren untergebracht, die mit 500 MHz betrieben werden und den Energieverlust der Elektronen durch Synchrotron-Strahlung ausgleichen. Damit kommt ein hoch relativistisches Elektronenbündel genau nach 400 Schwingungen der stehenden Wellen im Resonator wieder dort an ($240 \text{ m} \cdot 500 \text{ MHz} / c$). Anders gesagt stehen 400 *Potentialtöpfe* für Elektronenbündel zur Verfügung. Die pri-

²2001 wurden große Teile von BESSY I im Rahmen eines UNESCO-Projekt nach Jordanien verlegt, wo unter dem Namen SESAME das erste Synchrotron im Nahen Osten entstand - BESSY I ging also über den Jordan.

4.2. Synchrotronstrahlung



Abbildung 4.5: Luftaufnahme von BESSY II. Speicherring-Halle und Synchrotron-Tunnel sind gut erkennbar (vergleicht Abbildung 4.6) © EUROLUFTBILD, mit freundlicher Genehmigung des HZB.

märe Beschleunigung auf die notwendigen relativistischen Geschwindigkeiten übernimmt ein Synchrotron mit einem Umfang von 96 m. Wie im Abschnitt 4.2.1 *„Teilchenbeschleuniger“* erwähnt, ist ein Synchrotron nicht für eine Beschleunigung geeignet, die von sehr kleinen Geschwindigkeiten aus startet. Daher werden die Elektronen, die aus einer thermischen Kathode erzeugt werden, in einem Mikrotron auf 50 MeV vorbeschleunigt.

In der Tabelle 4.3 sind die wichtigsten Kennzahlen von BESSY (I & II) aufgelistet und mit anderen Strahlungsquellen, an denen Messungen zur Photoionisation von Ionen durchgeführt werden, verglichen.

Tabelle 4.3: Technische Kennzahlen von BESSY im Vergleich mit den Synchrotron-Strahlungsquellen ASTRID und ALS, an denen MB Photoionisations-Experimente durchgeführt werden.

Synchrotron	BESSY I	BESSY II	ASTRID	ALS
Elektronen-Energie	340-850 MeV	0.9-1.9 GeV		0.9-1.9 GeV
↔ Standardwert	800 GeV	1.7 GeV	580 MeV	
γ -Faktor	1566	3327	1135	2935-3718
max. Ringstrom	800 mA	300 mA	220 mA	500 mA
Speicherring-Umfang	62.4 m	240 m	40 m	197 m
Brillanz		10^{19}	$(4 \cdot 10^{13})$	
Insertion Devices		14	3	10
Dipol - beam lines	≈ 32	max. 40	5	≈ 27
ID - beam lines	3	max. 30	3	10
Radiofrequenz	500 MHz	500 MHz	3 GHz	500 MHz

Die Eigenschaften der Synchrotronstrahlung wird nicht nur über die einzelnen IDs bestimmt bzw. variiert, sondern auch über den Betriebsmodus beeinflusst. Bei BESSY wer-

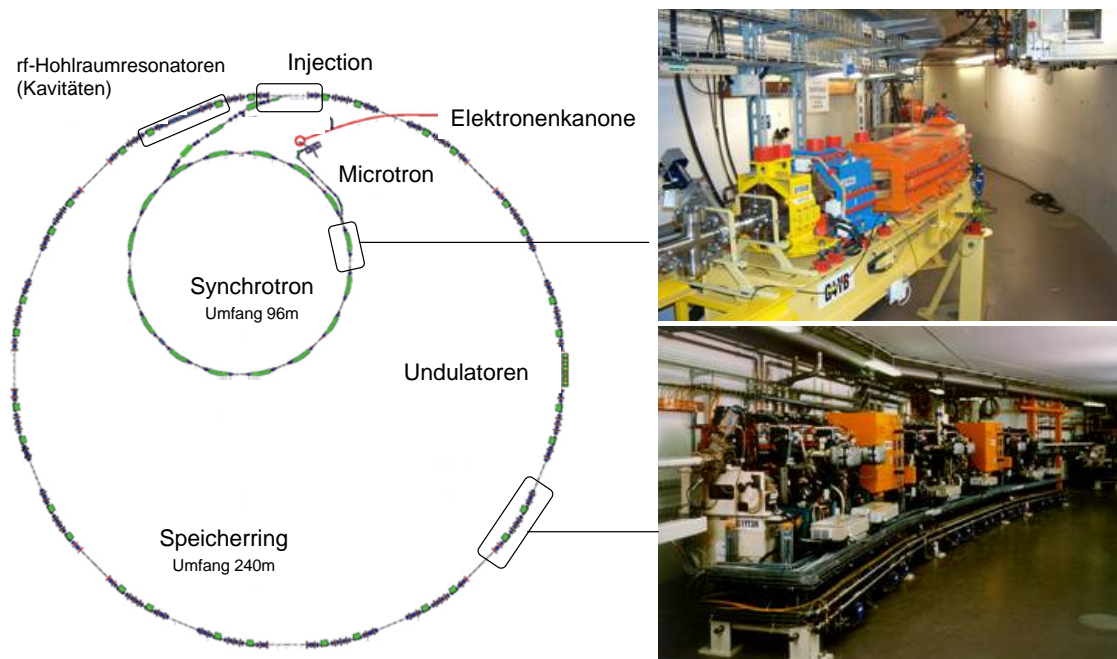


Abbildung 4.6: Schematische Darstellung der wesentlichen Komponenten von BESSY II. Nach der Erzeugung des Elektronenbündel aus einer thermischen Kathode erfolgt eine Vorbeschleunigung mittels Mikrotron auf 50 MeV und anschließende Energiezufuhr bis zur nominellen Energie (1.7 GeV) im Synchrotron mit Umfang 96 m. Dieses Bündel wird in den Speicherring mit Umfang 240 m injiziert. Der Energieverlust durch Synchrotronstrahlung wird in vier Radiofrequenz-Hohlraumresonatoren ausgeglichen, die mit der 400-fachen Frequenz der Umlaufdauer betrieben werden (≈ 500 MHz). Die Fotografien zeigen einen Ablenkmagneten des Synchrotrons (oben) und einen Undulator des Speicherrings (unten). © Helmholtz Zentrum Berlin, mit freundlicher Genehmigung.

den *multi bunch* (MB)³, *single bunch* (SB) und *low alpha* (low-a) angeboten. Unterscheidungsmerkmale sind die Zahl der Elektronenbündel und der gesamte Ringstrom und damit verbunden die Lebensdauer des Ringstroms sowie Kohärenzeigenschaften der Strahlung. Tabelle 4.4 gibt einen Überblick.

Der *multi bunch*-Modus ist der interessanteste vom Blickwinkel der Photoionisations-Experimente, da hier zur Zeit die höchsten integralen Intensitäten erzielt werden. Er wird auch als *hybrid-Modus* bezeichnet, da sich zusätzlich zu 350 ähnlichen Elektronenbündeln noch ein größeres im Speicherring befindet, das dem SB-Modus entspricht und als Zeitreferenz für Experimente dienen kann. MB ist der häufigste Betriebsmodus. Wie aus Abbildung 4.7 hervorgeht, gibt es einen Zeitraum von rund 90 ns ohne Strom, in dessen Mitte sich der SB befindet. Theoretisch könnten auch alle 400 Potentialtöpfe gefüllt werden. Allerdings hätte das negative Auswirkungen auf die Lebensdauer, da die negative Raumladung des Elektronenstrahls, ähnlich dem EBIT Prinzip, mehr Ionen einfangen würde. Aus der verwendeten Hochfrequenz ergibt sich eine Wiederholungsrate von 2 ns. Im Vergleich dazu hat man beim SB-Modus 800 ns zwischen zwei aufeinander folgenden Lichtpulsen (240 m Umfang/c). Zeitabhängige Messungen unterliegen damit deutlich ge-

³In allem anderen Abschnitten dieser Arbeit steht MB für *merged-beam*

4.2. Synchrotronstrahlung

Tabelle 4.4: Übersicht der verschiedenen möglichen Betriebsmodi für BESSY.

Modus	hybrid multi bunch	single bunch	low-alpha	top-up
$N_{\text{Bündel}}$	≈ 350 (+ 1 SB)	1	≈ 350	≈ 350
$I_{\text{ring}}^{\text{ges}}$	300 mA (max)	20 mA	36 mA	300 mA
$I_{\text{Bündel}}$	0.9 mA (+ 5 mA SB)	20 mA	0.1 mA	0.9 mA
$\tau_{1/2}$	10 h	3 h	15 h	" ∞ "
$l_{\text{Bündel}}$	10 mm	10 mm	0.5 mm	10 mm
$\tau_{\text{Injektion}}$	8 h	6 h	12 h	ständig

(Symbolerklärung) $N_{\text{Bündel}}$: Anzahl der Elektronenbündel, $I_{\text{ring}}^{\text{ges}}$: gesamter Ringstrom, $I_{\text{Bündel}}$: Ringstrom pro Bündel, $\tau_{1/2}$: Lebensdauer des Ringstroms, $l_{\text{Bündel}}$: Länge eines Elektronenbündels, $\tau_{\text{Injektion}}$: Zeitintervall zwischen zwei aufeinanderfolgende Injektionen.

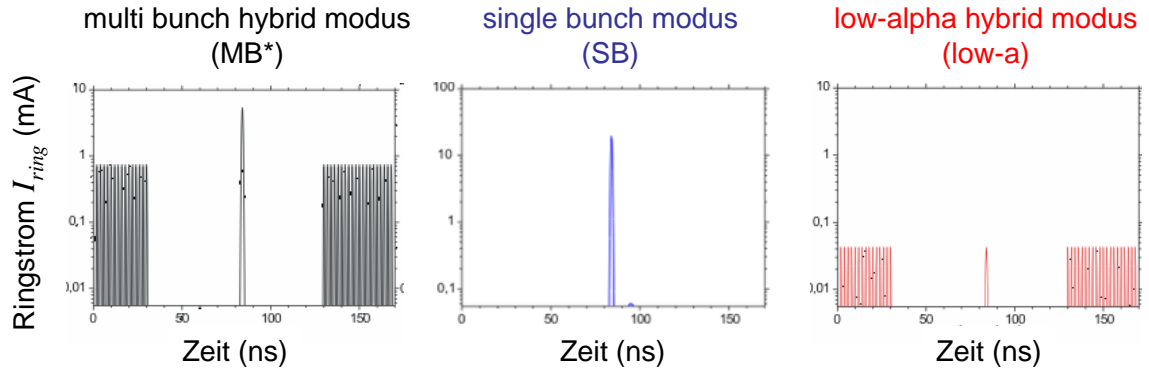


Abbildung 4.7: Die Betriebsmodi *multi bunch* (links), SB (mitte) und low-a (rechts) sind als gemessene, zeitabhängige Ringströme dargestellt. © Helmholtz Zentrum Berlin, mit freundlicher Genehmigung.

ringeren Anforderungen und Einschränkungen als im *multi bunch*-Modus. Der Ringstrom und damit die integrale Intensität sind ca. 20mal kleiner. Trotzdem ist auch die Lebensdauer geringer, weil das einzelne Bündel rund 20mal mehr Elektronen enthält als ein *multi bunch*-Bündel. BESSY betreibt nur zwei Wochen je Halbjahr den SB-Modus, was an der geringeren Zahl der Experimente liegt, die diesen Modus benötigen. Unsere Testmessung zu absoluten Wirkungsquerschnitten erfolgte in diesem Modus, was jedoch ausschließlich an der Verfügbarkeit dieser Strahlzeit und nicht an den speziellen Eigenschaften des SB lag.

Der *low-alpha*-Modus ist dem *multi bunch*-Modus von der Struktur her ähnlich (ebenfalls ein Hybrid-Modus), allerdings gelingt bei rund zehn mal geringeren Ringströmen eine Kompression des Elektronenbündels um einen Faktor 20 auf nur 0.5 mm Länge. Damit wird im THz-Bereich (mm-Wellen) die Produktion kohärenter Strahlung möglich.⁴

⁴beim FEL entstehen die Mikro-Elektronenbündel, die kleiner sind als die Wellenlänge durch SASE, während beim low-alpha-Modus durch spezielle Anpassung der Elektronenoptik von Anfang an ausreichend

Ein weiterer hochinteressanter Modus befindet sich zur Zeit noch im Teststadium: *top-up*. Wie der Name nahe legt, wird hier der kontinuierliche Elektronenverlust, der zu einem exponentiell abnehmenden Ringstrom führt, durch ständiges Auffüllen im laufenden Nutzerbetrieb ausgeglichen. Mit diesem Betriebsmodus fällt die Intensität (die mit dem Ringstrom verknüpft ist) nicht ab, sondern bleibt konstant auf dem hohen Niveau, welches sonst nur kurz nach einer Injektion vorherrscht. Damit wird auch der langzeit-integrale Photonenfluss erhöht und die regelmäßigen Experiment-Unterbrechungen durch die Injektion können entfallen.

4.2.3.3 Die verwendeten Strahlrohre

Die zwei Messkampagnen zur Photoionisation hochgeladener Ionen wurden in den Zeiträumen März bis Juli 2008 (Kampagne 2008) und Januar bis April 2009 (Kampagne 2009) an zwei verschiedenen Strahlrohren durchgeführt. Die Kampagne 2008 umfasste zwei jeweils zweiwöchige Strahlzeiten an der Undulator-Beamline U125/2-SGM mit sphärischem Gittermonochromator für den Bereich der Photonen-Energie von 30 bis 400 eV. Für die Kampagne 2009 an der Undulator-Beamline U49/2-PGM1 mit Plan-Gittermonochromator für den Energiebereich von 85 bis 1600 eV wurden nach den Erfolgen der Kampagne 2008 vier Wochen Strahlzeit genehmigt. Zusätzlich konnte eine anschließende zweiwöchige *low-alpha* und SB-Strahlzeit für weiterführende Testexperimente genutzt werden, welche in Abschnitt 5.5.1 "Absolute Wirkungsquerschnitte" beschrieben werden. Technische Daten der beiden relevanten Strahlrohre können der Tabelle 4.5 entnommen werden. Die Abbildungen 4.8 und 4.9 zeigen den Strahlengang und die optischen Elemente für die U125/2-SGM bzw. für die U49/2-PGM1.

Tabelle 4.5: Technische Daten zu den beiden verwendeten Strahlrohren

Strahlrohr	U125/2-SGM	U49/2-PGM1
Undulatorperiode λ	125.0 mm	49.4 mm
\leftrightarrow Anzahl N_λ	32 (quasiperiodisch)	84
Monochromatortyp	SGM	PGM
auswählbare Gitter	500 od. 1100 $\frac{\text{Linien}}{\text{mm}}$	600 od. 1000 $\frac{\text{Linien}}{\text{mm}}$
Energiebereich	29 - 400 eV	85 - 1600 eV
Divergenz hori. / verti.	7 / 0.6 mrad	2 / 2 mrad
Auflösungsvermögen $E/\Delta E$	50 000 (bei 200 eV)	30 000 (bei 100 eV) 5 000 (bei 1.6 keV)
Distanz zum Fokuspunkt	1300 mm	959 mm

Der Undulator U125/2 bedient drei Strahlrohre, die über eine Schaltspiegel-Einheit (engl.: *switching mirror unit - SMU*) ausgewählt werden können. Da der Undulator auch als Wiggler betrieben werden kann, gibt es neben einer NIM-Beamline (engl.: *Normal Incidence Monochromator*) auch eine KMC-Beamline (Doppel Kristall-Gittermonochromator) für den Bereich von 4 bis 15 keV. U125/2 ist quasiperiodisch ausgeführt, wodurch die Maxima der höheren Harmonischen nicht bei exakten vielfachen der Grundfrequenz liegen.

kurze Pulse für kohärente THz-Strahlung erzeugt werden

4.2. Synchrotronstrahlung

Damit kann der meist störende Anteil an Photonen, welche der Monochromator gemäß der Gittergleichung (4.12) in höherer Ordnung selektiert, reduziert werden.

$$n k \lambda_n = \sin\alpha + \sin\beta \Rightarrow \lambda_n = \frac{\lambda_1}{n} . \quad (4.12)$$

Die vorkommenden Größen stehen für die Ordnung n , die Gitterkonstante k , die Wellenlänge λ sowie Einfallswinkel α und Ausfallswinkel β des Photonenstrahls auf dem Gitter. Um die Fokusbedingung beim SGM zu erfüllen, kann entweder die Position des Austrittsspalts angepasst werden, oder Einfallswinkel und Ausfallswinkel werden variiert. Im zweiten Fall, der mechanisch einfacher zu realisieren ist und daher dem Standard-Betriebsmodus entspricht, erreicht man nicht die höchstmögliche Auflösung. Dafür ändert sich die Strahlgröße im Fokuspunkt mit der eingestellten Wellenlänge nicht. Weitere Informationen über die Beamline U125/2-SGM findet man in [119; 120; 121], sowie auf den Homepages von BESSY II bzw. dem HZB ⁵.

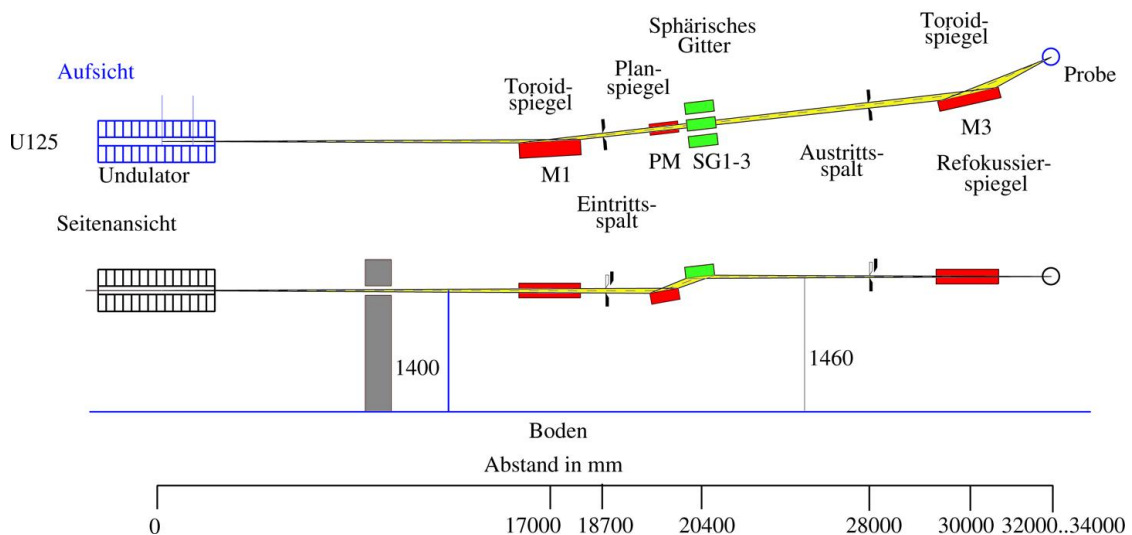


Abbildung 4.8: Schematische Darstellung des Strahlengangs der Beamline U125/2-SGM. © Helmholtz Zentrum Berlin, mit freundlicher Genehmigung.

Der Undulator U49/2 bedient zwei Plan-Gittermonochromatoren. Die Auswahl erfolgt auch hier über eine SMU. Bei herkömmlichen Gittermonochromatoren, wie beispielsweise beim *Czerny-Turner-Spektrometer*, ist die Summer aus Einfallswinkel und Ausfallswinkel am Gitter konstant ($\alpha + \beta = 2\theta = konst.$) und der Gitterwinkel alleine bestimmt die selektierte Wellenlänge. Bei Anordnungen, welche aus einem Spiegel und einem Gitter bestehen, können durch den zusätzlichen Freiheitsgrad unterschiedliche Eigenschaften optimiert werden:

- höchstmögliche Auflösung
- höchstmöglicher Photonenfluss (engl.: *on-blaze*)

⁵http://www.helmholtz-berlin.de/userservice/photons/instrumentation/beamlines-stations_en.html

- Unterdrückung höherer Ordnungen
- Bereichserweiterung durch Nutzung der inneren bzw. äußeren Beugung

Außerdem kann die Strahlführung, abgesehen von einem leichten Versatz, horizontal und geradlinig weitergehen, was den Platzverhältnissen bei modernen Synchrotron-Strahlungsquellen entgegen kommt (tangential vom Speicherring wegführende Strahlrohre).

Wie in Abschnitt 4.2.2.1 "Dipolmagnete, Undulatoren und Wiggler" beschrieben, ist Synchrotronstrahlung divergent. Nach der Beugung am Gitter ändern sich die Winkelverhältnisse und der Quellpunkt erscheint im virtuellen Abstand r' , für den folgende Beziehung gilt

$$r' = -r \frac{\cos^2 \beta}{\cos^2 \alpha} = -r c_{ff}^2 \rightarrow c_{ff} = \frac{\cos \beta}{\cos \alpha}, \quad (4.13)$$

U49/2-PGM1

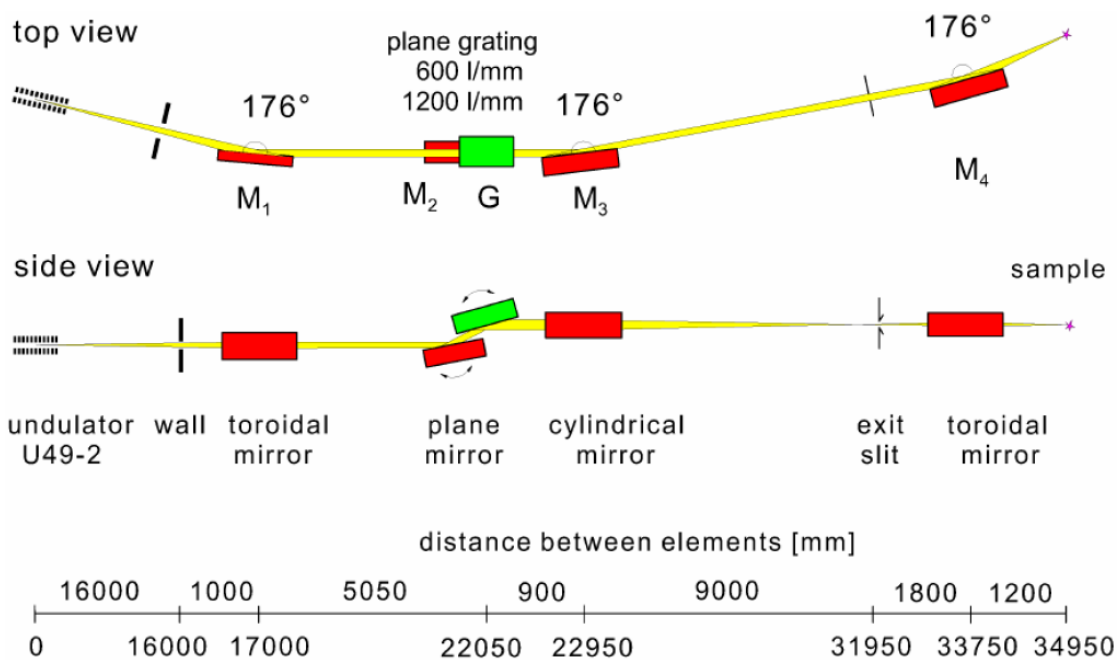


Abbildung 4.9: Schematische Darstellung des Strahlengangs der Beamline U49/2-PGM1. © Helmholtz Zentrum Berlin, mit freundlicher Genehmigung.

wobei r für den realen Abstand *Quelle-Monochromator* steht und die sogenannte *Fix-Fokus Konstante* c_{ff} definiert wurde. Damit ist eine Fokussierbedingung gegeben, welche α und β verknüpft. Um die oben genannten Freiheitsgrade voll nutzen zu können, verwendet die U49/2-PGM1 einen kollimierten (parallelen) Strahlengang am Monochromator, weshalb die Wahl von c_{ff} wegen $r = r' = \infty$ für die Fokussierung keine Rolle spielt. Die Abhängigkeit der Auflösung (Dispersion) von c_{ff} und der Photonen-Energie ist in Abbildung 4.11 zu sehen. Weiter Informationen über die Beamline U49/2-PGM1 findet man in [119; 122; 121] und wiederum auf den Homepages von BESSY II bzw. dem HZB.

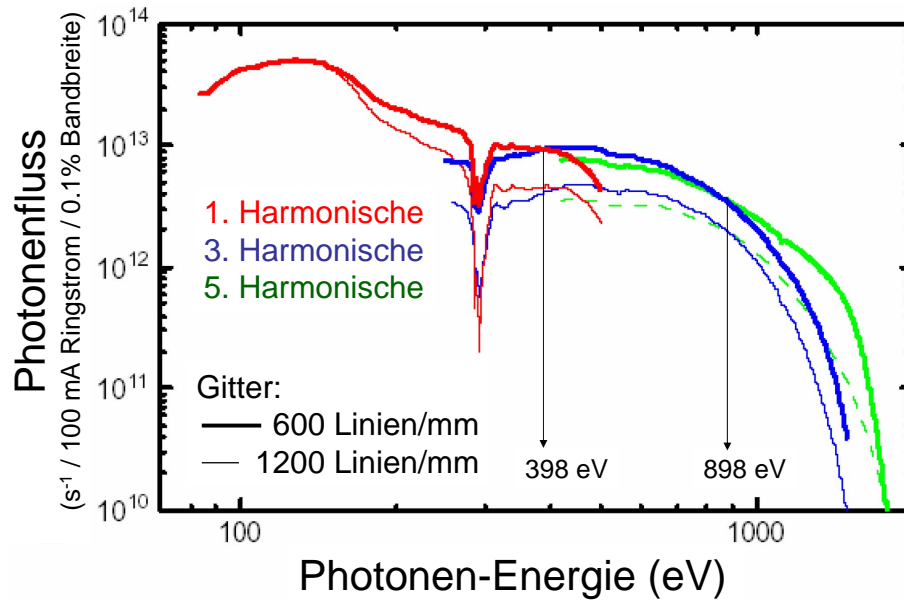


Abbildung 4.10: Photonflusskurven normiert auf 100 mA Ringstrom und 0.1% Bandbreite der drei ersten Harmonischen (1., 3. und 5.) der U49/2-PGM1. Um den maximalen Photonfluss zu erzielen empfiehlt sich ab Photonen-Energien von 398 eV die dritte Harmonische zu verwenden und ab 898 eV die fünfte. Dem geringeren Fluss bei Verwendung des 1200 Linien/mm Gitters steht eine höhere Auflösung gegenüber. © Helmholtz Zentrum Berlin, mit freundlicher Genehmigung.

Die Ansteuerung der Monochromatoren erfolgt in beiden Fällen mittels hausinterner Software (EMP/2) auf einem OS/2 Betriebssystem basierend. Die durchgeführten Messungen sind dabei über folgende Parameter definiert:

- Startwert E_{start} und Endwert E_{end} der Photonen-Energie (in eV)
- Anzahl der Schritte N_{step}
- Anzahl der Wiederholungen N_{scan} (Scan) in einer Messung
- Verweildauer des Monochromators auf einem Einstellwert t_{meas}
- Kopplungsart zwischen Monochromator und Undulator bzw. Photonen-Energie und Gap sowie Auswahl der Harmonischen

Der Terminus *Scan* soll hier einem einfachen Messvorgang von E_{start} bis E_{end} vorbehalten sein, während eine *Messung* aus der mehrfachen Wiederholung des gleichen Scans besteht. Die Schrittweite ergibt sich demnach zu

$$\Delta E_{step} = \frac{E_{end} - E_{start}}{N_{step} - 1} . \quad (4.14)$$

Eine Steuerspannung, die proportional zum momentanen Schritt i ($i=1..N_{step}$) ist und zwischen einem einstellbaren Minimal und Maximal-Wert ausgegeben wird (typische Werte waren 1 bis 7 V bzw. 0.5 bis 8.5 V), gibt den aktuellen Wert der Photonen-Energie dem

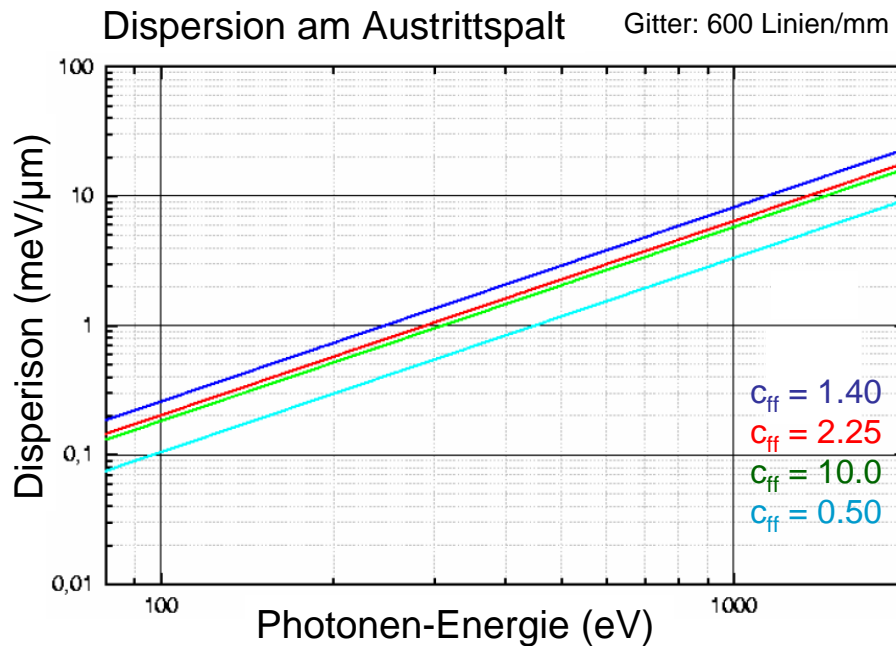


Abbildung 4.11: Dispersion im Fokuspunkt in Abhängigkeit der Photonen-Energie für verschiedene Werte der Fix-Fokus Konstanten c_{ff} für die Beamline U49/2-PGM1 bei Verwendung des 600 Linien/mm Gitters. © Helmholtz Zentrum Berlin, mit freundlicher Genehmigung.

Datenaufnahmesystem der FLASH-EBIT bekannt. Details dazu folgen in Abschnitt 4.6.1 "Datenaufnahme". Wie im Kapitel über IDs erwähnt, kann man bei Undulatoren, welche aus technischen Gründen mit Permanentmagneten arbeiten, die Magnetfeldstärke (und damit K) über den Polabstand beeinflussen. Die spektrale Verteilung der Undulatorstrahlung hängt somit entsprechend (4.11) vom Gap ab. Der optimierte Betrieb einer monochromatisierten Undulator-Beamline erfordert die gekoppelte Steuerung von Monochromator-Stellung und Undulator-Gap anhand experimentell ermittelter Tabellen oder theoretischer Formeln. Ab einer bestimmten Photonen-Energie ist der Wechsel auf die nächste (ungerade) Harmonische erforderlich, um den höchstmöglichen Fluss zu erzielen. Bei der U49/2-PGM1 geschieht dies beispielsweise bei 398 eV (Wechsel von 1. auf 3. Harmonische) und bei 898 eV (Wechsel von 3. auf 5. Harmonische) der Fall, wie auch in Abbildung 4.10 eingezeichnet.

Während eines Scans fährt der Monochromator zu einer Photonen-Energie $h\nu_i$, und bleibt für die einstellbare Zeitdauer t_{meas} (typischer Wert: 2 s) auf dieser Position bevor die inkrementierte Photonen-Energie $h\nu_{i+1} = h\nu_i + \Delta E_{step}$ eingestellt wird. Das Undulator-Gap wird simultan angepasst. Die für die Umstellung notwendige Zeitspanne liegt auch im Sekunden-Bereich und steigt mit größer werdender Schrittweite an.

4.3 Elektronenstrahl-Ionenfallen

Elektronenstrahl-Ionenfallen (engl.: *electron beam ion trap - EBIT*) zählen bereits seit mehreren Jahrzehnten zu den etablierten Technologien der atomphysikalischen Forschung und eine Vielzahl an hochrangigen Publikationen dokumentiert die wissenschaftlichen Ergebnisse, welche durch den Einsatz dieser Fallen erzielt wurden. Aus diesem Grund soll hier ein kurzer Abriss als Rahmen dienen, um auf die wesentliche Literatur zu verweisen. Ausgehend vom Grundprinzip sollen speziell jene technischen Details herausgearbeitet werden, die für das Photoionisations-Experiment relevant sind. Die FLASH-EBIT, welche hier konkret zum Einsatz kam, wurde im Rahmen der Doktorarbeit von *Sascha Epp* aufgebaut [48] und ist dort detailliert beschrieben⁶. Hier liegt das Hauptaugenmerk auf Neuerungen und Erweiterungen, welche für die Durchführung eines Photoionisations-Experiments erforderlich waren.

4.3.1 Grundprinzip

Die Elektronenstrahl-Ionenfalle ist ein Apparat der die Erzeugung und wissenschaftliche Untersuchung von atomaren Ionen in extrem hohen Ladungszuständen ermöglicht. Wie der Name außerdem nahe legt, ist ein Elektronenstrahl in mehrfacher Hinsicht das Mittel zum Zweck. Die Grundidee ist sequentielle Elektronenstoß-Ionisation (engl.: *electron impact ionization - EII*) zu nutzen, um hochgeladene Ionen zu erzeugen. Die dafür benötigten schnellen Elektronen werden in Form eines Strahls bereitgestellt (engl.: *electron beam*), dessen negative Raumladung (engl.: *space charge - SC*) es gleichzeitig ermöglicht die positiv geladenen Ionen einzufangen.



In Abbildung 4.12 sind die folgenden wesentlichen Komponenten, die alle EBITs gemeinsam haben, dargestellt:

Elektronen-Kanone mit Kathode (engl.: *electron gun*)

Falle (engl.: *trap*)

Elektronen-Kollektor (engl.: *electron collector*)

Der Elektronenstrahl nimmt seinen Ursprung an der Kathode der Elektronen-Kanone, wird auf eine gewünschte Energie beschleunigt, passiert dann die Fallenregion und wird im Elektronen-Kollektor abgebremst und gestoppt (nachfolgend nur noch *Kollektor*). Ein koaxial zum Strahl verlaufendes, starkes Magnetfeld komprimiert den Elektronenstrahl und ermöglicht die Erzeugung extrem hoher Stromdichten (bis zu $5 \cdot 10^{22}$ Elektronen $\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$).

⁶die FLASH-EBIT hieß zunächst Tesla-EBIT, weil auch das Projekt in Hamburg zunächst unter dem Namen *Tesla Test Facility* lief

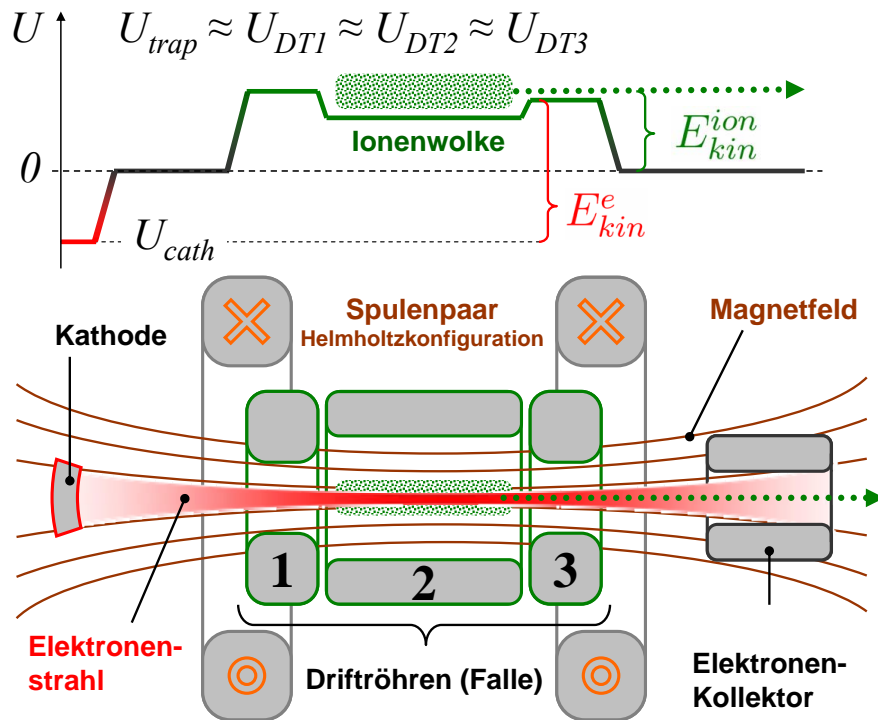


Abbildung 4.12: Grundprinzip und Hauptkomponenten einer EBIT. Oben der typische Spannungsverlauf von Kathode über Fallenregion (Driftröhren) zum Kollektor. Das koaxial verlaufende Magnetfeld des Spulenpaars komprimiert den Elektronenstrahl zur Fallenmitte hin, wo Ionen über EII erzeugt werden. Einschluss erfolgt radial durch die Raumladung des Elektronenstrahls bzw. das Magnetfeld und axial durch passende Driftröhren-Potentiale. Zum Kollektor hin kann der Elektronenstrahl expandieren und wird abgebremst und abgefangen.

Mittels eines Injektionssystems wird ein dünner Strahl von Atomen oder Molekülen gezielt mit dem Elektronenstrahl im Fallenbereich gekreuzt, wo Elektronenstöße zur erstmaligen Ionisation führen. In radialer Richtung werden die Ionen in erster Linie von der Raumladung des Elektronenstrahls am Entkommen gehindert. Durch das Magnetfeld ist ein zusätzlicher radialer Einschluss gegeben, welcher auch in Abwesenheit des Elektronenstrahls bestehen bleibt. Diverse Messprozesse nutzen diesen sogenannten *magnetic trapping mode*, welcher im Prinzip einer Penning Falle entspricht und in [123] beschrieben ist.

Die Fallenregion besteht aus einer koaxialen Anordnung von zumindest drei ringförmigen Elektroden, welche Driftröhren (engl.: *drift tubes - DT*) genannt werden und ein axiales Fallenpotential erzeugen. Radialer und axialer Einschluss führen zu einem Fallenvolumen in Form eines langen, dünnen Zylinders (Ionenwolke). Das Diagramm oben in Abbildung 4.12 zeigt wie einzelne Komponenten typischerweise mit Spannung beaufschlagt werden und verdeutlicht das Grundprinzip. Der Elektronenstrahl wird vom negativen Potential der Kathode (U_{cath}) zum positiven Potential der Driftröhren ($U_{DT1} \approx U_{DT2} \approx U_{DT3} \approx U_{trap}$) beschleunigt und hat unter zusätzlicher Berücksichtigung der Raumladung (U_{SC}) eine Energie von:

$$E_{kin}^e = e (U_{trap} - U_{SC} - U_{cath}). \quad (4.16)$$

Im Kollektor werden die Elektronen wieder abgebremst, damit nur die Leistung $P_e = I_e \cdot U_{cath}$ aufgebracht bzw. abgebaut werden muss und nicht $I_e \cdot E_{kin}^e/e$. Im Fallenzentrum stehen nun Elektronen mit der Energie gemäß (4.16) für Elektronenstoß-Ionisation zur Verfügung. Ionen werden höchstens bis zu jenem Ladungszustand gebrütet, dessen Ionisations-Potential über der Elektronen Energie liegt. Die Ionisations-Prozesse zusammen mit Rekombinations-Prozessen (Elektronen-Einfang, Ladungsaustausch) sowie Ionen-Verlust und Neutralgas-Zufuhr führen zu einem dynamischen Gleichgewicht mit einer entsprechenden Ladungszustands-Verteilung Abschnitt 4.3.1.1 "Ladungszustands-Verteilung" [124; 125; 126].

Die Anordnung der Magnetfeld erzeugenden Spulen in Helmholtz-Konfiguration und die Ausführung der zentrale Driftröhre mit axial verlaufenden Schlitzen, die zu den Vakuumports hin orientiert sind, ermöglichen diversen Detektionssystemen den direkten radialen Blick auf die Ionenwolke. Zusätzlich zu den vielfältigen Untersuchungsmöglichkeiten an gefangenen Ionen kann eine EBIT auch als Ionenquelle dienen (engl.: *electron beam ion source* - *EBIS*). Geschichtlich war dies auch die erste Anwendung [127; 128]. Beim Extrahieren verlassen die Ionen die Fallenregion in Richtung Kollektor und werden dabei durch das positive Fallenpotential beschleunigt

$$E_{kin}^{Z^{q+}} = q (U_{trap} - U_{SC}). \quad (4.17)$$

Die Ionen passieren den röhrenförmig ausgeführten Kollektor und können, typischerweise nach einer magnetischen Selektion nach Ladungszuständen, für Stoßexperimente, Präisionssfallen oder auch als Detektionsmittel für falleninterne Prozesse herangezogen werden

4.3.1.1 Ladungszustands-Verteilung

Eine EBIT bietet exzellente Kontrolle über die Ladungszustände der gefangenen Ionen. Die Mechanismen dieser Verteilung können mathematisch mit Ratengleichungen beschrieben werden

$$\begin{aligned} \frac{dn_q}{dt} = & n_{q-1} \cdot k_{EII}^+ \\ & + n_q \left(-k_{EII}^- - k_{RR}^- - k_{DR}^- - k_{CX}^- - k_{Loss}^- \right) \\ & + n_{q+1} \left(k_{RR}^+ + k_{DR}^+ + k_{CX}^+ \right). \end{aligned} \quad (4.18)$$

Hier steht n_q für die Dichte der Ionen im Ladungszustand q und k für die Ratenkoeffizienten. Nur die dominanten Prozesse sind angeführt (beispielsweise keine Doppelionisation). Neben der bereits erwähnten EII hängen auch *radiative Rekombination* (RR) und *dielektronische Rekombination* (DR) vom Elektronenstrahl ab. Weitere wichtige Prozesse die nicht direkt mit dem Elektronen-Strahl zusammenhängen sind *Ladungsaustausch* (engl.: *charge exchange* - *CX*) und direkte Verlustkanäle, welche in axial und radial aufgeteilt

werden können. Mit den beiden dominanten Prozessen EII und RR alleine ergibt sich im dynamischen Gleichgewicht ($\frac{dn_q}{dt}=0$) folgender grober Zusammenhang

$$\frac{n_{q-1}}{n_q} = \frac{k_{EII}^- + k_{RR}^-}{k_{EII}^+} = \frac{\sigma_{EII}^{q \rightarrow q+1} + \sigma_{RR}^{q \rightarrow q-1}}{\sigma_{EII}^{q-1 \rightarrow q}}. \quad (4.19)$$

Aufbauend auf den Ratengleichungen können numerische Simulationen durchgeführt werden [125; 124], um die Entwicklung der Ladungszustands-Verteilung ab dem Einschalten des Elektronen-Strahls bis zum Erreichen des Dynamischen Gleichgewichts zu verstehen. Die Schwierigkeit besteht darin, dass sich die (lokale) Ionenbewegung in einer Zeitskala von Nanosekunden abspielt, während die (globale) Ladungszustands-Verteilung in Zeiträumen variiert, welche bis zu Sekunden in Anspruch nehmen können. Wie sich die Ladungsverteilung im Gleichgewicht ausbildet, hängt von mehreren Parametern ab:

- Elektronen-Energie E_{kin}^e
 \hookrightarrow Einfluss von Resonanz-Phänomenen
- Falltiefe ΔU_{DT}
- axialer und radialer Ionenverlust
- Elektronenstrom I_e
- Neutralgaszufuhr (Injektionsdruck p_{inj})
- Restgas, Kühlgas
- Gezielte Fallenentleerungen

Für das Photoionisations-Experiment ist speziell die Kontrolle über die Elektronen-Energie von entscheidender Bedeutung, wie eingangs durch (4.1) begründet wurde. Selbst mit den hohen Photonenflüssen, die bei modernen Synchrotron-Strahlungsquellen vorhanden sind, führt der zusätzliche Prozess der Photoionisation in Anwesenheit des intensiven Elektronenstrahls zu keiner nennenswerten Veränderung der Ladungszustands-Verteilung. Nur wenn die Photoionisation nicht in Konkurrenz mit der EII steht, kann das Experiment gelingen, woraus sich Bedingung (4.2) ergibt. Im Zusammenhang mit der Ionenidentifikation werden $\frac{q}{m}$ -Scans für Argon gezeigt, wo die genannte Bedingung einmal für Ar^{8+} und einmal für Ar^{12+} erfüllt ist und die veränderte Ladungszustands-Verteilung gut erkennbar ist (siehe Abschnitt 4.6.2 "Ionenidentifikation", Abbildung 4.30).

4.3.1.2 Raumladung und Ionendichte

Die Ionenwolke einer EBIT ist zylindersymmetrisch, weshalb nachstehende Angaben in den entsprechenden Koordinaten zu verstehen sind (r, z). Für einen idealisierten Elektronenstrahl mit homogener Stromdichte und einem Radius r_e , erhält man folgenden Ausdruck für die Raumladung (siehe z.B. [125])

4.3. Elektronenstrahl-Ionenfallen

$$U_{SC}(r) = U_0 \cdot \begin{cases} \left(\frac{r}{r_e}\right)^2 & , r < r_e \\ 2 \ln\left(\frac{r}{r_e}\right) + 1 & , r > r_e \end{cases}, \quad U_0 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{I_e}{\sqrt{\frac{2E_{kin}^e}{m}}} . \quad (4.20)$$

Diese Zusammenhänge kann man aus der ersten Maxwell'schen Gleichung und dem Satz von Gauss herleiten (beispielsweise in [129; 130] zu finden). Um der Wirklichkeit näher zu kommen, ist eine realistischere Dichteverteilung des Elektronenstrahls entscheidend [131]. Zusätzlich muss die Raumladungs-Kompensation durch die positive Ladung der Ionen bzw. Verstärkung durch langsame Elektronen mitberücksichtigt werden. Solche Überlegungen sind auch bei der Konstruktion des Driftröhren-Ensembles (Fallenregion) mit einzubeziehen. Für die FLASH-EBIT findet man diese zusammen mit detaillierten Überlegungen, Illustrationen und Hinweisen auf weiterführende Literatur in [49]. Um die Größenordnung auftretender Potentialdifferenzen einschätzen zu können, sind zwei Betrachtungen anhand (4.20) sinnvoll: (i) Die Potentialdifferenz zwischen Strahlzentrum und Strahlrand ($\Delta U_{beam} = U_{SC}|_{r=r_e} - U_{SC}|_{r=0}$) sowie (ii) der Einfluss durch den Driftröhren-Radius r_{DT} , auf dem die Randbedingung vorgegeben ist und der von Driftröhre zu Driftröhre unterschiedlich ist.

Tabelle 4.6: Raumladungsdifferenzen innerhalb des Elektronenstrahls bei verschiedenen EBIT-Einstellungen unter den vereinfachten Annahmen eines homogenen Elektronenstrahls mit Radius $r_e = 50\mu m$.

Ion (Strahlzeit)	N ³⁺ (BESSY 2008)	Fe ¹⁴⁺ (BESSY 2009)	Fe ²³⁺ (FLASH 2006)
I_e	2.0 mA	6.6 mA	300 mA
E_{kin}^e *	60 eV	475 eV	4600 eV
(i) $U _{r=r_e} - U _{r=0}$ $= I_e/(4\pi\epsilon_0 v_e) \approx \Delta U_{radial}$	3.9 V	4.6 V	67 V
(ii) $U _{r=r_{DT}} - U _{r=r_e}$			
$r_{DT} = 6$ mm	37.4 V	44 V	641 V
$r_{DT} = 2$ mm	28.8 V	34 V	494 V
ΔU_{axial}	8.6 V	10 V	147 V

* hier nominelle Elektronenstrahl-Energie: $e \cdot (U_{trap} - U_{cath})$

Tabelle 4.6 zeigt beispielhaft Raumladungs-Verhältnisse für EBIT-Einstellungen, wie sie bei Messkampagnen tatsächlich vorherrschten. Eine deutliche Potentialdifferenz tritt zwischen dem Rand des Elektronenstrahls und der Driftröhren-Oberfläche auf (ii), welche verdeutlicht, dass der Raumladungs-Term U_{SC} für die tatsächliche Elektronen-Energie gemäß (4.16) nicht unterschätzt werden sollte. Man sieht allerdings auch am Beispiel N³⁺ deutlich, dass dies nur eine Abschätzung der tatsächlichen Verhältnisse sein kann, denn U_{SC} würde die Elektronenstrahl-Energie deutlich unter den erforderlichen Wert senken, ab dem N³⁺ erzeugt wird, was nicht dem experimentellen Befund entspricht. Die Differenzen innerhalb des Strahls (i) sind verhältnismäßig geringer, dafür bewirken sie eine unerwünschte, effektive Verbreiterung der Elektronen-Energie. Des Weiteren erkennt man

an der Differenz der Werte für verschiedene Radien der Driftröhren (letzte Zeile), dass auch die Geometrie der Elektroden die tatsächlichen Potentiale wesentlich mit beeinflusst. Die gewählten Radien entsprechen jenen der FLASH-EBIT (DT Nr. 2: 6 mm / DT Nr. 1 & 3: 2 mm - Nummerierung entsprechend Abbildung 4.12), das heißt, dass im Falle der Einstellungen *FLASH 2006* bei identischen Spannungen auf den Driftröhren bereits eine raumladungsbedingte axiale Falle von 147 V vorherrscht. Dieser axiale Einschluss verschwindet, wenn der Elektronenstrahl ausgeschaltet wird, was bei allen Messungen, die auch den *magnetic trapping mode* verwenden, bedacht werden muss. Über den axialen Einschluss, der im Gegensatz zum radialen direkt und unabhängig mittels der Spannungen an den einzelnen Driftröhren steuerbar ist, kann man Einfluss auf Größe, Temperatur und Gesamtladung der Ionenwolke nehmen. Unter der vereinfachten Annahme, dass die gefangenen Ionen, die gleiche Gesamtladung haben wie der Elektronenstrahl, kann die Ionendichte abgeschätzt werden [132]

$$\underbrace{I_e l \sqrt{\frac{m_e}{2 E_{kin}^e}}}_{\text{gesamte Elektronenladung}} \approx \underbrace{e \sum_Z \sum_{q=1}^{q_{max}(Z)} q \cdot N_{q,Z}}_{\text{gesamte Ionenladung}}, \quad (4.21)$$

wobei l für die Länge der Ionenwolke steht und $N_{q,Z}$ für die Anzahl der Ionen der Sorte Z (Ordnungszahl) im Ladungszustand $q \leq q_{max} \leq Z$. Da es sich ohnehin nur um eine Abschätzung handelt soll angenommen werden, dass ein einzelnes Element mit einer gleichmäßigen Ladungszustands-Verteilung ($N_1 = N_2 = \dots N_{q_{max}}$) vorhanden ist. Damit kann der Ausdruck weiter vereinfacht werden

$$\sum_{q=1}^{q_{max}} q \cdot N_q = N_{q_{max}} \frac{q_{max} (q_{max} + 1)}{2} \approx N_{q_{max}} \frac{q_{max}^2}{2}, \quad (4.22)$$

und man erhält für die Dichte

$$\tilde{\rho}(Z, q_{max}) = \frac{N_{q_{max}}}{A} \approx f_q \frac{4}{d_{IC}^2} \frac{I_e l}{\pi e q_{max}^2} \sqrt{\frac{2 m_e}{e \Delta U}}, \quad (4.23)$$

Um die simplen Annahmen der gleichförmigen Ladungsverteilung und dem genauen Ausgleich der Ladungsträger-Bilanz für einzelne Situationen anpassen zu können, wurde hier noch ein *Ladungsverhältnis-Faktor* f_q eingeführt. Beispielsweise kann Ar^{8+} , mit besonders hohen Dichten präpariert werden, was mit dem Schalenabschluss dieses Ne-artigen Systems zusammenhängt (siehe Abschnitt 5.2 *Ne-artige Argon-Ionen*“, bzw Abbildung 4.30). Tabelle 4.7 gibt einige Beispiele für die Ionendichten gemäß (4.23), die im Bereich von 10^9 bis 10^{10} Ionen pro cm^2 liegen, wobei eine Ionenwolke mit den Abmessungen $d_{ion}=250 \mu\text{m}$ und $l=50 \text{ mm}$ zu Grunde liegt. Diese einfache Abschätzung steht in Übereinstimmung mit belastbareren Werten aus detaillierteren Simulationen [124; 125] sowie Auswertung von spektroskopischen Daten [133; 134]. Dies sind die drei bis vier Größenordnungen, um die das Target dichter ist im Vergleich zu MB-Experimenten (Abschnitt 3.2 *Die merged-beam Methode*“).

4.3. Elektronenstrahl-Ionenfallen

Tabelle 4.7: Zu erwartende Flächen-Dichten (Ionen pro cm^2) für einige Ionen und entsprechende EBIT-Einstellungen. Die Abmessungen der Ionenwolke wurden mit $d_{ion}=250\ \mu\text{m}$ und $l=50\ \text{mm}$ angenommen.

Ion	I_e	E_{kin}^e	f	$\rho\ 10^{10}\text{cm}^{-2}$
N^{3+}	2.0 mA	50 eV	0.3	2.0
Ar^{8+}	8.0 mA	400 eV	1	1.4
Fe^{14+}	6.6 mA	445 eV	0.5	0.17
Fe^{23+}	300 mA	4.5 keV	1	1.8
Xe^{44+}	400 mA	10 keV	0.8	0.35

4.3.2 Eine kurze Geschichte der EBIT

Die ersten Berichte über Effekte des Ioneneinfangs in der Raumladung eines stoßionisierenden Elektronenstrahls gehen auf das Jahr 1957 durch *Plumlee* zurück [135]. Das Grundprinzip der Elektronenstrahl-Ionenfallen in *Dubna* wurde von *Donets* erfunden und im Jahr 1968 zunächst, wie weiter oben bereits erwähnt, in Form einer Ionenquelle (EBIS) umgesetzt, genannt *model-IEL-1* [127; 128]. Die erste solche Apparatur zur Untersuchung gefangener Ionen wurde von *Levine et al.* am *Lawrence Livermore National Laboratory* (LLNL), wo einiges an Pionierarbeit für EBITs geleistet wurde, entwickelt und 1986 in Betrieb genommen [136; 137]. Über Schlitze in der zentralen Driftröhre und Verwendung von Spulen in Helmholtzkonfiguration wurde Sichtzugang zur Ionenwolke gewährt und spektroskopische Untersuchungen möglich. Das Nachfolgermodell EBIT II wurde mehrfach kopiert (NIST-EBIT, Oxford, Berlin). Einen Sprung in den erreichbaren Elektronenstrahl-Energien brachte das Konzept der *Super EBIT*. Hier werden Kanone und Kollektor isoliert aufgehängt und auf hohe negative Spannungen gelegt. Damit konnte nachweislich U^{92+} erzeugt werden [138]. Die EBIT in Tokyo (1997) [139], in Heidelberg (früher Freiburg EBIT, 1998) [140] und jene in Shanghai (2004) [141] wurden nach diesem Prinzip gebaut. Zur Heidelberg EBIT ist anzumerken, dass der Elektronenstrahl im Unterschied zu den meisten anderen EBITs nicht senkrecht sondern waagrecht verläuft. Das verhalf zu einer deutlichen Reduktion der kryogenen Kühlleistung, da der Kollektor, an dem hohe Leistungen anfallen, thermisch besser von den Flüssighelium-Behältern getrennt werden kann. Die transportable FLASH-EBIT [49; 48], welche nun für die Photoionisations-Experimente benutzt wurde, und die Heidelberg EBIT erreichen mit $I_e \approx 500\ \text{mA}$ die höchsten Elektronenströme. Eine noch stärkere Apparatur (HYPER-EBIT) befindet sich zur Zeit in Heidelberg im Aufbau. Die Titan-EBIT, eine in Heidelberg gebaute "Zwillingsschwester" der FLASH-EBIT, ist in Vancouver am TRIUMF im Einsatz [142; 143]. Eine kompaktere Versionen mit LN_2 gekühlten Spulen wurde in Tokyo entwickelt [144] und Raumtemperatur-EBITs mit Permanentmagneten sind beispielsweise in Belfast und Dresden im Einsatz. Historische Überblicke findet man in [145; 146].

4.3.3 Einsatzgebiete

Elektronenstrahl-Ionenfallen sind universelle und flexible Maschinen. Eine Vielzahl von Systemen ($\gg 1,000$) kann untersucht werden und diverse Untersuchungsmethoden stehen

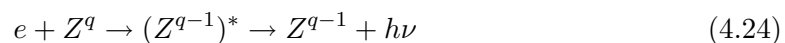
zur Verfügung. Die EBIT kann als Ionen Falle oder Quelle dienen und sowohl eigenständig Experimente durchführen, als auch mit anderen Technologien gekoppelt werden. Die Tabelle 4.8 gibt einen Überblick über diese Methoden, die Einteilungsmöglichkeiten, sowie beispielhaft weiterführende Literatur.

Tabelle 4.8: Auflistung der Vielzahl an Experimenten mit EBITs und Einteilungsarten.

Experiment	Modus	gekoppelt mit	Anmerkung	Ref.
Spektroskopie	F	–	VIS bis X ray	[133; 147; 148; 149]
dielektronische	F	–	Photonendetekt.	[129; 150]
Rekombination (trielektronisch)	bzw. Q	–	Ionendetektion	[139; 151] [152]
Lebensdauer	F	–	<i>mag. trap mode</i>	[153]
Ladungsaustausch	F	–	<i>mag. trap mode</i>	[154; 155; 156]
Stoßphysik	bzw. Q	Targetkammer	Photonendetekt.	
	Q	z.B. Reaktions- mikroskop	Ionendetektion	[106]
Massenspektr.	Q	Penning Fallen		[157; 142; 143]
Oberflächenphysik	Q	Targetkammer		[158; 159; 130]
Resonanz- spektroskopie	F	Laser	VIS	
		FEL	VUV (mobil)	[48]
Photoionisation	F	Synchrotron	bis X ray (mobil)	[160; 132; 161]
	bzw. Q		zur Detektion	

(*Modus: F ... als Falle, Q ... als Quelle)

Für das Photoionisations-Experiment werden praktisch alle Möglichkeiten ausgeschöpft, die eine EBIT bietet. Es erfolgt die Kopplung an eine Synchrotron-Strahlungsquelle, wozu eine transportfähige (mobile) EBIT nötig ist. Die Wechselwirkung erfolgt in der Falle, wo sehr hohe Target-Ionen-Dichten erreicht werden und effiziente Detektion beruht auf Ionenextraktion und Einzelteilchen Nachweis. Außerdem erfordern diese Experimente eine Feineinstellung der Elektronenstrahl-Energie und je nach Photonen-Energie auch die Verwendung des *magnetic trapping mode*. Die dielektronische Rekombination (DR) hat eine besondere Relevanz für die Photoionisations-Experimente, da sie den zeitinversen Prozess der resonanten Photoionisation (2.16) darstellt.



Allerdings wurde der Großteil der Photoionisations-Messungen in der Nähe der PI Schwelle (engl.: *threshold*) durchgeführt und der zeitinverse Prozess benötigt dementsprechend Elektronen geringer Energie ($E_{kin}^e = E_{res} - E_{IP}$). Da bei DR Messungen in EBITs die Elektronen-Energie auch ausreichen muss, um das Target-Ion zu erzeugen, sind Speicherringe für Untersuchungen im Bereich der Schwellenenergie besser geeignet.

4.3.4 Die FLASH-EBIT

Die FLASH-EBIT kann als das transportable Nachfolgermodell der Heidelberg bzw. Freiburg EBIT angesehen werden, welches speziell für den Einsatz an modernen Strahlungsquellen (Freie Elektronen Laser, Synchrotron der dritten Generation) konzipiert wurde. Diese "kryogene EBIT neuester Generation" absolvierte vor den Photoionisations-Experimenten erfolgreiche Kampagnen am Freie Elektronen Laser in Hamburg (FLASH), wodurch sich auch die Namensgebung erklärt.

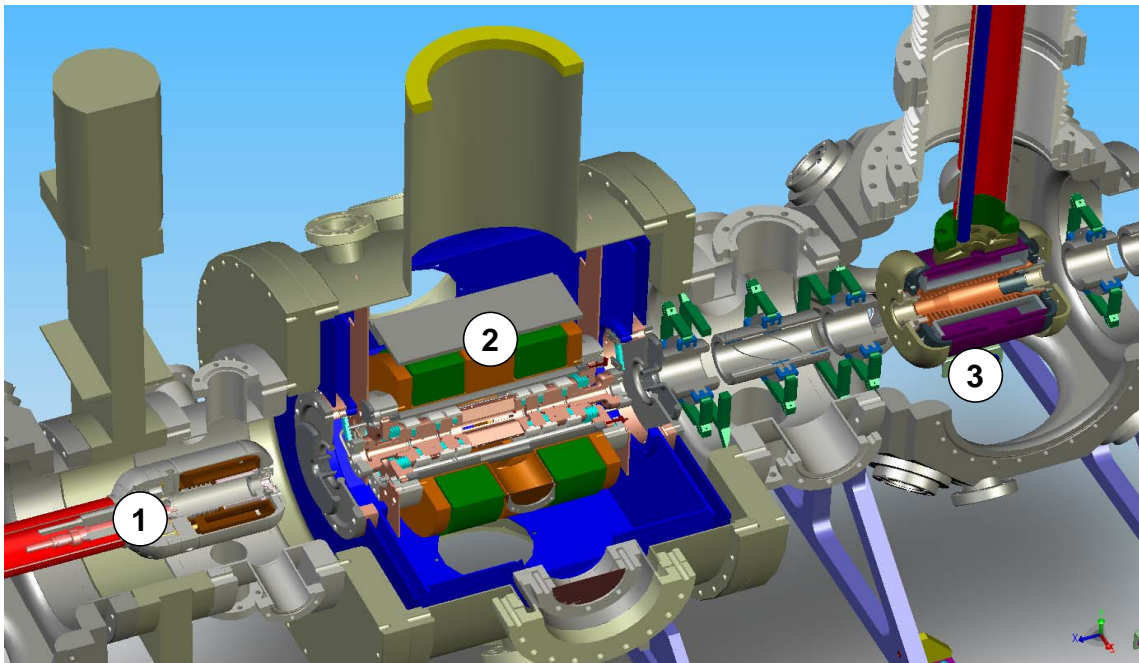


Abbildung 4.13: Schnittdarstellung der FLASH-EBIT bzw. Titan-EBIT: (1) Elektronenkanone, (2) Falle mit neun Driftröhren und supraleitenden Magneten (grün) in Helmholtz Konfiguration, (3) Kollektor.

Die wesentlichen Merkmale der FLASH-EBIT sind:

transportabel: Mit Abmessungen von rund $3.5\text{ m} \times 2.8\text{ m} \times 1.2\text{ m}$ (L×H×B) passt diese EBIT in einen Standardcontainer (Wechselbrücke)

kryogen: Das supraleitende Spulenpaar und der gesamte Fallenbereich werden über einen geschlossenen Heliumkreislauf unterbrechungsfrei auf kryogenen Temperaturen gehalten. Damit ist ein Dauerbetrieb möglich, der während einer Strahlzeit an einer modernen Strahlungsquelle mehr Flexibilität und Sicherheit gibt. Durch die tiefen Temperaturen werden exzellente Vakuumbedingungen in der Falle garantiert.

waagrecht Elektronenstrahl: Mit dem Elektronenstrahl befindet sich auch die Ionenwolke, welche die Form eines dünnen Zylinders hat, in einer waagrechten Position. Das ermöglicht die axiale Überlappung mit dem Photonenstrahl, wodurch Flächenladungsdichten für einzelne Ladungszustände im Bereich von 10^9 bis 10^{10} erreicht werden. In einer Geometrie mit gekreuzten Strahlen, wie sie mit einer senkrechten Io-

nenwolke zwingend wäre, liegt man mindestens zwei Größenordnungen unter diesen Werten.

Super EBIT: Elektronenkanone und Kollektor sind für Hochspannungen bis 60 keV ausgelegt. Die Falle kann auf Potentiale bis zu 20 keV gelegt werden. Damit sind Elektronenstrahl-Energien bis 80 keV möglich. Diese Energie reicht bei allen Elementen für die Entfernung der L -Schale und bis zu Element $Z=73$ (Tantal) auch für das $1s$ Elektron.

Hochleistung Mit Elektronenströmen bis $I_e=500$ mA gehört die FLASH-EBIT zu den leistungsstärksten Elektronenstrahl-Ionenfallen.

Ports Insgesamt sieben Ports erlauben den gleichzeitigen Einsatz verschiedener Detektoren.

Die Portbelegung hat sich seit dem Aufbau der FLASH-EBIT [49], geringfügig geändert (siehe Abbildung 4.14). Der Cr:YAG-Kristall belegt einen 45° -Port und ist in Abschnitt 4.4 "Photonen-Ionen Überlappung" beschrieben. Das VUV-Spektrometer wurde von Thomas Baumann im Zuge seiner Diplomarbeit konzipiert, konstruiert und aufgebaut [162].

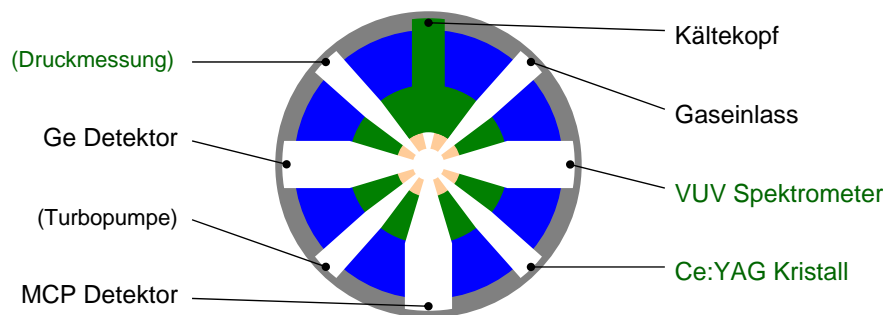


Abbildung 4.14: Belegung der Zugänge zur Fallenregion während der Photoionisations-Experiment in Berlin aus Sicht der Elektronenkanone. Änderungen gegenüber dem ursprünglichen Aufbau [49] sind grün beschriftet.

Abbildung 4.13 zeigt eine geschnittene Darstellung der FLASH-EBIT (bzw. Titan-EBIT), mittels der Konstruktions-Zeichnungen in Solid Works.

4.4 Photonen-Ionen Überlappung

Die exakte Positionierung der EBIT-Ionenwolke mit einem Durchmesser von rund $250 \mu\text{m}$ im Photonenstrahl der Undulator-Beamline, mit vergleichbaren Abmessungen, sollte bevorzugter Weise direkt und auf jeden Fall unabhängig vom Photoionen-Signal möglich sein. Mit *direkt* ist hier gemeint, dass man eine tatsächliche Information erhalten will, in welche Richtung die EBIT bewegt werden muss, um eine Überlappung zu erlangen. Ein Signal, das lediglich Aufschluss gibt, ob die Überlappung im moment besteht oder nicht, erfordert systematisches, zweidimensionales Verschieben der 1.5 Tonnen schweren FLASH-EBIT und ist daher mit hohem Aufwand und vor allem wertvollem (Strahl-) Zeitverlust verbunden. Handelt es sich bei dem Signal, um den Effekt, der eigentlich untersucht werden soll, steckt man in einem weiteren Dilemma. Wenn das Signal nicht gefunden wird

bleibt ungewiss, ob die Ursache auf die fehlende Überlappung zurückzuführen oder woanders zu suchen ist; daher die Forderung nach einem *unabhängigen* Signal. Bei den ersten Einsätzen der FLASH-EBIT wäre das Fehlen einer direkten und unabhängigen Methode zur Feststellung der Überlappung fast zum Verhängnis geworden. Daher war eine entsprechende Aufrüstung für die nachfolgenden Kampagnen nach Hamburg (*FLASH 2008*) und Berlin (*BESSY 2008* bzw. *2009*) ein vorrangiges Ziel. Bekannte Methoden zur Positionsbestimmung sind:

- Verstellbare Spalte (engl.: *scanning slits*): für Ionen- und Photonenstrahlen beispielsweise bei MB-Experimenten im Einsatz
- Rotierende Drähte (engl.: *rotating wire*): ebenfalls für Ionen- und Photonenstrahlen bei MB-Experimenten im Einsatz
- Abbildungsverfahren: mittels CCD-Kamera (engl.: *charged coupled device - CCD*) und entsprechender Optik kann bevorzugt im sichtbaren Bereich ein Bild der Ionenwolke aufgenommen werden
- Fluoreszenz (Szintillation): vor allem bei der Positionsbestimmung von Photonenstrahlen häufig im Einsatz, entsprechende Kristalle können aber auch durch Elektronen oder Ionen zum Fluoreszieren angeregt werden

Für die EBIT sind die ersten beiden Methoden auf Grund des Platzmangels im Fallenbereich, wo die Überlappung festgestellt werden soll, sehr schwer anwendbar. Optische Methoden, die eine "Ferndiagnostik" zulassen sind besser geeignet. Allerdings muss auch hierzu ein Kristall im Fallenzentrum positioniert werden können, welcher jedoch wenig Platz beansprucht. Mit diesem Kristall kann nicht nur die Photonenstrahl-Position abgebildet werden, sondern auch jene des Elektronenstrahls. Unter der Annahme, dass dieser bedingt durch das starke, führende Magnetfeld seine Trajektorie in Anwesenheit des Kristalls nicht wesentlich ändert, wird sich an dieser Stelle auch die Ionenwolke befinden. Die axiale Überlappung des Photonenstrahls mit der länglichen Ionenwolke ist effektiv ein zweidimensionales Problem. Um beide Informationen zu erhalten, stehen zwei Herangehensweisen zur Auswahl:

Axialer Blick durch den Kollektor Damit erhält man beide Informationen mit einer Aufnahme, allerdings ist die Abbildung der Ionenwolke schwieriger, da die heiße Kathode im Hintergrund leuchtet. Zusätzlich muss der Strahlengang im vorliegenden Experimentaufbau über einen Spiegel zur CCD-Kamera geführt werden, welcher ein Loch für die Synchrotronstrahlung benötigt.

Radialer Blick Die Abbildung der Ionenwolke stellt keine Schwierigkeit dar, dafür werden zwei der sieben Ports der FLASH-EBIT für diese Variante in Anspruch genommen und der Cr:YAG-Kristall muss in schräger Position in der Falle positioniert werden.

Die Wahl fiel auf ein System mit einem Cr:YAG-Kristall (Yttrium-Aluminium-Granat), der die axiale Abbildung des Photonen- und Elektronenstrahls über einen Spiegel mit Loch

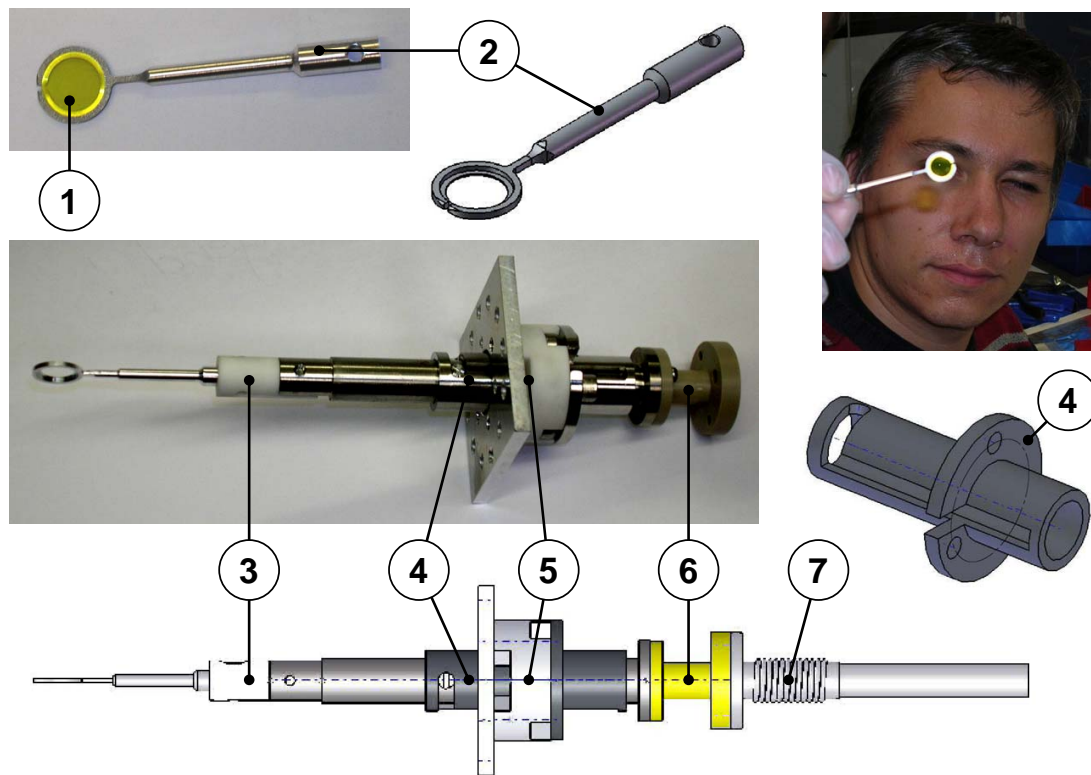


Abbildung 4.15: Photographien und Konstruktionszeichnungen des Cr:YAG-Kristall Halters und der Führungskonstruktion. (1) Cr:YAG-Kristall, (2) Kristall-Halter aus Aluminium, (3) erste elektrische und thermische Entkopplung aus Macor, (4) Halterung aus Edelstahl mit L-förmiger Führungsnabe, (5) zweite elektrische und thermische Entkopplung aus Macor mit Befestigungsplatte aus Aluminium für die Montage am ersten Hitzschild, (6) dritte elektrische Entkopplung aus PEEK, (7) Balg für mechanische Entkopplung vom Linearmanipulator.

auf einer CCD-Kamera erlaubt. Die konstruktiven Anforderungen an den Kristall-Halter und -Manipulator waren dabei mehrfache:

- Der Kristall mit 10 mm Durchmesser und 1 mm Dicke muss durch einen Schlitz in der Fallen-Driftröhre von nur 4 mm breite geschoben werden und in der Endposition innerhalb der Falle mit einem Innendurchmesser von 12 mm eine 90°-Drehung vollführen.
- Eine Führung muss garantieren, dass man den Halter erst in der Endposition drehen kann, um Beschädigung auszuschließen.
- Die unvermeidliche zusätzliche Wärmelast darf auf keinen Fall zu einer Temperaturerhöhung in der Falle führen, die einen *Quench* des supraleitenden Magneten verursachen könnte. Daher muss auf *thermische Entkopplung* höchster Wert gelegt werden.
- Der Halter soll *elektrisch isoliert* aufgehängt werden, damit der Kristall auf das gleiche Potential, wie die zentrale Driftröhre gelegt werden kann.

4.4. Photonen-Ionen Überlappung

- Da die Falle und die Vakuumkammer einerseits nicht perfekt zu einander ausgerichtet sind und andererseits ein Abstand von über 30 cm zwischen Zugangsport und der Falle vorliegt, muss eine *mechanische Entkopplung* zwischen Kristall-Halter und Linear- bzw. Drehmanipulator (Vakuum-Durchführungen) erfolgen.
- Die Halterung muss in einer Tieftemperatur-Umgebung von 4 K im Ultra-Hochvakuum bei Anwesenheit eines Magnetfelds von 6 T funktionieren.

Abbildung 4.15 zeigt Konstruktionspläne (**Solid Works**) und Photographien der zusammengebauten Halterung sowie des Konstrukteurs *Sascha Epp*. Montiert ist der Cr:YAG-Kristall in einer lupenförmigen Fassung (2). Der Ring dieser Fassung hat einen Außendurchmesser von 11 mm und ist an einer Stelle kurz unterbrochen. Auf dem inneren Absatz liegt der Kristall satt auf. Der größere Innendurchmesser (beim erwähnten Absatz) ist geringfügig kleiner ausgeführt als der Kristall-Außendurchmesser. Durch Spreizen des offenen Rings kann der Kristall eingesetzt werden und hält anschließend durch die Materialspannung.

Der Spiegel war mit 45°-Bohrung nicht erhältlich. Kupfersubstrate bieten einfache Bearbeitbarkeit und werden mit diversen Beschichtungen hergestellt, da sie für Hochleistungs-Lasern (CO_2 -Laser) wegen der notwendigen Wärmeabfuhr kommerziell im Einsatz sind. Zwei silberbeschichtet (PS - PROTECTED SILVER) kreisrunde Kupfersubstrate mit Durchmesser 38.1 mm und Dicke 6.4 mm wurden bestellt. Für die Bearbeitung wurden die beschichteten Flächen mit einem dünnen Siliconöl-Film dazwischen aufeinander gelegt und gemeinsam eingespannt. Beim Vorbohren mit 45° geneigter Bohrachse und beim anschließenden Drahterodieren auf 4 mm waren die empfindlichen Flächen dadurch gut geschützt. Das Silikonöl konnte anschließend schonend durch Spülen mit Aceton entfernt werden.

Bei der Kamera viel die Wahl auf ein Produkt mit der Bezeichnung ANDOR LUCA^{EM}. Dieses Gerät bietet wartungsarme Kühlung auf $-20^\circ C$ mittels Thermoelement und Unterdrückung des Ausleserausens (engl.: *readout noise*) durch Elektronenmultiplikation beim Ausleseprozess (engl.: *electron multiplication* \rightarrow *EM-CCD*). Da sie nur über 658×496 Pixel verfügt, kann eine Bild-Ausleserate (engl.: *frame rate*) von 37.2 Hz erreicht werden. Dazu passend besitzt die mitgelieferte Software **Andor Solis** einen *Videomodus*, der zur sofortigen Erfassung der Fluoreszenz durch den Elektronenstrahl äußerst hilfreich war.

Abbildung 4.16 zeigt diverse Bilder die mit dem neuen Überlappungs-System aufgenommen wurden. Die Fluoreszenz durch den auftreffenden Elektronenstrahl der EBIT sowie den Photonenstrahl der Undulatorbeamline (hier U125/2-SGM) sind klar zu erkennen. Das Bild rechts unten zeigt der Kristall-Halter beim Hineinschieben Richtung Fallenzentrum (also vor der 90°-Drehung) vor der hell leuchtenden, heißen Kathode der Elektronenkanone. Sichtbegrenzend für Halter und Kathode wirkt die Driftröhre Nr. 3 (Nummerierung entsprechend Abbildung 4.12) mit einem Innendurchmesser von 4 mm. Schwach ist diese Begrenzung auch in den beiden oberen Aufnahmen zu erkennen. Einen genaueren Maßstab für die tatsächlichen Abmessungen in den Abbildung liefert die Vermessung der Photonenstrahl-Größe bei unterschiedlich eingestellten Austrittsspalt. Abbildung 4.17 zeigt das Ergebnis dieser Untersuchung. Die Werte waren auch für die Abschätzung eines absoluten Wertes für die Oszillatorstärke eine Fe^{14+} -Resonanz hilfreich (Abschnitt 5.5.1 "Absolute Wirkungsquerschnitte"). Der Fluoreszenz-Fleck des Elektronenstrahls erscheint

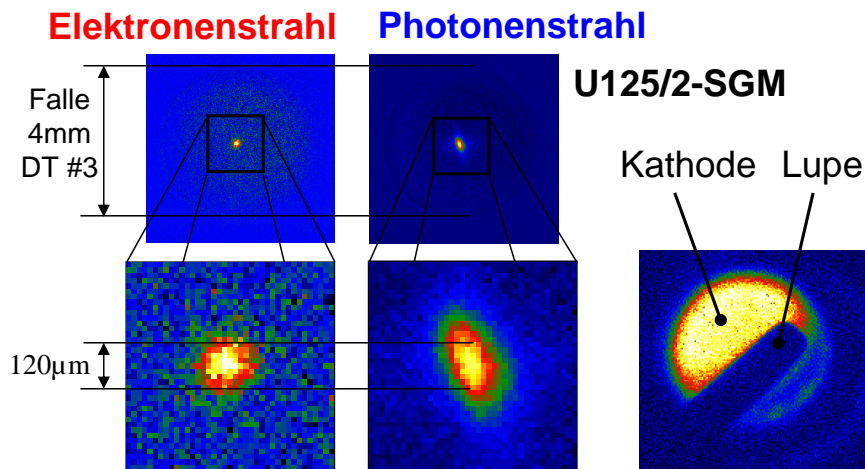


Abbildung 4.16: Aufnahmen der Fluoreszenz des Elektronen- und Photonenstrahls am Cr:YAG-Kristall mit der CCD-Kamera in Falschfarben. In der oberen Reihe (Großaufnahmen) erkennt man die sichtbegrenzende Drift-röhre (Nr. 3) mit einem Innendurchmesser von 4 mm. Entsprechend darunter angeordnet sind Vergrößerungen der Fluoreszenz-Flecke. Rechts unten sieht man die Cr:YAG-Kristall Fassung von der Seite beim Hineinschieben in den Fallenbereich. Die Beleuchtung von hinten erfolgt über die heiße Kathode der Elektronenkanone.

mit einem Durchmesser von rund $120\ \mu\text{m}$ (FWHM). Die beugungsbegrenzte Auflösung beim Blick durch den Kollektor beträgt im sichtbaren Bereich ca. $40 - 50\ \mu\text{m}$. Außerdem ist der fluoreszierende Fleck im Cr:YAG-Kristall größer als der tatsächliche Auftreffbereich der Elektronen. Daher werden die typischen Angaben für den Durchmesser des Elektronenstrahls von $50 - 100\ \mu\text{m}$ von dieser Messung unterstützt. Um die Überlappung herzustellen bildet man zuerst die Elektronenstrahl-Position ab. Anschließend wird die gesamte FLASH-EBIT justiert bis der Photonenstrahl an eben dieser Stelle auftritt. Da die Zentren der fluoreszierenden Flecken auf wenige μm genau bestimmt werden können, beruht die Genauigkeit der Überlappung im Wesentlichen auf der Feinmotorik beim händischen justieren der rund $1500\ \text{kg}$ schweren FLASH-EBIT mittels Stellschrauben [49]. Die einzelnen Schritte dieser Prozedur, welche zu optimalen Signalstärken geführt hat, sind im Anhang (Seite 149) im Detail beschrieben.

4.5 Ionen-Extraktion

Abbildung 4.18 zeigt nochmals den experimentellen Aufbau; diesmal in isometrisch Darstellung, um einige Aspekte dieses Kapitels besser herausarbeiten zu können.

Die dritte wesentliche Komponente für das Photoionisations-Experiment ist die Ionen-Extraktion, (c) in Abbildung 4.18. Diese musste neu konstruiert und gebaut werden. Ein Hauptaugenmerk bei der Konstruktion lag aus mehreren Gründen auf der Kompaktheit der Anlage. Erstens handelt es sich um ein Experiment, das den *Transport* zu einer Synchrotron-Strahlungsquelle verlangt und zweitens sind die Platzverhältnisse eben dort vorgegeben und häufig stark eingeschränkt. Der Ionenstrahl wird durch den Kollektor aus der EBIT extrahiert und verläuft in diesem Bereich überdeckend und gegenläufig zum

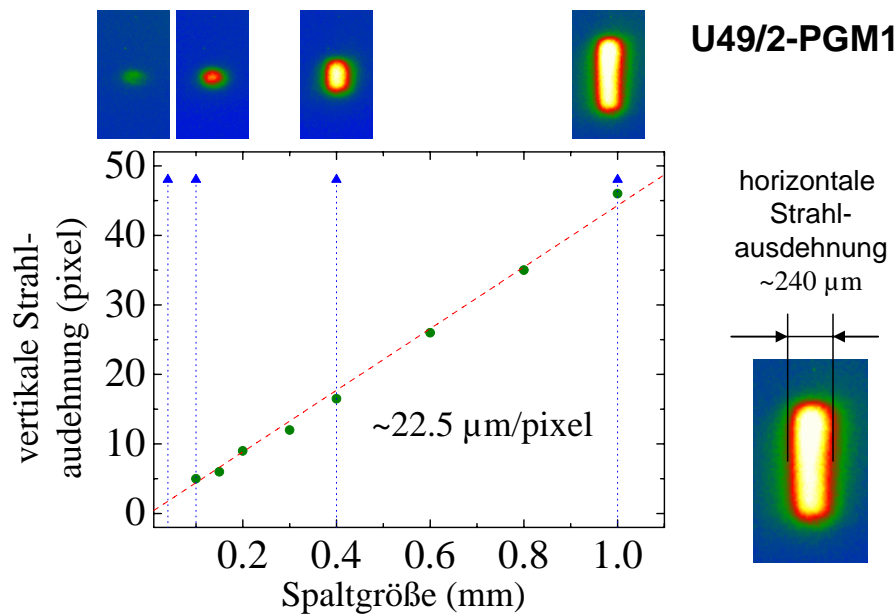


Abbildung 4.17: Die Abbildung der Fluoreszenz des Photonenstrahls am Cr:YAG-Kristall bei verschiedenen Austrittsspalt-Öffnungen liefert eine Kalibrierung für die genaue Ermittlung der Strahlgröße in der Falle.

Photonenstrahl. Daher ist eine Ablenkung der Ionen nach dem Kollektor erforderlich. Hier gelten aus einem anderen technischen Grund noch schärfere Anforderungen an die Kompaktheit. Der Photonenstrahl einer Undulator-Beamline hat typischerweise einen Fokuspunkt in einem gewissen Abstand vom Ende der Beamline (siehe Tabelle 4.5). Um die höchst mögliche Photonen-Flussdichte und Auflösung zu erreichen, sollte die untersuchte Wechselwirkung in diesem Fokuspunkt stattfinden. Die FLASH-EBIT zeigt mit der Kollektor-Seite zur Beamline, wodurch praktisch ein Minimalwert für den Abstand Beamline-Ende→Ionenwolke vorgegeben ist. Einige Beamlines kamen daher nicht in Betracht. Die erforderliche Ionen-Extraktion macht den Einbau zusätzlicher Komponenten zwischen Beamline und Kollektor unumgänglich, was den Abstand noch vergrößert und praktisch bereits eine Entfernung vom Fokuspunkt bedeutet. Die Beschreibung der neuen Bestandteile wird zeigen, dass eine Ionen-Extraktion ohne wesentliche Abstands-Verlängerung (<10 cm) gelungen ist. Informationen zur Steuerung der Beamline über ein LabView-Programm befinden sich im Anhang (Seite 152).

4.5.1 Ionenoptik

Abbildung 4.19 zeigt die Anordnung der einzelnen Elektroden und in Tabelle 4.9 sind sie mit den eingeführten Bezeichnungen und zugehörigen Aufgaben aufgelistet.

Die kritischste Komponente ist der elektrostatische Ablenker (nachfolgend nur noch Ablenker). Damit die erwähnte Forderung nach Kompaktheit erfüllt werden kann ist ein sehr enger Biegeradius von Nöten und außerdem sollte der Ablenker justierbar sein, damit eine Anpassung an den Verlauf von Photonen- und Ionenstrahl möglich ist. Zusätzlich muss an dieser Stelle auch der 45° -Spiegel mit Loch für das Überlappungs-System eingebaut

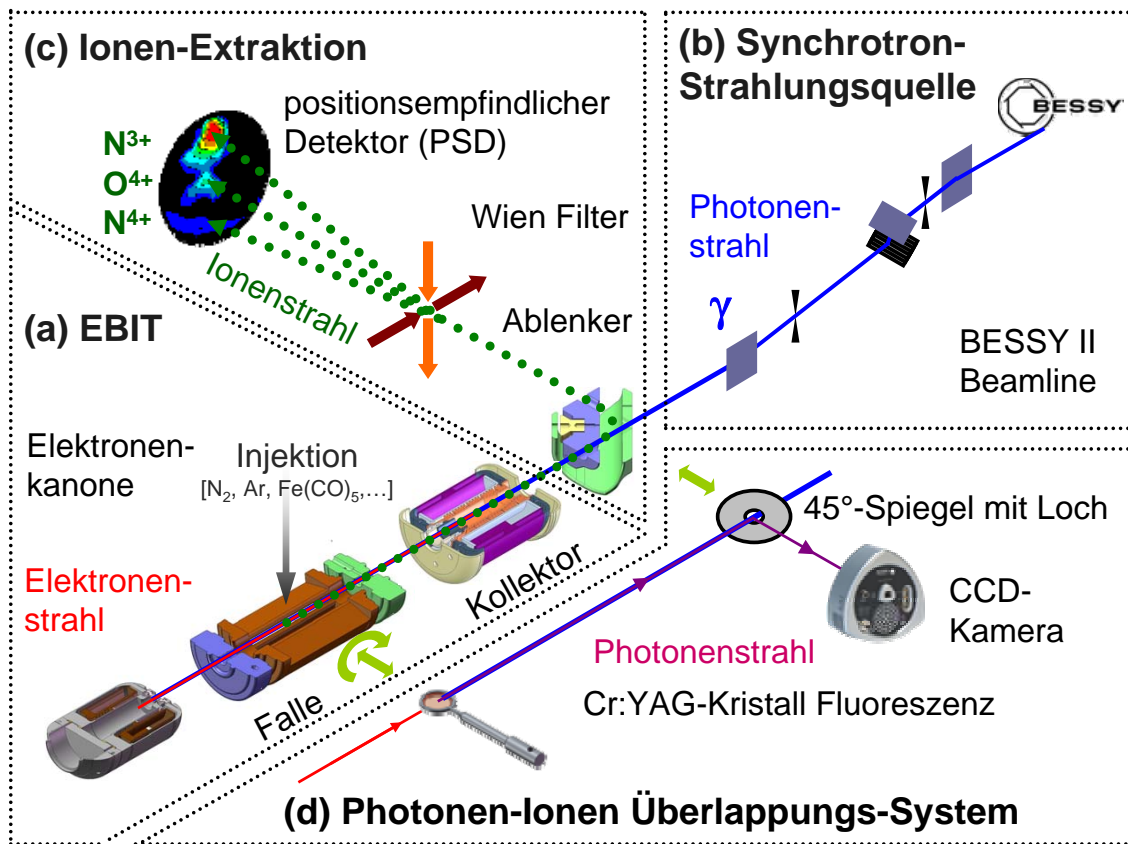


Abbildung 4.18: Isometrische Darstellung des Photoionisations-Experiments mit einer EBIT (a). Ein Photonenstrahl (b) mit hohem Fluss und hoher spektraler Auflösung wird von einem Undulator-Strahlrohr mit Monochromator zur Verfügung gestellt. Die Überlappung (d) der Ionenwolke mit dem Photonenstrahl wird mit einem neu entwickelten System bewerkstelligt (Details siehe Text). Der Nachweis der Photoionisation erfolgt mittels Extraktion der Ionen (c) und anschließender Ladungszustands-Selektion in einem Wien Filter, sowie Einzelnachweis auf einem positionsempfindlichen Detektor (Darstellung nicht maßstabsgetreu).

werden. Die mit Abstand platzsparendste Lösung war den selben Platz entweder für die Ablenkung oder den Spiegel zu nutzen. Dazu wurden beide Bauteile auf einem Manipulator montiert. In Abbildung 4.20 zeigen Konstruktions-Zeichnungen diesen Manipulator einmal in der Position um Fluoreszenz über den Spiegel zu beobachten (links) und einmal in jener um Ionen mit dem Ablenker Richtung Wien Filter zu biegen (rechts). Die Beobachtung der Falle über den Spiegel ist dementsprechend nicht möglich, wenn Ionen extrahiert werden sollen. Dieser Umstand bedeutet jedoch keine Einschränkung für das Überlappungs-System, da ohnehin keine Ionen produziert werden können während sich der Cr:YAG-Kristall im Fallenzentrum befindet.

Zur Herstellung der Photonen-Ionen Überlappung befindet sich der optische Spiegel (mit 45°-Bohrung) auf der Photonenstrahl-Achse. Anschließend wird der Ablenker durch z -Manipulation auf diese Position gebracht (siehe Abbildung 4.20). Dazu ist ein Hub von 46 mm erforderlich. Der Photonenstrahl tritt durch ein Loch (Durchmesser 4 mm) im Außenzylinder des Ablenkers und verläuft weiter durch dessen Eintrittsöffnung. In die Genauigkeit dieser Manipulation musste blind vertraut werden können. Erst durch den er-

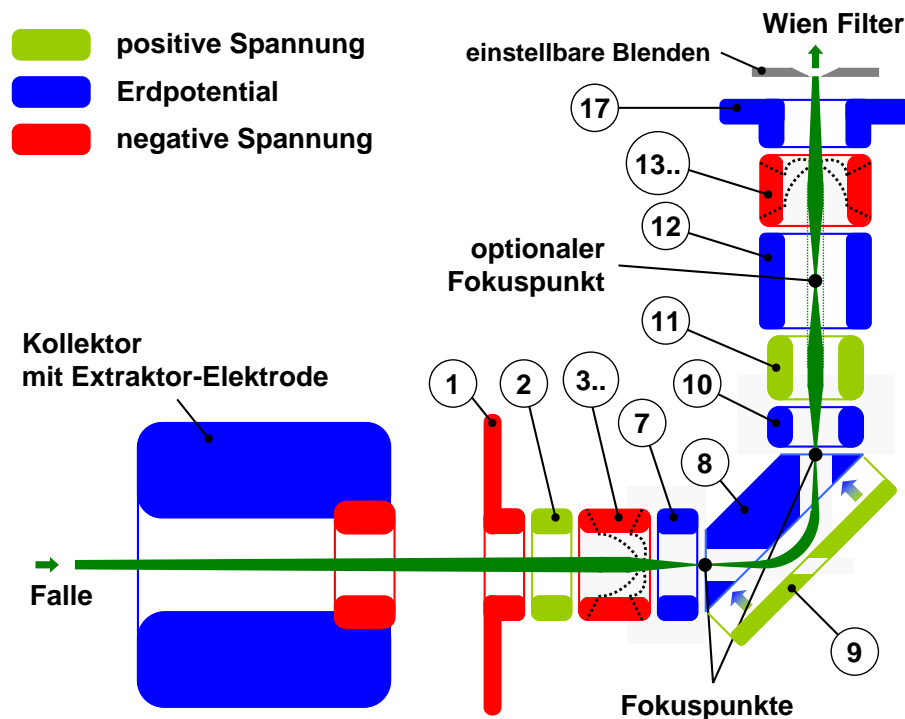


Abbildung 4.19: Schematische Darstellung der Elektroden der neuen Ionenoptik. Der Farbcode bezieht sich auf die Polarität der typischerweise anliegenden Spannung (grün für positiv, blau für neutral/Erdpotential, rot für negativ). Bezeichnungen und Aufgaben der durchnummerierten Elektroden finden sich in Tabelle 4.9.

folgreichen Nachweis eines Photoionisation-Signals steht wirklich fest, dass der Photonenstrahl den Ablenker ungehindert passieren kann. In Abbildung 4.21 sind Konstruktionszeichnungen und Photographien dieser Kammer samt Innenleben gezeigt.

4.5.2 Elektrostatischer Ablenker

Der 90° -Deflektor entspricht im Prinzip einem Ablenk-Plattenpaar. Diese Art der Ablenkung erfordert nur *eine* verhältnismäßig geringe Spannung. Ein elektrostatischer Quadrupolablenker beispielsweise erfordert eine positive und eine negative Spannung mit jeweils ca. dem doppelten Betrag im Vergleich zur Beschleunigungsspannung U_{extr} und kann nicht doppel-fokussierend ausgeführt werden. Parallelplatten führen bei Fokussierung des Ionenstrahls auf den Eintrittsspalt zu einer *einfachen* Refokussierung in der Ablenkebene auf den Austrittsspalt. In Abbildung 4.22 (a) sind die Verhältnisse bei Parallelplatten skizziert, wo die Flugbahn einer Parabel entspricht. Haben die Platten einen Abstand d und ist die Entfernung vom Scheitel der Parabelbahn zu der Eintrittsplatte b so benötigt man eine Ablenkspannung von

$$U_{bend} = U_{extr} \cdot \frac{d}{2b} \quad , \quad (4.25)$$

um die Ionen abzulenken. Eintritts- und Austrittswinkel sind identisch und da bei 45° für

Tabelle 4.9: Auflistung der einzelnen Elektroden der Ionen-Optik. Nummerierung (#) entsprechend Abbildung 4.19.

Nr.	Bezeichnung / Polarität	Kommentar / Aufgabe
1	Eintritts-Teller	– # 1 & 2 bei Kampagne
2	Eintritts-Ring	+ FLASH 2008 noch nicht getrennt
3-6	Sikler-Linse I	– Fokussierung und xy -Verschiebungen
7	Symmetrie Elektrode	0
8	Innen Zylinder	0 # 8 & 9 zusammen bilden den
9	Außen Zylinder	+ elektrostatischen Ablenker
10	post Ionen Optik Eingang	0
11	post Ionen Optik Linse	+ Vorfokussierung
12	Rohrstück	0 Vakuumkammer (nicht isoliert)
13-16	Sikler-Linse II	– wie #3-6, erst nach BESSY 2008
17	Austritts-Teller	0 nicht isoliert → immer auf Erdpotential

$l = 4b$ ein Extremum auftritt, entsteht bei einer 90° -Ablenkung die optimale Refokussierung (Eintrittsspalt auf Austrittsspalt) in der Ablenkebene. Senkrecht dazu (b) erfolgt bei Parallelplatten keine Refokussierung und der Strahl divergiert. In (c) wird verdeutlicht, wie mit der Ausführung der Platten in Form konzentrischer Zylinder eine Doppel-Fokussierung erreicht wird. Dies ist die Geometrie des elektrostatischen Ablenkers, wie sie in der Ionen-Extraktion der FLASH-EBIT verwendet wurde. Anzumerken bleibt, dass das elektrische Ablenkerfeld dieser Anordnung nicht mehr homogen ist, weshalb die Flugbahn von der Parabelform geringfügig abweicht und die optimale Refokussierung genau genommen nicht bei einer 90° -Ablenkung auftritt (siehe Anhang, Seite 143). Bei den vorliegenden Abmessungen, die man den Konstruktions-Zeichnungen in Abbildung 4.23 (a) entnehmen kann, liegt der ideale Eintrittswinkel bei 57.2° (Ablenkung um 114.4°). Für die vorliegende 90° -Ablenkung ergibt sich in dieser Geometrie für die nominelle Ablenkspannung in Äquivalenz zu (4.25)

$$U_{bend} = U_{extr} \cdot 0.6821 \quad , \quad (4.26)$$

was den experimentellen Befunden entspricht. Abbildung 4.23 zeigt außerdem (b) SIMION-Simulationen und (c) Photographien zum Ablenker. Bei der Darstellung (b) sind Elektroden braun, Äquipotentialflächen der elektrischen Felder rote Linien in der Schnittebene und Ionen-Flugbahnen schwarz bzw. in (b) unten auch blau und grün für Ionen mit einer niedrigeren und höheren Energie, als vom Ablenker selektiert. Ferner geht aus den Simulationen hervor, dass sich die Fokuspunkte in einem deutlichen Abstand vor den Ein- und Austrittsöffnungen befinden. Für die Ablenkebene ist dieser Sachverhalt mit der, zu höheren Winkeln verschobenen, idealen Refokussierung erklärbar. Die Abweichungen vom optimalen Feldverlauf auf Grund der notwendigen Öffnungen am Innenzylinder (mit Durchmesser 8 mm) spielen sicherlich auch eine Rolle.

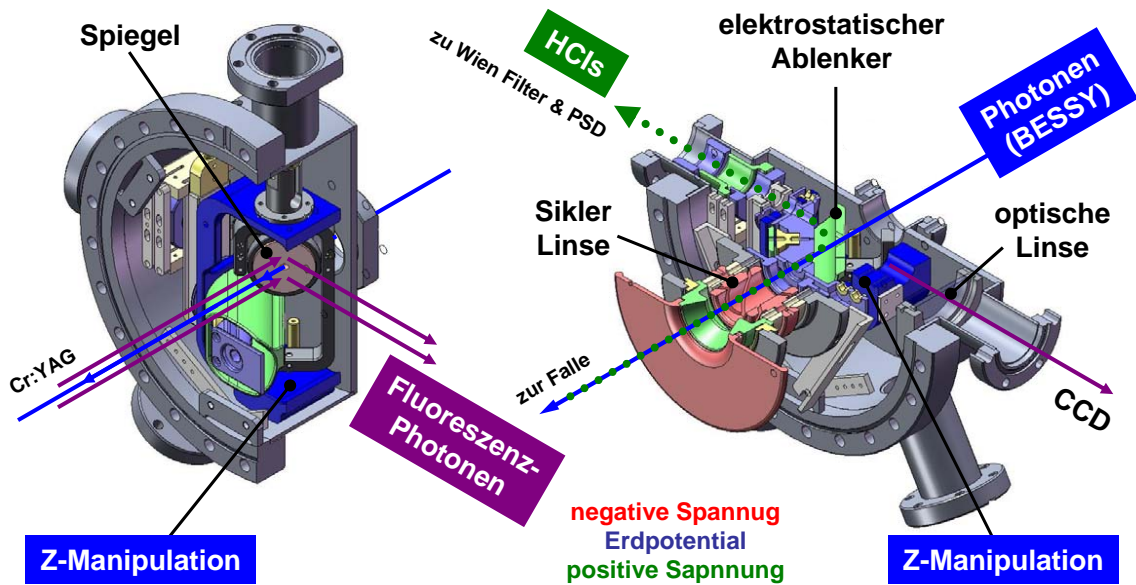


Abbildung 4.20: Konstruktions-Zeichnungen der schmalen Kammer, die an die Kollektor-Kammer der FLASH-EBIT anschließt. Die neuen Komponenten ermöglichen die Abbildung der Cr:YAG-Fluoreszenz über einen Spiegel (links) zur Herstellung der Überlappung von Ionen und Photonen oder die Ablenkung der Ionen (rechts) Richtung Wien Filter und PSD.

4.5.3 Sikler Linse

Die Ionenoptik nach dem Kollektor hat die Aufgabe den Ionenstrahl nach dem Verlassen der EBIT im optimalen Abstand zentral vor der Eintrittsöffnung des elektrostatischen Ablenkers zu fokussieren. Richtungskorrektur des Ionenstrahls (engl.: *steering*) sowie Fokussierung müssen dazu auf extrem kurzer Strecke gewährleistet werden. Dazu wurde eine von Günther Sikler eingeführte *Steerer-Lens* (oder auch *Sikler-Linse*) weiterentwickelt [143].

Strahlfokussierung wird in der Ionenoptik im Bereich niedriger Energien bevorzugt mittels einer elektrostatischen *Einzellinse* umgesetzt. Im einfachsten Fall handelt es sich dabei um drei aneinander gereihete, hohlzylinderförmige Elektroden, wobei die mittlere mit einer Spannung U_{fok} beaufschlagt werden kann [163; 164]. Unabhängig von der Polarität der angelegten Spannung hat die gesamte Anordnung einen fokussierenden Effekt. Man spricht von Beschleunigungs-Linsen, wenn U_{fok} und Teilchenladung ungleiche Polarität haben und im anderen Fall von Verzögerungs-Linsen. Bei letztgenannter Betriebsart treten stärkere Abbildungsfehler auf, dafür erreicht man die gleiche Fokussierstärke schon mit geringer Spannungsdifferenzen zwischen dem mittleren und den beiden äußeren Linsensegmenten.

Zur Richtungskorrektur sind in der Ionenoptik häufig schräg geschnittene Hohlzylinder im Einsatz (links in Abbildung 4.24), da solche Geometrien im Vergleich zu herkömmlichen Ablenkplatten Abbildungsfehler deutlich reduzieren. Dieser Schnitt ermöglicht die Ablenkung in einer Richtung normal zur Zylinderachse (die Flächennormale der Schnittebene und die Zylinderachse legen die Ablenkebene fest). Für eine zweidimensionale Richtungskorrektur wird ein zweites identisches Element nachgeschaltet und in Bezug auf das erste im Sinne der Zylinderachse um 90° verdreht eingebaut. Platziert man den zweiten Schnitt

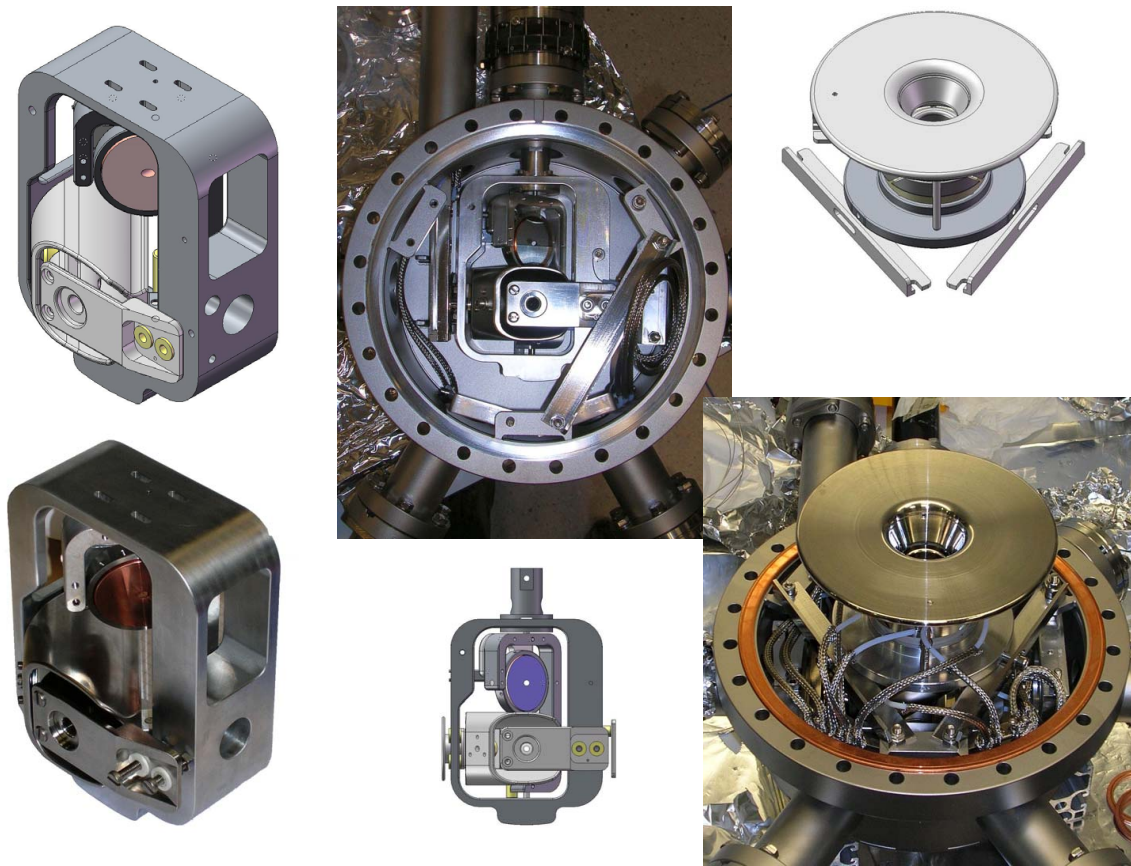


Abbildung 4.21: Photographien der schmalen Kammer samt Innenleben, die bei zwei wichtigen Aufgaben für das Photoionisations-Experiment wesentlich beiträgt: Herstellung der Photonen-Ionen Überlappung und Ionenextraktion. Aufhängung für Spiegel und Ablenker die über den z -Manipulator bewegt wird (links). Kammer mit eingebauter Aufhängung (mitte). Aufgesetzte Primäre Ionenoptik (rechts).

an der gleichen Stelle wie den ersten und verwendet die so entstehenden vier Segmente (mittig und rechts in Abbildung 4.24) gemeinsam als mittleres Element einer Einzellenlinse, so erhält man eine kompakte Anordnung, die Fokussierung, Richtungskorrektur und astigmatische Korrekturen erlaubt. Die Symmetrie der vier zentralen Segmente der *Sikler-Linse* legt es nahe, die Schnittebenen im Vergleich zu einfach geschnittenen Zylindern um 45° zu drehen (mit Bezug auf die Zylinderachse). Damit wird die Ansteuerung der einzelnen Segmente Äquivalent zu der zweier Ablenk-Plattenpaare und können mit den Raumrichtungen unten, oben, links und rechts benannt werden. Mathematische Zusammenhänge für die Ansteuerung dieser Elemente werden im Anhang (Seite 150) erläutert.

Eine zweite Sikler-Linse ist in der Ionen-Extraktion der FLASH-EBIT nach der elektrostatischen Ablenkung im Einsatz, um den Ionenstrahl bestmöglich für die Ladungszustand-Separation im Wien Filter vorzubereiten. Dieses Element wurde erst nach der ersten Kampagne bei BESSY II (2008) im Rahmen der Diplomarbeit von *Maria Schwarz* gefertigt und eingebaut. Details können in ihrer Arbeit gefunden werden [165]. Eine deutliche und notwendige Erhöhung der Auflösung (q/m) wurde mit dieser Maßnahme erreicht; vergleiche Abschnitt 4.6.2 *"Ionenidentifikation"*.

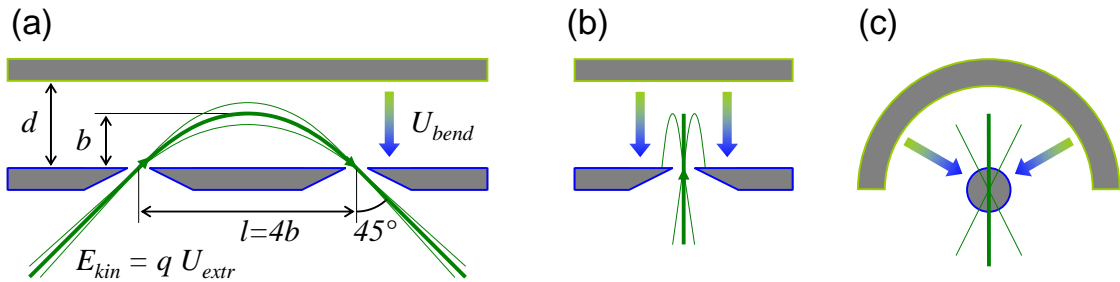


Abbildung 4.22: Prinzip des elektrostatischen Ablenkens. Ausgehend von parallelen Platten und einem Ionenstrahl mit Fokuspunkt am Eintrittsspalt: (a) bei einer Ablenkung um 90° (Eintrittswinkel = Austrittswinkel = 45°) erfolgt eine Refokussierung in der Ablenkebene, (b) in der Ebene senkrecht dazu divergiert der Strahl nach dem Eintritt, (c) Platten in Form konzentrischer Zylinder ermöglichen eine Doppel-Fokussierung auf den Austrittsspalt.

4.5.4 Wien Filter

Ionen, die durch die gleiche Potentialdifferenz U_{extr} beschleunigt wurden, können mit Hilfe elektrostatischer Felder nicht getrennt werden. Magnetische oder zeitabhängige elektrische Felder sind dazu notwendig. Im vorliegenden Experiment übernimmt eine Anordnung mit gekreuztem elektrischen und magnetischen Feld (Wien Filter) diese Aufgabe. Die Kräfte auf ein geladenes Teilchen werden durch die Lorentzkraft beschrieben

$$\vec{F}_L = q \cdot \vec{E} + q \cdot \vec{v} \times \vec{B} . \quad (4.27)$$

Da das magnetische und das elektrische Feld im Wien Filter senkrecht zu einander stehen, können sich die Kräfte kompensieren. Durch Null setzen von (4.27) folgt

$$v_{pass} = \frac{|E|}{|B|} . \quad (4.28)$$

Teilchen dieser Geschwindigkeit können unabhängig von ihrer Ladung (bzw. Impuls oder kinetischen Energie) den Wien Filter auf einer geradlinigen Trajektorie passieren. Man spricht von einem Geschwindigkeits-Filter. Durch skalieren der beiden Felder ändert sich die Geschwindigkeits-Bedingung nicht, sehr wohl aber die Auflösung (siehe Anhang, Seite 144), welche proportional zu $|B|$ ist.

$$\Delta y = s_{drift} \frac{e B l}{\sqrt{2} m q U_{extr}} . \quad (4.29)$$

Die Auflösung eines Wien-Filters ist zwar im Vergleich zu anderen Typen von Massenspektrometern nicht besonders hoch, dafür kann sie eingestellt werden. Diese Freiheit kann dazu genutzt werden, um die räumliche Trennung von Target-Ion und Photoion optimal an die Detektorfläche anzupassen. Außerdem ist der Wien-Filter im ausgeschalteten Zustand für den gesamten Ionenstrahl durchlässig. Für eine erste Optimierung der Ionenextraktion und im sogenannten PhoBIS-Modus (siehe Abschnitt 4.6.4.2 "PhoBIS-Modus") ist dieser Umstand von großem Vorteil.

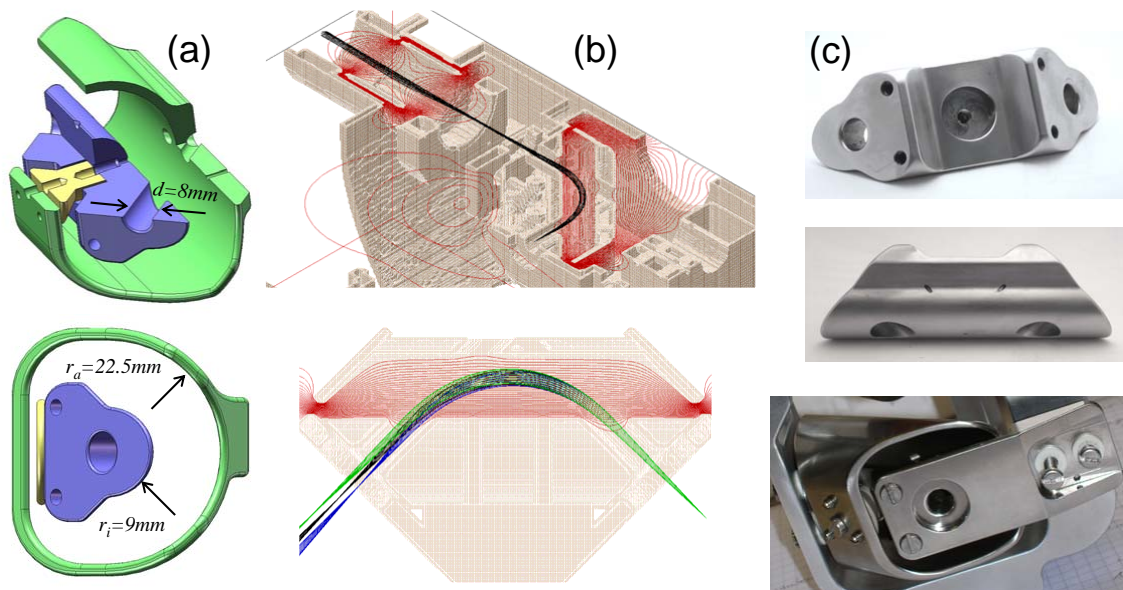


Abbildung 4.23: Praktische Umsetzung der elektrostatischen Ablenkung. Links (a) die Konstruktionszeichnungen mit den wesentlichen Abmessungen. Mittig (b) beispielhafte Ergebnisse der Simulationen mit dem Softwarepaket SIMION, wobei Elektroden braun und Äquipotentialflächen der elektrischen Felder rot dargestellt sind, (b) unten sieht man die Dispersion des Ablenkers für drei Ionenstrahlen unterschiedlicher Energie in blau, schwarz und grün. Rechts (c) zeigen Photographien gefertigten Innenzylinders, sowie den kompletten Ablenker montiert in der linear verschiebbaren Aufhängung (Ablenker \leftrightarrow Spiegel).

Das Gerät, das im Photoionisations-Experiment eingesetzt wurde stammt von der COLUTRON RESEARCH CORPORATION und trägt die Typbezeichnung MODEL 600-B. Technische Daten können Tabelle 4.10 entnommen werden bzw. dem Handbuch (*Intructions Velocity Filter*) [166]. Der komplette Aufbau, wie er in Abbildung 4.26 zu sehen ist, wurde in einer Vakuumkammer montiert. Das bedeutet, dass bei diesem Modell (nicht ganz nachvollziehbarer Weise) auch die Spulen im Vakuum sind und gekühlt werden müssen. Wasser ist als Kühlmittel unzulässig, da (nicht ganz nachvollziehbarer Weise) korrosive Materialien verwendet wurden. Der Hersteller empfiehlt die Kühlung mittels Kältekreis zu bewerkstelligen. Alle vier Anschlüsse des Spulenpaares wurden einzeln über elektrische Vakuum-Durchführungen nach außen geleitet, wodurch auch im evakuierten Zustand zwischen Parallel- und Serienschaltung der beiden Spulen gewechselt werden kann. Ein möglichst homogener elektrische Feldverlauf zwischen den beiden Feldplatten wird durch sieben zusätzliche Elektrodenpaare (engl.: *shims*) bewerkstelligt (siehe Abbildung 4.26). Ein verfügbarer Spannungsteiler wurde nach der ersten Kampagne nach Berlin (2008) ersetzt, da dieser mit nur $3\text{ k}\Omega$ Gesamtwiderstand die Spannungsversorgung für das elektrische Feld bereits vor Erreichen der Maximalspannung in die Strombegrenzung trieb. Der neu gebaute, kompakte Spannungsteiler kommt mit leistungsschwachen Spannungsversorgungen aus ($R_{ges} = 500\text{ k}\Omega$) und ist für Spannungsdifferenzen bis 1200 V ausgelegt. Während beim alten Modell neun Potentiometer die Spannungen der einzelnen Shims und der Feldplatten unabhängig regelten, sorgen nun drei Potentiometer für die gleichzeitige Manipulation aller Shims.

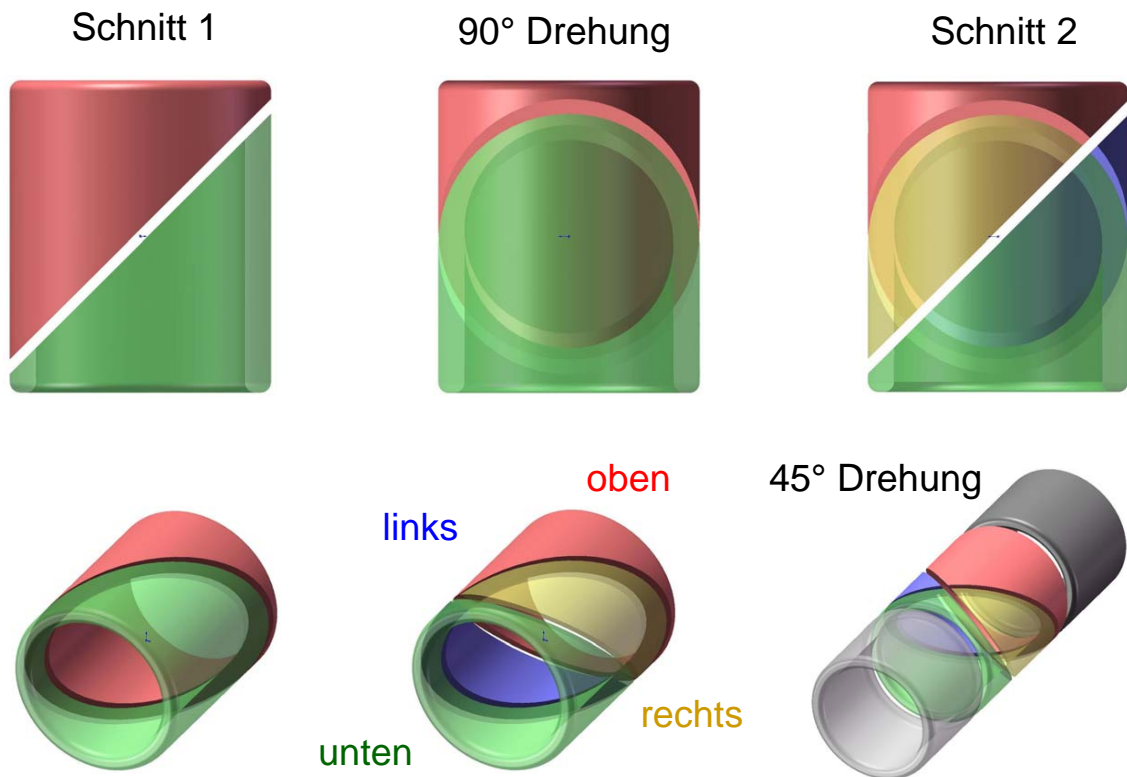


Abbildung 4.24: (links) Nach einem schrägen Schnitt durch eine hohlzylinderförmige Elektrode entstehen zwei Elemente. Mit unterschiedlicher Spannung beaufschlagt können Ionenstrahlen mit geringsten Abbildungsfehlern in einer Ebene abgelenkt werden. Führt man 90° verdreht dazu (oben Mitte) den gleichen Schnitt nochmal durch und (oben rechts), so entstehen vier Elemente (unten Mitte). Teilt man das mittlere Segment einer Einzellinse auf diese Weise (unten rechts), so entsteht ein extrem kompaktes elektrostatisches Element, das die Richtungskorrektur und Fokussierung von Ionenstrahlen (allg. geladene Teilchenstrahlen) ermöglicht: die sogenannte *Steerer-Lens* oder *Sikler-Linse*. Der Einbau mit 45° Verdrehung zu den Schnittlagen (rechts unten) sorgt dafür, dass die einzelnen Elemente wie zwei Ablenk-Plattenpaare angesteuert werden können (oben, unten, links, rechts).

Wie aus Abbildung 4.18 ersichtlich erfolgt die Separation der Ionen nach Ladungszustand nicht in der Ablenkebene des Ionenstrahls, sondern normal dazu. Das hat zwei Gründe: (i) Die Energie-dispersive Ebene des elektrostatischen Ablenkens und die Geschwindigkeits-dispersive Ebene des Wien-Filters werden damit entkoppelt. (ii) Das nicht vernachlässigbare Magnetfeld der supraleitenden Spulen der FLASH-EBIT hat in diesem Bereich Komponenten in x - und z -Richtung (Wien-Filter Koordinaten). Die z -Komponente (x -Komponente wegen $\hat{v} = \hat{x}$ in erster Ordnung ohne Auswirkung) führt nach der elektrostatischen Ablenkung zu einer unerwünschten geringfügigen Ladungszustand-Separation. Die vorliegende Orientierung des Wien-Filters erlaubt eine bessere Kompensation dieser Effekte. Auf der Strecke zwischen dem elektrostatischen Ablenker und dem Wien-Filter skaliert die Abweichung von der geradlinigen Flugbahn in y -Richtung zunächst quadratisch und dann erst linear mit der Entfernung vom Ablenker (siehe Anhang, Seite 146). Um die Auswirkungen des FLASH-EBIT-Magnetfeldes auf die Ionentrajektorien möglichst gering zu halten sollte der Wien-Filter daher möglichst nah am Ablenker positioniert werden. Nach

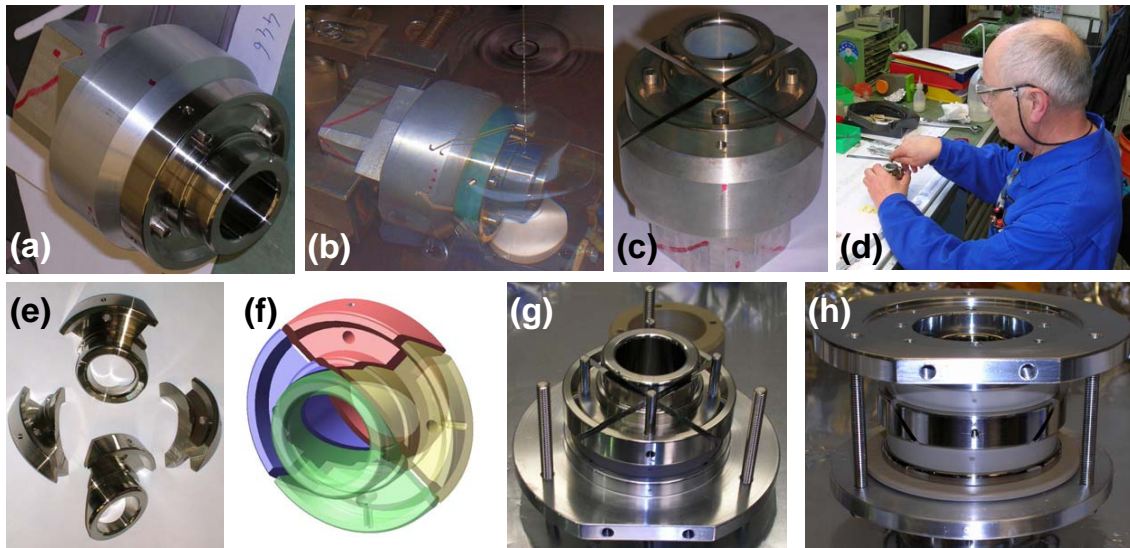


Abbildung 4.25: Herstellung und Zusammenbau der *Sikler-Linse*: (a) Montage des ungeteilten Linsenelements auf der Halterung für die (b) Durchführung der beiden schrägen Schnitte mittels Drahterosion, (c) das geteilte Linsenelement auf der Halterung und (d) Demontage durch Herrn *Karl Bechberger*, (e) die getrennten einzelnen Linsenelemente: *Top - Bottom - Left - Right*. (f) Konstruktions-Zeichnungen eingefärbt gemäß Abbildung 4.24. (g) Exakter Zusammenbau der gesäuberten Elektroden mit Hilfe von Metallbolzen in den Ausrichtbohrungen im Reinraum. Die fertig zusammengestellte Ionenoptik (h) nach entfernen der Metallbolzen nur durch Presskraft gehalten.

der kontrollierten Separation im Wien-Filter ist diese Beeinflussung weniger kritisch.

4.5.5 Positionsempfindlicher Detektor

Typische Ionenraten für einzelne Ladungszustände, die in einem kontinuierlichen Betrieb aus einer EBIT extrahiert werden, liegen im Bereich von $10\text{-}10^6$ Hz. Der hocheffiziente, zählende Nachweis einzelner Ionen mittels Kanal-Elektronen-Vervielfacher (engl.: *channeltron or channel electron multiplier - CEM*) oder Mikrokanal-Platte (engl.: *micro channel plate - MCP*) ist hier anwendbar. Bei MCPs kann über spezielle Ausführungen der Anode (*resistive anode, wedge and stripe anode, delay line anode*) auch der Auftreffort des Teilchens bestimmt werden. Nach dem Wien-Filter können somit die räumlich separierten Ladungszustände über die Ortsinformation der Detektion unterschieden werden. Für die Ionen-Extraktion der FLASH-EBIT wurde auf das Produkt DLD40 der Firma ROENTDEK mit Verzögerungsleitung-Anodenauslesung zurückgegriffen. Zwei kreisförmige MCPs in *Chevron Konfiguration* (=gegengleicher Neigungswinkel der Mikrokanäle) mit Durchmesser 40 mm sind über den gekreuzten Anodendrähten montiert. Die MCP-Vorderseite muss gegenüber der MCP-Rückseite auf einer negativen Spannung liegen. Solange damit keine unerwünschte Potentialbeeinflussung in der Vakuumkammer verursacht wird, bietet es sich für die Detektion positiver Ionen an, die Rückseite des MCPs auf Erdpotential zu belassen und die Vorderseite mit negativer Spannung zu versorgen. Dadurch werden die Ionen zusätzlich beschleunigt, wodurch die Nachweiseffizienz erhöht wird und zusätzlich müssen die Anodendrähte auf weniger hohe positive Spannungen gelegt werden.

4.5. Ionen-Extraktion

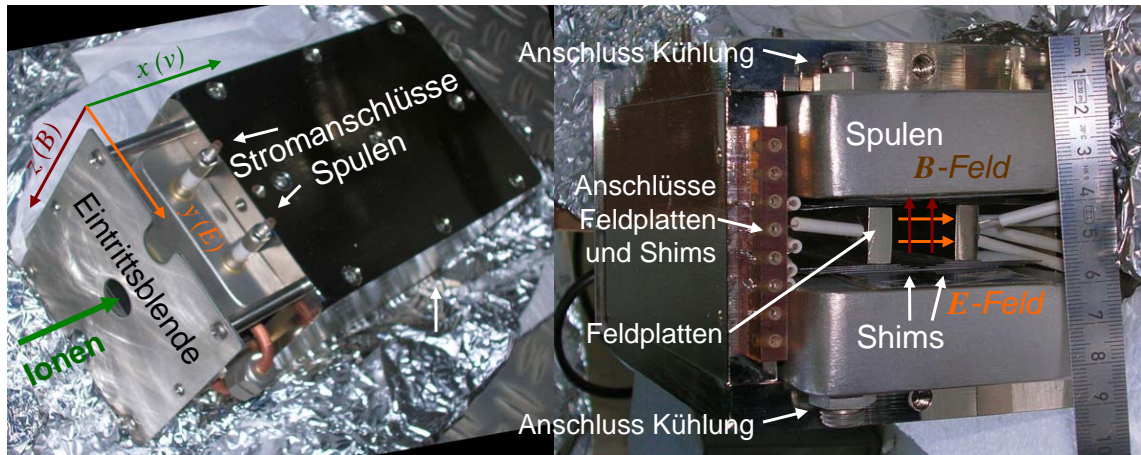


Abbildung 4.26: Photographien des verwendeten Wienfilters Model Colutron 600-B. Insgesamt 15 Anschlüsse müssen aus der Vakuumkammer geführt werden (siehe Tabelle 4.10). Im eingebauten Zustand ist die z -Richtung waagrecht und die y -Richtung senkrecht.

Tabelle 4.10: Technische Daten des Wien-Filters von Colutron, Model 600-B.

Größe	Wert (Anmerkung)
max. elektrisches Feld \vec{E}	168 V/cm
max. magnetisches Feld \vec{B}	0.3 T
Abstand Feldplatten d	17.8 mm
max. Spannung ΔU für \vec{E}	300 V
max. Spulenleistung	400 W (28 V · 14 A)
Länge l	15.2 cm
Gewicht	9 kg
Anschlüsse Spulen Kühlung	2
Anschlüsse Spulen	4 (→Parallel und Serien-Schaltung möglich)
Anschlüsse Feldplatten und Shims	9

Für beide Dimensionen sind jeweils ein *Signaldraht* und ein *Referenzdraht* vorhanden. Der Signaldraht liegt auf etwas positiverer Spannung als der Referenzdraht und erhält daher ein stärkeres Elektronensignal. Elektromagnetische Störsignale werden hingegen von beiden Drähten gleich erfasst. Für die Detektion der auftreffenden Teilchen ist daher das Differenzsignal entscheidend (Signaldraht abzüglich Referenzdraht). Insgesamt sind also vier Drähte vorhanden und alle acht Enden sind über eine Vakuum-Durchführung einzeln kontaktiert. Über die gleiche Durchführung werden auch MCP Vorder- und Rückseite sowie die MCP Halterung versorgt bzw. geerdet. Die erste Signalverarbeitung (Gleichspannungs-Entkopplung und Differenzsignal-Bildung) erfolgt unmittelbar nach der Vakuumdurchführung. Die vorverarbeiteten Signale werden zu einem Vorverstärker (ATR19) geleitet, und die verstärkten Signale weiter zur Datenaufnahme.

Die Spezifikationen und Daten des DLD40 sind in Tabelle 4.11 gelistet und für weitere Details sei auf das Handbuch verwiesen [167]. Abbildung 4.27 zeigt eine Konstruktions-

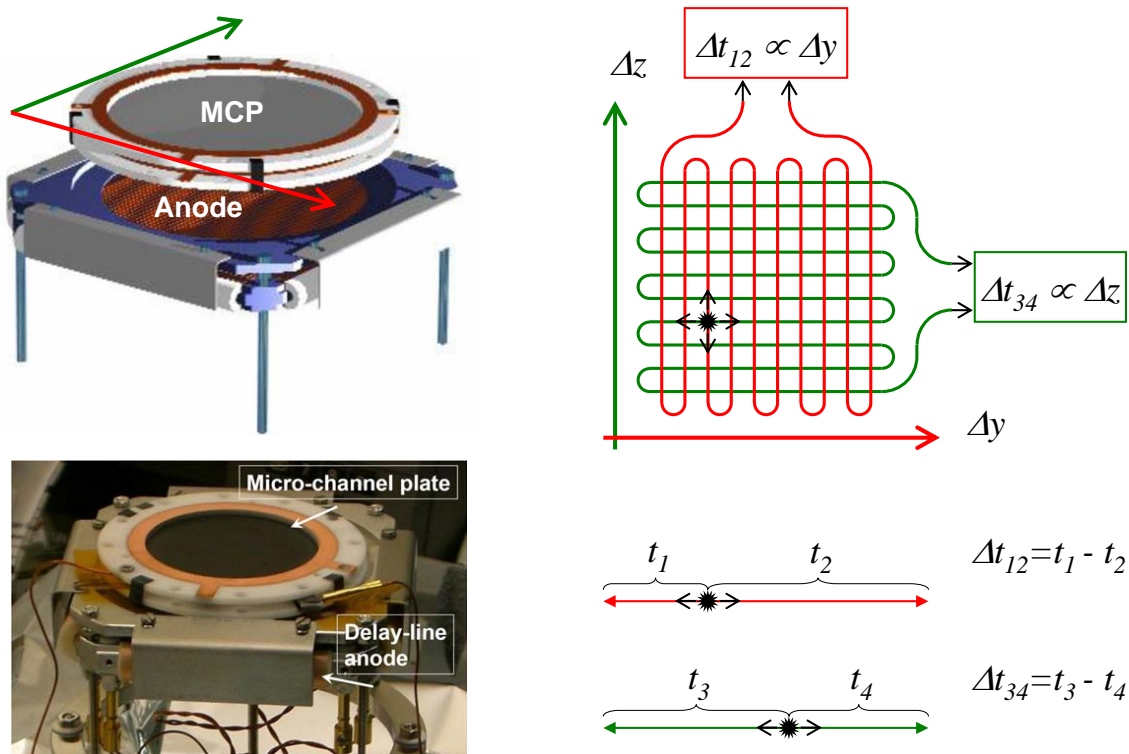


Abbildung 4.27: (links) Konstruktionszeichnung des positionsempfindlichen Detektors *DLD40* der Firma *RoentDek* sowie Photographie (aufgenommen beim MCP-Tausch in Berlin vor der Strahlzeit in 2009). (rechts) Prinzip der Anode mit Verögerungsleitungen (engl.: *delay line anode*).

zeichnung, sowie eine Photographie und veranschaulicht das Prinzip. Am Auftreffort des nachzuweisenden Teilchens verlässt ein Elektronenschauer die Rückseite des MCPs und landet bevorzugt auf den Signaldrähten. Über den Laufzeitunterschied zu den beiden Enden des Drahts kann auf die Position rückgeschlossen werden. Der Laufzeitunterschied kann entweder direkt gemessen werden, indem ein Drahtende als Startsignal dient und das zweite als Stoppsignal, oder indirekt über ein gemeinsames Startsignal (z.B. MCP-Signal). Da es vom Auftreffort abhängt, welches Drahtende das Signal früher erreicht muss man im ersten Fall das Stoppsignal entsprechend verzögern, damit es immer nach dem Startsignal registriert wird. Im zweiten Fall sind vier Zeitmessungen erforderlich und die Ortsinformation liegt redundant vor. Anschließende Differenzbildung mittel Software verbessert die Auflösung. Damit die Start- und Stoppsignale aufeinanderfolgender Ereignisse nicht mischen darf der Zeitraum zwischen zwei Signalen 30 ns nicht unterschreiten. Für tolerierbare Totzeiten bzw. eine Unterdrückung von Zufallskoinzidenzen sollte die Zählrate unter 1 MHz bleiben

Tabelle 4.11: Technische Daten des positionsempfindlichen Detektors *DLD40* von *RoentDek*.

ROENTDEK DLD40	Wert (Anmerkung)
Anzahl MCPs	2 (Chevron Konfiguration)
aktive Fläche	Durchmesser 40 mm
typische MCP-Spannung	2400 V
Verstärkung	$\approx 10^7$ (bei 2400 V)
Anodenspannung	≈ 300 V + 36 V (Signaldraht) ≈ 300 V (Referenzdraht)
Zeit-Ort Umrechnung	0.73 ns/mm
Ortsauflösung	< 0.1 mm

4.6 Messung

In diesem Abschnitt wird zunächst die Datenaufnahme und dann die Ionenidentifikation besprochen. Letztere stellt eine wesentliche Messvorbereitung dar, bei der EBIT- und Extraktions-Parameter für das Photoionisations-Experiment optimiert werden. Bei den Kampagnen wurden die beiden Strahlrohre (U125/2-SGM 2008 und U49/2-PGM1 2009) verwendet, welche unterschiedliche Photonen-Energien bereitstellen. Die Mess-schemata und die Kalibrierung der Photonen-Energie werden diskutiert und vorgestellt.

4.6.1 Datenaufnahme

Die Datenaufnahme wird bei der FLASH-EBIT durch ein System mit der Bezeichnung MPA-3 (engl.: *multi parameter analyzer*) der Firma FAST COMTEC GMBH bewerkstelligt. Bis zu 16 digitale Parameter werden mit Signalraten bis zu $6 \cdot 10^6$ Ereignisse/s unter wählbaren Koinzidenzbedingungen erfasst und gespeichert. Das Hauptmodul, welches mittels der PCI-Karte mit einem Rechner verbunden ist, hat vier ADC-Eingänge (engl.: *analog to digital converter - ADC*) und kann mit bis zu drei Erweiterungsmodulen (ebenfalls mit je vier Eingängen ADC-Eingängen) aufgerüstet werden. Die Konversion der analog verfügbaren Messsignale in kompatible digitale Werte übernehmen Wandler der gleichen Firma mit der Bezeichnung 7072T DUAL TIMING. Diese 16bit-ADCs sind paarweise in NIM-Einschüben untergebracht und verfügen über drei Betriebsmodi, wodurch die Verarbeitung verschiedenartig vorliegender Messsignale mit einem System möglich ist:

SVA (engl.: *sampling voltage analyzer*) Ein Spannungssignal im Bereich von 0-10 V wird über ein zu setzendes Zeitfenster (>65 ns) erfasst. Der Mittelwert wird immer dann digitalisiert, wenn ein externer Trigger (TTL) es vorgibt.

PHA (engl.: *pulse height analysis*) Die Extrema von Spannungspulsen im Bereich von 0.025-10 V werden digitalisiert. Gleichzeitig wird ein TLL-Signal erzeugt, das zur koinzidenten Auslösung einer SVA Messung verwendet werden kann.

TDC (engl.: *time to digital converter*) Die Zeitspanne zwischen zwei NIM-Pulsen (Start- und Stoppsignal) wird digitalisiert. Die maximale Auflösung ist <25 ps und die maximal erfassbare Zeitdauer $20 \mu\text{s}$. Zu jedem Startsignal kann nur ein Stoppsignal verarbeitet werden.

Weitere Details zum MPA-3-System und den ADCs sowie deren Betriebsmodi finden sich in den zugehörigen Handbüchern [168; 169] bzw. online unter www.fastcomtec.com. Während der Photoionisations-Experimente waren das Hauptmodul mit einem Erweiterungsmodul und vier der NIM-Dual-ADCs im Einsatz. Somit konnten bis zu acht Messgrößen gleichzeitig erfasst werden. Mit der zugehörigen Software (MPANT) können ein- und zwei-dimensionale Spektren in Form von Histogrammen dargestellt und flexibel Bedingungen gesetzt werden ([168] enthält auch eine Beschreibung dieses Programms). Eine vorläufige Datenanalyse ist damit schon beim laufenden Experiment möglich. Die aufgenommenen Daten können in zwei Formaten gespeichert werden:

Histogramme (*.mpa) Die entstandenen Histogramme (Datenvektoren bzw. -matrizen) werden gespeichert. Die Zeitinformation geht dabei verloren und nachträgliche Änderungen sind nicht möglich. Die Dateigröße hängt von den Einstellungen ab (Anzahl und Größe der Histogramme) und nicht von der Datenaufnahme-Dauer.

Ereignislisten (*.lst) Die einzelnen Ereignisse chronologisch gelistet (daher auch *Listfile* oder *Eventfile*). Damit wird die vollständige Information der Messung festgehalten und nachträgliche Wiederholungen bzw. Simulationen im sogenannten *Replay-Modus* mit geänderten Analysebedingungen sind möglich. Die Dateigröße hängt von der Anzahl der Ereignisse ab.

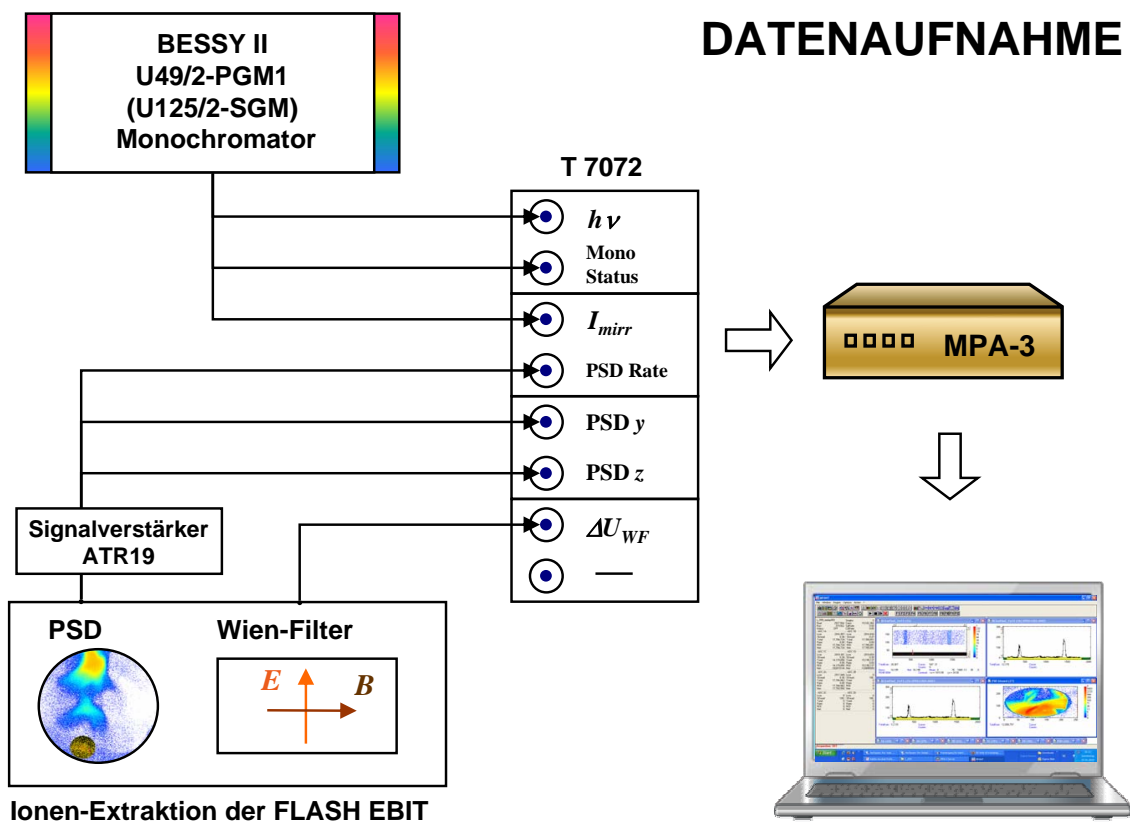


Abbildung 4.28: Datenaufnahme-Schema während der zwei Kampagnen bei BESSY II. Analoge Messgrößen werden von den ADCs (T 7072) digitalisiert und vom MPA-3 System verarbeitet und an einen Rechner zur Verarbeitung und Speicherung geleitet. Unbedingt erforderlich ist die Aufzeichnung der Photonen-Energie ($h\nu$) und des PSD-Bilds (PDD y und z). Für die Ionenidentifikation ist das E -Feld des Wien-Filters der entscheidende Parameter. Als zusätzliche Informationen wurden Monochromator Status, Spiegelstrom (\propto Photonenfluss) und PSD Rate mit erfasst.

Der minimale Datensatz für das vorliegende Photoionisations-Experiment besteht aus der Photonen-Energie und dem Bild des positionsempfindlichen Detektors. Damit sind drei Kanäle im Datenaufnahme-System belegt und ein effektiv vierdimensionales Datenensemble wird dabei erfasst. Die zweidimensionale Information des Detektors liefert Zählraten für Target-Ionen und Photoionen. Da die Photonen-Energie typischerweise für eine Messung mehrere Scans durchläuft (siehe Abschnitt 4.2.3.3 "Die verwendeten Strahlrohre")

enthält sie implizit als zweiten Parameter die Scannummer N_{scan} . Eine weitere wertvolle Information ist der Photonenfluss. Ein diesem Parameter proportionaler Wert kann durch Messung des Spiegelstroms (U49/2-PGM1: Photostrom am letzten Refokussierspiegel) bzw. des Gitterstroms (U125/2-SGM: Photostrom auf hochtransparenten Goldgitter) gewonnen werden. Der Ringstrom des Elektronen-Speicherrings ist eine weitere Größe, die über eine Flusskurve (wie in Abbildung 4.10 gezeigt) und die Einstellung des Austrittsspalts einen Rückschluss auf den Photonenfluss zulässt. Zur Vorbereitung des Photoionisations-Experiments ist die Identifikation der Ionen von entscheidender Bedeutung. Dazu ist es sinnvoll einen Kanal des Datenaufnahme-Systems mit der Scangröße des Wien-Filter zu belegen (bisher immer das E -Feld bzw. die Feldplatten-Spannung). Details dazu werden im nachfolgenden Unterpunkt erläutert.

Auch das Monochromator-Steuerprogramm bei BESSY II verfügt über ein eigenes Datenaufnahmesystem. Zu jeder Datei des MPA-3 Systems gibt es auch einen Datensatz von BESSY der folgende Informationen enthält:

- Photonen-Energie $h\nu$
- Spiegelstrom I_{mirr}
- Ringstrom I_{ring}
- Ringstrom-Lebensdauer $\tau_{1/2}$
- Undulator-Gap

Bei einer Messungen mit mehreren Scans wurden die Werte zur gleichen Photonen-Energie aufsummiert.

4.6.2 Ionenidentifikation

Die Elemente der Ionen-Extraktion und speziell der Wien-Filter sind so einzustellen, dass sowohl Target-Ionen als auch Photoionen deutlich separiert am Detektor auftreffen. Ionen, die von der gleichen Spannung U_{extr} beschleunigt werden, können nach ihrer *spezifischen Ladung* q/m getrennt werden. In einer EBIT werden Ionen nicht ausschließlich in der Falle erzeugt, sondern überall entlang der Elektronenstrahl-Bahn. Da sich das Potential entlang dieser Bahn ändert, können Ionen verschiedene Beschleunigungs-Spannungen durchlaufen haben. Hochgeladene Ionen können aber nur aus dem Fallenbereich erwartet werden. Bei unserer Ionen-Extraktion geht der Ladungszustand-Separation eine elektrostatische Ablenkung voraus, weshalb die Problematik verschiedener Extraktionspotentiale nicht auftritt.

Ein q/m -Scan kann bei einem Wien-Filter prinzipiell durch Variation des elektrischen und/oder magnetischen Feldes durchgeführt werden. Praktisch wurde nur das elektrische Feld gescannt, da es im Vergleich zum magnetischen besser reproduzierbar ist (keine Remanenz) und auch schnellere Variationen zulässt. Zwischen der spezifischen Ladung und der Scangröße ΔU (Spannung zwischen den Feldplatten) besteht folgender Zusammenhang

$$\Delta U = E \cdot d = \sqrt{\frac{q}{m}} d B \sqrt{2 U_{extr}} \rightarrow \Delta U \propto \sqrt{\frac{q}{m}} \sqrt{U_{extr}}, \quad (4.30)$$

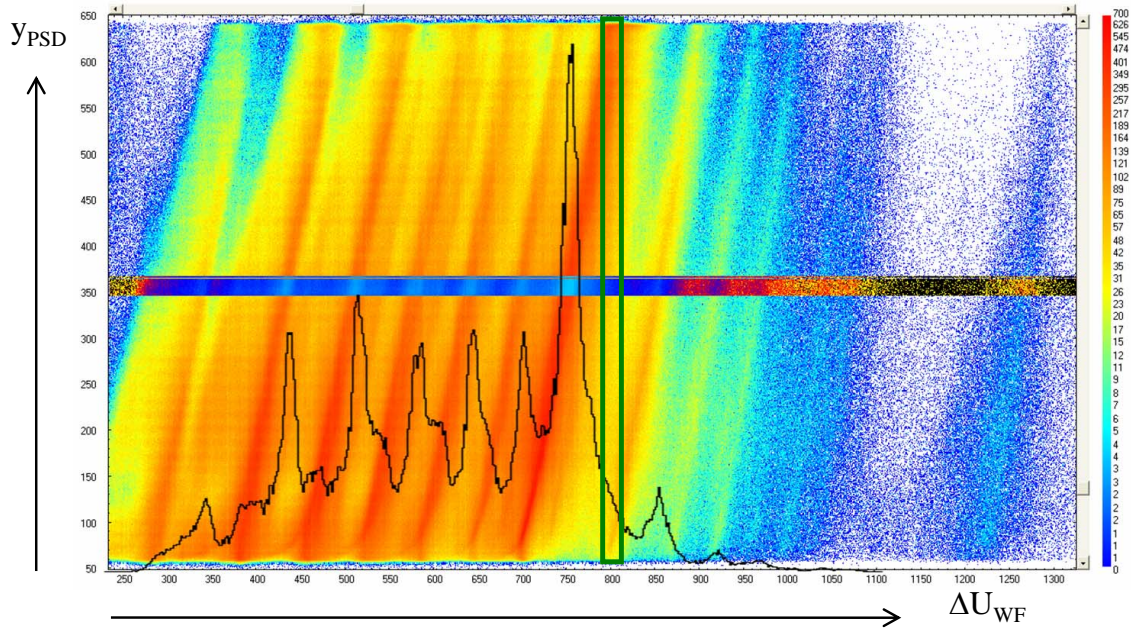


Abbildung 4.29: Scan des elektrischen Felds des Wien-Filters (Ordinate) gegenüber der Ladungszustand dispersiven Achse des PSD (Abszisse) als zweidimensionales Histogramm. Mit der Software MPANT kann sofort ein waagrechter Bereich (invertierte Farben) ausgewählt und projiziert werden. Das Ergebnis wurde als schwarze Linie eingefügt. Für die Identifikation siehe Abbildung 4.30. Ursachen für die mäßige Auflösung sind in Mängeln des Kollektors, dem engen Biegeradius der elektrostatischen 90°-Ablenkung sowie dem störenden Steufeld der supraleitenden Spulen zu suchen. Trotzdem konnten auch Isotope von Fe^{14+} ($m=54$, $m=56$) eindeutig getrennt werden.

wobei (4.28) benutzt wurde und die Geschwindigkeit aus der Beschleunigungs-Spannung U_{extr} ausgedrückt wurde. Beim vorliegenden Aufbau überqueren beim Scannen der Feldplatten-Spannung Ionen mit ansteigender spezifischer Ladung nacheinander die Detektorfläche in y -Richtung. Da es sich um einen positionsempfindlichen Detektor handelt ist es naheliegend, die disperse Achse gegenüber der Scangröße darzustellen. Abbildung 4.29 zeigt das Ergebnis einer solchen Messung. Die geneigten Linien sind durch einzelne Ionensorten verursacht, die mit ansteigendem E -Feld über den Detektor laufen. Die Neigung gibt Aufschluss über die Auflösung und ein senkrechter Schnitt bei einem bestimmten E -Feld Wert gibt Auskunft, welche Ionen gleichzeitig am Detektor auftreffen. Das grüne Rechteck in Abbildung 4.29 zeigt beispielhaft einen Schnitt, bei dem Ar^{8+} ganz oben am Detektor auftritt und Ar^{10+} ganz unten, weshalb Ar^{9+} in der Mitte zu erwarten ist. Durch Aufsummieren entlang der Neigung der Ionenlinien erhält man rasch ausgezeichnete Statistik. Praktisch reicht häufig die Auswahl und Projektion eines schmalen horizontalen Ausschnitts, was mit der Software MPANT sofort möglich ist. Eine solche Projektion mit Ionenidentifikation ist in Abbildung 4.30 zu sehen. Die Vorgehensweise bei der Identifizierung ist im Anhang (Seite 153) zusammengefasst. Es ist sinnvoll diesen Scan bei verschiedenen Elektronenstrahl-Energien durchzuführen (Variation von U_{cath}). Übersteigt

E_{kin}^e das Ionisationspotential des Target-Ions, so wird das Photoion bereits in hoher Zahl durch Elektronenstoß-Ionisation in der EBIT erzeugt. So kann der Auftreffort der Photoionen am PSD schon ohne Photonenstrahl bestimmt werden. Für die Messung selbst muss natürlich darauf geachtet werden, dass die Elektronenstrahl-Energie nicht über dem Ionisationspotential liegt, gemäß der Bedingung (4.2). Taucht der nächste Ladungszustand bei der zu erwartenden Elektronenstrahl-Energie auf, so ist das gleichzeitig eine ausgezeichnete Bestätigung für die gefundene Ionenidentifikation. Diese oftmals aufwändigen Prozeduren müssen schon vor Beginn der eigentlichen Strahlzeit (Verfügbarkeit des Photonenstrahls) abgeschlossen sein.

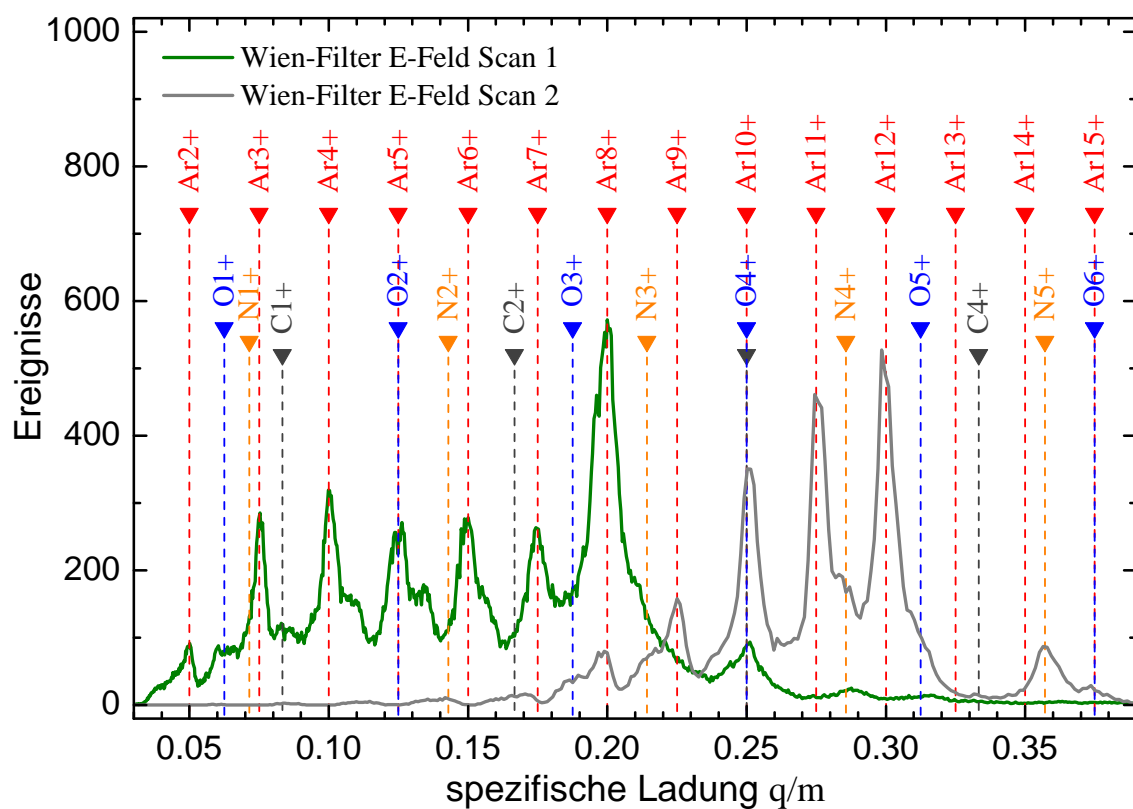


Abbildung 4.30: Die E -Feld Achse (Wien-Filter) des Scans aus Abbildung 4.29 wurde auf die spezifische Ladung umskaliert, wodurch verschiedene Ladungszustände des gleichen Elements in äquidistanten Abständen erscheinen. Die Identifikation erfolgte mit der Vorgangsweise, die im Anhang (Seite 153) beschrieben ist. Deutlich erkennt man im Scan1 (grün) das ausgeprägte Maximum der Verteilung bei Ar^{8+} , die für dieses Ion möglich ist, da ein Schalenabschluss auftritt (Ne-artiges System). Der Scan2 (grau) zeigt die Optimierung für Messungen mit Ar^{12+} . Der Vergleich der beiden Wien-Filter E -Feld Scans demonstriert die gute Kontrolle über die auftretenden Ladungszustände in einer EBIT.

Der Nachweis der Photoionisation über extrahierte Ionen ist hocheffizient, quantitativ (speziell das Verhältnis von Target-Ionen zu Photoionen) und nach erfolgter Identifikation sind praktisch zweifelsfreie Zuordnungen möglich. Den einzigen Nachteil stellen auftretende q/m -Koinzidenzen dar. Beispielsweise wurde für Untersuchungen an hochgeladenen Eisenionen über den Gaseinlass Eisenpentacarbonyl ($Fe(CO)_5$) injiziert. Bei den Photoionisations-Experimenten mit Fe^{14+} war die quantitative Erfassung des Target-Ions stark

beeinträchtigt

$$\frac{q}{m} \left(Fe^{14+} \right) = \frac{14}{56} = \frac{q}{m} \left(O^{4+} \right) = \frac{4}{16} = \frac{q}{m} \left(C^{3+} \right) = \frac{3}{12} = \frac{1}{4}. \quad (4.31)$$

Wenn das zu untersuchende Element stabile Isotope aufweist (z.B. ^{54}Fe) können diese Einschränkung umgangen werden. Dabei müssen nicht unbedingt isotopenreine Proben injiziert werden. Die natürliche Isotopenverteilung bietet bereits die Möglichkeit von einem Isotop auf die Häufigkeit der anderen zu schließen (siehe Abschnitt 5.5.1 *"Absolute Wirkungsquerschnitte"*). Die Vermessung von Isotopen-Effekten würde hierbei jedoch fallweise eingeschränkt bleiben. Ein anderer Lösungsansatz ist die Verwendung von Nachweismethoden, die auf den Ladungszustand q sensitiv sind und damit eine Trennung von Ionen mit gleicher spezifischer Ladung zulässt. Solche Ansätze sind im Ausblick beschrieben.

4.6.3 Messmethoden

Die Bedingung (4.2), dass die Elektronenstrahl-Energie E_{kin}^e unter dem Ionisationspotential E_{IP} des zu untersuchenden Photoionisations-Prozesses liegen muss, ist wesentlich für das Gelingen des Experiments. E_{kin}^e kann in einer EBIT allerdings nicht beliebig reduziert werden. Auf der gesamten Wegstrecke von der Kathode bis zum Kollektor muss das Potential über U_{cath} liegen und eine Spannungsdifferenz $\Delta U_I = U_{coll} - U_{cath}$ muss bestehen, damit überhaupt ein Strom I_e fließt. Nicht zuletzt stellt die Raumladung, die invers mit $\sqrt{E_{kin}^e}$ skaliert bei niedrigen Energien eine entscheidende Hürde dar. In der Literatur kann eine kleine Zahl an EBIT-Experimenten gefunden werden die im Bereich von $E_{kin}^e = 50-100$ eV durchgeführt wurden [170; 171; 172], aber nicht darunter. Das liegt natürlich auch daran, dass Elektronenstrahlen bei hohen Energien (keV-Bereich) leichter zu beherrschen sind. Das Photoionisations-Experiment ist daher mit Ionen in niedrigen Ladungszuständen deutlich schwieriger, als mit hochgeladenen Ionen. Vom Stand der Forschung aus betrachtet ist dieser Umstand aber unkritisch, da für ein bis mehrfach geladene Ionen mit der *MB* Methode ein etabliertes Verfahren zur Verfügung steht (siehe Abbildung 1.3 bzw. Abschnitt 3.2 *"Die merged-beam Methode"*). Die vorgestellte Methode, basierend auf der Technologie der Elektronenstrahl-Ionenfallen, stellt so gesehen eine optimale Ergänzung dar.

Niedrigen Elektronenstrahl-Energien haben eine weitere Konsequenz, denn Kanone und Kollektor konnten während dieser Experimente noch nicht vom Erdpotential entkoppelt auf Spannung gelegt werden. Damit wird die Elektronenstrahl-Energie gemäß (4.16) nur durch die Kathodenspannung U_{cath} und das Fallenpotential U_{trap} (und Raumladung) bestimmt. Der Nachweis der Photoionisation erfolgt durch Extraktion der Ionen. Wie effizient diese gestaltet werden kann hängt entscheidend von der kinetischen Energie der Ionen E_{kin}^{ion} ab. Wie bereits in (4.17) formuliert und in Abbildung 4.12 (oben) angedeutet ist auch hier in erster Linie das Fallenpotential U_{trap} maßgebend. Die Ionenextraktion fordert also einen möglichst hohen Wert für U_{trap} , während die Bedingung (4.2) einen niedrigen Wert verlangt.

Die Extraktion der Ionen ist bei Fallenpotentialen von lediglich $U_{trap} = 300$ V gelungen. Photoionisations-Experimente mit Ionen, deren Ionisationspotential über 300 eV liegt (z.B.

$E_{IP}^{Ar^{8+}}=422$ eV, $E_{IP}^{Fe^{14+}}=456$ eV) konnten daher bei vorteilhaften kontinuierlichen Betrieb durchgeführt werden. Welche Vorteile das sind wird etwas weiter unten behandelt. Ist das Ionisationspotential geringer (z.B. $E_{IP}^{N^{3+}}=77$ eV) so muss die Präparation des Target-Ions bei niedrigerem Fallenpotential von der Extraktion der Ionen bei hohem zeitlich getrennt durchgeführt werden, was zu einem zyklischen Messablauf führt.

Mit der Entkopplung der Kanone und des Kollektors vom Erdpotential kann in zukünftigen Experimenten auch für Ionen in niedrigen Ladungszuständen eine Messung im kontinuierlichen Betrieb erfolgen. Bis die Ionen den Kollektor verlassen, hat diese Maßnahme jedoch noch keine Auswirkung auf die Effizienz der Ionenextraktion. Die kinetische Energie, die den Ionen beim Passieren des Kollektors zur Verfügung steht hängt mit der Potentialdifferenz zwischen Falle und Kollektor zusammen. Daher sollte man folgen Zusammenhang beim kontinuierlichen Betrieb mit Ionen in niedrigen Ladungszuständen beachten (im zyklischen Messablauf spielt diese Überlegung keine Rolle)

$$e \cdot \Delta U_I + E_{kin}^{ion} = E_{kin}^e \leq E_{IP}^{Zq+} . \quad (4.32)$$

Die ohnehin geringe Potentialdifferenz, welche E_{kin}^e bestimmt, muss aufgeteilt werden um einerseits einen Elektronenstrom-Fluss von Kathode zu Kollektor zu ermöglichen und andererseits den Ionen genug Energie zum effizienten Passieren des Kollektors zu geben.

4.6.3.1 Zyklische Extraktion: niedrige Ladungszustände

Aus oben genannten Gründen war für Ionen in niedrigen Ladungszuständen und entsprechend geringen Ionisationspotentialen ($E_{IP}^{Zq+} \leq 300$ V) eine zeitliche Trennung der Target-Ionen Präparation und dem Nachweis durch Extraktion vorzunehmen. Bei der ersten Kampagne in Berlin (2008) an der U125/2-SGM führte wegen der verhältnismäßig geringen Photonen-Energien kein Weg an einem zyklischen Messablauf vorbei ($h\nu$ effektiv 40-180 eV, weil nur die beiden Gitter für den niedrigen Energiebereich verfügbar waren und der Photonenfluss zu höheren Energien daher deutlich abnahm). Hier soll beschrieben werden wie der Messvorgang mit zyklischer Extraktion im konkreten Fall für N^{3+} umgesetzt wurde.

Den Elektronenstrahl und die Potentiale an den drei zentralen Driftröhren, waren die Größen, welche es während dem Durchlauf eines Zyklus zu manipulieren galt (siehe Abschnitt 4.31 "F:PeriodischerMessablauf"). Der erste Schritt war die Präparation der Target-Ionen (i). Dazu lag die zentrale Driftröhre DT2 auf Erdpotential und die anderen beiden Einschluss erzeugenden Driftröhren DT1 und DT3 knapp darüber (≈ 10 V). Die Kathode war auf einer negativen Spannung von $U_{cath}=-50$ V. Ein Elektronenstrahl von $I_e=2$ mA und einer Energie die auch im Bereich von DT1 und DT3 unter dem Ionisationspotential von N^{3+} lag waren das Resultat ($E_{kin}^e \leq E_{IP}^{N^{3+}}$). Bei den wenigen Ladungszuständen, die bei diesen Energien eine Rolle spielen, kann man davon ausgehen, dass das dynamische Gleichgewicht in Millesekunden erreicht wird. Wenn der Monochromator den nächsten Wert Photonen-Energie erreicht hatte (ii), löste ein Trigger einen Zyklus aus, der mittels Funktionsgeneratoren gesteuert wurde. Der Elektronenstrahl wurde ausgeschaltet und das Potential der einschließenden Driftröhren schnell angehoben, um axialen Ionenverlust zu verhindern. Dieser Schritt ist essentiell, denn mit dem Wegfall des Elektronenstrahls war

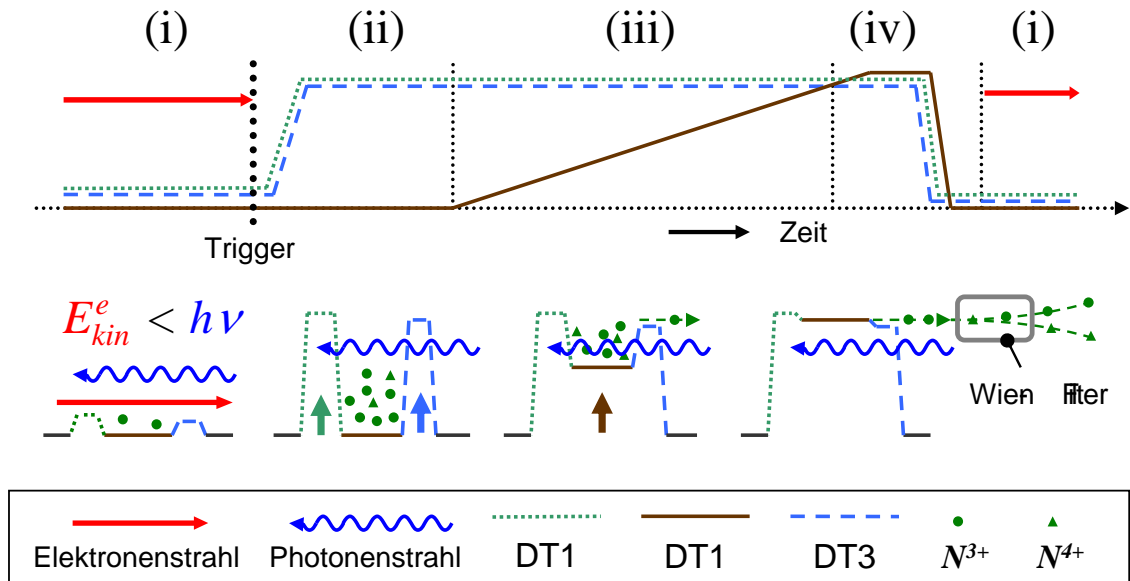


Abbildung 4.31: Schematische Darstellung des zyklischen Messablaufs, mit dem die Photoionisation von N^{3+} mit einem Ionisationspotential nur $E_{IP}=77$ eV untersucht werden konnte. Oben: der zeitliche Verlauf der Spannungen an den drei zentralen Driftröhren (DT1: grün gepunktet, DT2: braun voll, DT3: blau gestrichelt - Nummeriert entsprechend Abbildung 4.1) und des Elektronenstrahls. Mitte: Darstellungen der vorliegenden Fallpotentiale während der einzelnen Phasen und unten Legende. Präparation der Target-Ionen (N^{3+}) und der Nachweis der Photoionisation durch Extraktion der Target-Ionen und der Photoionen (N^{4+}) sind in diesem Ablauf zeitlich getrennt. (i) Erzeugung der Target-Ionen mittels Elektronenstrahl, zentrale Driftröhre (DT2) auf Erdpotential. (ii) Ausschalten des Elektronenstrahls und sofortiges anheben der fallenbegrenzenden Driftröhren (DT1 & DT3), um axialen Ionenverlust zu verhindern. (iii) Extraktion: kontinuierliches Anheben des Potentials auf (DT2), bis die Falle entleert ist. (iv) Potentiale aller Driftröhren vor dem Einschalten des Elektronenstrahls wieder auf Ausgangswerte setzen, damit der Ablauf von neuem beginnen kann.

auch der raumladungsbedingte Einschluss nicht mehr gegeben (siehe Abschnitt 4.3.1.2 "Raumladung und Ionendichte"). DT1 wurde dabei auf ein etwas höheres Potential gelegt im Vergleich zu DT3, damit bei der anschließenden Extraktion praktisch alle Ionen die Falle in Richtung Kollektor verlassen ($U_{DT1}=620$ V $>$ $U_{DT3}=500$ V). Im nächsten Schritt (iii) wurde die zentrale DT2 angehoben, um die Ionen über die Barriere der DT3 zu drücken, welche die kinetische Energie der extrahierten Ionen bestimmt. Dieser Schritt muss langsam durchgeführt werden, da eine all zu hohe Zählrate den positionsempfindlichen Detektor in Sättigung bringt. Nach dem die Falle komplett entleert wurde ($U_{DT2}>U_{DT3}$), folgte im letzten Schritt (iv) die Rücksetzung der Spannungen auf die Werte am Beginn von Schritt (i) und der Elektronenstrahl konnte wieder eingeschaltet werden. Die Präparation der Target-Ionen lief dann wieder bis der Monochromator die nächste Photonen-Energie eingestellt hatte.

Abbildung 4.32 zeigt den Ablauf der Messung in Echtzeit anhand der Zählrate auf dem MCP am untern Magnetport (siehe Abschnitt 4.3.4 "FLASH-EBIT") dem Steuersignal für die zentrale Driftröhre DT2 und die Zählrate auf dem PSD. Die MCP-Zählrate zeigt die Photonenemission in der Falle an und daher wann der Elektronenstrahl eingeschaltet war. Die PSD-Zählrate ist sichtlich mit dem entleeren der Falle gekoppelt. In (a) sieht

man mehrere Zyklen mit einer Dauer von 5.96 s. Der Elektronenstrahl war für rund 3.5 s an. In (b) ist ein Zyklus einer anderen Einstellung dargestellt. Die Präparation der Target-Ionen erfolgte in einer kürzeren Zeit von unter 2 s. Beim anschließenden langsamen Entleeren der Falle wird eine Struktur in der Rate am PSD sichtbar. Für die Flugzeit sind diese Strukturen zu lang, weshalb angenommen wird, dass es Ionen in verschiedenen Ladungszuständen sind, welche unterschiedlich starke Barrieren verspüren. Diese Auflösung wurde allerdings nur mit dem Digital-Oszilloskop (TEKTRONIX) erreicht und wurde mit dem Datenaufnahme-System nicht im Detail aufgezeichnet. Der Versuch mit Hilfe dieser Struktur eine Unterdrückung des Untergrunds für das N^{4+} -Signal zu erreichen war allerdings nicht erfolgreich.

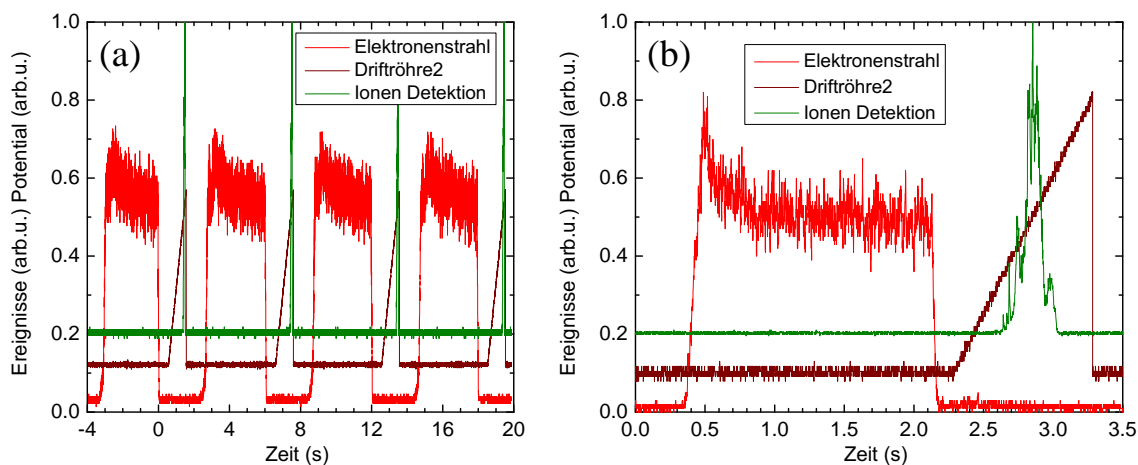


Abbildung 4.32: Echtzeitdarstellung des zyklischen Messablaufs für N^{3+} : (rot) die Signalrate am MCP am unteren Magnetport zeigt Aktivität in der Falle, wenn der Elektronenstrahl eingeschaltet ist (braun) Potential an der zentralen Driftröhre DT2, welche zum Entleeren der Falle angehoben wird (grün) Ionenrate am PSD. Messung (a) zeigt vier Zyklen mit einer Dauer von je 6 s und Messung (b) einen Zyklus mit einer Dauer von 5 s im Detail, wobei eine Struktur in der Ionenrate sichtbar wird.

Der zyklische Messprozess enthält noch einen weiteren wichtigen Aspekt. Nach dem Ausschalten des Elektronenstrahls geht die Wechselwirkung mit den Photonen weiter. Ab diesem Zeitpunkt werden angeregte Zustände nicht mehr durch Elektronenstöße nachbesetzt. Nur wenige metastabile Zustände (MS) mit sehr langen Lebensdauern spielen noch eine Rolle. Allerdings ist auch zu bedenken, dass die Ionendichte im *magnetic trapping mode* gegenüber jener mit Elektronenstrahl reduziert ist. Details werden anhand der Daten und im Vergleich mit MB-Messungen in Abschnitt 5.1 *Be-artige Stickstoff-Ionen* diskutiert. Im Prinzip ist damit gezeigt, dass eine Unterdrückung oft störender metastabiler Zustände auch in einer EBIT erreicht werden kann (Thissen *et al.* [61] haben das an Xe^+ in einer Penning-Falle demonstriert).

Der Monochromator löst den Messzyklus mit Ausschalten des Elektronenstrahls aus, wenn der nächste Wert der Photonen-Energie erreicht ist und steht dann für 2 bis 4 s auf dieser Einstellung still, bevor die Photonen-Energie wieder um eine Schrittweite erhöht wird. Wenn sich die Photonen-Energie daraufhin ändert, wurden die Ionen bereits aus der Falle extrahiert. Allerdings in der Phase der Präparation der Target-Ionen können diese, sobald erzeugt, mit einer veränderlichen Photonen-Energie wechselwirken. Dies führt zu einer

geringfügigen Verbreiterung der experimentellen Auflösung und zu einer schrittweisenabhängigen Verschiebung der Resonanzlagen (siehe Abschnitt 4.6.4.3 *”Schrittweisenabhängige Verschiebung”*). Bei zukünftigen Messungen können diese Artefakte leicht umgangen werden, beispielsweise durch einen automatisierten Schließmechanismus für den Photonenstrahl. Aus praktischen (Triggersignale, Anzahl der verfügbaren Funktionsgeneratoren) und zeitlichen Gründen (längere Zyklusdauer wenn der gesamte Ablauf nur bei Stillstand des Monochromators erfolgen soll) war die Vermeidung bei der Kampagne 2008 noch nicht möglich.

4.6.3.2 Kontinuierliche Extraktion: hohe Ladungszustände

Unter welchen Bedingungen ein kontinuierlicher Messprozess möglich ist, wurde bereits erläutert. Bei diesen Experimenten bleiben sämtliche EBIT- und Extraktions-Parameter während der Messung unverändert. Lediglich die Photonen-Energie wird gescannt. Die Vorteile im Vergleich zur zyklischen Extraktion sind:

- hohe Dichte der Target-Ionen und gut bekannte und kontrollierte Position der Ionen
- ständiges evaporatives Kühlen der gefangenen Ionen durch Extraktion
- geringe Fluktuationen
- bessere Zählstatistik

Wie in Abschnitt 4.3.1.2 *”Raumladung und Ionendichte”* erklärt, ist die Raumladung des Elektronenstrahls ein starker radialer Einschluss für die Ionen. Im *magnetic trapping mode* expandiert die Ionenwolke und die Ionendichte sinkt. Darüber hinaus können Driftbewegungen (ähnlich der Magnetronbewegung in Penning-Fallen) und zusätzlich können Driftbewegungen die Position der Ionenwolke langsam ändern und damit die Überlappung mit dem Photonenstrahl verschlechtern. Im kontinuierlichen Betrieb ist die Position der Ionenwolke fixiert. Außerdem wirkt die kontinuierliche Extraktion wie evaporative Kühlung [126; 152], da nur die schnelleren, heißeren Ionen die Barriere axial überwinden können. Das hat auch einen positiven Effekt auf die Ionendichte, denn wenn die Ionen bevorzugt axial entkommen und nicht radial ist das Volumen der Ionenwolke (radiale Ausdehnung) deutlich geringer [124]. Für die Genauigkeit der zyklischen Messmethode ist es besonders wichtig, dass alle Durchläufe möglichst identisch ablaufen. Allerdings unterliegt die Aufladung der Falle natürlichen Schwankungen und zum Teil chaotischen Fluktuationen, die durch die Wechselwirkung mehrerer gleichzeitig gespeicherten Ionensorten entstehen [173]. Bei kontinuierlichen Bedingungen ist die Reproduzierbarkeit ein deutlich geringeres Problem. Die kurzfristig hohen Zählraten bei zyklischer Extraktion können im vorgestellten Aufbau den PSD in die Sättigung treiben, während die Zählraten im kontinuierlichen Betrieb optimal zu dieser Detektionsmethode passen und integral betrachtet erhält man in der selben Zeit deutlich bessere Zählstatistik. Die mittlere Speicherzeit der Photoionen in der Falle unterliegt einer weniger direkten Kontrolle im Vergleich zur zyklischen Messung mit regelmäßigen Fallenentleerungen.

4.6.4 Kalibrierung der Photonen-Energie

Die Kalibrierung der Photonen-Energie umfasst zweierlei. Einerseits weicht der Wert, den die *Monochromator*-Steuerung angibt von der tatsächlichen Photonen-Energie ab. Standardverfahren, um diese Verschiebung zu ermitteln, sind Photoabsorption in Gaszellen mittels bekannter Resonanzlagen. Zweitens und unabhängig vom Monochromator kann die *Messmethode* Verschiebungen mit sich bringen, die korrigiert werden müssen.

4.6.4.1 Gaszellen Absorption

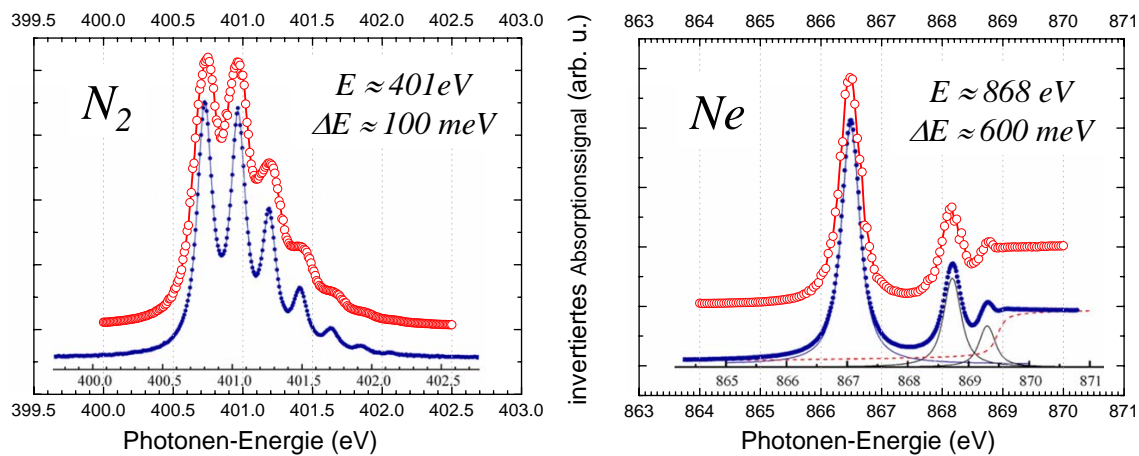


Abbildung 4.33: Ergebnisse der Kalibrierung des Monochromators mittels Absorptionsmessung in einer Gaszelle. Für den Bereich um 400 eV (links) wurden Stickstoff-Moleküle (N_2) verwendet, im Bereich um 870 eV Neon (rechts). Die Kalibrierung mit der verwendeten Beamline U49/2-PGM1 (rot) wurden mit aktuellen Messungen einer anderen Beamline von BESSY II verglichen (blau), welche mit Literaturwerten und aktuellen Vorhersagen übereinstimmt.

Während der Kampagne 2009 an der Beamline U49/2-PGM1 haben die wissenschaftlichen Betreuer der Strahlrohre *Olaf Schwarzkopf* und *Rolf Follath* die Kalibrierungsaufgaben übernommen. Der Photonenfluss wird dabei auf einer Photodiode (*GaAsP*-Diode) gemessen. Der monochromatische Photonenstrahl durchquert zuvor eine Neutralgas-Zelle, in der verschiedene Gase bei typischen Drücken von 10^{-5} mbar eingebracht werden können. Im Bereich um $h\nu \approx 400 \text{ eV}$ wurden die $1\sigma^{-1}\pi^*$ Anregungen von Stickstoff-Molekülen verwendet und bei $h\nu \approx 870 \text{ eV}$ $1s^{-1}np$ ($n \geq 3$) Anregungen von atomaren Neon. Abbildung 4.33 zeigt Ergebnisse dieser Kalibrierung im Vergleich mit aktuellen Messungen einer weiteren Beamline bei BESSY II [174], die mit gängigen Theorien verglichen wurden. Weiter Literaturwerte finden sich beispielsweise in [175; 176; 177; 178]. Das unkalibrierte Ergebnis (Photonen-Energie wie von der Monochromator-Steuerung angegeben) der Beamline U49/2-PGM1 ist in rot dargestellt, die Vergleichswerte der *Deutsch-Russischen* Dipol-Beamline in blau. Die statistische Genauigkeit dieser Kalibrierungs-Methoden (Vergleich gemessener Absorptionsspektren) liegen bei etwa 10 meV. Systematische Unsicherheiten zur absoluten Lage dieser Resonanzen limitieren die Kalibrierung auf rund 100 eV.

$$E_{tat}^{h\nu} = E_{mono} + \Delta E_{calib}(E_{mono}) \quad , \quad \Delta E_{calib} = a \cdot \Delta E_{mono} + b \quad . \quad (4.33)$$

Aus den beiden lokalen Kalibrierungspunkten lässt sich eine Gerade angeben, welche der nominellen Photonen-Energien des Monochromators für alle Photonen-Energien tatsächliche Werte zuordnet. Die Ergebnisse dieser Kalibrierung werden etwas weiter unten im Zusammenhang mit einer Überprüfung mittels *Photonen zweiter Ordnung* in Tabelle 4.15 zusammengefasst.

4.6.4.2 PhoBIS-Modus

Bei der Kampagne 2008 wurde ein eigenes Kalibrierungs-Verfahren erfolgreich angewandt. Dazu wurde ausschließlich der bestehende Aufbau für Photoionisations-Experiment mit einer EBIT benutzt (vergleiche Abbildung 4.1). Der Elektronenstrahl wurde ausgeschaltet und bei höheren Injektionsdrücken, im Vergleich zum Standardbetrieb einer EBIT, konnte der Photonenstrahl im Fallenzentrum mit dem gewählten Kalibrierungsgas (He, Ne, ...) wechselwirken. Wie in Abbildung 4.34 verdeutlicht, werden die erzeugten Ionen (He^+ , Ne^+ , ...) auf die gleiche Weise extrahiert und am positionsempfindlichen Detektor nachgewiesen, wie beim Experiment mit hochgeladenen Ionen. Einziger Unterschied war, dass die Wien-Filter Felder zu diesem Zwecke ausgeschaltet wurden, da eine Separation von Ladungszuständen nicht erforderlich war. Dieser Betriebsmodus trägt den Namen *PhoBIS* für Photonenstrahl-Ionenquelle (engl.: *photon beam ion source*) und wurde auch schon von Jones *et al.* und später von Kravis *et al.* beschrieben [179; 51].

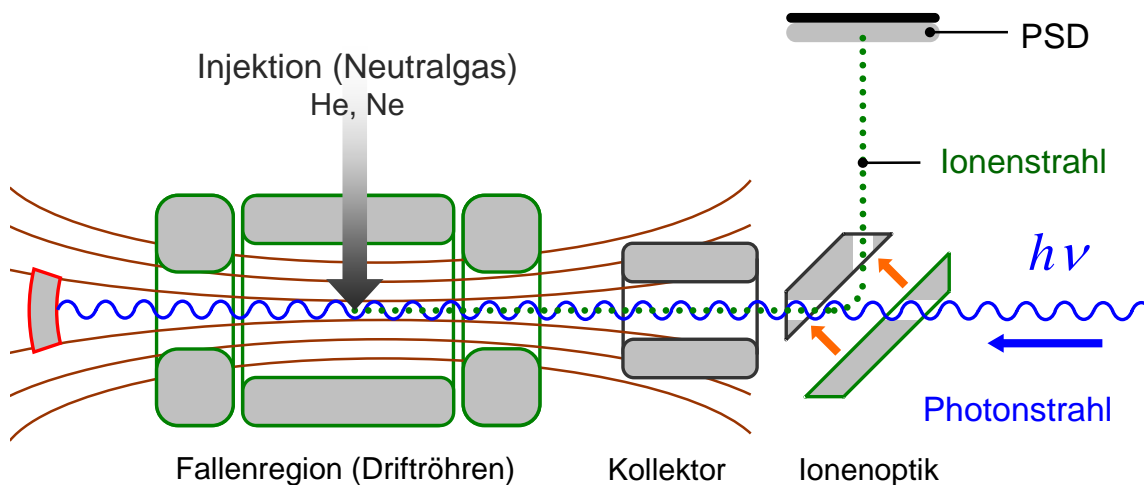


Abbildung 4.34: Prinzip des *PhoBIS*-Modus. Im Fallenzentrum ionisiert der Photonenstrahl injiziertes Kalibrierungsgas. Der Elektronenstrahl ist ausgeschaltet. Photoionen werden extrahiert und am PSD nachgewiesen.

Zur Kalibrierung der N^{3+} Daten wurden Resonanzen in neutralen Helium verwendet, die auf Doppelanregungen beruhen und in Abbildung 4.35 (a) zu sehen sind. Die starke Asymmetrie der Profile beruht vor allem auf der Interferenz der $2snp$ und $2pns$ Serien und weniger auf Interferenz mit dem direkten Prozess. Die Beschriftung des Peaks folgt der Hauptquantenzahl des äußeren Elektrons. Durch Vergleich mit genauen Photoionisations-Experimenten mit Helium durch Domke *et al.* [180] konnte eine Kalibrierungs-Genauigkeit von 8 meV erreicht werden. Die deutlich stärkeren Resonanzen in Neon in Abbildung 4.35 (b) beruhen auf einfacher Anregung eines $2s$ Elektrons in np Zustände und zeigen starke

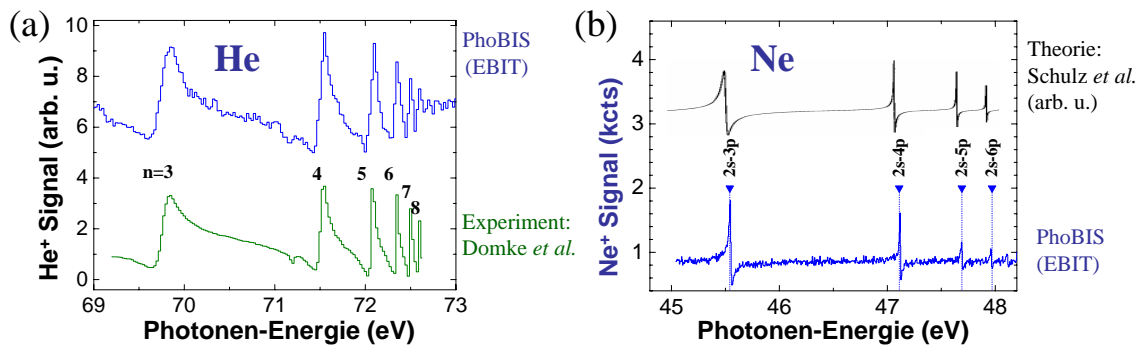


Abbildung 4.35: Kalibrierung der Photonen-Energie mittels PhoBIS-Modus. Links: Durch Vergleich der Resonanzen doppelt angeregter Zustände ($2snp, 2pns$) von Helium mit experimentellen Werten von Domke *et al.* [180] konnten N^{3+} Resultate auf 8 meV genau kalibriert werden. Die Beschriftung n gibt die Hauptquantenzahl des höher angeregten Elektrons. Rechts: Die Neon-PhoBIS wurde zur Optimierung der Extraktionsparameter genutzt. Die Resonanzen wurden durch Vergleich mit Theoriewerten von Schulz *et al.* identifiziert [181]. Resonanzen dieser Rydberg-Serie wurden auch bei Ne-artigem Ar^{8+} gefunden.

Interferenzeffekte mit dem direkten Photoionisation. Zum Vergleich wurden dem Diagramm theoretische Werte von Schulz *et al.* beigefügt [181]. Ein interessanter Vergleich mit den Ar^{8+} Daten wird in Abschnitt 5.2 "Ne-artige Argon-Ionen" gezogen, da es sich um die gleiche Elektronenkonfiguration handelt (Ne-artiges System). Der PhoBIS-Betrieb mit Neon wurde vor allem zur Optimierung der Extraktionsparameter für die zyklische Messmethode verwendet. Dies hat wesentliche Vorteile gegenüber einer Optimierung bei kontinuierlicher Extraktion im normalen EBIT Betrieb. Erstens zeigt die Ionenextraktion mit und ohne Elektronenstahl deutliche Unterschiede und zweitens kann im PhoBIS Modus mit ausgeschalteten Wien-Filter optimiert werden, ohne den PSD zu überladen. Das ermöglicht die getrennte Optimierung der anderen Elektroden der Ionen-Extraktion bevor der Wien-Filter hinzukommt.

Der PhoBIS-Modus erlaubt die Kalibrierung im Fokus des Photonenstrahls an der Stelle wo auch die Wechselwirkung mit den Ionen stattfindet. Außerdem wird ein direkter Vergleich der Photoionisation von hochgeladenen Ionen und neutralen Atomen im selben experimentellen Aufbau ermöglicht, was einen sehr direkten Vergleich zulässt. Die Detektion von Photoionen oder Photoelektronen ist sehr effizient und ist in einem Bereich möglich, wo der Photonenstrahl beim Passieren des Kalibrierungsgases nicht messbar abnimmt, also noch keine Absorptionsmessung notwendig ist. In zukünftige Messungen soll daher eine eigene Gaszelle mit Photoionen Detektion simultan zur Hauptmessung an hochgeladenen Ionen ein Kalibrierung durchführen.

4.6.4.3 Schrittweitenabhängige Verschiebung

Wie in Abschnitt 4.2.3.3 "Die verwendeten Strahlrohre" diskutiert, wechselt der Monochromator bei Durchlauf eines Scans alternierend zwischen zwei Phasen: (i) Stillstand bei einer bestimmten Photonen-Energie für die Zeitdauer t_{meas} . (ii) Anfahren der nächsten Photonen-Energie in einer Zeitdauer, die (auf nicht lineare Weise) mit der Schrittweite zusammenhängt $t_{move}(\Delta E_{step})$. Die Messungen mit zyklischer und kontinuierlicher Ex-

traktion müssen dazu separat betrachtet werden.

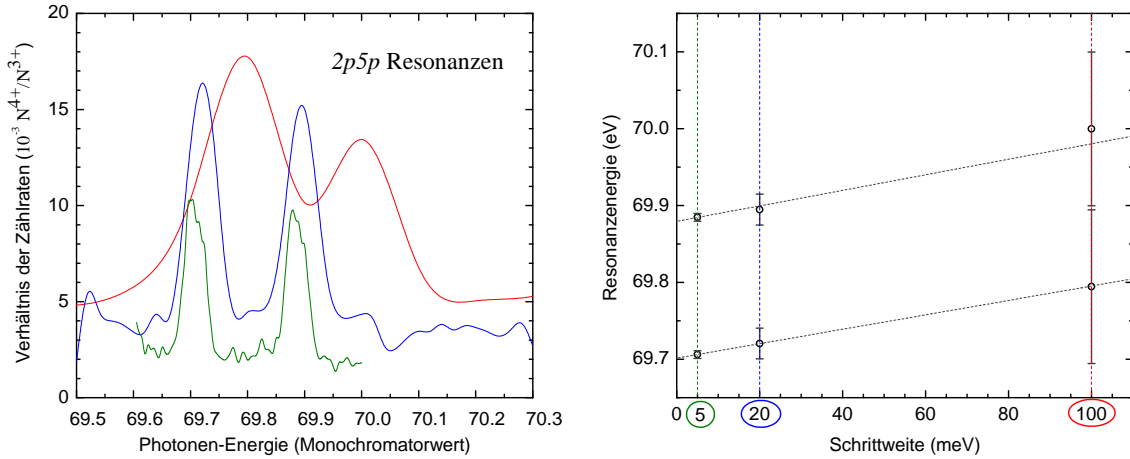


Abbildung 4.36: (links) Drei Scans der LS aufgespaltenen $2s5p$ -Resonanz bei unterschiedlichen Schrittweiten (5, 20 und 100 meV in grün, blau und rot) zeigen eine deutliche Verschiebung. (Rechts) Die ermittelten Resonanzenergien sind gegenüber der Schrittweite aufgetragen. Aus der Steigung kann der Korrekturfaktor gewonnen werden.

Beim zyklischen Messablauf findet der erste Teil der Wechselwirkung bei noch ansteigender Photonen-Energie statt (siehe Abschnitt 4.6.3.1 "Zyklische Extraktion: niedrige Ladungszustände"). Die dabei erzeugten Photoionen werden der daraufhin eingestellten Photonen-Energie zugeordnet, die der Monochromator meldet, wenn der Extraktionspuls erfolgt. Je größer die Schrittweite, desto weiter liegt die mittlere Photonen-Energie, die während der Wechselwirkungszeit effektiv vorlag, unter dem zugeschriebenen Wert. Entsprechend tritt eine stärkere Verschiebung zu scheinbar höheren Photonen-Energien in den unkorrigierten Daten auf. Abbildung 4.36 (links) zeigt diesen Sachverhalt anhand von drei Scans der aufgespaltenen (LS) $2p5p$ Resonanz von metastabilen N^{3+} -Ionen, welche bei Schrittweite ΔE_{step} von 5 meV, 20 meV und 100 meV vermessen wurde. In (rechts) sind die Resonanzlagen gegenüber dieser Schrittweiten dargestellt. Eine linearer Fit legt eine Schrittweitenabhängige Verschiebung von rund $0.8(2) \cdot \Delta E_{step}$ nahe, wobei der Faktor aus der Steigung $s_{\Delta E(E)}$ folgt. Daraus wird zur Schrittweite $\Delta E_{step}=0$ extrapoliert und somit zum physikalisch korrekten Wert.

Etwas komplizierter ist die Situation beim kontinuierlichen Messprozess. Hier werden Ionen auch während der Umstellphase des Monochromators extrahiert. Das proportionale Spannungssignal vom Monochromator wird während dieser Phase nicht mit verändert, sondern schrittweise erhöht und zwar immer dann, wenn der Monochromator den nächsten Energiewert erreicht hat. Folglich werden die höheren Photonen-Energien der Umstellphase noch der nächst niedrigeren eingestellten Photonen-Energie zugeschrieben. Damit sollte im Fall der kontinuierlichen Messung eine prinzipielle Verschiebung zu niedrigeren Werten einhergehen (welche auch von der Schrittweite ΔE_{step} abhängt). Die Analyse einer einzelnen Messung zeigt das zu erwartende Verhalten (siehe Abbildung 4.37).

Ein kombiniertes Rechteck-Sägezahn Signal (braun in Abbildung 4.37 links) wurde benutzt, um den Monochromator Status mit dem Datenaufnahme-System festzuhalten. Die Idee war die Ereignisse während der Umstellphase (Funktionswert *tief*: roter Bereich) zu

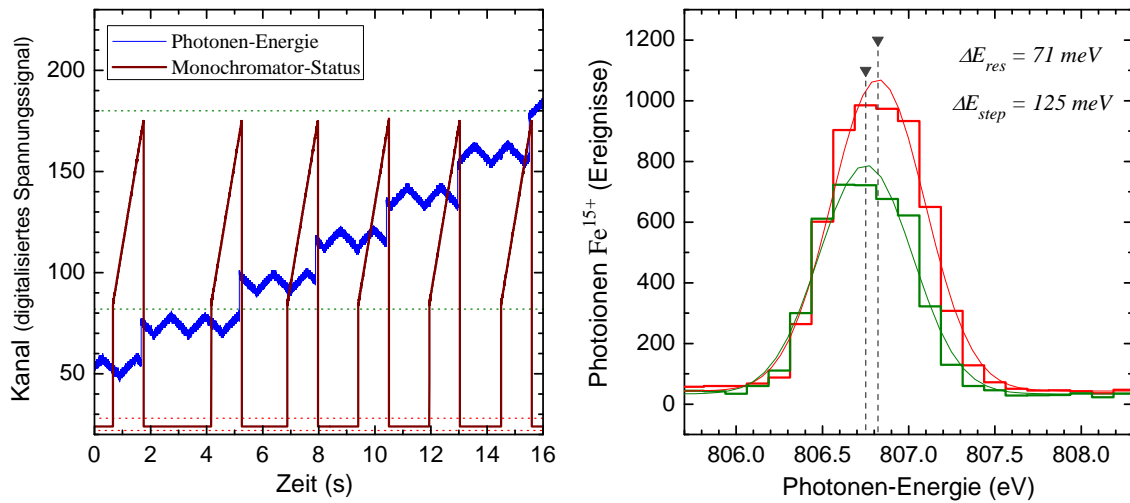


Abbildung 4.37: (links) Zeitlicher Verlauf des Spannungssignals, welches proportional zur eingestellten Photonen-Energie des Monochromators ist (blau) und ein generiertes Signal (braun), welches den Status des Monochromators meldet (Umstellphase vs. Photonen-Energie konstant). Ereignisse im roten (Funktionswert *tief*) und grünen (Funktionswert *hoch*) Bereich können getrennt ausgewertet werden. (rechts) Die getrennte Auswertung zeigt die zu erwartende Verschiebung. Zusätzlich erkennt man (links), dass die Dauer der Umstellphase einzelner Schritte variiert.

unterdrücken. Das ansteigende Signal in der Phase konstanter Photonen-Energie (Funktionswert *hoch*: grüner Bereich) lässt für vertiefende Untersuchungen eine weitere zeitliche Aufteilung dieser Phase zu. Der Wert der Photonen-Energie (blau) wird von dem stufenweise erhöhten, proportionalen Spannungssignal angezeigt. Der Funktionswert *hoch* scheint mit dem anschließenden (noch überlappenden) Anstieg dieses Spannungssignals korreliert, was eventuell darauf hindeutet, dass dieses Signal am Ende der Phase konstanter Photonen-Energie erhöht wird. Selbst wenn keine eindeutige Zuordnung in Umstellphase und konstante Phase möglich ist, eine Trennung kann auf jeden Fall vorgenommen werden. Die Ereignisse des roten und grünen Bereichs, dargestellt in Abbildung 4.37 (rechts), zeigen die zu erwartende Verschiebung.

Betrachtet man, ohne eine Trennung vorzunehmen, die Verschiebung der Resonanzenergie in Abhängigkeit der Schrittweite, so ergibt sich ein anderes Bild. Abbildung 4.38 zeigt die anhand der $2s5p$ -Resonanz im Fallen von Ar^{8+} (links) und der $2p_{1/2}3d_{3/2}$ -Resonanz im Falle von Fe^{14+} , welche am häufigsten und bei verschiedensten Schrittweiten vermessen wurde. Für dieses unerwartete Ergebnis kämen mehrere Ursachen in Frage:

Falscher Trigger: Eine sehr plausible Erklärung wäre, dass das Spannungssignal nicht beim Erreichen der nächsten Photonen-Energie inkrementiert wurde, sondern am Beginn der Umstellphase. Analyse des Verlaufs des Spannungssignals, Aufzeichnungen (Laborbuch), und Angaben der Beamline-Betreuer sprechen allerdings dagegen.

Monochromator-Undulator Abstimmung: Während der Umstellphase werden Monochromator und Undulator auf den nächsten Wert eingestellt. Dabei laufen sie außer Phase, was den Photonenfluss reduziert, speziell im Fall großer Schrittweiten. Dieser Effekt kann die Verschiebung aber nur abschwächen und nicht umkehren.

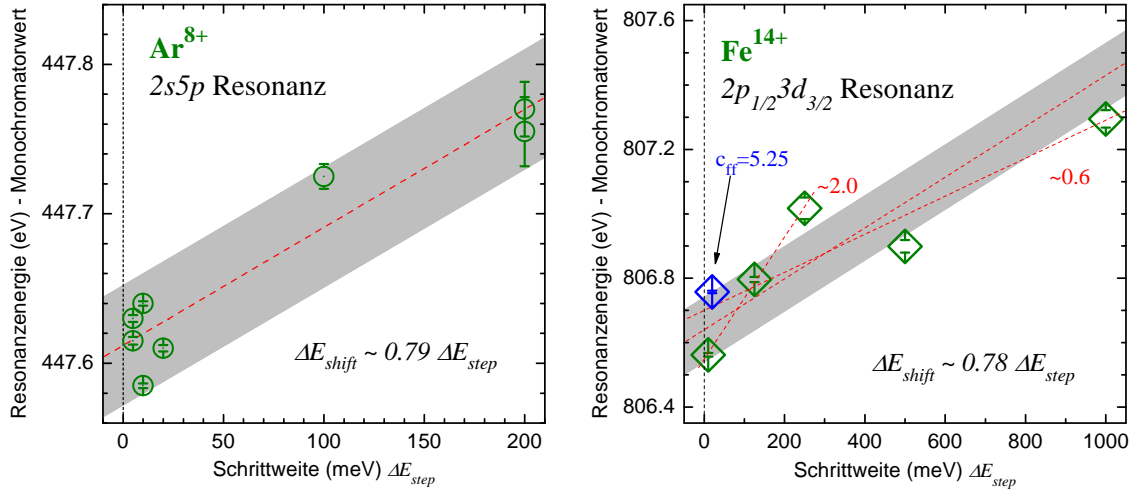


Abbildung 4.38: Ermittelte Resonanzenergie gegenüber der Schrittweite des Scans für die $2s5p$ -Resonanz von Ar^{8+} (links) und die $2p_{1/2}3d_{3/2}$ -Resonanz von Fe^{14+} (rechts). Eine überraschende Verschiebung zu höheren Photonen-Energien für größere Schrittweiten ist in beiden Fällen zu sehen. Die rote Linie ist ein linearer Fit an die Datenpunkte. Für Ar^{8+} wurden maximale Schrittweiten von 200 meV verwendet und alle Werte liegen innerhalb ± 40 meV um diesen Fit (graue Bereich). Für Fe^{14+} gibt es auch Scans mit Schrittweite 1000 meV und für den Scan mit höchster Auflösung wurde die *Fix-Fokus Konstante* umgestellt $c_{ff}=5.25$ (Standardwert: $c_{ff}=2.25$). Ein linearer Fits verwendet alle Datenpunkte und einer nur jene im Bereich bis Schrittweite 200 meV und ohne den Scan mit $c_{ff}=5.25$. Der graue Bereich verwendet die gleiche Steigung von 0.79, wie bei Ar^{8+} .

Ionen-Speicherzeit: Wenn erzeugte Photoionen im Mittel erst nach einer Zeit die Falle verlassen, die mit der Zeitdauer für einen Monochromatorschritt $t_{meas} + t_{move}(\Delta E_{step})$ vergleichbar ist, würde dies zu einer Verschiebung zu höheren Werten beitragen.

In Anbetracht der in Abschnitt 5.5.1 *”Absolute Wirkungsquerschnitte”* ermittelten Photoionen-Speicherzeit τ (rekombinationsbedingte mittlere Lebensdauer in der Falle) von rund 5 s hinkt das Maximum des Ioneninventars dem der Produktionsrate hinter her. Während letztere proportional zum Wirkungsquerschnitt ist, hängt die Rate der extrahierten Ionen vom Ioneninventar ab. Bei schnelleren Änderungen der Photonen-Energie pro Zeiteinheit sind dementsprechend größere Verschiebungen der Maxima zu erwarten.

Unabhängig von der Ursache liegt der experimentelle Befund der schrittweitenabhängigen Verschiebung vor und dieser wurde entsprechend den Fitergebnissen in Tabelle 4.13 in der Kalibrierung berücksichtigt

$$\Delta E_{shift} = s \cdot \Delta E_{step} , \quad (4.34)$$

wobei s die Steigung des linearen Fit ist. Bei Scans mit kleiner Schrittweite liegt in der Verschiebung eine deutlich geringe Unsicherheit, als in der Monochromatorkalibrierung (≈ 100 meV). Zu jeder Resonanz wurde die Messung mit der kleinsten Schrittweite zur Kalibrierung herangezogen. Messungen mit mehreren Resonanzen haben meist größere Schrittweiten und wurden anhand von jenen einzelner Resonanzen kalibriert. Da für andere Resonanzen nicht mehrere Messungen mit verschiedenen Schrittweiten zur Verfügung stehen, welche die Extrapolation gegen Schrittweite Null erlaubt, wird in diesen Fällen die

Tabelle 4.12: Nominelle Resonanzenergien (Monochromator-Wert) der $2s5p$ -Resonanz von Ar^{8+} und der $2p_{1/2}3d_{3/2}$ -Resonanz von Fe^{14+} bei verschiedenen Schrittweiten ΔE_{step} .

Ion	ΔE_{step} (meV)	E_{mono} (eV)	ΔE_{stat} (meV)
Fe^{14+}	1000	807.295	27
	500	806.899	19
	250	807.017	37
	125	806.796	8.2
	$(c_{ff}=5.25)$ 20	806.757	3.8
	10	806.562	2.2
	Ar^{8+}	200	447.770
200		447.755	23
100		447.725	8.3
20		447.610	2.1
10		447.640	1.5
10		447.585	1.6
5		447.630	2.3
5		447.615	2.6

Tabelle 4.13: Ergebnisse der linearen Fits and die nominellen Resonanzenergien der $2s5p$ -Resonanz von Ar^{8+} und der $2p_{1/2}3d_{3/2}$ -Resonanz von Fe^{14+} bei verschiedenen Schrittweiten.

Ion	Datenpunkte	E_{mono}^0 (eV)	$\mathcal{F}_{E_{mono}^0}$ (meV)	s (eV/eV)	\mathcal{F}_s
Fe^{14+}	ohne $c_{ff}=5.25$	806.598	± 5	0.78	± 0.02
Ar^{8+}	alle	447.612	± 11	0.79	± 0.11

Korrektur aus dem hier bestimmten Faktor verwendet. Da einzelne Messungen Streuungen im Bereich von ≈ 80 meV aufweisen, wie ebenfalls aus Abbildung 4.38 hervorgeht, sollte diese Schwankungen als Reproduzierbarkeit in die Fehlerbilanz aufgenommen werden

4.6.4.4 Photonen zweiter Ordnung

Bei der Auswertung der Messungen an Fe^{14+} fiel auf, dass zu starken LM -Resonanzen im Energiebereich von 800 bis 1000 eV bei den halben Photonen-Energien schwache Resonanzen gefunden werden konnten. Diese wurden von Photonen der *sechten Harmonischen* des Undulators verursacht, welche bei Messungen unter Nutzung der dritten Harmonischen den Monochromator in zweiter Ordnung passieren können. Mit diesen Resonanzlagen kann die Kalibrierung überprüft bzw. verbessert werden.

Die zusätzlichen Bedingungen, dass Resonanzen erster Ordnung möglichst genau bei der halben Photonen-Energie der Resonanzen zweiter Ordnung als Konterpart haben sollen,

4.6. Messung

Tabelle 4.14: Zusammenstellung der Zahlenwerte im Zusammenhang mit Kalibrierung und Fehlerabschätzung. E_{mono} ist die unkorrigierte und unkalibrierte nominelle Photonen-Energie des Monochromators, $+s \cdot E_{step}$ enthält die schrittweitenabhängige Verschiebung, $E_{N_2,Ne}$ ist die kalibrierte Energie E_{tat} gemäß (4.33) mittels Gaszellen-Absorption alleine und $E_{2.Ordnung}$ unter Mitberücksichtigung der Bedingungen durch Photonen zweiter Ordnung.

Resonanz (Ordnung)	E_{mono}	$+s \cdot E_{step}$	Bedingung	$E_{N_2,Ne}$	$E_{2.Ordnung}$
$2s_{1/2}3p_{3/2}$ (2.)	436.91	436.89	A	437.01	436.99
N_2	401		+82 meV		401.07
$2p_{3/2}4d_{5/2}$ (2.)	482.12	482.04	B	482.21	482.20
$2p_{1/2}4d_{3/2}$ (2.)	487.80	487.72	C	487.90	487.88
Ne	868		+580 meV		868.59
$2s_{1/2}3p_{3/2}$ (1.)	873.51	873.47	$2 \times A$	874.06	874.07
$2p_{3/2}4d_{5/2}$ (1.)	963.64	963.62	$2 \times B$	964.30	964.31
$2p_{1/2}4d_{3/2}$ (1.)	975.08	975.06	$2 \times C$	975.75	975.76
aus Gleichung (4.33)			Steigung a	$1.066 \frac{meV}{eV}$	$1.116 \frac{meV}{eV}$
			Verschiebung b	-0.346 eV	-0.382 eV

können in eine lineare Regression eingebunden werden (siehe Anhang, Seite 147). Tabelle 4.14 fasst das Ergebnis dieser Prozedur zusammen und vergleicht mit dem Ergebnis, das nur auf den beiden Kalibrierungspunkten beruht. Die nominelle (Monochromator) Photonen-Energie muss zunächst um die schrittweitenabhängige Verschiebung korrigiert werden. Die verbesserte Kalibrierung ($E_{2.Ordnung}$) unterscheidet sich effektiv nicht von jener, die nur auf den Absorptionmessungen ($E_{N_2,Ne}$) beruht (± 15 meV im Bereich von 400 bis 1000 eV). Daher war es nicht notwendig die Ergebnisse auf die verbesserte Kalibrierung umzurechnen. Mit diese Überprüfung sind die Bereiche jenseits und zwischen der Kalibrierungspunkten gut abgesichert. Außerdem könnten aus solchen Messungen wertvolle Informationen über die Beimengung höherer Ordnungen im Spektrum der Undulatorstrahlung extrahiert werden, welche im Allgemeinen nicht genau bekannt sind. Für die Bestimmung absoluter Wirkungsquerschnitte könnten mit der hier vorgestellten Methode bald Genauigkeiten erreicht werden, wo diese Beimengungen eine Rolle spielen.

4.6.4.5 Fehlerabschätzung für angegebene Photonen-Energien

In den vorangegangenen Abschnitten wurde ausgeführt, welche Korrekturen notwendig sind, um von der nominellen Photonen-Energie (Monochromator Wert E_{mono}) auf die tatsächliche zu kommen (E_{tat}). Die Beiträge (4.33) und (4.34) zu der gesamten Verschiebung ΔE_{ges} können aus in einer Gleichung zusammengefasst werden

$$\Delta E_{ges} = E_{mono} - E_{tat} = \Delta E_{calib} + \Delta E_{shift} = a \cdot E_{mono} + b + s \cdot \Delta E_{step} , \quad (4.35)$$

Die Fehlerangaben \mathcal{F} der vermessenen Resonanz- und Schwellenergien enthalten neben den Unsicherheiten dieser beiden Verschiebungen noch die Reproduzierbarkeit und den statistischen Fehler

$$(\mathcal{F}_E)^2 = (\mathcal{F}_{\Delta E_{\text{calib}}})^2 + (\mathcal{F}_s \cdot \Delta E_{\text{step}})^2 + (\mathcal{F}_{\text{Reprod.}})^2 + (\mathcal{F}_{\text{stat.}})^2, \quad (4.36)$$

Eine Abschätzung für die Reproduzierbarkeit kann aus Abbildung 4.38 gewonnen werden und liegt bei rund 80 meV (Kampagne 2009, U49/2-PGM1). Die Unsicherheit in der schrittweitenabhängigen Verschiebung ergibt sich aus dem Produkt der Schrittweite ΔE_{step} mit der Unsicherheit der ermittelten Steigung s_{shift} . Aus den Fitprozeduren, welche in Abbildung 4.38 dargestellt und in Tabelle 4.12 bzw. 4.13 zusammengefasst sind, ergibt sich $\approx \pm 0.02\text{-}0.11 \cdot \Delta E_{\text{step}}$. Daher sollte dieser Fehler nicht wesentlich beitragen, vor allem im Falle genügend kleiner Schrittweiten. Wie im Abschnitt 4.6.4.3 "Schrittweitenabhängige Verschiebung" bereits erwähnt, wurden Scans mit größerer Schrittweite, welche typischerweise mehrere Resonanzen umspannen, auf solche mit kleiner Schrittweite einzelner Resonanzen bezogen. Die statistischen Fehler sind die Unsicherheiten in der Bestimmung der Resonanzenergie, wie sie sich durch die Fitprozeduren in Photoionisations-Spektren (Anzahl Ereignisse gegenüber Photonen-Energie) ergeben. Diese sollten nicht mit der Breite der Profile verwechselt werden. Sie liegen betragsmäßig meist über eine Größenordnung unter der Unsicherheit der Kalibrierung und der Reproduzierbarkeit und haben praktisch keinen Einfluss auf den Gesamtfehler. Nur im Falle der Untersuchung des Abstandes zweier Resonanzen, welche in erster Ordnung nicht von der Kalibrierung abhängt, ist dieser Fehler entscheidend.

Tabelle 4.15: Zusammenstellung der Zahlenwerte im Zusammenhang mit Kalibrierung und Fehlerabschätzung.

Beamline	U125/2-SGM	U49/2-PGM1	
Ion	N ³⁺	Ar ⁸⁺	Fe ¹⁴⁺
Photonen-Energie	≈ 70 eV	≈ 400 eV	≈ 800 eV
Kalibriergas	He (PhoBIS)	N ₂	Ne
$\Delta E_{\text{Kalibrierung}}$	≈ 90 meV	≈ 100 meV	≈ 600 meV
s	0.80	0.79	0.78
$\mathcal{F}_{\Delta E_{\text{Kal.}}}$	± 8 meV	± 100 meV	± 100 meV
\mathcal{F}_s	± 0.02	± 0.11	± 0.02
$\mathcal{F}_{\text{Reprod.}}$	–	≈ 60 meV	≈ 80 meV

Die Fehlerbalken in den Photoionisations-Spektren basieren auf Zählstatistik. Da das Signal der Photoionen $q + 1$ auf das Signal anderer Ionen (im Optimal das Target-Ion q) bezogen werden, was zum Ausgleich von auftretenden Schwankungen der Gesamtrate an extrahierten Ionen erforderlich ist, ergibt sich folgender Zusammenhang

$$\frac{N_{q+1}}{N_q} \Rightarrow \mathcal{F} \left(\frac{N_{q+1}}{N_q} \right) = \frac{N_{q+1}}{N_q} \sqrt{\frac{1}{N_{q+1}} + \frac{1}{N_q}}, \quad (4.37)$$

wobei die statistische Unsicherheit der einzelnen Zählraten durch $\mathcal{F}(N) = \sqrt{N}$ gegeben ist. In den Spektren wurden nicht die angeführte Verhältnis dargestellt, sondern bezogene Werte, welche entweder absolute Wirkungsquerschnitte angeben oder die Zählstatistik der interessierenden Photoionen widerspiegeln

$$\tilde{N}_{q+1}(h\nu_i) = \frac{N_{q+1}(h\nu_i)}{N_q(h\nu_i)} \cdot \left(\sum_j N_{q+1}(h\nu_j) / \sum_j \frac{N_{q+1}(h\nu_j)}{N_q(h\nu_j)} \right), \quad (4.38)$$

wobei der Index (i bzw. j) die Schritte im Scan durchnummeriert. Meist gilt $N_q \gg N_{q+1}$, wodurch sich in erster Näherung ergibt: $\mathcal{F}(\tilde{N}_{q+1}) = \sqrt{N_{q+1}}$.

In Tabelle 4.15 sind die Verschiebungen und die Unsicherheiten im Überblick angegeben.

4.7 Datenanalyse

Eine Abhandlung der Methoden zur Auswertung der aufgenommenen Daten bildet den Abschluss des Kapitels *Experiment*. In fast allen durchgeführten Messungen ist das Ziel die Ermittlung von Resonanz- bzw. Schwellwertlagen bezüglich der Photonen-Energie. Hier wird ausschließlich dieser Fall berücksichtigt während die Analyse der Daten zur Bestimmung eines absoluten Wirkungsquerschnitts zusammen mit der entsprechenden Messung behandelt wird.

4.7.1 Normierung auf den Photonenfluss

Der Photonenfluss hängt von der Photonen-Energie und von der Einstellung des Austrittspalts ab (siehe Abbildung 4.10 bzw. 4.11). Für feste Photonen-Energie und Spalteinstellung ist er direkt proportional zum Ringstrom I_{ring} . Die Berücksichtigung des Photonenflusses spielt vor allem eine Rolle für Scans die sich über einen größeren Bereich erstrecken. Hier kommt sowohl die Änderung mit der Photonen-Energie als auch die längere Zeitdauer zum Tragen, in welcher der Ringstrom deutlicher abfallen kann. Da es Bereiche gibt, in denen sich der Photonenfluss abrupt ändert, kann dort auch bei Scans über kurze Bereiche die Normierung nicht vernachlässigt werden. Auf jeden Fall reicht in all diesen Fällen die Messung einer Größe die zum Photonenfluss proportional ist (I_{mirr} , I_{grid}), um relative Verzerrungen auszugleichen. Gesondert zu behandeln ist die Bestimmung absoluter Wirkungsquerschnitte, weil hier eine quantitative Messungen des Photonenflusses erforderlich ist.

Die formal korrekte Vorgehensweise wäre es, jeden in jedem Scan jeden Datenpunkt einzeln auf den Photonenfluss zu normieren und anschließend die normierten Scans zu einer gesamten Messung aufzusummieren. Für das Ergebnis macht es praktisch keinen großen Unterschied, wenn die Signalwerte zunächst bei jeder Photonen-Energie aufsummiert und erst dann normiert werden

$$PI_{signal}(h\nu) \propto \sum_i \frac{N_{q+1}^i(h\nu)}{I_{mirr}^i(h\nu)} \approx \frac{\sum_i \frac{N_{q+1}^i(h\nu)}{N_q} }{\sum_i I_{mirr}^i(h\nu)} . \quad (4.39)$$

Hier stehen i für die Scannummer und N_{q+1} bzw. N_q für die Anzahl der detektierten Photoionen bzw. Target-Ionen. Die Bestimmung des letzteren Terms in (4.39) war deutlich einfacher zu realisieren (in der separaten Datenaufnahme von BESSY II liegt der Term $\sum_i I_{mirr}^i(h\nu)$ direkt vor). Die nachfolgende Beschreibung widmet sich den Wegen um $\sum_i N_{q+1}^i/N_q(h\nu)$ zu ermitteln.

4.7.2 Allgemeines zur Auswertung

Bei konstanter Einstellung des Wien-Filter werden durch die Auswahl von Bereichen auf der Detektorfläche des PSD Bedingungen geschaffen, welche Ereignisse als Target-Ion, Photoion oder anders interpretieren. Abbildung 4.39 zeigt ein Beispiel für eine solche Auswahl anhand eines PSD-Bilds, das während der Messungen 2008 zur Photoionisation von

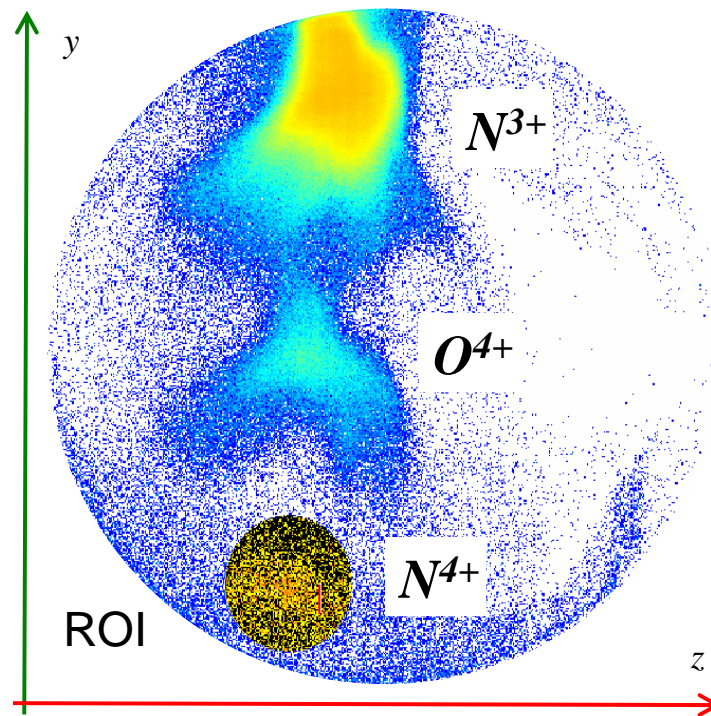


Abbildung 4.39: Bild des positionsempfindlichen Detektors bei einer Messung der Photoionisation von N^{3+} während der Kampagne 2008. Oben ist mit größter Zählrate das Target-Ion zu erkennen, in der Mitte Ionen mit $\frac{q}{m} = \frac{1}{4}$ (O^{4+}, C^{3+}, \dots) und unten ist der Bereich für Photoionen (N^{4+}) mit einer runden Region (engl.: *region of interest* - *ROI*) ausgewählt und invertiert dargestellt.

N^{3+} aufgenommen wurde. Da die Experimente bei sehr niedrigen Extraktionsenergien ausgeführt werden mussten verursachten unvorteilhafte Voraussetzungen (Streufeld des supraleitenden Magneten, wenig Platz: enger Ablenkradius) eine mäßige Extraktionseffizienz und Qualität der Ionenstrahl-Form am PSD. Daher hatte die Auswahl der Bereiche deutlichen Einfluss auf das Ergebnis der Auswertung.

Die Photonen-Energie wird zwar in Schritten gescannt, vom Monochromator erhält das Datenaufnahme-System jedoch ein Analogsignal, das auf 2048 Kanäle digitalisiert wird. Bezüglich dieses Parameters müssen die Daten auf die Anzahl der Monochromatorschritte *gebinnt* werden.

4.7.3 Vorläufige Auswertung

Vor Beginn der Messung wurden Bedingungen für die Auftrefforte gesetzt, wodurch das getrennte Zählen der Target-Ionen und Photoionen möglich war. Am Ende eines Scans bzw. am Ende einer vollständigen Messung konnten die getrennten Ionenereignisse, die in Form von Histogrammen gegenüber der Photonen-Energie (in Kanälen, nicht in Schritten) vorlagen, exportiert werden. Binning und Umrechnung auf Photonen-Energie wurden von einem LabView-Programm übernommen. Die gebinneten Daten für Target-Ionen und Photoionen wurden in Origin eingelesen und dividiert.

Die Anfangs gesetzten Bedingungen für die Auftrefforte konnten während einer Messung allerdings nicht mehr verändert bzw. angepasst werden. Eine Trennung nach Scans war nicht möglich. Wenn die Daten nicht nach dem letzten Scan einer Messung exportiert wurden, dann enthält die vorläufige Analyse nicht die volle Information der aufgenommenen Daten. Diese Gründe machen in praktisch allen Fällen eine nachträgliche genauere Auswertung erforderlich.

4.7.4 MPANT-Replay: Nachträgliche Analyse der Ereignislisten

Die Auswahl des Auftrefforts für bestimmte Ionen am PSD hat einen deutlichen Einfluss auf das Ergebnis. Die Software MPANT bietet sehr flexible Möglichkeiten, um Bereiche auszuwählen. Mit den gespeicherten Ereignislisten kann die Messung virtuell wiederholt werden. Weitere Parameter und verbesserte Bedingungen können dabei getestet werden (z.B. Monochromator Status). Da die Ereignisliste auch stückweise abgearbeitet werden kann, ist im Prinzip auch eine Trennung der Messung in die einzelnen Scans der Photonen-Energie möglich. Eine vollständige Automatisierung konnte allerdings nicht erreicht werden, was angesichts der Datenmenge aber sinnvoll wäre. Der Durchlaufdauer einer Ereignisliste hängt von den involvierten Zählraten ab und ist häufig nicht viel schneller, als die Messung selbst. Außerdem ließ die Stabilität des Programms vor allem bei komplex verknüpften Bedingungen einiges zu wünschen übrig.

4.7.5 Detaillierte Auswertung mit LabView-Programmen

Eine weitergehende Auswertung wurde mit LabView-Programmen von *Christian Beilmann* durchgeführt. Diese Programme sollen nicht nur die Daten des Photoionisations-Experiments, sondern Ereignislisten vom MPA-3 System im Allgemeinen bearbeiten können. Beim Versuch diese *eyerlegende Wollmilchsau* zu programmieren, erwies es sich am sinnvollsten eine Aufgabentrennung vorzunehmen, die in Einzelprogrammen mit den Bezeichnungen `cow`, `chicken` und `sheep` realisiert wurde:

cow wandelt die Ereignisliste (`*.lst`) der MPANT Software in ASCII-Listen um und nimmt gleichzeitig eine Trennung nach Scans und eine primäre Unterdrückung unbrauchbarer Ereignisse vor.

chicken vollführt ein binning der Detektorfläche in *Detektor-Superpixel* und der Photonen-Energie von Kanälen auf Monochromatorschritte. Damit reduziert sich die Datenmenge beträchtlich.

sheep erlaubt die Unterdrückung einzelner Scans und das flexible Zusammenfassen der Detektor-Superpixel, welche zusammen die Fläche für eine Ionensorte am PSD bilden (ROI).

Der entscheidendste Vorteil der hier genannten Programme ist, dass eine Trennung der Scans einer Messung in automatisierter Form erfolgen kann. Der Vergleich einzelner Scans hat sich als äußerst wichtig erwiesen, um über die Reproduzierbarkeit "echte" Photoionisations-Signale von "falschen" zu unterscheiden. Abbildung 4.40 ein Fallbespiel, wo die

4.7. Datenanalyse

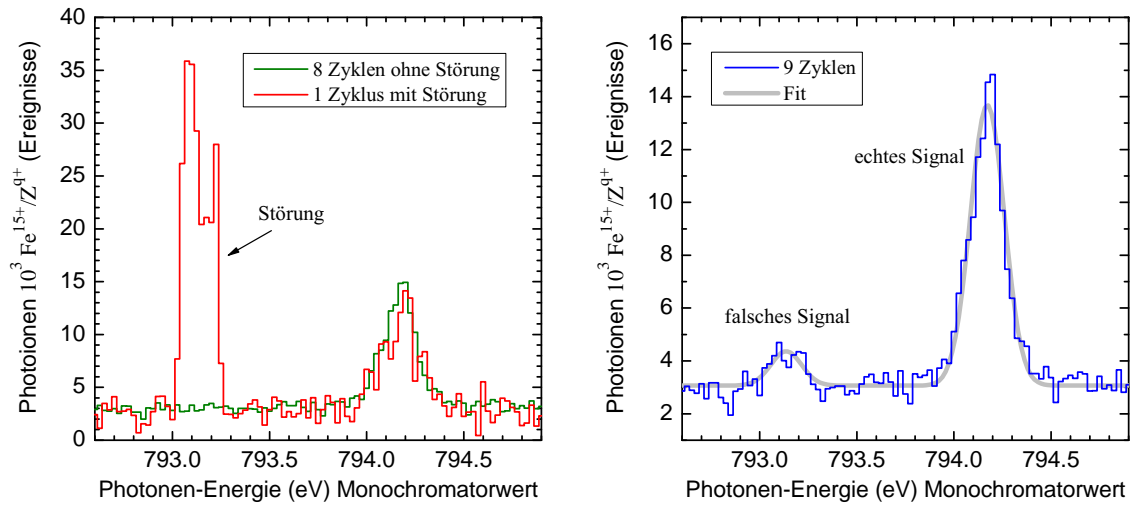


Abbildung 4.40: Störsignale können Artefakte erzeugen, die in den aufsummierten Scans Resonanzen vortäuschen. Durch Vergleich der einzelnen Scans einer Messung können diese von *echten* Signalen unterschieden werden (Reproduzierbarkeit). Gezählte Photoionen wurden auf einen Untergrund normiert und gegenüber der Photonenergie aufgetragen. In einem von neun Scans tritt ein deutliches Störsignal auf (links). Wird dieser Scan aus der gesamten Messung nicht entfernt, so kann die Störung im summierten Signal (rechts) aussehen wie eine Resonanz.

Datenauswertung ohne Scan-Trennung eine Resonanz vermuten lässt, die nicht existiert. Ein derartiges Störsignal stellt keines Falls den Regelfall dar. Man muss sich vor Augen führen, dass hier Ereignisse der Photoionen Fe^{15+} auf andere Ereignisse Z^q normiert wurden. Die Störung ist also keine momentane Ratenhöhung, sondern tatsächlich ein Signal, dass nur am gewählten Auftreffort der Photoionen am PSD vorhanden war. Komplette konstante Ionenraten, welche äußerst stabile Betriebsbedingungen der Elektronenstrahl-Ionenfalle widerspiegeln sind zwar wünschenswert, aber keines Falls Voraussetzung für ein Gelingen der Messung. Beispielsweise schwankte die Gesamtrate während des einer sehr sauberen aus 25 Scans bestehende Messung von Ar^{8+} (siehe Abbildung 5.5) um einen Faktor zwei. Da sich die Betriebsstabilität einer EBIT erfahrungsgemäß mit der Betriebsdauer verbessert, können in einem zukünftigen permanenten Setup vorteilhaftere Bedingungen erreicht werden. Spätestens dann sollte man die Datenaufnahme so zu gestalten, dass Schrittnummer und Scannummer (ohne anschließendes Binning bzw., Scan-Trennung zu erfordern) direkt miterfasst werden.

Kapitel 5

Ergebnisse und Diskussion

"Das ist wie wenn man mit einem Panzer zwei Weltkriege plant"

Dr. Sascha W. Epp, am 6. Dez. 2007

*über die bevorstehenden Kampagnen am FLASH (Hamburg) und BESSY II (Berlin)
innerhalb von fünf Monaten*

Die Resultate aus den beiden Kampagnen mit der FLASH-EBIT bei BESSY II werden in diesem Kapitel präsentiert und mit in der Literatur verfügbaren bzw. eigenen¹ theoretischen Vorhersagen verglichen und diskutiert. Sie dokumentieren die erste erfolgreiche Umsetzung dieses Typs von Photoionisations-Experimenten. Im Falle von N^{3+} ist auch der Vergleich mit experimentellen Werten der MB Methode möglich. Mit den Messungen der zweiten Kampagne wurde nicht nur im Hinblick auf die Methode, sondern auch bei den Resultaten experimentelles Neuland betreten.

Die erste Kampagne fand von April bis Juli 2008 an der Beamline U125/2-SGM (40 - 180 eV) statt, wobei Untersuchung der Photoionisation von N^{3+} in einem periodischen Messverfahren durchgeführt wurden (siehe Abschnitt 4.6.3.1 "*Zyklische Extraktion: niedrige Ladungszustände*"). Zusätzliche Messungen an neutralen Helium und Neon zeigten eine weitere Anwendungsmöglichkeit des experimentellen Aufbaus (siehe Abschnitt 4.6.4.2 "*PhoBIS-Modus*").

Die zweite Kampagne fand von Januar bis April 2009 an der Beamline U49/2-PGM1 (85 - 1600 eV) statt, wobei Untersuchungen an Ar^{8+} , Ar^{10+} , Ar^{12+} , sowie Fe^{12+} und Fe^{14+} durchgeführt wurden. Die umfangreichsten Daten liegen für die Systeme Ar^{8+} und Fe^{14+} vor. Beim letzteren konnte exzellentes Auflösungsvermögen gezeigt ($E/\Delta E=6500$ bei 800 eV) und ein Verfahren zur Bestimmung absoluter Wirkungsquerschnitte demonstriert werden. Des weiteren werden anhand dieser Daten Zuverlässigkeiten verschiedener theoretischer Vorhersagen geprüft. Ein wichtiges Ergebnis unserer Fe^{14+} Messungen war die Bestätigung von unerkannten systematischen Abweichungen in den mittels HULLAC berechneten Resonanzenergien, die zu unhaltbaren Modellen der Plasmawinde von aktiven galaktischen Kernen geführt hatten [23]. Verbesserte Rechnungen [24], die eine Korrektur dieser Modelle nahe legten, konnten mit Hilfe der Ergebnisse dieser Arbeit nun auch von

¹eigene im Sinn von "an unserem Institut" (MPI-K) von *Zoltan Harman* durchgeführt

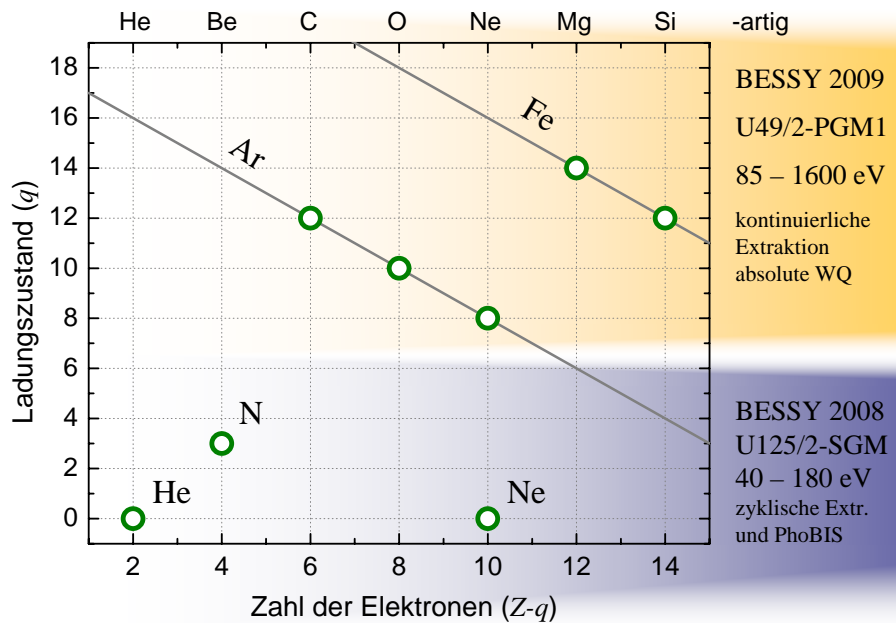


Abbildung 5.1: Ionen und Atome, welche im Rahmen dieser Arbeit in Hinblick auf Photoionisation vermessen wurden als Plot, der den Ladungszustand q gegenüber der Zahl der Elektronen ($Z - q$) des Ions dargestellt. Höhere Ladungszustände wurden 2009 bei höheren - N^{3+} und Atome 2008 bei niedrigeren Photonen-Energien vermessen. Diese Darstellung zeigt, dass vom Zwei-Elektronensystem (He-artig) bis zum 14-Elektronensystem (Si-artig) jedes geradzahlige System einmal untersucht wurde. Die einzige Überschneidung besteht beim Ne-artigen Systemen: Ne und Ar^{8+} .

experimenteller Seite bestätigt werden.

Diese wichtigsten Ergebnisse zur Photoionisation von Fe^{14+} wurden zur Veröffentlichung an *Physical Review Letters* geschickt und werden zur Zeit begutachtet (submitted [160]). Die Ergebnisse zur Photoionisation von N^{3+} werden vollständig zusammen mit dem Großteil der Resultate zur Photoionisation von Ar^{8+} im *Journal of Physics B: Atomic Molecular and Optical Physics* veröffentlicht [132]. Ergebnisse zur Photoionisation von Ar^{12+} und Fe^{12+} sowie teilweise N^{3+} und die PhoBIS Messungen mit He und Ne wurden im *Journal of Physics: Conference Series* im Anschluss an die *ICPEAC 2009* veröffentlicht [161].

5.1 Be-artige Stickstoff-Ionen: N^{3+}

Stickstoff ist das siebente Element im Periodensystem und liegt in natürlicher Form fast isotopenrein mit symmetrischem Kern vor (^{14}N : sieben Protonen und sieben Neutronen, nur 0.37% ^{15}N). Als eines der leichteren Elemente ist Stickstoff von astrophysikalischer Bedeutung, vor allem bei elementübergreifenden Studien, wie beispielsweise der *Nukleosynthese*. Untersuchungen, in denen ein Element oder Ion für den Rückschluss auf Größen wie Temperatur und Dichte astrophysikalischer Objekte benutzt wird, fokussieren sich meist auf einen der Nachbarn im Periodensystem, Kohlenstoff oder Sauerstoff, welche mit höheren Teilchenhäufigkeiten auftreten². Im Sonnensystem liegt die Teilchenhäufigkeit bei rund 0.1% [7; 8]. Von theoretischer Seite interessant an Be-artige Systemen wie N^{3+} ist, dass der Grundzustand (GS) aus der maximal erreichbaren Zahl von Einzelteilchen- s -Wellenfunktionen besteht: $1s^2 2s^2 \ ^1S_0$. Ein-Elektron Anregungen mit genügend Energie für anschließende Autoionisation liefern alle Anregungen eines $1s$ Elektrons. Diese benötigen zumindest 410 eV für den Übergang nach $1s 2s^2 2p$ und konnten daher an der Beamline U125/2-SGM nicht vermessen werden. Autoionisierende Zwei-Elektronen Anregungen in Konfigurationen der Form $1s^2 2pns$ hingegen sind schon in der Nähe des Ionisationspotentials möglich, haben jedoch geringere Wirkungsquerschnitte, als Ein-Elektronen Übergänge. Elektronenstöße bei der Erzeugung des Target-Ions N^{3+} führen außerdem auch zur Anregung in metastabile Zustände (MS) der Form $1s^2 2s 2p$. Wenn deren Abregung an einen Spinflip gebunden ist treten entsprechend lange Lebensdauern auf. Ausgehend von MS genügt ein Ein-Elektronen Übergang ($2s-np$), um einen doppelangeregten, autoionisierenden Zustand der Form $1s^2 2pnp$ zu erreichen.

²Bei der Kampagne 2008 waren zunächst Untersuchungen an O^{4+} geplant. Wegen eines Defekts am Gaseinlass (Turbopumpe) musste auf die Untersuchung von N^{3+} ausgewichen werden.

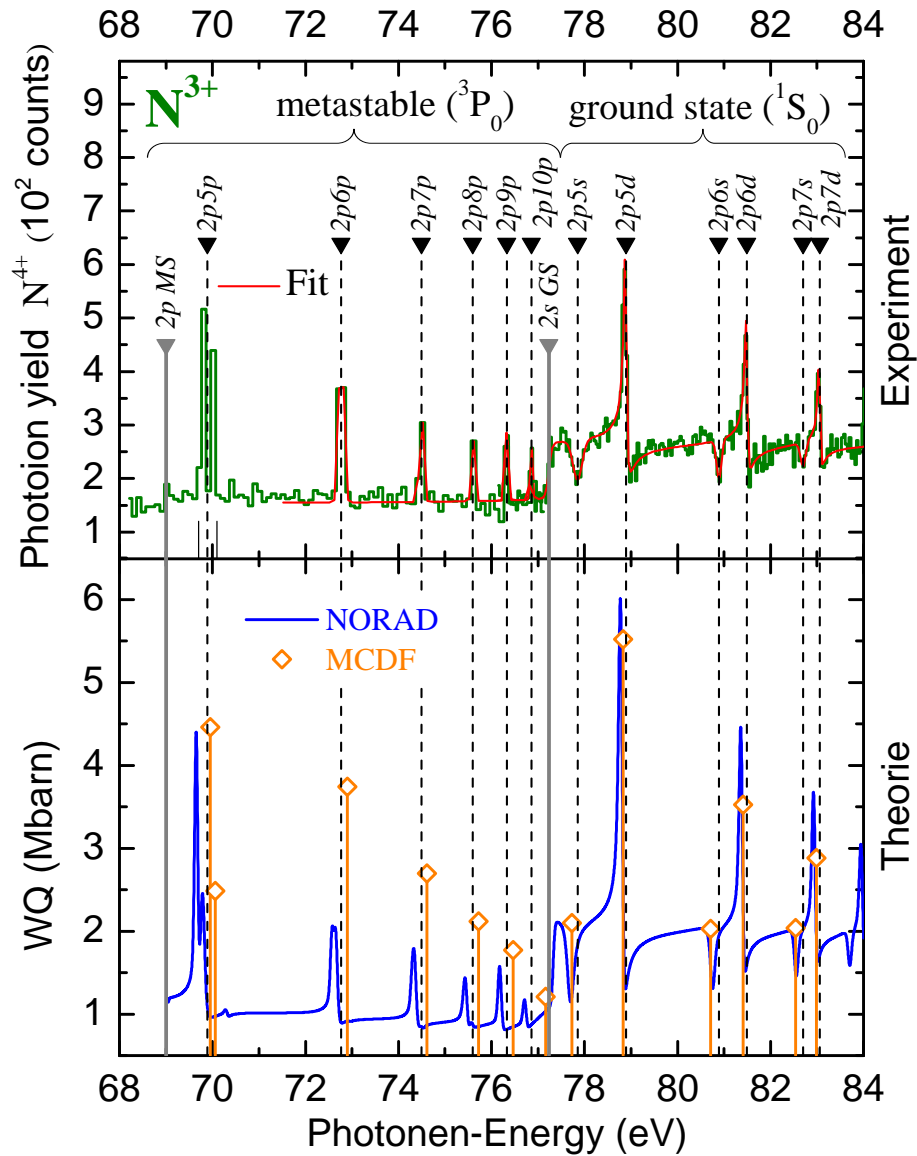


Abbildung 5.2: Übersichtsspektrum der Photoionisation von N^{3+} -Ionen im Bereich von 68 bis 84 eV. Der Bereich oberhalb des Ionisationspotentials des Grundzustandes (GS) $E_{IP}^{GSN^{3+}}$ von rund 77 eV wurde mit 40 meV Schrittweite gescannt. Unterhalb der Schwelle treten Resonanzen ausgehend vom metastabilen Zustand (MS) 3P_0 auf. Dieser Bereich wurde mit 100 meV Schrittweite gescannt. oben: Experiment (grün), Fitkurve (rot). unten: Vergleich mit theoretischen Vorhersagen von NORAD (blau) [81; 82] und eigenen MCDF-Werten von Zoltan Harman [71].

Abbildung 5.2 zeigt ein Übersichtsspektrum mit den wichtigsten Ergebnissen zur Photoionisation von N^{3+} . Oben sind experimentelle Werte in grün und eine Fitkurve in rot dargestellt. Mehrere einzelne Messungen wurden hier aufaddiert. Zwei Messungen mit einer Schrittweite von 100 meV im Bereich von 68 bis 84 eV sowie zwei weitere Messungen im Bereich von 76 bis 84 eV mit Schrittweite 40 meV. Im Überlappungsbereich sind nur die feineren Messungen gezeigt, wobei die Höhenskala so angepasst wurde, dass gleich hohe Schwellen und Resonanzen erscheinen, wie sie in den durchgehenden Scans zu sehen waren. Resonanzen gehören zu eingangs erwähnten Zwei-Elektronen Übergängen im Falle der GS-Ionisation und zu Ein-Elektron Übergängen bei MS. Die Identifikation der Resonanzen erfolgte durch Gegenüberstellung mit Vorhersagen sowie existierender MB Messungen (siehe Abbildung 5.3). Durch Fitprozeduren wurden die Resonanzenergien bestimmt. Dabei wurde bei den Schwellen (engl.: *edge - E*) eine Boltzmann-Kurve verwendet, für die asymmetrischen $2pnd$ -Resonanzen ein Fanoprofil (F) und eine Gaußskurve (G) für die restlichen Resonanzen. Fanoparameter um $q_F \approx -2.3 \pm 0.5$ wurden dabei ermittelt. Die Gaußfits der $2pns$ -Resonanzen haben negative Amplituden, was für sehr kleine Fanoparameter spricht ($q_F \approx 0$). Vertikale Linien mit zugehöriger Beschriftung kennzeichnen die ermittelten Resonanzenergien bzw. Schwellwerte. Diese Linien sind in den unteren Bereich der Abbildung fortgesetzt, wo sie den optischen Vergleich mit theoretischen Vorhersagen ermöglichen. R -Matrix-Rechnung von Nahar [81], welche auch die Asymmetrie der Profile angeben, sind als blaue Linie dargestellt. Diese Daten sind auch in der NORAD-Datenbank (*Nahar Ohio State University Radiative Atomic Database*) verfügbar [82]. Eigene MCDF Rechnungen, welche die Asymmetrie der Linienprofile nicht berücksichtigen, sind als orange Karos mit vertikaler Fluchtlinie eingezeichnet. Die vertikale Position gibt dabei die berechnete Resonanzstärke wieder, welche über eine Breite (FWHM) von 75 meV auf die Wirkungsquerschnitt-Skala konvertiert wurde (siehe Abschnitt 2.3.4 "*Wirkungsquerschnitte und Resonanzstärke*"). Die Anteile von GS und MS wurden bei NORAD mit 50:50 angenommen und bei MCDF mit 75:25 (GS:MS). In diesem Zusammenhang lohnt es, zunächst den Vergleich der experimentellen Ergebnisse der EBIT-Methode mit MB Messungen in Abbildung 5.3 zu begutachten [98].

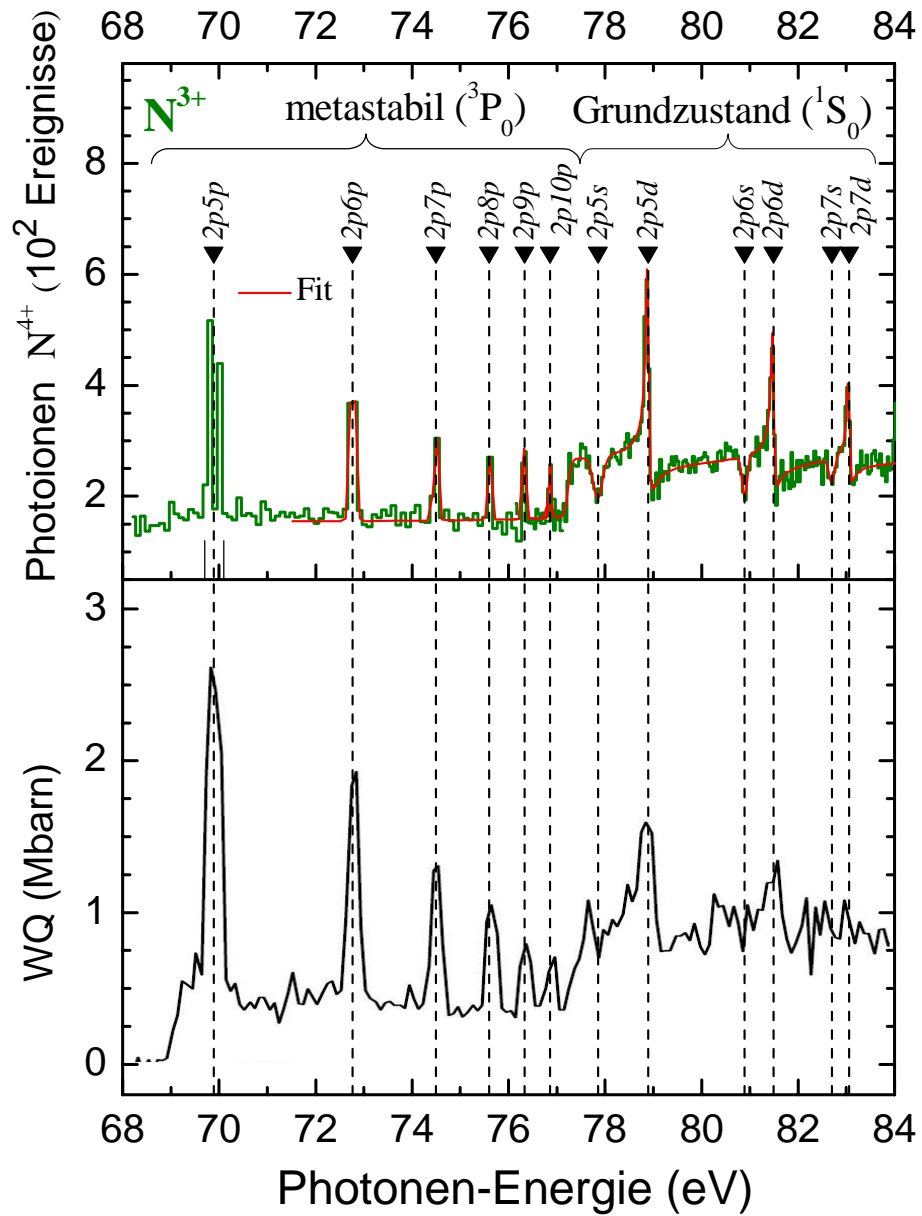


Abbildung 5.3: Oberer Teil der Abbildung identisch mit Abbildung 5.2. Unten wird mit Ergebnissen aus einer MB Messung verglichen [98]. Sehr gute Übereinstimmung der Resonanzlagen überzeugen von der Vertrauenswürdigkeit der neuen Methode. Interessante Unterschiede in den relativen Anteilen von N^{3+} -Ionen im Grundzustand (GS) und in metastabilen Zuständen (GS) können festgestellt werden.

Grundsätzlich wurde eine sehr gute Übereinstimmung mit dieser etablierten Methode gefunden. Im Vergleich zu den absolut gemessenen MB Resultaten wurde der existierende Untergrund bei Energien unter 69 eV nicht abgezogen (dessen Ursprung wurde im Abschnitt 4.1 "Aufbau des Photoionisation-Experiments" behandelt). An der Fläche unter den Resonanzkurven (weniger an den Resonanzhöhen) und vor allem am Höhenunterschied der GS und MS Ionisationsschwelle ist ersichtlich, dass der Anteil an MS im MB Experiment bei rund drei bis vierfachen Werten von jenen in der EBIT liegt.

Die Hauptursache ist mit Sicherheit in der periodischen Messmethode zu suchen (siehe Abschnitt 4.6.3.1 "Zyklische Extraktion: niedrige Ladungszustände"). Bei der MB Methode vergehen nur wenige Mikrosekunden, bis die Ionen vom Plasmavolumen der ECRIS zum Bereich der Photonen-Wechselwirkung gelangen, wodurch nur ein minimaler Bruchteil der N^{3+} -Ionen in metastabilen Zuständen zerfallen können. Beim periodischen Messvorgang mit der EBIT ist der Elektronenstrahl für eine Zeit von mehreren Sekunden ausgeschaltet und es kann keine weitere Anregung von GS Ionen erfolgen. Zusätzlich könnte die Population von MS in einer EBIT mit einem 6 T Magnetfeld prinzipiell niedriger sein als in einer ECRIS, was mit verstärkten *magnetic quenching* in Verbindung gebracht werden kann. Die neuen MCDF Rechnungen produzieren zwar noch keine asymmetrischen Linienprofilen, aber die relativen Stärken von GS und MS Resonanzen passen besser zu den experimentellen Befunden, als NORAD Werte.

Die rote Fitkurve in Abbildung 5.2 dehnt sich nicht bis zum Bereich der MS $2p5p$ -Resonanz aus, denn hier existiert eine Messung mit besserer Auflösung, welcher die LS -Aufspaltung dieser Linie deutlicher zeigt. Die Abbildung 5.4 (oben) zeigt diese Detailmessung mit Schrittweite 5 meV und einer Auflösung von 35 meV (FWHM). Darunter sind Ergebnisse einer MB Messung von Müller *et al.* [96] der selben Resonanzen gezeigt, die eine exzellente Auflösung von 3.3 meV erreicht hat und damit auch die Feinstruktur dieser Resonanz auflöst. Ob diese Auflösung auch mit der EBIT Methode erreicht werden kann bleibt noch zu zeigen. Bei der Kampagne in 2008 lag es vor allem am Zeitmangel und der damit verbunden Wahl der Austrittspalt-Größe von 250 μm , dass keine höhere Auflösung erreicht wurde. Gefangene Ionen können allerdings mittlere Temperaturen erreichen, bei denen die Dopplerverbreiterung eine Auflösung $>20\,000$ (wie bei [96]) verhindert. Dem kann beispielsweise evaporatives Kühlen entgegenwirken. Im Falle der kontinuierlichen Messmethode, welche für Ionen mit höherem Ionisationspotential angewandt wurde, werden die Ionen ständig gekühlt, weshalb kein prinzipieller Grund gegen ähnlich gute Auflösungen spricht³.

In Tabelle 5.1 sind alle Ergebnisse übersichtlich zusammengefasst und sowohl mit den experimentellen Befunden der MB Methode und den MCDF-Werten, als auch einigen weiteren Theorien verglichen. Bei der Identifikation durch Bizau *et al.* [98] dürfte im Falle der $2p5s$ -Resonanz eine irrtümliche Zuordnung zu dem Maximum zwischen Schwelle und der echten negativen Resonanz erfolgt sein, was die starke Verschiebung erklären würde (130 meV obwohl sonst typischerweise 10 bis 30 meV). Die Werte von NORAD, welche als Datenpunkte und nicht mittels Resonanzenergien und -stärken gegeben werden, wurden bereits in Abbildung 5.2 verglichen, weshalb sie hier nicht nochmals geführt sind. Die

³Die schnellen Ionen mit gut definierter kinetischen Energie der MB Methode bleiben in Hinsicht auf Dopplerverbreiterung klarerweise im Vorteil.

Tabelle 5.1: Vergleich experimenteller und theoretischer Energiewerte (eV) für Photoionisations-Resonanzen und Schwellwerte für N^{3+} ausgehend vom Grundzustand und von metastabilen Zuständen. Experimentelle Werte aus Fitprozeduren (E: Schwelle, F: Fano, G: Gauss) an Daten der vorliegenden Arbeit und von veröffentlichten MB Ergebnissen ([98], und fallweise [96]). Zum Vergleich mit theoretische Vorhersagen wurden am MPI-K MCDF Rechnungen durchgeführt. Weitere Theoriewerte stammen von TOPbase (TOP) [11; 182], NIST [183; 184] und von CATS [185; 186].

Übergang		Experiment diese Arbeit	MB, exp. Bizau <i>et al.</i>	MCDF <i>Harman</i>	TOP	NIST	CATS
$MS-2s \infty$	E	69.0(2)	69.13	68.85	68.97	–	69.48
$MS-2p 5p \ ^3D_1$	G	69.805(8)	69.818(3)*	69.95	69.655	69.810	70.106
$MS-2p 5p \ ^3P_1$	G	69.984(8)	70.000(3)*	70.06	69.909	70.001	70.328
$MS-2p 5p$	G	69.89(5)	69.85(5)	69.99	69.782	69.906	70.19
$MS-2p 6p$	G	72.77(5)	72.75(5)	72.90	72.670	72.790	73.10
$MS-2p 7p$	G	74.49(5)	74.45(5)	74.61	74.388	74.503	74.83
$MS-2p 8p$	G	75.60(5)	75.59(5)	75.72	75.492	75.621	75.93
$MS-2p 9p$	G	76.33(5)	76.31(5)	76.47	76.244	76.364	76.69
$MS-2p 10p$	G	76.86(5)	76.85(5)	77.17	76.778	78.881	77.22
$GS-2s \infty$	E	77.23(5)	–	77.18	77.47	–	75.92
$GS-2p 5s$	G	77.85(2)	77.72(5)	77.73	77.93	77.930	76.1
$GS-2p 5d$	F	78.89(2)	78.88(5)	78.83	78.40	78.912	77.0
$GS-2p 6s$	G	80.89(3)	–	80.71	80.81	–	79.3
$GS-2p 6d$	F	81.49(2)	81.49(5)	81.41	81.18	81.506	79.8
$GS-2p 7s$	G	82.70(5)	–	82.54	82.63	–	81.1
$GS-2p 7d$	F	83.06(3)	–	82.99	82.84	83.080	81.4

* Werte von Müller *et al.* [96]

Zusammenstellungen von NIST gibt Resonanzenergien an, aber keine Resonanzstärken. Die Werte von *TOPbase* (*The Opacity Project* Datenbank) [11; 182] weichen deutlicher von unseren Messungen ab (50 bis 100 meV) und sollten angesichts besserer vorhandener Werte [187; 82] nicht mehr verwendet werden. Die Ergebnisse von CATS [185] zeigen die größten Abweichungen, dafür muss angemerkt werden, dass diese Werte innerhalb von Sekunden für beliebige Ionen am Rechner des *Los Alamos National Laboratory* [186] für externe Nutzer erzeugt werden und daher Näherungen und Vereinfachungen vorausgesetzt werden können.

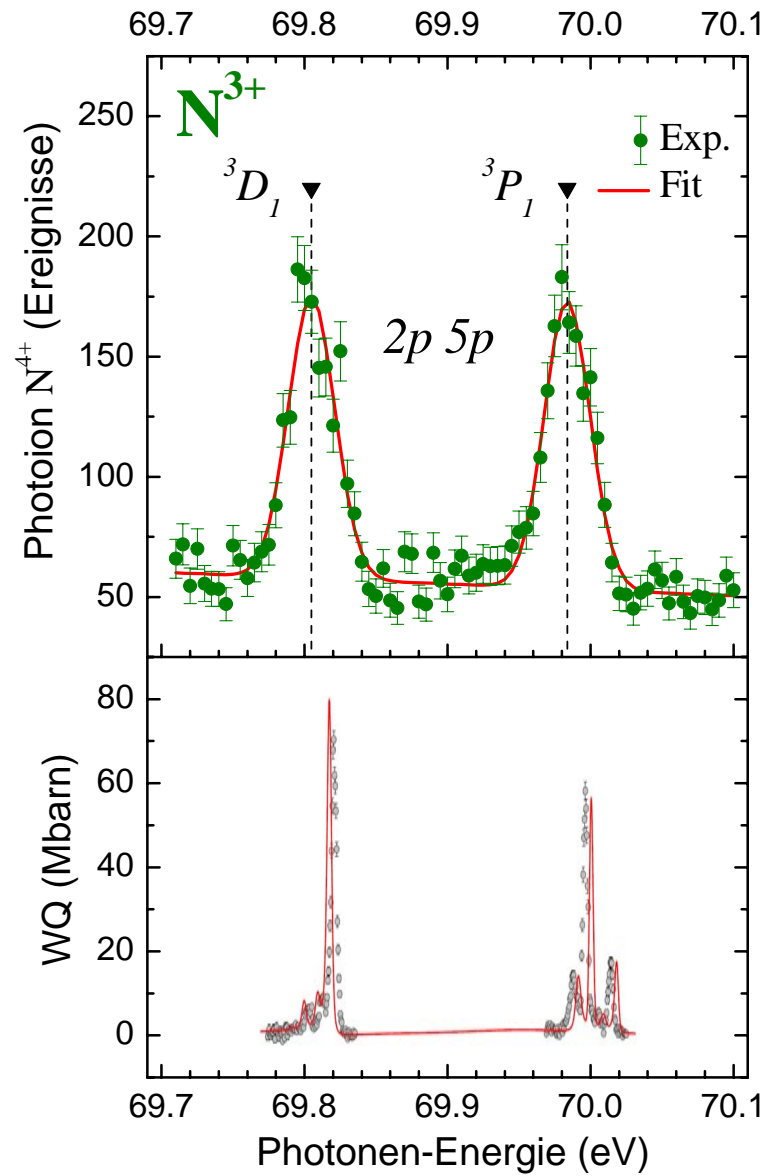


Abbildung 5.4: Detailspektrum im Bereich um 70 eV mit einer Schrittweite von 5 meV (oben) zeigt die LS -Aufspaltung der $2s2p-2p5p$ -Resonanz. Eine MB Messung von Müller *et al.* [96] erzielte eine bemerkenswerte Auflösung von 3.3 meV auf diesen Resonanzen, womit sogar die Feinstruktur sichtbar wird. Die Strukturen konnten mit genauen R -Matrix Rechnungen sehr gut reproduziert werden (rote Linie).

5.2 Ne-artige Argon-Ionen: Ar⁸⁺

"Numerous photoionization experiments have been performed on neutral argon . . . but photoionization cross sections have not been obtained for argon ions. This is a bit surprising considering the fact that the data are astrophysically important, the ions are easy to produce in an ion source, and calculations for the argon sequence have been performed long ago . . ."

*Henrik Kjeldsen
in his topical review [42]*

Wie Kjeldsen in seinem *Review* über Photoionisation von Ionen 2006 anmerkte [42] und wie auch aus Abbildung 1.3 hervorgeht gibt es für Argon-Ionen überraschender Weise kaum experimentelle Ergebnisse. Überraschend deshalb, weil an Resultaten von astrophysikalischer Seite durchaus Interesse besteht. Hohe Ströme von Argonionen können aus einer ECRIS extrahiert werden. Seit 2006 hat sich an dieser Situation mit einer Ausnahme (MB Photoionisations-Experiment mit Ar⁵⁺ durch Wang *et al.* [99]) nicht viel verändert.

Das Ne-artige System ist für das Photoionisations-Experiment mit einer EBIT besonders gut geeignet, weil durch die geschlossene Schale höhere Ionendichten erreicht werden können (siehe Tabelle 4.1). Im Grundzustand $1s^2 2s^2 2p^6$ liegen zwei geschlossene Schalen vor, weshalb Inner und Inter-Schalenkorrelationen auftreten. Dieses System lässt sich einfacher behandeln, als eines mit offenen Schalen. Jede Form der Anregung geht mit einer Besetzung der dritten (oder höheren) Schale einher, weshalb keine Übergänge aus dem GS unterhalb von ≈ 250 eV möglich sind. Da Übergänge der $1s$ Elektronen sogar über 3.2 keV benötigen, konnten diese Resonanzen an der U49/2-PGM1 nicht vermessen werden. Diese Energie reicht jedoch für einen Übergang des $2s$ Elektrons in einen gebundenen np Zustand, welcher anschließend ein weniger stark gebundenes $2p$ Elektron über einen Auger-Prozess ins Kontinuum befördert.

In Abbildung 5.5 ist ein Photoionisation Spektrum von Ar⁸⁺ im Bereich von 415 bis 495 eV dargestellt. Die $2p$ Ionisationskante bei rund 422 eV ist sehr gut definiert. Die Ursache des deutlichen Untergrunds ist teils in MS von Ar⁸⁺ und teils in N³⁺ Untergrund-Ionen (Restgas) zu suchen. Nur ein Bruchteil der N³⁺ landen in jenem Bereich am PSD, welcher den Ar⁹⁺ Ionen zugeordnet wurde, aber da diese mit hohen Raten extrahiert wurden entsteht ein wesentlicher Beitrag zum Untergrund. Trotzdem wurde eine Signalerhöhung von 20% erreicht. Eine genauere Auflösung der Schwelle ist schwierig, denn dazu muss der Austrittsspalt verkleinert werden, was zu einer Verringerung des Photonenfluss führt. Im Gegensatz zu resonanten Prozessen, wo das Verhältnis von Auflösung und Linienbreite eine Rolle spielt, skaliert die Signalrate beim direkten Prozess immer mit dem Photonenfluss⁴. Abbildung 5.7 (a) zeigt einen Scan der Schwelle mit erhöhter Auflösung, wo die Signalerhöhung nur noch 4% beträgt (fünffach bessere Auflösung - ein Fünftel des Photonenflusses).

Eine Rydberg Serie der $2s(2p^6)np$ -Resonanzen, welche für alle Ne-artigen Systeme gefunden werden kann, beginnt bei $n=5$ und ist eindeutig bis $n=9$ (und mit Vorsicht auch

⁴Genauere Bestimmungen der Schwellenenergie sollten mit engerer Schrittweite durchgeführt werden, nicht mit verringertem Austrittsspalt, wodurch gleichzeitig über die Dispersion eine Abschätzung der Größe der Ionen-Wolke möglich ist.

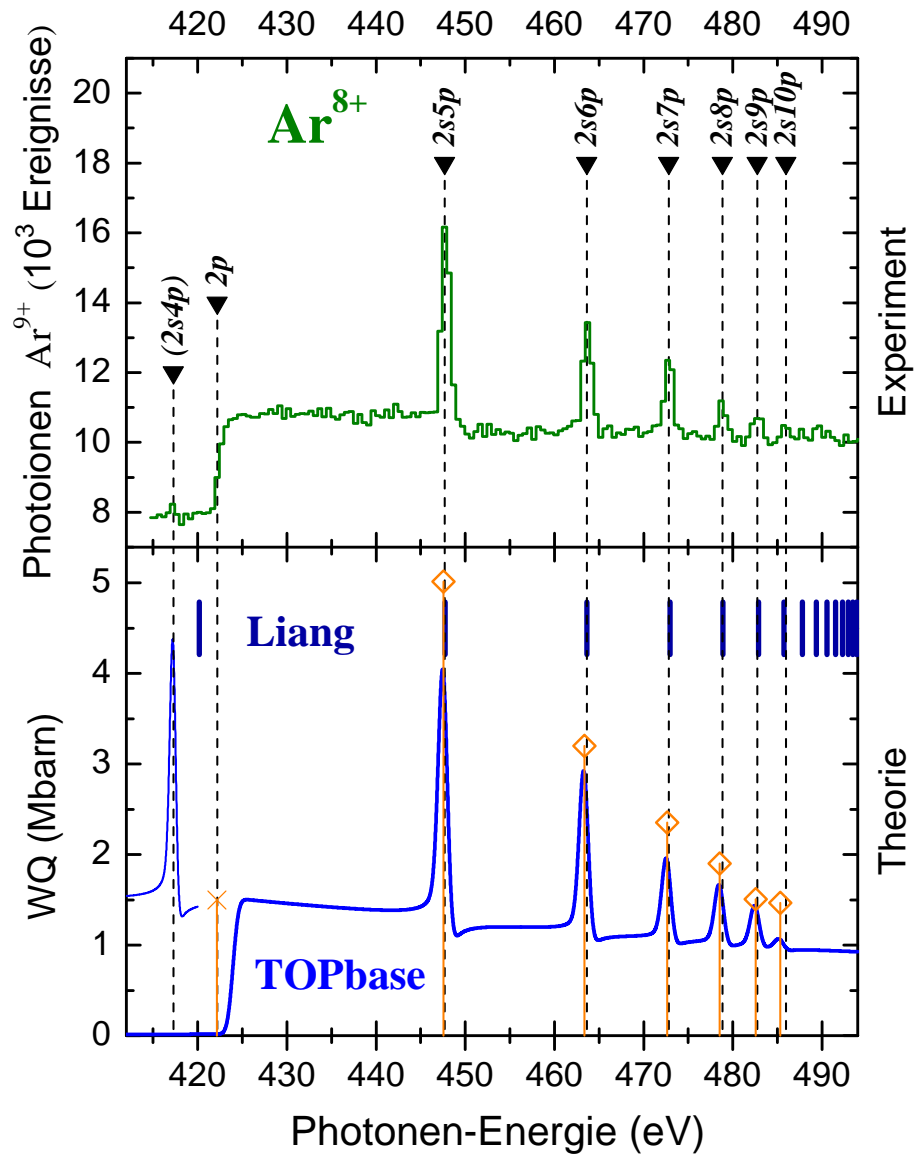


Abbildung 5.5: (oben) Photoionisation Spektrum von Ar^{8+} im Bereich von 415 bis 495 eV mit einer Schrittweite von 500 meV. Diese Übersicht zeigt die $2p$ Ionisationskante und eine Rydbergserie von Resonanzen, welche als $2snp$ (ab $n=5$) identifiziert wurde. (unten) Vergleich mit theoretischen Vorhersagen von TOPbase (blaue Linie), MCDF Rechnungen (orange Karos) und *Breit-Pauli R-Matrix* Rechnungen von Liang (blaue Marker).

bei $n=10$) zu erkennen. Photoionisations-Experimente, welche diese Serie untersuchten, existieren für die ersten drei Repräsentanten dieser isoelektronischen Sequenz (Ne , Na^+ , Mg^{2+}) und wurden gesammelt von Kennedy *et al.* veröffentlicht [188]. Die Rydbergserie beginnt bei diesen drei Systemen bereits bei $n=3$, wobei die erste Resonanz und die Ionisationskante mit zunehmenden Ladungszustand näher zusammenrücken. Für Si^{4+} entstand die interessante Frage, ob die Autoionisation bei $2s3p$ Anregung energetisch möglich ist, oder nicht. *Dual laser produced plasma* Experimente von Chakraborty *et al.* [189], welche Photoabsorption und nicht Photoionisation untersuchen, zeigten ein asymmetrisches Li-

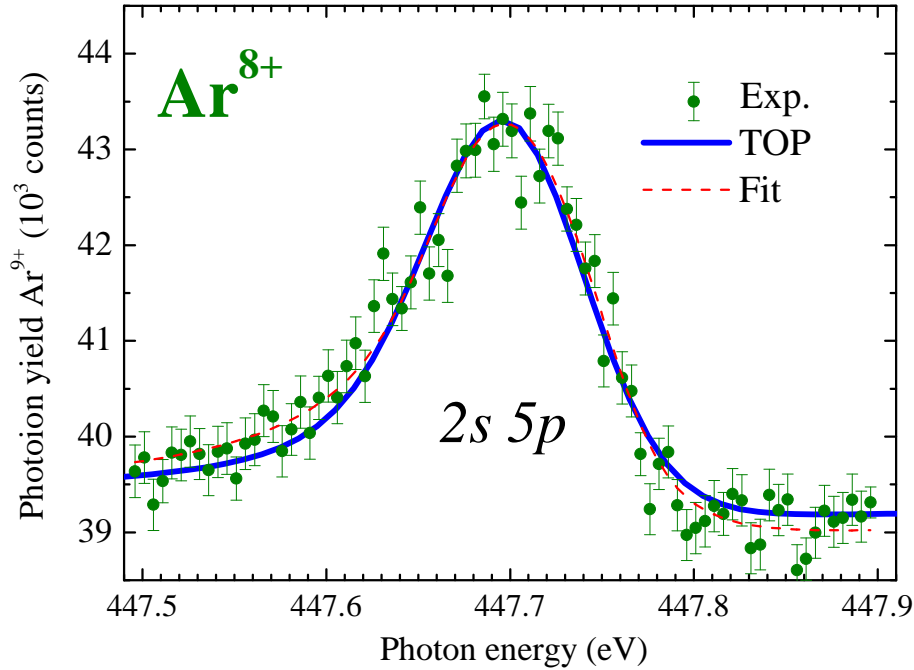


Abbildung 5.6: Messung der ersten Resonanz ($2s5p$) der Rydberg-Serie bei einer Schrittweite von $\Delta E_{step}=5$ meV und Austrittsspalt-Öffnung von $15\ \mu\text{m}$. Die experimentellen Daten (grüne Punkte) zeigen eine Asymmetrie. Die Theorie von TOPbase (blaue Linie) wurde um 145 meV verschoben und mit einem Gaussprofil mit 88 meV verbreitert. Fanoparameter (E_{res}, q_F, Γ_q) und experimentelle Breite wurden mittels Fit (rote gestrichelte Linie) eines experimentell verbreiterten Fanoprofils ermittelt. Werte siehe Text.

nienprofil für die $2s3p$ -Resonanz, was Interferenz mit direkter Photoionisation vermuten ließ. Allerdings können die Mikrofelder im dichten Plasma der *dual laser produced plasma* Methode zu einem effektiv reduzierten Ionisationspotential $E_{IP}^{Si^{4+}}$ führen. Außerdem streuen Vorhersagen für $E_{IP}^{Si^{4+}}$ verschiedener Theorien im eV-Bereich. Kürzlich veröffentlichte MB Untersuchungen von Bizau *et al.* [97] zeigten zweifelsfrei, dass diese Resonanz unterhalb des Ionisationspotentials liegt. Eine vergleichbare Situation liegt im Falle von Ar^{8+} für die $2s4p$ -Resonanz vor. Berechnungen für $E_{IP}^{Ar^{8+}}$ streuen um bis zu 3 eV (siehe Tabelle 5.2). TOPbase sagt widersprüchlicherweise ein asymmetrisches Linienprofil für die $2s4p$ -Resonanz vorher und gibt gleichzeitig die Resonanzenergie unterhalb des Ionisationspotentials an, weshalb keine Interferenz mit dem direkten Photoionisations-Prozess möglich ist.

Die ersten drei Resonanzenergien wurden aus Detailmessungen ermittelt, welche in Abbildung 5.6 bzw. Abbildung 5.7 (b) und (c) zu sehen sind. Dabei wurde im Falle von $2s5p$ ein Auflösungsvermögen (engl.: *resolving power*) von $E/\Delta E \approx 5000$ erreicht, welches ausreichte um die Asymmetrie der Linie sichtbar zu machen. Der Fit (rote gestrichelte Linie) simuliert ein experimentell verbreitertes Fanoprofil (siehe Anhang, Seite 146) und lieferte einen Wert für den Fanoparameter von $q_F=-6\pm 1$, sowie eine Fanobreite von $\Gamma_F=30\pm 5$ meV und eine experimentelle Breite von 88 meV (FWHM).

Die Energielagen der Ionisationskante und der Resonanzen können im unteren Bereich der Abbildung 5.5 mit drei theoretischen Vorhersagen verglichen werden (in Tabelle 5.2

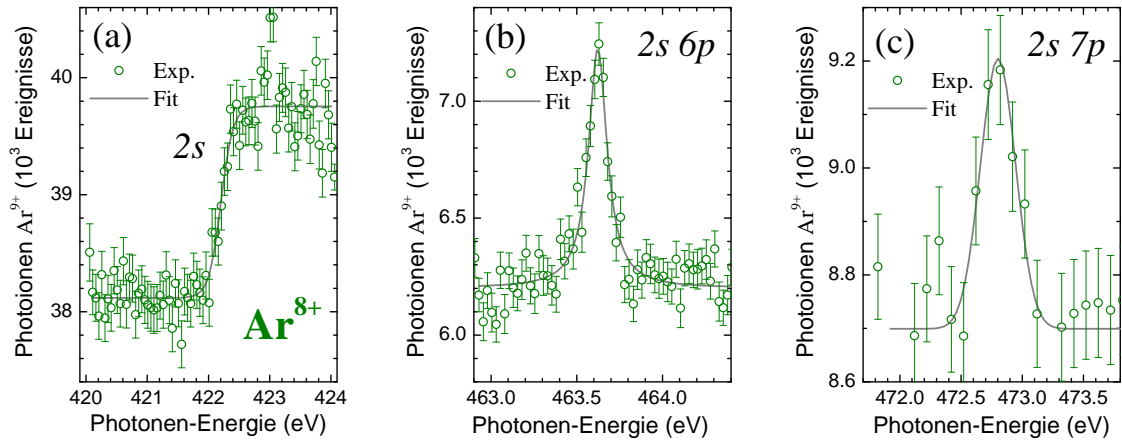


Abbildung 5.7: Detailspektren der $2s$ Ionisationskante sowie der $2s6p$ und $2s7p$ -Resonanz, aus denen die Werte mittels Fit (grau) ermittelt wurden.

sind weitere Theoriewerte gelistet). TOPbase gibt nicht Parameter an ($f_{PI}, E_{res}, q_F, \Gamma_q$) sondern tabellierte Werte ($\sigma_{PI}(h\nu)$) an, welche Resonanzlagen, -stärken (genaugenommen Wirkungsquerschnitte) und Asymmetrien der Profile implizit enthalten [11; 182]. Eigene MCDF Rechnungen, welche den direkten Prozess vernachlässigen, geben Resonanzlagen und -stärken an. Um einen Vergleich auf der Wirkungsquerschnitt-Skala von TOPbase zu ermöglichen, wurden die Resonanzstärken über eine angenommene Breite von 75 meV in Wirkungsquerschnitte (in Mbarn) umskaliert und ein Wert von 1 bis 1.5 Mbarn (abhängig von der Photonen-Energie) hinzu addiert, um dem direkten Prozess Rechnung zu tragen. Kürzlich erschienene Rechnungen von Liang *et al.* [190] geben Resonanzlagen bezogen auf die Ionisationskante (*relative* Resonanzenergien) ohne Resonanzstärken an und sind als blaue Marker eingezeichnet. Da nur relative Werte vorlagen wurden die Resonanzen verschoben, um die experimentellen Werte best möglich zu reproduzieren. Das Ionisationpotential liegt nach dieser Anpassung allerdings bei einem rund 2 eV zu tiefen Wert. In diesem Zusammenhang ist die ausgezeichnete Vorhersage des Ionisationspotentials durch die MCDF Rechnungen von Zoltan Harman hervorzuheben, die andere Theorien nur mit Abweichungen im eV-Bereich vorhersagen können.

Die Resultate der Untersuchungen an Ar^{8+} bilden auch die Grundlage der Diplomarbeit von Maria Schwarz. Dort werden unter anderem Resonanzen ausführlich diskutiert, die Targetionen in metastabilen Zuständen zugeordnet wurden. Ergebnisse dieser Auswertung wurden teilweise in dieser Arbeit übernommen.

Tabelle 5.2: Vergleich des experimentell bestimmten $2p$ Ionisationspotentials sowie der Resonanzenergien der $2snp$ Serie mit diversen theoretischen Vorhersagen für Ar^{8+} . Die experimentelle Seriengrenze wurde nicht gemessen, sondern extrapoliert. MCDF Rechnungen wurden von *Zoltan Harman* am Max-Planck-Institut für Kernphysik durchgeführt. Weitere Vorhersagen von TOPbase [11], NIST [184], CATS [185; 186], sowie Liang *et al.* [190]. Anmerkungen im Text. Das $2s$ Ionisationspotential wurde mittels Extrapolation abgeschätzt.

Übergang	Experiment diese Arbeit	MCDF <i>Harman</i>	TOP	NIST	CATS	Liang
$2p-\infty$	E 422.20(12)	422.14	423.953	422.54	422.15	420.197
$2s-5p$	F 447.71(10)	447.54	447.56	—	449.90	447.71
$2s-6p$	G 463.62(12)	463.35	463.34	—	465.76	463.61
$2s-7p$	G 472.80(15)	472.63	472.61	—	475.06	472.92
$2s-8p$	G 478.82(15)	478.53	478.51	—	480.98	478.85
$2s-9p$	G 482.76(18)	482.58	482.50	—	484.98	482.86
$2s-10p$	G 485.94(25)	485.33	485.32	—	487.81	485.69
$2s-\infty$	— 497.80(40)	—	—	497.44	499.47	497.39

5.3 O-artige und C-artige Argon-Ionen: Ar^{10+} und Ar^{12+}

Untersuchungen an weiteren Argonionen verdeutlichen, dass systematische Studien entlang isonuklearer Sequenzen problemlos möglich sind. Das Umstellen der EBIT und Extraktions-Parameter auf den nächsten Ladungszustand konnte in wenigen Stunden erfolgen. Angesichts der Zeitvorgaben musste auf ähnlich systematische Messungen wie bei Ar^{8+} , vor allem zu Gunsten des astrophysikalisch bedeutsameren Eisens, verzichtet werden.

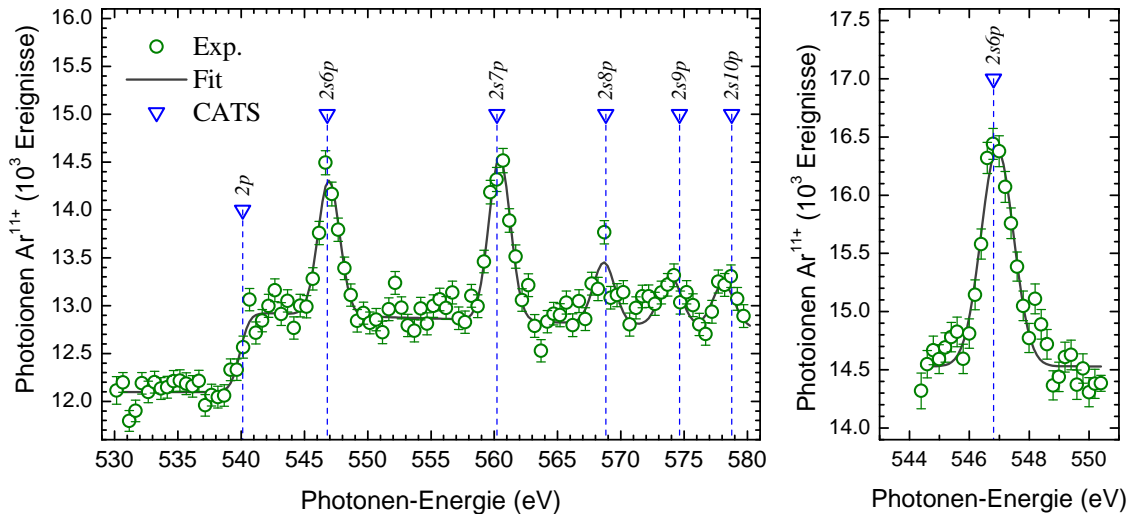


Abbildung 5.8: (links) Übersichtsspektrum für Ar^{10+} im Bereich der Ionisationskante von 530 bis 580 eV mit Schrittweite 500 meV und Austrittsspalt-Öffnung von 1000 μm . (rechts) Detailspektrum der ersten Resonanz. Die Identifikation erfolgte mit CATS (blaue Dreiecke).

Ar^{10+} ist ein O-artiges System mit der Konfiguration $2s^24p^2 \ ^3P_2$. In ähnlicher Weise wie bei Ar^{8+} können die $2s$ Elektronen angeregt werden und bei Photonen-Energien knapp über dem Ionisationspotential einen autoionisierenden Zustand bevölkern. In Abbildung 5.8 links ist ein Übersichtsspektrum von 530 bis 580 eV zu sehen. Die Identifikation erfolgte über CATS Rechnungen [186; 185]. Rechts ist die $2s6p$ -Resonanz in einer detaillierten Messung zu sehen und zeigt erstaunlich gute Übereinstimmung mit den Resonanzlagen, welche durch CATS vorhergesagt werden. Die nicht gefüllte $2p$ Schale ermöglicht metastabile Zustände mit Anregungsenergien von wenigen eV. Die dominanten Strukturen in den Daten lassen sich aber sämtlich aus Prozessen vom GS ausgehend erklären.

Die Messungen mit Ar^{12+} beschränkten sich auf die Ionisationskante. Mit 685.7(9) eV ist das derzeit das höchste (erste) Ionisationspotential, welches über direkte Photoionisation ermittelt wurde. Wie man Abbildung 5.9 entnehmen kann, tritt die Kante sehr deutlich in den Daten hervor. Für Ar^{12+} wurde keine Detailmessung von Resonanzen mit kleinen Schrittweiten gemacht wurden. Diese Messungen liegen in einem Energiebereich zwischen beiden Kalibrierungspunkten (401 eV und 868 eV). Die resonanzartige Struktur bei rund 706 eV konnte keinem Übergang eindeutig zugewiesen werden. Unter Umständen besteht ein Zusammenhang mit dem $2s$ Ionisationpotential.

In Tabelle 5.3 sind die Zahlenwerte aus den Fitprozeduren zusammengefasst und den theoretischen Werten von CATS gegenüber gestellt.

Tabelle 5.3: Resonanzenergien bzw. Ionisationskanten für Ar^{10+} und Ar^{12+} .

Ar^{q+}	Übergang	Fit	E (eV)	CATS	NIST	Scofield
$q=10$	$2p-\infty$	E	539.9(5)	540.12	540.03	541.2
	$2s-6p$	G	546.9(3)	546.81		
	$2s-7p$	G	560.4(3)	560.22		
	$2s-8p$	G	568.9(4)	568.81		
	$2s-9p$	G	573.9(5)	574.63		
	$2s-10p$	G	578.1(5)	578.75		
$q=12$	$2p-\infty$	E	685.7(9)	687.28	685.9	675.2
	unbekannt	G	706.2(6)			
	$2s-\infty$			713.03		

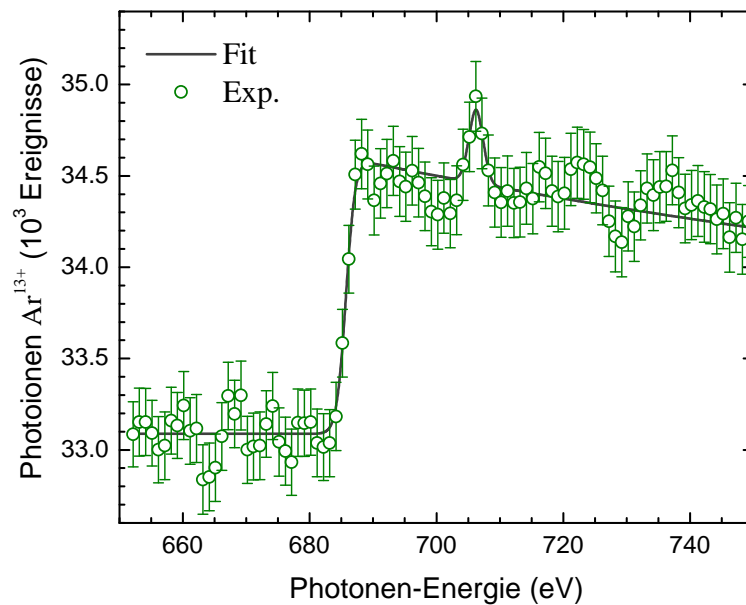


Abbildung 5.9: Übersichtsspektrum von Ar^{12+} von 650 bis 750 eV mit 1 eV Schrittweite und 1000 μm Austrittsspalt-Öffnung mit der ausgeprägten Ionisationskante bei 686 eV.

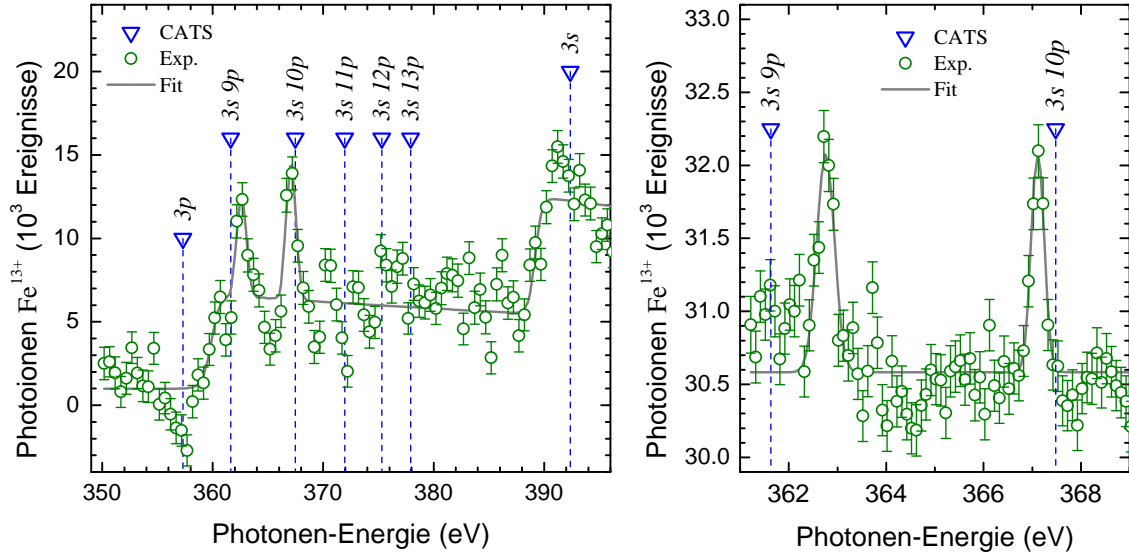
5.4 Si-artige Eisen-Ionen: Fe^{12+}


Abbildung 5.10: Photoionisation von Fe^{12+} . Übersichtsspektrum (links) im Bereich von 350 bis 395 eV mit Schrittweite 500 meV und 1000 μm Austrittsspalt. Ein abfallendes Untergrundsignal wurde abgezogen, daher ist hier nicht die absolute Zahl an Ereignissen aufgetragen. Die Strukturen gehören zum $3p$ Ionisationspotential, zum Serienende der $3snp$ Übergänge, welche ab $n=9$ autoionisieren können und zum $3s$ Ionisationspotential. Eine Detailmessung (rechts) zeigt die Resonanzen $3s9p$ und $3s10p$ im Bereich von 361 bis 369 eV bei Schrittweiten von 100 meV und 150 μm Austrittsspalt.

Die verfügbaren Photonen-Energien der Beamline U49/2-PGM1 gaben für Untersuchungen an Eisen ein Grenze beim Ne-artigen System vor ($E_{IP}^{Fe^{16+}} \approx 1270$ eV). Auf Grund der q/m -Koinzidenz von Fe^{16+} mit N^{2+} fiel Fe^{15+} als Untersuchungsobjekt aus. Die Untersuchungen mit Eisenionen wurden mit dem Si-artigen System Fe^{12+} begonnen, aber ähnlich wie bei Ar^{10+} und Ar^{12+} , stand dieses System nur vorübergehend im Zentrum der Untersuchungen. Sehr interessante Einblicke konnten mit den wenigen Scans in der Region der Ionisationskanten gewonnen werden, obwohl diese Daten im Vergleich zu Untersuchungen von Fe^{14+} oder auch Ar^{8+} nur mäßige Qualität erreichen.

Tabelle 5.4: Resonanzenergien bzw. Ionisationskanten für Fe^{12+} .

Übergang	Fit	E (eV)	CATS	NIST	Scofield
$2p-\infty$	E	359.9(4)	357.30	361.042	357.7
$2s-9p$	G	362.8(2)	361.63		
$2s-10p$	G	367.1(2)	367.48		
$2s-11p$	-	-	371.95		
$2s-\infty$	E	389.2(4)	392.38		

Das Si-artige System hat die Grundzustands-Konfiguration $Ne 3s^2 3p^2$, 3P_0 und lässt daher zwei M -Schalen Ionisationskanten erwarten, nämlich $3p$ und $3s$. Eine ähnliche Situation lag auch bei Ar^{12+} vor jedoch für die L -Schale. In der Region zwischen den Io-

nisationskanten sind angeregte Zustände der Form $3s3p^2np$ möglich, die für hohe Werte von n autoionisieren können. Genau dieses Bild zeigt sich in den Daten. Die Identifikation erfolgte auch hier mittels Hartree-Fock Werten von CATS. Vorausgesetzt dass diese Zuordnung korrekt ist, so sieht man im Vergleich zu den Messungen mit Argon (speziell Ar^{10+}) größere Abweichungen. Dies könnte sich aus der größeren Anzahl an Elektronen (14 vs. 8) und dem stärkeren Kernpotential erklären (Z : 26 vs. 18).

Die Auswertung der Fe^{12+} Daten mittels LabView-Programmen hat *Benjamin Schmitt* übernommen.

5.5 Mg-artige Eisen-Ionen: Fe¹⁴⁺

Die Ergebnisse zur Photoionisation von Fe¹⁴⁺ sind in mehrerer Hinsicht hervorzuheben. Es handelt sich um das höchst geladene Ion, von dem Photoionisations-Spektren bisher gemessen wurden. Außerdem gelang hier die Bestimmung eines absoluten Wirkungsquerschnitts einer starken Resonanz ($2p_{1/2}2d_{3/2}$), wodurch die Energieabhängigkeit dieser Größe in den entsprechenden Spektren auf Wirkungsquerschnitte skaliert werden konnten. Besondere Betonung verdient auch die Auflösung von 125 meV, die auf eben dieser Resonanz erzielt wurde, welche bei ≈ 800 eV liegt, woraus ein Auflösungsvermögen von 6500 folgt. In dem Energiebereich von 300 bis 2500 eV ist sowohl auf dem Gebiet der Photoionisation von Ionen als auch bei spektroskopischen Messungen mit hochgeladenen Ionen im Allgemeinen wenig Vergleichbares erreicht worden.

5.5.1 Absolute Wirkungsquerschnitte

Die Bestimmung absoluter Photoionisations-Wirkungsquerschnitte ist eine Herausforderung, die eine quantitative Ermittlung aller involvierten Größen bedarf. Ionen bieten hier gegenüber Photoionisation von Neutralgas sogar Vorteile, weil Ströme gemessen, bzw. einzelne Teilchen nachgewiesen werden können. Bisher war die MB Methode die einzige Möglichkeit solche Bestimmungen durchzuführen und Genauigkeiten im Bereich von 10 bis 20% werden typischerweise erreicht (Abschnitt 3.2 "Die merged-beam Methode"). Zusammenfassend lässt sich sagen, dass zusätzlich zur quantitativen Messung von Target-Ionendichte, Photoionen-Ausbeute und Photonenfluss die genaue Ermittlung der Geometrie der Überlappung der beiden Strahlen (Photonen und Target-Ionen) zu erfolgen hat, welche im *Formfaktor* ihren Ausdruck findet. Anders liegt die Situation bei Messungen mit einer Elektronenstrahl-Ionenfalle, denn hier hat man gute Kontrolle über die Wechselwirkungszeit der Ionen mit den Photonen, weshalb zusätzliche Möglichkeiten bestehen. Außerdem sind die Ionen in einem kleinen Volumen gefangen (Durchmesser $\lesssim 250 \mu\text{m}$), sodass die Ausleuchtung mit einem Photonenstrahl möglich ist, der über den Wechselwirkungsbereich praktisch homogen ist. Wie Kravis *et al.* in [51] im Zusammenhang mit Wirkungsquerschnitt-Messungen in Elektronenstrahl-Ionenfallen hervorheben, fällt damit die Ionendichte aus den Ratengleichungen heraus.

Wenn ein Ion einer Photoenenflussdichte Φ_ν ausgesetzt wird, so ist die Photoionisations-Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit gegeben durch $\sigma_{PI} \cdot \Phi_\nu$, wobei σ_{PI} der Photoionisations-Wirkungsquerschnitt ist. Daraus kann die zeitliche Entwicklung eines Ensembles von Ionen abgeleitet werden. Betrachtet man den Photoionisations-Prozess zunächst isoliert, so folgt

$$\dot{N}_{q+1} = \int dA [\sigma_{PI} \Phi_\nu l n_q(A)] = \sigma_{PI} \Phi_\nu l \int dA_{ions} n_q(A) = \sigma_{PI} \Phi_\nu N_q, \quad (5.1)$$

wobei klein n für Teilchendichten und groß N für Teilchenzahlen steht und Φ_ν die Photonen-Flussdichte ist. Über die kleine Fläche A_{ions} und kurze Länge l der Ionenwolke wird Φ_ν als konstant betrachtet, weshalb sich das Integral nur über die Ionendichte erstreckt und auf die Gesamtzahl der Ionen N_q reduzieren lässt. Die zeitliche Entwicklung der Anzahl an Photoionen N_{q+1} lässt sich nun bestimmen, indem man die Target-Ionen für

unterschiedliche Zeitdauern mit dem Photonenstrahl wechselwirken lässt, bevor der Fal-
leninhalt extrahiert und analysiert wird. Dabei kann gleichzeitig die Zahl der Targetionen
bestimmt werden

$$\frac{N_{q+1}^{extr.}}{N_q^{extr.}} = \frac{\eta_{q+1} N_{q+1}^{trap}}{\eta_q N_q^{trap}} \underset{q \gg 1}{\approx} \frac{N_{q+1}^{trap}}{N_q^{trap}}. \quad (5.2)$$

Hier wurde benutzt, dass die Extraktionseffizienten η für zwei benachbarte, hohe La-
dungszustände ähnlich sind. Da N_{q+1} und N_q auf beiden Seiten der Gleichung stehen
(bzw. als Verhältnis eingehen), müssen in den nachfolgenden Betrachtungen $N^{extr.}$ und
 N^{trap} nicht mehr unterschieden werden. Aus zwei Messungen mit den Wechselwirkungsda-
uern $t_1 < t_2$ folgt

$$\sigma_{PI} = \frac{1}{\Phi_\nu} \frac{\dot{N}_{q+1}}{N_q} \approx \frac{1}{\Phi_\nu} \frac{2}{t_2 - t_1} \frac{N_{q+1}^{t_2} - N_{q+1}^{t_1}}{N_q^{t_1} + N_q^{t_2}}. \quad (5.3)$$

5.5.1.1 Wechselwirkungszeit

Nach diesen theoretischen Betrachtungen, folgt nun die Beschreibung der tatsächlichen
Messung, wobei folgende Überlegungen eine Rolle spielen werden:

Rekombinationsprozesse: Der Elektronenstrahl war während dieser Messung die ganze
Zeit eingeschaltet, damit die höchstmögliche Target-Ionendichte gewährleistet wer-
den kann.

Targetionen in metastabilen Zuständen: Die Population der Photoionen Fe^{15+} nimmt
auch ohne Photonenstrahl mit zunehmender Wechselwirkungszeit mit dem Elek-
tronenstrahl ($E_{kin}^e < E_{IP}^{Fe^{14+}}$) zu, da Elektronenstoß-Ionisation von Targetionen in
metastabilen Zuständen die Erzeugung zulässt ($E_{kin}^e \approx E_{IP}^{(Fe^{14+})^*}$).

q/m -Koinzidenzen: Das Targetion Fe^{14+} hat das gleiche q/m Verhältnis wie die Io-
nen O^{4+} und C^{3+} . Da Eisen in der Form von Eisenpentacarbonyl $\text{Fe}(\text{CO})_5$ in die
Elektronenstrahl-Ionenfalle injiziert wurde, lagen diese "Verunreinigungen" in Men-
gen vor.

Photonenfluss: Diese Messung wurde im *Single Bunch* Modus bei BESSY II durch-
geführt, weshalb nur geringe Photonenflüsse zur Verfügung standen. Daher wurde
eine starke Resonanz gewählt, um ausreichend Signal zu erhalten. Dazu sind weitere
Ausführungen erforderlich.

Die ersten beiden Punkte erweitern die Ratengleichung (5.1) zu

$$\dot{N}_{q+1} = \sigma_{PI} \Phi_\nu N_q + \sigma_{EII} j_e (N_q)^* - \sigma_{RR} j_e N_{q+1}, \quad (5.4)$$

5.5. Mg-artige Eisen-Ionen: Fe^{14+}

wobei j_e die Elektronen Flussdichte und $(N_q)^* = N_q \cdot p^*$ die Zahl der Target-Ionen in metastabilen Zuständen ist. Für die Zeitentwicklung der Photoionen ist daher ein Sättigungsverhalten zu erwarten, dass durch die Rekombinationsprozesse der entstehenden Photoionen bestimmt ist. Hier wurde zwecks Übersichtlichkeit nur der Hauptprozess, radiative Rekombination (RR) angeführt. Formal ändert sich aber nichts, wenn andere Rekombinations- bzw. Verlustmechanismen berücksichtigt werden. Dieses Sättigungsverhalten ist qualitativ zu unterscheiden von einer Situation, wo die Abnahme der Zahl an Targetionen eine Obergrenze vorgibt, was hier wegen des niedrigen Photonенflusses nicht maßgeblich war. Für die Zeitentwicklung der Photoionen sollte damit in erster Näherung gelten

$$N_{q+1}(t) \approx N_q \alpha \left(1 - e^{-t/\tau}\right), \quad \alpha = \frac{\sigma_{PI} \Phi_\nu + \sigma_{EII} p^* j_e}{\sigma_{RR} j_e}, \quad \tau = \frac{1}{\sigma_{RR} j_e}. \quad (5.5)$$

Durchführung von Messungen mit (α_ν) und ohne Photonenstrahl (α_e - nur EII) kann der Term $(\sigma_{EII} p^* j_e)$ eliminieren und man erhält

$$\sigma_{PI} = \frac{1}{\Phi_\nu \tau} (\alpha_\nu - \alpha_e). \quad (5.6)$$

Man beachte, dass τ in beiden Fällen, also mit und ohne Photonen, den gleichen Wert haben sollte, was als Test dienen kann, ob die Annahme gemäß (5.5) gerechtfertigt war.

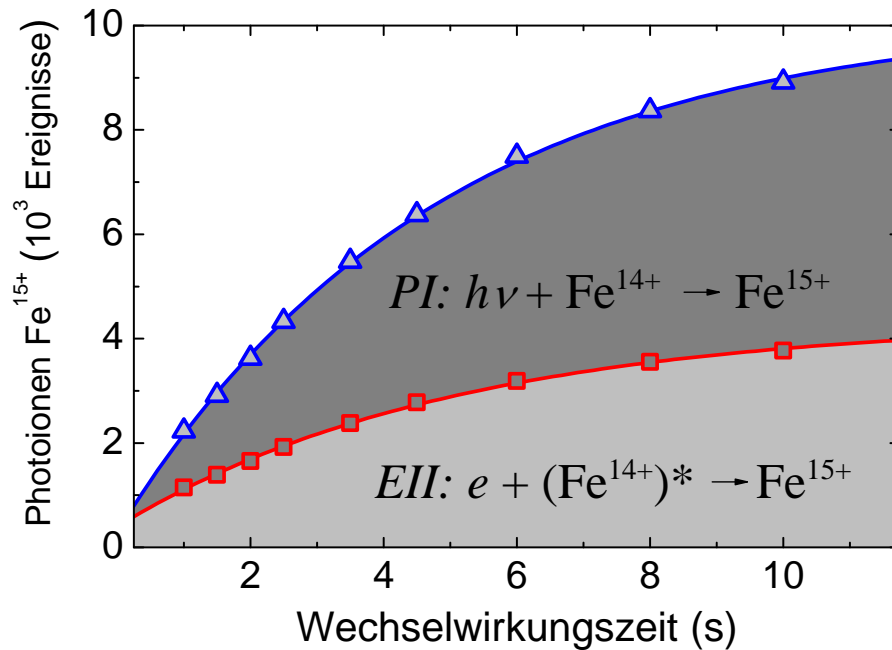


Abbildung 5.11: Entwicklung der Anzahl an Photoionen Fe^{15+} in Abhängigkeit der Wechselwirkungszeit der Target-Ionen Fe^{14+} . Einmal mit Photonenstrahl (blau) und einmal ohne Photonenstrahl (rot), wobei die Wechselwirkung mit dem Elektronenstrahl zur zeitlichen Zunahme führt.

Der Messablauf war wie folgt: Der Elektronenstrahl ($E_{kin}^e < E_{IP}^{Fe^{14+}}$) war während der gesamten Messung an, um dem Photonenstrahl eine dichte Ionenwolke an einer fest fixierten Position anbieten zu können. Nun wurden Targetionen in einer tiefen Falle (65 eV - plus raumladungsbedingte Falle) erzeugt und konnten für eine kontrollierte Zeit t_i mit dem Photonenstrahl wechselwirken, bevor die Fallen-Driftröhre langsam angehoben wurde, um alle Ionen zu extrahieren. Die Zeit t_i wurde zwischen 1 und 10 s variiert. In Abbildung 5.11 ist zu sehen, wie sich die Anzahl der Photoionen mit steigender Wechselwirkungszeit t_i zunächst erhöht und dann aus besprochenen Gründen in Sättigung geht. Die untere, rote Kurve zeigt die Untergrund Messung ohne Photonenstrahl, EII von $(Fe^{14+})^* \rightarrow \alpha_e$, und die obere, blaue Kurve die eigentliche Messung inklusive Photoionisation $\rightarrow \alpha_\nu$. Die Differenz (dunkelgrau) kann dem letzteren Prozess allein zugeordnet werden. Die Linien, welche die Datenpunkte ausgezeichnet nähern, sind Fits gemäß (5.5).

Trägt man die Ergebnisse einer optimalen Messung gleich als N_{q+1}/N_q gegenüber der Wechselwirkungszeit auf, so kann mit den Fitergebnissen (α_ν , α_e und τ) und Kenntnis des Photonenflusses sofort in (5.6) eingesetzt werden und man erhält den absoluten Wirkungsquerschnitt. Hier ergibt das Fitergebnis zuerst einen Wert $\tilde{\alpha} = \alpha \cdot N_q$, welcher noch nicht auf die Targetionen bezogen ist⁵ (siehe Tabelle 5.5). Die Qualität des Fits lässt darauf schließen, dass in Zukunft sehr genaue Bestimmungen von absoluten Wirkungsquerschnitten mit dieser Methode möglich sind.

Das Problem der q/m -Koinzidenzen des Target-Ions wurde umgangen, indem die Rate des 14-fach geladenen Eisenisotops ${}_{54}Fe^{14+}$, welches in ausreichender Rate getrennt detektierbar war, als Referenz genommen wurde. Durch Multiplikation mit einem Faktor von 15.8 (${}_{56}Fe/{}_{54}Fe$: 91.7% ${}_{56}Fe$ und 5.8% ${}_{54}Fe$) kann auf die interessierenden Target-Ionen ${}_{54}Fe^{14+}$ rückgeschlossen und mit den gezählten Photoionen ${}_{56}Fe^{15+}$ verglichen werden.

Die Dispersion des Photonenstrahls (siehe Abbildung 4.11) nach passieren des Monochromators führt über die Größe des Austrittsspalts zu einer Energiebreite oder Bandbreite BW (engl.: *bandwidth*). Innerhalb dieses kurzen Energieintervalls können Spektralverteilung und der Wirkungsquerschnitt des direkten Photoionisations-Prozesses als konstant angesehen werden. Beim resonanten Prozess hingegen kann die natürliche Linienbreite Γ durchaus kleiner sein als die Bandbreite. Die Photoionen-Ausbeute ist daher nicht proportional zum maximalen Wirkungsquerschnitt der Resonanz, sondern zur Resonanzstärke (2.27)

$$\dot{N}_{q+1} \propto \int_{BW} \frac{\Phi_\nu}{BW} \sigma_{dir} dE = \Phi_\nu \sigma_{dir}. \Leftrightarrow \int_{BW} \frac{\Phi_\nu}{BW} \sigma_{res}(E) dE = \frac{\Phi_\nu}{BW} S. \quad (5.7)$$

Man beachte, dass für den Zusammenhang mit der Resonanzstärke S nicht die gesamte Photonen-Flussdichte, sondern der entsprechende auf das Energieintervall bezogene Wert entscheidend ist, welcher nicht über Vergrößerung des Austrittsspalt erhöht werden kann. Mittels (2.28) erhält man

⁵bei diesen ersten Messungen fehlte ein Satz an Messungen, der sowohl Target-Ionen als auch Photoionen mit und ohne Photonenstrahl erfasst, daher und musste ein solcher aus mehreren Messungen rekonstruiert werden

5.5. Mg-artige Eisen-Ionen: Fe¹⁴⁺

$$\frac{\Phi_\nu}{BW} S = \Phi_\nu \sigma_0 \frac{\pi \Gamma}{2 BW} \Leftrightarrow \Phi_\nu \sigma_{dir} , \quad (5.8)$$

woraus ersichtlich werden soll, dass man bei Resonanzen, die gänzlich innerhalb der Bandbreite des Photonenstrahls liegen, auf gleiche Weise vorgehen kann wie bei Vermessung des direkten Prozesses, wenn man den angegebenen Faktor berücksichtigt. Im vorliegenden Fall wurde für die Linienbreite der Resonanz ein Theoriewert herangezogen. Eine weitere Korrektur ist noch vorzunehmen, weil der Photonenstrahl kleiner war als die Ionenwolke, wodurch nicht alle Target-Ionen an der Wechselwirkung teilnahmen, wohl aber bei der Extraktion detektiert wurden ($N_q \rightarrow N_q^{eff}$). Die Ermittlung eines Korrekturfaktors erfolgte aus dem Flächenverhältnis von Ionenwolke zu Photonenstrahl (A_q/A_ν), wobei über den Cr:YAG-Kristall genaue Informationen über die Photonenstrahl Abmessungen im Fallbereich zur Verfügung standen (siehe Abschnitt 4.4 "Photonen-Ionen Überlappung"). In Tabelle 5.5 sind die wichtigsten Zahlenwerte zusammengefasst. Die Berechnung erfolgte mit nachfolgender Formel, welche sich mit den erwähnten Korrekturen und (5.6) aus (5.3) ergibt

$$\sigma_0 = \frac{A_\nu}{\dot{N}_\nu} \frac{2 BW}{\pi \Gamma} \frac{\Delta\tilde{\alpha}}{\tau N_q^{eff}} , \quad N_q^{eff} \approx N_q \frac{A_q}{A_\nu} . \quad (5.9)$$

Tabelle 5.5: Verwendete Zahlenwerte für den absoluten Wirkungsquerschnitt am Maximum der $2p_{1/2}3p_{3/2}$ -Resonanz inklusive Fehlerabschätzung. Die letzte Spalte gibt Fehlerwerte an, die in zukünftigen Messungen erreichbar sein sollten.

Größe	ermittelt über	Wert	\mathcal{F}_{2p3d}	\mathcal{F}_{min}
$\tilde{\alpha}_\nu = \alpha_\nu N_q$	Fit	10202	2% (Fit)	1%
$\tilde{\alpha}_e = \alpha_e N_q$	Fit	4356	3% (Fit)	1%
τ_{nu}	Fit	4.76 s	5% (Fit)	1%
τ_e	Fit	5.05 s	7% (Fit)	1%
$\Delta\tilde{\alpha}$	Differenz	5846	10%	1%
τ_{mittel}	Mittelwert	4.9 s	10%	1%
N_q	${}_{54}\text{Fe}^{15+}$ (Isotopenverhältnis)	140 000	30%	1%
\dot{N}_ν	Ringstrom und Flusskurve	$2 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$	40%	2% *
BW	Dispersion und Austrittsspalt	690 meV	10%	
Γ	Theorie [24]	36 meV	20%	
A_ν	Cr:YAG-Kristall	$240 \times 150 \mu\text{m}^2$	10%	
A_q	typische Ionenwolkengröße	$(200\mu\text{m})^2 \pi$	20%	
σ_0	Gleichung (5.9)	650 Mbarn	60%	3%

* im Falle einer Einzelcharakterisierung einer Photodiode
(Baugruppen-Charakterisierungen $\approx 10\%$)

Photoionisations-Spektren, welche diesen Skalierungspunkt für absolute Wirkungsquerschnitte bei rund 800 eV enthalten, werden entsprechend dargestellt. Der ermittelte Wert

für den maximalen Wirkungsquerschnitt der Resonanz wird von einer unabhängigen Skalierung unterstützt, die von der 3s Ionisationskante ausgeht.

5.5.1.2 Skalierung über die Ionisationskante

Wirkungsquerschnitte für den direkten Photoionisations-Prozess werden von unterschiedlichen Theorien mit guter Übereinstimmung vorhergesagt. Werte für Fe^{14+} sind in Tabelle 2.1. Daher scheint es sinnvoll ein Spektrum, welches die Ionisationskante beinhaltet auf diese zu normieren. Dabei sei nochmals angemerkt, dass diese Skala für Resonanzen streng genommen nur dann zutrifft, wenn die Auflösung besser ist als die Linienbreite.

Mit den Verhältnissen von Photoionen-Zählraten, Photonenflüssen (\approx Ringstrom \times nomineller Photonenfluss) und effektive Bandbreiten, jeweils bei der Resonanz und bei der Ionisationskante, kann diese Skala auf die bekannte Resonanz übertragen werden

$$\sigma_0 = \sigma_{RES} = \sigma_{IP} \cdot \frac{\dot{N}_{q+1}^{RES}}{\dot{N}_{q+1}^{IP}} \frac{I_{ring}^{IP} \cdot \Phi_{nom}^{IP}}{I_{ring}^{RES} \cdot \Phi_{nom}^{RES}} \frac{BW_{eff}^{IP}}{BW_{eff}^{RES}} \quad (5.10)$$

wobei die tiefgestellten Abkürzungen "RES" und "IP" für Resonanzenergie und Ionisationspotential stehen. Diese Abschätzung liefert eine vernünftige Übereinstimmung

$$\sigma_0 = \underbrace{\sigma_{IP}}_{0.14 \text{ Mbarn} (10\%)} \cdot \underbrace{\frac{4.27 \text{ cts/s}}{0.101 \text{ cts/s}}}_{42.2 (40\%)} \cdot \underbrace{\frac{227 \text{ mA} \cdot 4.5 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}}{167 \text{ mA} \cdot 2.5 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}}}_{2.4 (30\%)} \cdot \underbrace{\frac{1060 \text{ meV}}{36 \text{ meV}}}_{30 (30\%)} \approx 425 \text{ Mbarn} (60\%), \quad (5.11)$$

5.5.2 Photoionisations-Spektren

In Tabelle 5.6 sind die experimentell ermittelten Resonanzenergien und das Ionisationspotential von Fe^{14+} aufgelistet und mit Theoriewerten verglichen. Die Rechnungen von *Harman* (MCDF), *Behar* (HULLAC) und *Gu* (RMBPT) [24] geben auch Oszillatorstärken an, welche nicht in der Tabelle angegeben werden, sondern in den einzelnen Darstellungen der Photoionisations-Spektren. RMBPT-Rechnungen waren nur für den Bereich von rund 700 bis 900 eV verfügbar. Der Wert für das Ionisationspotential in dieser Spalte stammt von NIST [184]. Zusätzlich sind Ergebnisse von CATS angeführt [186; 185]. Ein Vergleich mit berechneten Linienprofilen von *Bautista* [111], erfolgt direkt in den Spektren. Für weitere, ältere Rechnungen sei auf die Literatur verwiesen [191; 192]. Die Umrechnung zwischen Wirkungsquerschnitt-Skala der experimentellen Werte und der theoretischen PI-Oszillatorstärken f_{PI} ($=$ Oszillatorstärke \times Verzeigungsverhältnis) ergibt sich aus (2.28) und (2.29) zu

$$f_{PI} = \Gamma_{\sigma \rightarrow f} C \sigma_{PI}, \quad C = \frac{\epsilon_0 m_e c}{h e^2} \approx 2.3 (\text{eV Mbarn})^{-1}, \quad (5.12)$$

wobei $\Gamma_{\sigma \rightarrow f}$ keine physikalische Energiebreite ist, sondern aus Experiment und gewählter Darstellung folgt. In allen Photoionisations-Spektren sind experimentelle Werte durch

5.5. Mg-artige Eisen-Ionen: Fe¹⁴⁺

Tabelle 5.6: Resonanzenergien bzw. Ionisationskanten für Fe¹⁴⁺. Experiment im Vergleich mit mehreren Theorien (Details siehe Text). Einheiten in eV.

Übergang (Ordnung)	Fit	Exp.	MCDF	HULLAC	RMBPT	CATS
3s – ∞	T	456.2(5)	455.26	453.00	(457.0057)*	454.07
2s _{1/2} – 3p _{3/2} (2.)/2	L	436.9(2)	437.87	439.07	437.14	437.87
2p _{3/2} – 4d _{5/2} (2.)/2	G	482.4(2)	481.79	482.73	–	483.08
2p _{1/2} – 4d _{3/2} (2.)/2	G	488.1(2)	487.50	488.55	–	488.93
2p3s – 3p ²	G	768.7(3)	767.37	767.66	768.06	(771.30)
2p3s – 3p ²	G	781.0(3)	781.88	780.51	780.34	(779.86)
2p _{3/2} – 3d _{5/2}	LP	794.7(2)	794.74	795.89	794.95	793.53
2p3s – 3p ²	LP	800.3(2)	–	803.37	799.74	802.33
2p _{1/2} – 3d _{3/2}	L	807.1(2)	807.74	809.19	807.25	806.83
(2s _{1/2} – 3p _{1/2})	–	–	–	–	869.46	871.91
2s _{1/2} – 3p _{3/2}	G	874.1(2)	875.74	878.14	874.19	875.74
2s _{1/2} – 3p _{3/2} (2.)	L	873.8(4)	875.74	- -	- -	- -
(2p – 4s)	–	–	–	930.67	–	–
2p _{3/2} – 4d _{5/2}	G	964.3(2)	963.58	965.46	–	966.15
2p _{3/2} – 4d _{5/2} (2.)	G	964.8(4)	- -	- -	–	- -
2p _{1/2} – 4d _{3/2}	G	975.8(2)	975.00	977.10	–	977.85
2p _{1/2} – 4d _{3/2} (2.)	G	976.2(4)	- -	- -	–	- -
2p _{3/2} – 5d _{5/2}	G	1040.9(3)	1041.41	1040.31	–	1041.6
2p _{1/2} – 5d _{3/2}	G	1053.5(4)	1053.28	1052.14	–	1053.6
2s _{1/2} – 4p _{3/2}	G	1080.6(5)	1083.72	1080.19	–	1084.5

*NIST 3s Ionisationspotential

grüne Linien oder Punkte dargestellt. Die Fehlerbalken der Punkte rühren von der Zählstatistik her. Fitkurven sind grau dargestellt, wobei für Resonanzen meist Gaussprofile (G) verwendet wurden. In zwei Fällen war eine Lorentzkurve (L) passender (Abbildung 5.15 links, Abbildung 5.20) und in Abbildung 5.17 wurde ein experimentell verbreitertes Lorentzprofil getestet (LP), welches ausgezeichnete Übereinstimmung lieferte (Parabel verbreitert, in Anlehnung an das verbreiterte Fanoprofil bei der 2s5p Resonanz von Ar⁸⁺). Ionisationskanten wurden mit Boltzmannkurven und einem überlagerten Abfall mit dem Inversen der dritten Potenz der Photonen-Energie gefittet (engl.: *edge - E*). Punkte mit senkrechten Fluchtlinien stehen für Resonanzenergien und Oszillatorstärke der Theorie-werte: RMBPT [24] - blaue Kreise ◯, MCDF - orange Karos ◇, HULLAC - braune Dreiecke ▽. Schrittweiten der jeweiligen Scans ΔE_{step} , sowie Austrittsspalt-Öffnung können den Bildunterschriften entnommen werden.

Fe¹⁴⁺ ist ein Mg-artiges System (*Ne* 3s², ¹S₀). Autoionisierende Zustände, welche aus dem Grundzustand über Ein-Elektronen Übergänge angeregt werden können, benötigen L-Schalen Elektronen und damit Energien über 700 eV. In der Nähe der 3s Ionisationskante sind daher keine ausgeprägten Strukturen zu erwarten, höchstens Doppelanregungen der

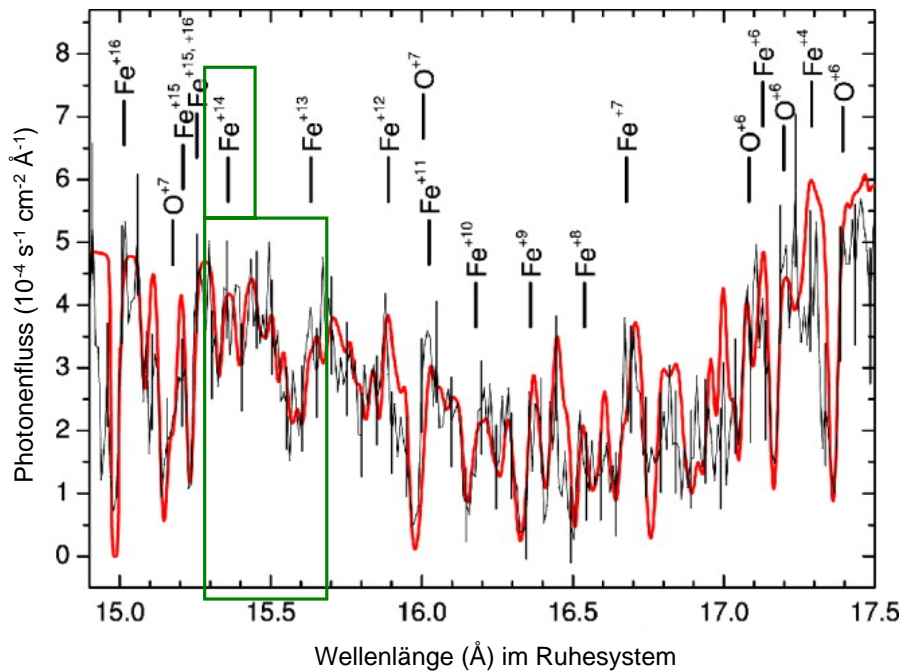


Abbildung 5.12: Absorptionslinien im Spektrum des aktiven galaktischen Kern *NGC 3783* aufgenommen von *Chandra* HETGS. Im Bereich von 17.3 bis 15.7 Å sind Absorptionslinien durch Fe^{14+} erkennbar. Die Identifikation der Eisenlinien beruht auf den neueren Rechnungen von Gu *et al.* [24].

beiden $3s$ Elektronen in Analogie zu den $2s$ Elektronen in Be-artigem Stickstoff.

Betrachtet man in Tabelle 5.6 die Resonanzenergien laut HULLAC in jenem Bereich, wo auch RMBPT Werte verfügbar sind (konkret 790 bis 890 eV oder 13.9 bis 15.7 Å), so stellt man eine generelle Verschiebung zu höheren Energien um rund 1 bis 4 eV fest. Abweichungen in diesem Bereich sind zu erwarten, aber eine systematische Verschiebung hatten Holczer *et al.* [23] ausgeschlossen. Anhand eines Spektrums des aktiven galaktischen Kerns *NGC 3783*, aufgenommen von *Chandra* HETGS, wurde versucht die Geschwindigkeit der Eisenionen im Plasmawind mittels Dopplerverschiebung und den Werten von HULLAC zu bestimmen. In Abbildung 5.12 sind die Absorptionslinien, welche Fe^{14+} zugeschrieben werden bei 15.4 Å grün markiert. Die systematische Abweichung der Lagen der Absorptionslinien von rund 0.25% zu niedrigeren Wellenlängen übersetzt sich dabei in eine Unterschätzung der Geschwindigkeit um rund 750 km/s. Dies ist in etwa die typische Geschwindigkeit der Plasmawinde, weshalb die Eisenionen (Absorber) als ruhend in Bezug auf die *NGC 3783* (Emitter) erschienen.

Ein Erklärungsmodell wurde vorgeschlagen, welches die Eisenionen einem ruhenden Halo zuordnet und leichtere Elemente den Plasmawinden. Mit verbesserten RMBPT Rechnungen von Gu *et al.* [24] ergab sich diese Diskrepanz in den Geschwindigkeiten der verschiedenen Ionensorten nicht. Widersprüchliche theoretische Vorhersagen machen den Bedarf an klärenden experimentellen Daten deutlich. Im Rahmen dieser Arbeit konnten solche Labormessungen durchgeführt werden und zeigen an diesem konkreten Beispiel, dass eindeutige Entscheidungen zwischen verschiedenen Theorien möglich sind. In Abbildung 5.13

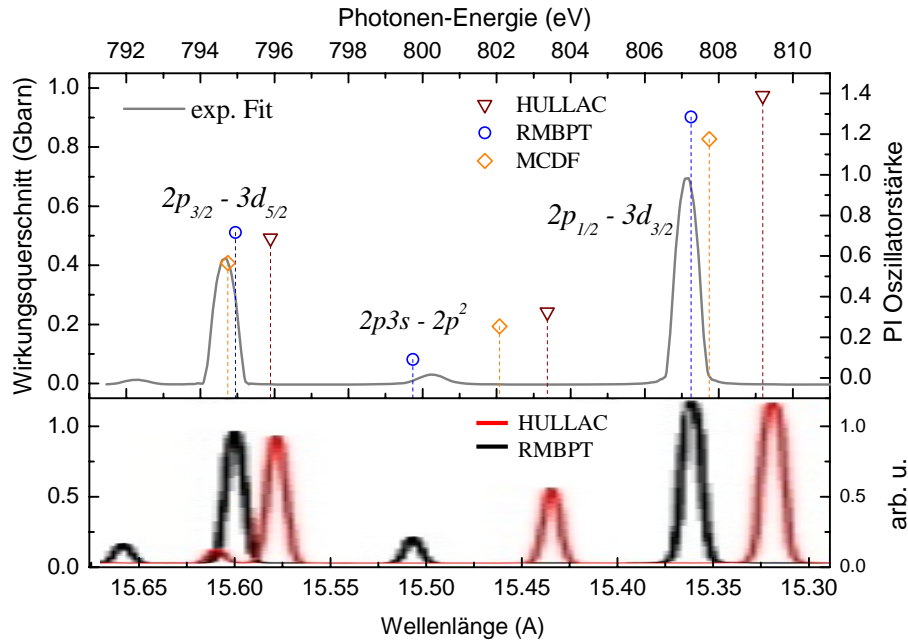


Abbildung 5.13: Gegenüberstellung der HULLAC und RMBPT Rechnungen zu Fe^{14+} aus [24] verglichen mit den gemessenen $2p3d$ -Resonanzen (siehe Abbildung 5.17) zeigt, dass bereits in dieser Messung über mehrere Resonanzen eine eindeutige Entscheidung zwischen den verfügbaren Theorien getroffen werden kann.

wird die Gegenüberstellung der beiden Theorien HULLAC und RMBPT aus [24] mit dem Fit an die experimentellen Daten (Abbildung 5.17) verglichen.

In Abbildung 5.14 ist die Ionisationskante der direkten Photoionisation bei rund 456 eV zu sehen. Die Skalierung auf Wirkungsquerschnitte erfolgte über Anpassung an der Kante auf theoretische Werte von 136 kbarn (siehe Abschnitt 5.5.1.2 "Skalierung über die Ionisationskante" bzw. Tabelle 2.1). Damit zeigt sich auch die hohe Sensitivität der EBIT Methode. In zukünftigen permanenten Setups mit verbesserter Extraktionseffizienz und Stabilität sollten durch die hohen Targetdichten in Langzeitmessungen Empfindlichkeiten unter der kbarn Grenze möglich sein.

Das Ionisationspotential bzw. die Bindungsenergie gibt die Energiedifferenz zum Vakuumniveau an (absolut), während Resonanzen Informationen über relative Energiedifferenzen zwischen zwei Zuständen liefern. Theoretische Werte für das Ionisationspotential streuen um bis zu 2 eV (Genauigkeit 0.5%). In dem Spektrum sind des weiteren zwei Resonanzen zu sehen, welche allerdings nicht zu Doppelanregungen der beiden $3s$ Elektronen passten. Vergleich mit Messungen bei höheren Energien lässt eine sichere Identifikation mit Anregungen von $2p4d$ -Resonanzen durch Photonen "zweiter Ordnung" zu. Solche Photonen werden als höhere Harmonische im Undulator immer erzeugt und können den Monochromator mit niedriger Effizienz passieren. In Abbildung 5.15 (rechts) sind diese beiden Resonanzen detaillierter dargestellt. Das Spektrum links davon zeigt die Resonanz $2s3p$, welche in zweiter Ordnung unterhalb des Ionisationspotentials auftritt. In Abschnitt 4.6.4.4 "Photonen zweiter Ordnung" wurde erklärt, wie solche Effekte zur Verbesserung der Kalibrierung der Photonen-Energie genutzt werden können.

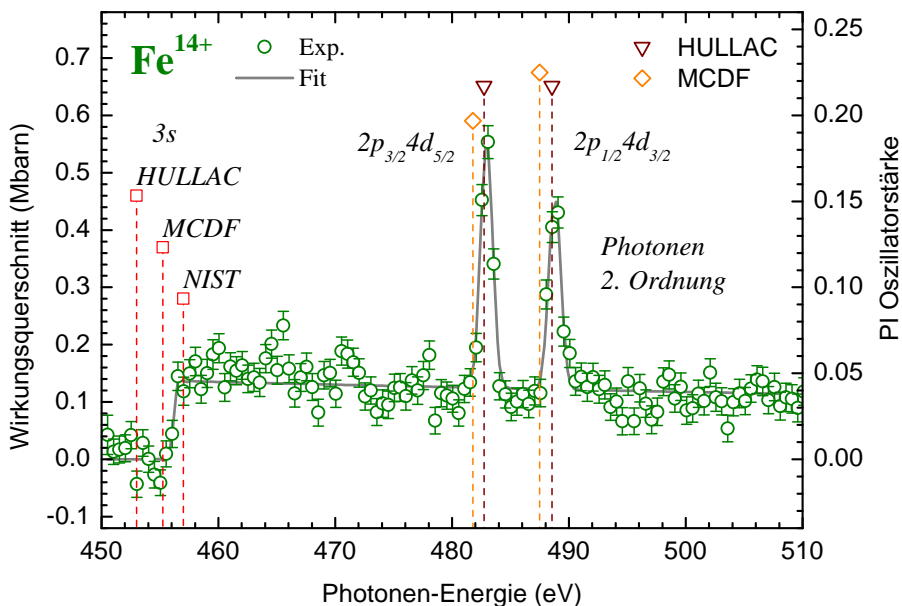


Abbildung 5.14: Photoionisations-Spektrum von Fe^{14+} im Bereich von 450 bis 510 eV, mit einer Schrittweite von $\Delta E_{step}=500$ meV bei einer Austrittsspalt-Öffnung von $1000 \mu\text{m}$. Über die Höhe der Kante mittels Theoriewert von 136 kbarn wurde auf absolute Wirkungsquerschnitte skaliert. Die Vorhersagen von zwei Theorien (HULLAC, MCDF) und der Wert der NIST-Datenbank für das Ionisationspotential sind rot eingezeichnet (die senkrechte Lage enthält keine Information). Die beiden Resonanzen sind Anregungen der $2p4d$ Übergänge durch Photonen zweiter Ordnung.

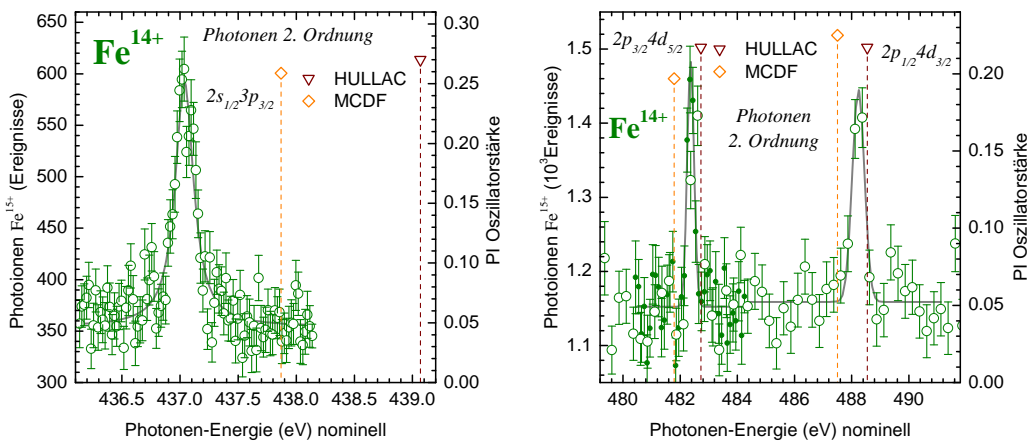


Abbildung 5.15: Anregung der starken L -Schalen Resonanzen bei niedrigen nominellen Photonen-Energien durch Photonen zweiter Ordnung. Man beachte, dass die Resonanzen durch Photonen mit dem doppelten Energie des nominellen Monochromator-Werts hervorgerufen werden. (links) $2s3p$ -Resonanz im Bereich von 436 bis 438 eV, mit einer Schrittweite von $\Delta E_{step}=25$ meV bei einer Austrittsspalt-Öffnung von $100 \mu\text{m}$. (rechts) $2p4d$ -Resonanzen im Bereich von 479 bis 493 eV, mit einer Schrittweite von $\Delta E_{step}=250$ meV bei einer Austrittsspalt-Öffnung von $150 \mu\text{m}$. Eine Messung der $2p_{3/2}4d_{5/2}$ -Resonanz mit Schrittweite 100 meV ist der Messung beider Resonanzen überlagert.

5.5. Mg-artige Eisen-Ionen: Fe^{14+}

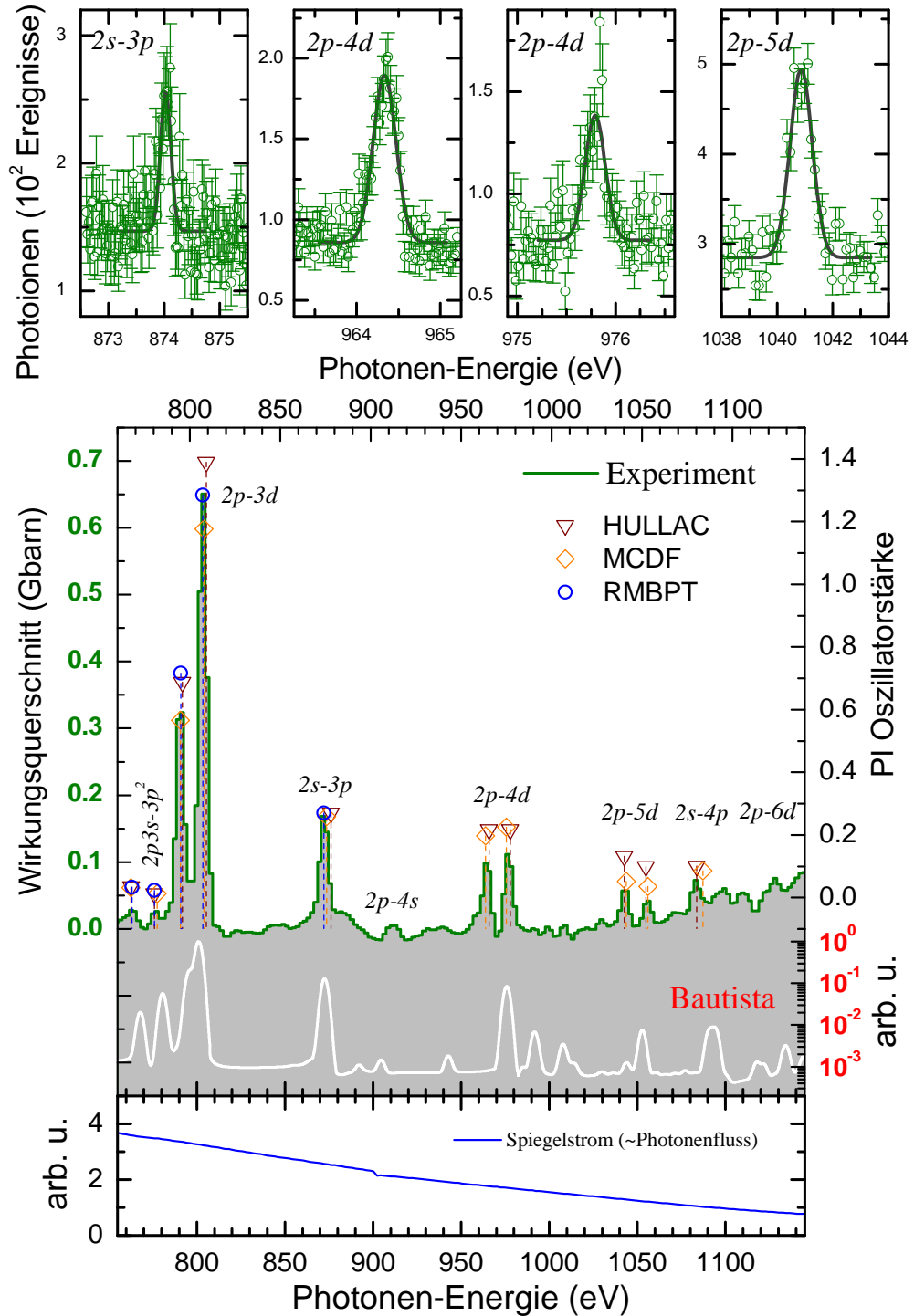


Abbildung 5.16: Übersichtsspektrum von Fe^{14+} im Bereich von 750 bis 1150 eV, mit einer Schrittweite von $\Delta E_{step}=2$ eV bei einer Austrittsspalt-Öffnung von 1000 μm . ($\Gamma_{\sigma \rightarrow f}=220$ meV)

Abbildung 5.16 gibt einen Überblick des gesamten höheren Energiebereichs, in dem Serien von L -Schalen Anregungen gemessen werden konnten. Im Unteren Bereich des zentralen Spektrums wurde zusätzlich mit R -Matrix Rechnungen verglichen, welche Linienprofile liefern [111]. Angesichts der offensichtlichen Abweichung bereits bei dieser groben Auflösung erübrigt sich der weitere Vergleich in den detaillierten Scans, welche zur Bestimmung der Resonanzen mit kleiner Schrittweite durchgeführt wurden. Oben in Abbildung 5.16 sind vier Beispiele zu sehen, deren Fit mit einer Gaußkurve die Werte in Tabelle 5.6 lieferte. Unten ist der Verlauf des Spiegelstroms abgebildet, welcher ein gutes Maß für den Photonfluss darstellt. Über den Bereich des Übersichtsspektrums ist ein Abfall um einen Faktor vier festzustellen. Da zu höheren Energien auch die Wirkungsquerschnitte abnehmen konnten die komplexen Strukturen der mischenden Seriengrenzen und der L -Schalen Ionisationspotentiale während dieser Kampagne leider nicht aufgelöst werden. Der Spiegelstrom lässt außerdem einen Sprung bei rund 900 eV erkennen, welcher mit dem Wechsel der von der 3. auf die 5. Harmonische des Undulators und der damit verbundenen größeren Umstellung des Gaps zu tun hat (siehe auch Abschnitt 4.2.3.3 "Die verwendeten Strahlrohre").

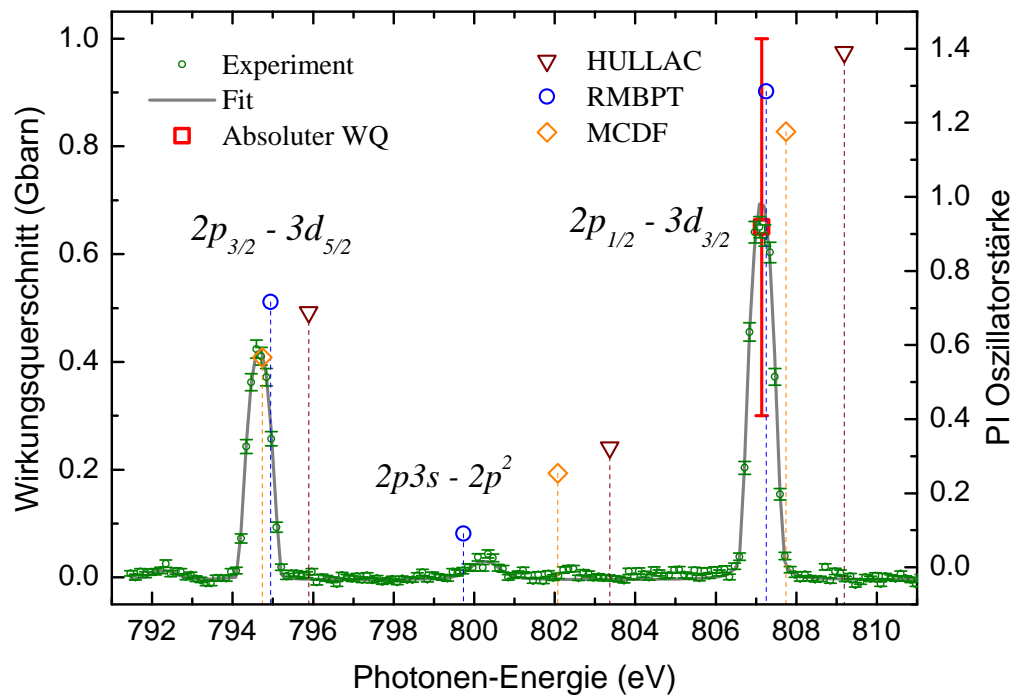


Abbildung 5.17: Photoionisations-Spektrum von Fe^{14+} im Bereich von 791 bis 811 eV, mit einer Schrittweite von $\Delta E_{step}=125$ meV bei einer Austrittsspalt-Öffnung von $150 \mu\text{m}$. Ein Skalierungspunkt für Absolute Wirkungsquerschnitte ist über die Testmessungen an der $2p_{1/2}3d_{3/2}$ -Resonanz vorhanden. ($\Gamma_{\sigma \rightarrow f}=150$ meV)

Abbildung 5.17 zeigt die Messung der $2p3d$ -Resonanzen. Die Fehlerbalken der Daten-

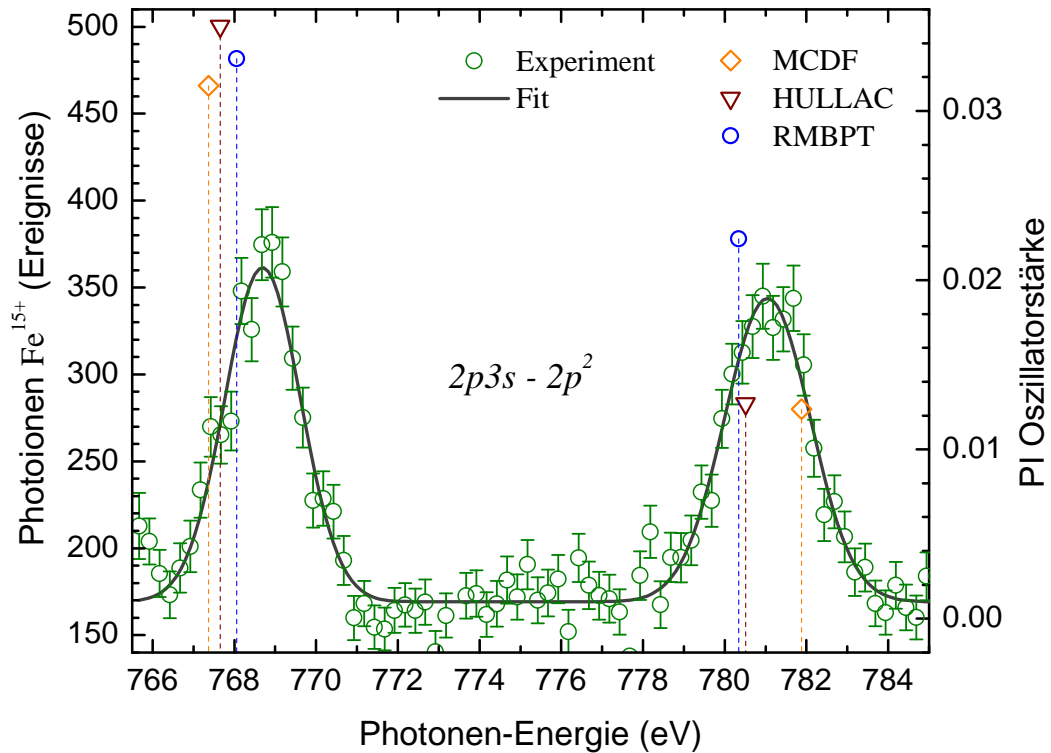


Abbildung 5.18: Photoionisations-Spektrum von Fe^{14+} im Bereich von 765 bis 785 eV, mit einer Schrittweite von $\Delta E_{step}=250$ meV bei einer Austrittsspalt-Öffnung von 500 μm . Resonanzen durch *Ein-Photon-Zwei-Elektron* Prozesse.

punkte zeigen die hier erreichte statistische Unsicherheit. Die Anregung der $2p_{3/2}$ Elektronen mit größerem Gesamt-Drehimpuls j ist (gemäß Dirac-Theorie) schon bei geringeren Energien möglich, als jene der $2p_{1/2}$ Elektronen. Da die Feinstruktur-Aufspaltung für die L -Schale größer ist als für die M -Schale, liegt die $2p_{3/2}3d_{5/2}$ -Resonanz (≈ 794 eV) energetisch tiefer als $2p_{1/2}3d_{3/2}$ (≈ 807 eV). Letztere ist die stärkste Resonanz durch L -Schalen Anregung in Fe^{14+} und wurde separat mit sehr guter Auflösung gemessen (siehe Abbildung 5.20 und zugehörige Diskussion). Aufgrund ihrer Stärke wurde sie auch zur Bestimmung des absoluten Wirkungsquerschnitts herangezogen (siehe Abschnitt 5.5.1.1 "Wechselwirkungszeit"). Die rote Marke zeigt den Skalierungspunkt mit Fehlerbalken.

Zwischen den beiden starken Resonanzen ist eine schwächere Struktur auszumachen, welche einem *Ein-Photon Zwei-Elektronen* Prozess zugeschrieben werden kann. Hier geht ein $2p$ Elektron in einen $3p$ Zustand über und ein $3s$ Elektron sorgt mit einem Innerschalen Übergang auf $3p$ dafür, dass die Auswahlregel für E1-Übergänge $\Delta l = \pm 1$ nicht verletzt wird. Mehrere involvierte p Zustände führen zu vielfältigen Kopplungsmöglichkeiten. Abbildung 5.18 zeigt zwei weitere, intensivere Resonanzen dieses Typs. Spektren wie diese, welche in einem engeren Energieintervall zwei oder mehr Resonanzen erfassen, ermöglichen die Bestimmung der Energieseparation, welche in ersten Näherung unabhängig von der absoluten Kalibrierung der Photonen-Energie ist (siehe Abschnitt 4.6.4 "Kalibrierung der Photonen-Energie"). Im Falle der starken $2p3d$ konnte der Wert auf 9 meV zu 12.481 eV

Tabelle 5.7: Vergleich der Energieseparation zweier Resonanzen, die innerhalb eines kurzen Scans abgedeckt werden konnten mit den Werten verschiedener Theorien. Diese Experimentellen Angaben sind in erster Ordnung unabhängig von der Kalibrierung der Photonen-Energie und können daher mit Fehlerbalken von wenigen meV angegeben werden.

Energieseparation	Exp.	MCDF	HULLAC	RMBPT	CATS
$2p3s\ 3p^2 - 2p3s\ 3p^2$	12.41(7)	14.51	12.85	12.28	–
$2p_{3/2}3d_{5/2} - 2p_{1/2}3d_{3/2}$	12.481(9)	13.005	13.293	12.303	13.30
$2p_{3/2}4d_{5/2} - 2p_{1/2}3d_{3/2}$	11.476(25)	11.42	11.64	–	11.70
$2p_{3/2}4d_{5/2} - 2p_{1/2}3d_{3/2}$ (2.O.)	11.38(9)	- -	- -	–	- -

bestimmt werden, womit Theorien auf sehr genauem Niveau getestet werden können. Tabelle 5.7 listet diese Energieseparationen für einige Resonanzpaare und vergleicht mit den Theorien.

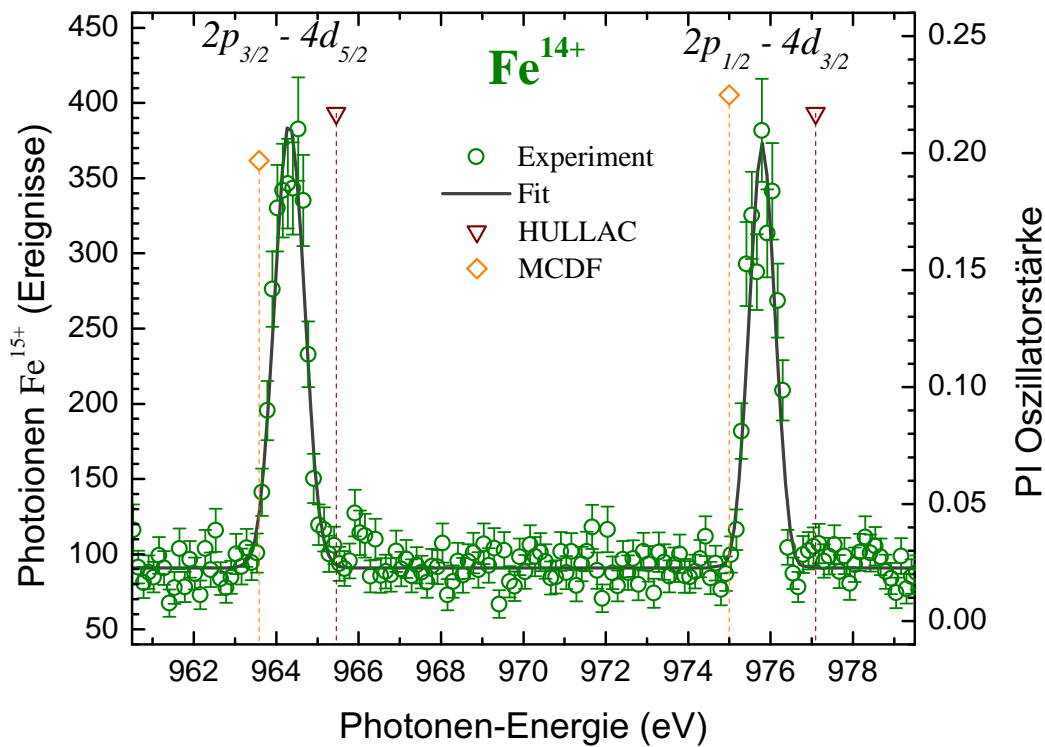


Abbildung 5.19: Photoionisations-Spektrum von Fe^{14+} im Bereich von 960 bis 980 eV, mit einer Schrittweite von $\Delta E_{\text{step}}=125$ meV bei einer Austrittsspalt-Öffnung von $250\ \mu\text{m}$. Die Resonanzen gehören zu angeregten Zuständen der Form $2p4d$ und sind die Fortsetzung der Rydberg Serie zu Abbildung 5.17.

Für die nächste Stufe der $2pnd$ -Resonanzen mit $n=4$ existiert ebenfalls ein Scan der beide Resonanzen erfasst und die Ermittlung der Energieseparation erlaubt (siehe Tabelle 5.7). Die Resonanzen in Abbildung 5.19 sind jene, die in zweiter Ordnung in der Nähe der $3s$ Ionisationskante gefunden wurden (vergleiche Abbildung 5.14 bzw. Abschnitt 4.6.4.4 "Photonen zweiter Ordnung").

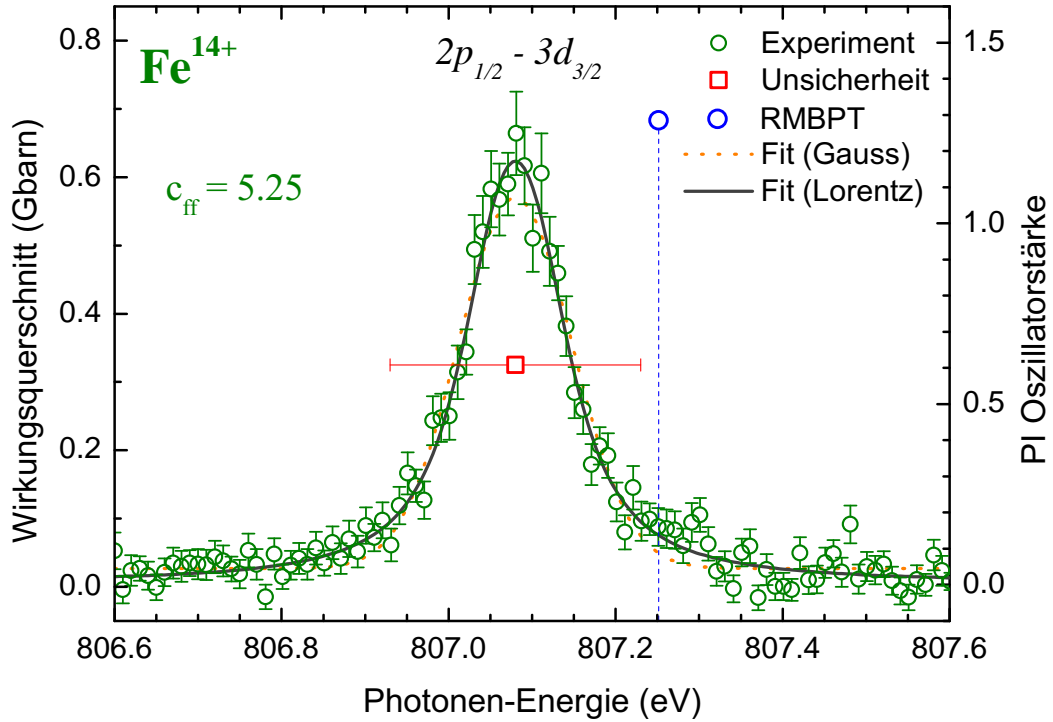


Abbildung 5.20: Hochauflösenden Photoionisations-Spektrum der $2p_{1/2}3d_{3/2}$ -Resonanz durch Umstellung des c_{ff} -Wertes (Fix-Fokus Konstante, siehe Abschnitt 4.2.3.3 "Die verwendeten Strahlrohre"). Scanbereich 806.5 bis 807.5eV, mit einer Schrittweite von $\Delta E_{step}=10$ meV bei einer Austrittsspalt-Öffnung von $25 \mu\text{m}$. ($\Gamma_{\sigma \rightarrow f}=200$ meV)

An der $2p_{1/2}3d_{3/2}$ -Resonanz wurde nicht nur die Bestimmung eines absoluten Wirkungsquerschnitts getestet, sondern auch die erreichbare Auflösung. Dazu wurde der c_{ff} Wert der U49/2-PGM1 vom Standardwert 2.25 auf 5.25 erhöht (siehe Abschnitt 4.2.3.3 "Die verwendeten Strahlrohre" bzw. Abbildung 4.11). Der Austrittsspalt wurde auf $10 \mu\text{m}$ reduziert. Das Ergebnis dieser Messung ist in Abbildung 5.20 dargestellt. Die Gesamtbreite (FWHM) der experimentellen Daten liegt bei 130 meV. Auf dem Gebiet der Photoionisation von Ionen und Atomen lässt sich bei dieser Energie in der Literatur kein vergleichbarer Wert für die Gesamtbreite finden. Die RMBPT Berechnungen von Gu *et al.* [24] liefern die beste Übereinstimmung mit den gefundenen Resonanzenergien und sagen für die natürliche Linienbreite der $2p_{1/2}3d_{3/2}$ -Resonanz einen Wert von 36 meV voraus. Daraus errechnen sich eine experimentelle Breite von 125 meV und ein erreichtes Auflösungsvermögen von 6500 . Die MCDF Rechnungen bestätigen diesen Wert (34 meV), während HULLAC einen deutlich größeren Wert für die natürliche Linienbreite findet (86 meV). Mit dem HULLAC Wert wäre das erreichte Auflösungsvermögen bereits 8300 . Wie aus Abbildung 5.20 hervorgeht, wird die experimentelle Linienform von einem Lorentzprofil wesentlich besser reproduziert als von einer Gaussfunktion, was darauf schließen lässt, dass die Linienbreiten gemäß Gu und MCDF zu schmal vorhergesagt werden. Ein Fit mit einem Voigt-Profil (Faltung aus Lorentz und Gauss), was als Standardmethode zur Trennung der Beiträge von experimenteller und natürlicher Linienbreite herangezogen wird, liefert sogar eine experimentelle Breite von lediglich 40 meV, womit ein Auflösungsvermögen von

Tabelle 5.8: Vergleich zur erzielten spektroskopischen Auflösungsvermögen anderer Messungen an hochgeladenen Ionen, sowie Photoionisations-Messungen an Ionen und Atomen.

System, Resonanz	E_{res}	ΔE (meV)			$\frac{E_{res}}{\Delta E_{exp}}$	Anmerkung / Ref.
		tot.	exp.	nat.		
$\text{Fe}^{14+} 2p_{1/2}3d_{3/2}$	807 eV	130	125	36	6500	ΔE_{nat} : RMBPT
			95	86	8300	ΔE_{nat} : HULLAC
			40	125	20 000	ΔE_{exp} : Voigt
$\text{Bi}^{80+} 2s_{1/2}3p_{3/2}$	2788 eV				> 20 000	Hámos Spekt. [149]
$\text{Pb}^{79+} 2s_{1/2}3p_{3/2}$	2642 eV		500		5000	[193]
Ar^{14+}	≈ 3000 eV				6000	[194]
$\text{Ne}^+, \text{Ne}^{2+}$	850 eV				670	[47]
Ce^{9+}	135 eV		15		9000	[44]
N^{3+}	77 eV		3.3		20 000	[96]
$\text{Ne } 1s3p$	867 eV	278	73		11 000	ΔE_{exp} : Voigt [177]
Ne					6000	[47]
He	64 eV		1		64 000	[181]

20 000 verbunden wäre.

Andere Untersuchungsmethoden an hochgeladenen Ionen haben, mit wenigen Ausnahmen (Kristall-Spektrometer), in diesem Energiebereich keine höhere Genauigkeit erreicht. Selbst im Vergleich mit Photoionisations-Messungen an niedrig geladenen Ionen und auch Atomen ist die erreichte Auflösung bemerkenswert. In Zukunft können Theorien mit verbesserten Kalibrierungsverfahren noch strengeren Tests unterzogen werden.

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

"Fünfzig Jahre intensiven Nachdenkens haben mich der Antwort zu der Frage
"Was ist Licht?" nicht näher gebracht."

Albert Einstein, 1951

Ziel dieser Arbeit war die Anwendung einer neuen Methode zur Untersuchung der Photoionisation hochgeladener Ionen, welche auf dem Einsatz einer Elektronenstrahl-Ionenfalle an einer Synchrotron-Strahlungsquelle der dritten Generation beruht. Bisher war die genaue Untersuchung dieses Prozesses auf Ionen mit niedrigem Ionisationspotential und entsprechend geringeren Ladungszuständen beschränkt ($E_{IP} \leq 150$ eV). Mit der neuen Methode, die hier bereits bis $E_{IP} = 686$ eV (Ar^{12+}) und $q = 14$ (Fe^{14+}) demonstriert wurde, steigt die Zahl der zugänglichen Systeme drastisch an und erschließt somit Bereiche, die in der Atomtheorie und speziell in der Astrophysik von hoher Aktualität sind.

Die experimentelle Herausforderung, Ionen mit hohen Flächen-Ladungsdichten als Target für Photoionisations-Experimente zur Verfügung zu stellen, konnte mit einer Elektronenstrahl-Ionenfalle gut gemeistert werden. Abhängig von Element und Ladungszustand liegen die erzielten Werte bei 10^8 bis 10^{10} Target-Ionen pro cm^2 . Dies übertrifft die Dichte bisher eingesetzter Ionstrahlen um drei bis vier Größenordnungen. Der Nachweis der Photoionisation erfolgte in diesen Experimenten durch Extraktion der Ionen und anschließende Separation der Ladungszustände. Sowohl die Photoionen als auch die Target-Ionen können dabei als Zählraten effizient detektiert werden.

Zwei Kampagnen wurden mit der transportfähigen FLASH-EBIT am Berliner Elektromagnetspeicherring für Synchrotron Strahlung (BESSY II) durchgeführt. Während der ersten im Jahr 2008 konnte die Photoionisation von N^{3+} Ionen im Grundzustand $1s^2 2s^2$ bzw. im metastabilen Zustand $1s^2 2s 2p$ an der Beamline U125/2-SGM (Undulator Beamline mit sphärischem Gittermonochromator) erfolgreich vermessen werden. Mit einem Ionisationspotential von $E_{IP}^{\text{N}^{3+}} \approx 77$ eV liegt dieses Ion in einem Bereich, der schon mit den etablierten Methoden zugänglich war. Bei diesem Experiment war ein besonders anspruchsvoller Betrieb der Elektronenstrahl-Ionenfalle bei sehr niedrigen Energien erforderlich. Es zeigte sich eine sehr gute Übereinstimmung mit MB Ergebnissen, was die Tauglichkeit der neuen Methode auf sehr überzeugende Weise bestätigte. Ein zyklisches Messverfahren wurde angewandt, wodurch die neuen Möglichkeiten, welche gefangene Ionen in der EBIT für

Photoionisations-Studien bieten, aufgezeigt wurden. Die Erzeugung der Target-Ionen, die Wechselwirkung mit den Photonen und der Nachweis der Photoionisation können zeitlich getrennt und variabel gestaltet werden. Eine wichtige Anwendung solcher Messzyklen ist die Unterdrückung der oft störenden Beiträge von Target-Ionen in metastabilen Zuständen [61]. Die Möglichkeit der Kontrolle über die Wechselwirkungs-Dauer wurde für die Bestimmung eines absoluten Wirkungsquerschnitts genutzt [51].

Bei der zweiten Kampagne (2009) bei BESSY II wurde die Beamline U49/2-PGM1 benutzt (Undulator Beamline mit planem Gittermonochromator), welche einen deutlich höheren Photonen-Energiebereich abdeckt (85 bis 1600 eV). Dadurch konnte die Messung bei vorteilhaften kontinuierlichen Bedingungen durchgeführt werden. Bei konstant gehaltenen EBIT- und Extraktions-Parametern wurde lediglich die Photonen-Energie in Schritten variiert. Im Laufe dieser Kampagne wurden Untersuchungen mit $\text{Ar}^{8,10,12+}$ und $\text{Fe}^{12,14+}$ durchgeführt, wobei die Studien der Ionen Ar^{8+} und Fe^{14+} besonders systematisch waren. Alle gemessenen Ionisationspotentiale und Resonanzenergien stellen dabei die ersten existierenden experimentellen Werte zur Photoionisation dieser Ionen dar. Am Ne-artigen System Ar^{8+} zeigten sich die besonders günstigen Bedingungen für Systeme mit geschlossenen Schalen, welche in einer EBIT in höheren Dichten bereitgestellt werden können, als jene mit offenen Schalen.

Die Messungen am 14-fach geladenem Eisen sind in mehrfacher Hinsicht besonders hervorzuheben. Es handelt sich um das Ion mit dem höchsten Ladungszustand, dessen Photoionisations-Spektrum je vermessen wurde. Im Bereich der Ionisationskante ($E_{IP}^{\text{Fe}^{14+}} \approx 456 \text{ eV}$) konnte die Empfindlichkeit auf Wirkungsquerschnitte im keV-Bereich gezeigt werden. Zu höheren Photonen-Energien bis in den keV-Bereich wurden starke Resonanzen durch L -Schalen Anregungen untersucht. Auf der $2p_{1/2}3d_{3/2}$ Resonanz konnte ein Auflösungsvermögen von $E/\Delta E=6500$ erreicht und die Bestimmung eines absoluten Wirkungsquerschnitts demonstriert werden. Unsicherheiten der gemessenen Resonanzenergien resultieren hauptsächlich aus der Kalibrierung der Photonen-Energie. Herkömmliche Photoabsorption in Neutralgas ist an der Grenze zum keV-Bereich auf rund 100 meV Genauigkeit begrenzt (Ne $1s3p$). In Zukunft könnten Ionisationspotentiale Wasserstoff-artiger Systeme, oder Resonanzen Helium-artiger Systeme (z.B. O^{6+}) als genauere Standards dienen, da Theorien für Ein- und Zwei-Elektronen Systeme wesentlich verlässlichere Werte liefern.

In manchen astrophysikalischen Fragestellungen sind diese Genauigkeiten zwingend erforderlich, wenn beispielsweise über die Dopplerverschiebung verschiedener Resonanzlinien auf Geschwindigkeiten von Objekten und Strukturen rückgeschlossen werden soll. Ein aktuelles Beispiel ist die Kontroverse um die Existenz von zwei hydrodynamischen Phasen in den Plasmawinden eines paradigmatischen aktiven galaktischen Kerns, welche anhand der hier präsentierten Ergebnisse gelöst wurde.

Die Vorbereitung für die nächste Strahlzeit bei BESSY II sind bereits angelaufen. Im Mai 2010 sollen die Photoionisations-Experimente mit der FLASH-EBIT fortgesetzt werden. Durch eine verbesserte Ionen-Extraktion und vor allem durch eine ständig mitlaufende Kalibrierung in einer eigenen Gas-Ionisationszelle sollte es möglich sein, die bereits erreichte Qualität und Genauigkeit der Untersuchungen weiter zu verbessern. Ziele sind die Bestimmung eines absoluten Wirkungsquerschnitts mit einer Genauigkeit von wenigen Prozent

sowie die Vermessung von L -Schalen-Ionisationspotentialen hochgeladener Eisenionen, wo Empfindlichkeiten im unteren keV-Bereich bei Photonen-Energien im keV-Regime gezeigt werden sollen.

Weitere Planungen umfassen Ende 2010 den Einsatz der FLASH-EBIT am *Linac Coherent Light Source* bei SLAC im Rahmen eines bereits genehmigten Antrags. Durch die extrem hohen Photonenflüsse dieses Röntgenlasers können Messungen an hochgeladenen Ionen im keV-Bereich bei Photonendichten durchgeführt werden, bei denen die Beobachtung von Zwei-Photonen Prozessen zu erwarten ist.

Mittelfristiges Ziel sollte auf jeden Fall die Installation einer permanenten und adaptierten Elektronenstrahl-Ionenfalle an einer modernen Synchrotron-Strahlungsquelle wie BESSY II oder PETRA III sein. Mit den vorliegenden Ergebnissen wurde gezeigt, dass die Kombination von intensiver, hochauflösender Strahlung im keV-Bereich mit hochgeladenen Ionen genaueste Informationen über die Atomstruktur und Photoionisations-Dynamik liefern kann. Mit einem permanenten Aufbau könnten zeitaufwändige, systematische Untersuchungen entlang isonuklearer und isoelektronischer Sequenzen wesentlich effektiver erfolgen. Die dabei gesammelten Einblicke in die Entwicklung der Wellenfunktionen und in die Korrelationen in Mehr-Elektronensystemen werden wesentlich zum besseren Verständnis der komplexen Strukturen von ionischen Systemen beitragen.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die hier vorgestellte Methode ein neues experimentelles Fenster zur Überprüfung theoretischer Beschreibungen der Atomstruktur von besonderer Genauigkeit öffnet, wie das erreichte Auflösungsvermögen von 6500 bei 800 eV zeigt. Darüber hinaus ergeben sich durch die Kombination "EBIT-Synchrotron" neue Möglichkeiten bei der Erforschung dünner Plasmen, die sowohl in der Fusionsforschung als auch in der Astronomie eine wichtige Rolle spielen. Die Modellierung solcher Plasmen sowie die Identifikation von Emissions- und Absorptionslinien beruhte im Bereich hoher Ladungszustände auf ungeprüften theoretischen Vorhersagen. Hier konnten grundlegende physikalische Größen, wie Resonanzenergien und Photoionisations-Wirkungsquerschnitte zum ersten Mal experimentell bestimmt werden. Da mit Elektronenstrahl-Ionenfallen auch bei schweren Elementen alle Ionisationszustände erreicht werden können [138] liegt die experimentelle Grenze dieser neuen Methode ausschließlich bei den erreichbaren Photonen-Energien. Gerade zur Überprüfung fundamentaler Theorien (QED) sind Wenig-Elektronensysteme mit schweren Kernen besonders geeignet. Daher lassen sich in naher Zukunft durch die verfügbar werdenden Röntgenquellen tiefe Einblicke in die Grundlagenphysik erwarten.

Anhang A

Herleitungen und mathematische Betrachtungen

Spektrale Breite der Synchrotronstrahlung

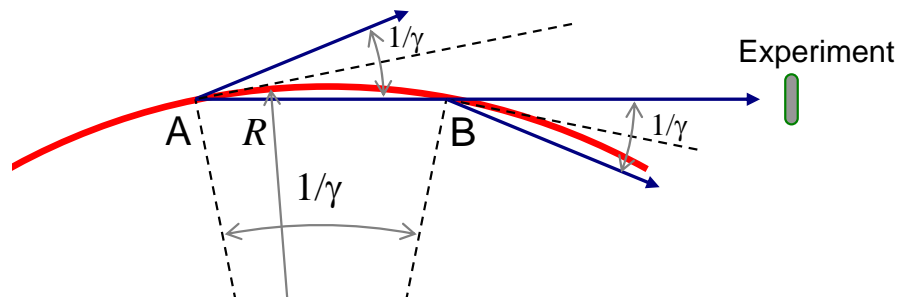


Abbildung A.1: Veranschaulichung zur Abschätzung der spektralen Breite von Synchrotronstrahlung.

Man benutzt die Heisenberg'sche Unbestimmtheitsrelation ($\Delta E \cdot \Delta\tau \geq \hbar/2$) und die Zeitdauer des Lichtpulses ($\Delta\tau$), den ein Elektron (oder kleines Elektronenpaket) bei einem externen Beobachter (Experiment) hervorruft, um die Energiebreite (ΔE) abzuschätzen. Dazu betrachtet man in Abbildung A.1 jenen Teil der Kreisbahn, der mit der Beobachtungsrichtung Winkel einschließt, die kleiner sind als der Öffnungswinkel $\theta_K = \frac{1}{\gamma}$ des Abstrahlkegels gemäß (4.7). Aus Abbildung entnimmt man die Laufzeitdifferenz ($2\Delta\tau$) zwischen den ersten ausgesandten Photonen bei Punkt "A" und den letzten bei Punkt "B". Im hoch relativistischen Fall ($\gamma \gg 1$) sind Kreisbogenlänge der Elektronenbahn und Kreissegmentlänge der Photonen praktisch identisch und die Laufzeitdifferenz folgt aus den Geschwindigkeiten der Elektronen und Photonen

$$2\Delta\tau \approx \frac{R}{2\gamma} \left(\frac{1}{\beta c} - \frac{1}{c} \right) \approx \frac{R}{2c\gamma^3} \quad , \quad (\text{A.1})$$

wobei R für den Bahnradius steht. Verwendung der Unbestimmtheitsrelation und anschließendes Ersetzen des Bahnradius durch einen Ausdruck, der den γ -Faktor und die

Magnetfeldstärke B enthält, liefert

$$\Delta E \geq \frac{2 \hbar c \gamma^3}{R} = \frac{2 e \hbar B \gamma^2}{m} . \quad (\text{A.2})$$

Mit typischen Werten für den γ -Faktor und die Magnetfelder B erhält man Photonen-Energien im keV-Bereich.

Undulator-Gleichung

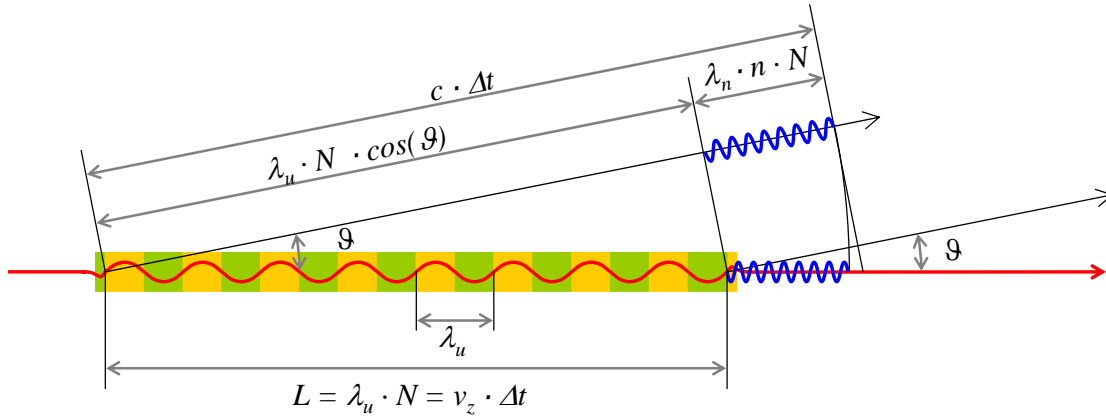


Abbildung A.2: Geometrische Betrachtung zur Herleitung der Undulator-Gleichung (4.11). Die N Perioden des Undulators sind im abgestrahlten elektromagnetischen Feld komprimiert.

Das elektromagnetische Feld, welches von einem Undulator mit N Perioden abgestrahlt wird besteht ebenfalls aus N Wellenzügen, die in einem Bereich Δs komprimiert sind. Die Front dieser Wellenzüge wird vom Anfang des Undulators mit Lichtgeschwindigkeit c ausgesandt und hat einen (winkelabhängigen) Vorsprung gegenüber der Wellenzüge am Ende des Undulators, den das Elektronenbündel mit $v_z < c$ erreicht. Über die geometrischen Verhältnisse (siehe Abbildung A.2) lässt sich Δs ausdrücken

$$\Delta s = \lambda_n \cdot n \cdot N = c \cdot \Delta t - \lambda_u \cdot N \cdot \cos(\vartheta) , \quad (\text{A.3})$$

wobei λ_u Undulator-Periodenlänge, λ_n Photonen-Wellenlänge der Ordnung n und ϑ der Abstrahlwinkel sind. Das Zeitintervall Δt kann aus der Undulatorlänge L und der Elektronen-Geschwindigkeit berechnet werden, wobei speziell im Falle $K \gg 1$ die effektive Geschwindigkeit in z -Richtung entscheidend ist

$$v_z^{eff} \approx \frac{1}{\lambda_u} \int_0^{\lambda_u} d\lambda \sqrt{c^2 \beta^2 - (v_x(z))^2} , \quad (\text{A.4})$$

mit dem Ausdruck für $v_x(z)$ gemäß (4.10) und weiterer Vereinfachung erhält man

$$v_z^{eff} = c\beta \left(1 - \frac{K^2}{4\beta^2\gamma^2}\right) = \frac{N \lambda_u}{\Delta t} . \quad (\text{A.5})$$

Ausdrücken von Δt aus (A.5) und einsetzen in (A.3), sowie entwickeln der Kosinus-Funktion und Benutzung von $\beta \approx 1$ liefern die Undulator-Gleichung (4.11)

$$\begin{aligned} \lambda_n \cdot n \cdot N &= c \cdot \frac{N \lambda_u}{c\beta \left(1 - \frac{K^2}{4\beta^2\gamma^2}\right)} - \lambda_u \cdot N \cdot \left(1 - \frac{\vartheta^2}{2}\right) \\ \lambda_n \cdot n &= \lambda_u \left[\frac{1}{\beta} \left(1 - \frac{K^2}{4\beta^2\gamma^2}\right)^{-1} - 1 + \frac{\vartheta^2}{2} \right] \dots \left(\frac{1}{\beta} - 1\right) \approx (1 - \beta) \approx \frac{1}{2\gamma^2} \\ \lambda_n \cdot n &= \lambda_u \left(\frac{1}{2\gamma^2} + \frac{K^2}{4\gamma^2} + \frac{\vartheta^2}{2} \right) \\ \lambda_n &= \frac{\lambda_u}{2 n \gamma^2} \left(1 + \frac{K^2}{2} + \gamma^2 \vartheta^2 \right) . \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Ablenker

Das elektrische Feld zwischen den konzentrischen Zylinderflächen mit Radien r_i und r_a berechnet man am einfachsten mit dem Satz von Gauss unter Ausnutzung der Symmetrie. Auf Zylinderflächen $A_r^{Zyl} \propto r$ mit $r_i \leq r \leq r_a$ steht das Feld senkrecht

$$\int_{A_r^{Zyl}} d^2 \vec{f} \cdot \vec{E}(r) = \int_{V_r^{Zyl}} d^3 r \vec{\nabla} \cdot \vec{E}(r) = \int_{V_r^{Zyl}} d^3 r \frac{\rho}{\epsilon_0} = konst. \rightarrow E(r) \propto \frac{1}{r} \quad (\text{A.7})$$

Das elektrische Feld ist also proportional zu r^{-1} und das Potential demzufolge zu $\ln(r)$. Mit den Randbedingungen $\Phi(r = r_i) = 0$ und $\Phi(r = r_a) = U_{bend}$ folgt

$$\Phi(r) = U_{bend} \cdot \frac{\ln(r/r_i)}{\ln(r_a/r_i)} . \quad (\text{A.8})$$

Um bei gegebenen Abmessungen und einer bestimmten Beschleunigungs-Spannung der Ionen U_{extr} die erforderliche Ablenkspannung U_{bend} zu ermitteln sucht man einen Ausdruck für die "Wurfweite" w

$$w = v_0 \cdot \cos(\alpha) \cdot t \quad , \quad v_0 = \sqrt{\frac{2qU_{extr}}{n}} \quad , \quad t = 2 \int_{r_i}^{r_{max}} \frac{dr}{v_r(r)} . \quad (\text{A.9})$$

Die radiale Geschwindigkeits-Komponente als Funktion des Radius $v_r(r)$ erhält man aus der Energieerhaltung

$$\frac{1}{2}m(v_0 \sin(\alpha))^2 = q U_{extr} \sin^2(\alpha) = \frac{1}{2}m(v_r(r))^2 + q\Phi(r) , \quad (\text{A.10})$$

mit der Abkürzungen $f = \frac{U_{bend}}{U_{extr}}$ folgt

$$v_r(r) = \sqrt{\frac{2qU_{extr}}{m}} \sin(\alpha) \sqrt{1 - \frac{f}{\sin^2(\alpha)} \frac{\ln(r/r_i)}{\ln(r_a/r_i)}} . \quad (\text{A.11})$$

einsetzen und lösen (Substitution $\ln(r/r_i) = s$) liefert.

$$w = 2\sqrt{\pi}r_i \cdot \cos(\alpha) \sqrt{\frac{\ln(r_a/r_i)}{f}} (r_a/r_i)^{\frac{\sin^2(\alpha)}{f}} \operatorname{erf} \left(\frac{\sin^2(\alpha)}{f} \ln(r_a/r_i) \right) \quad (\text{A.12})$$

Daraus errechnet sich mit den Abmessungen des konstruierten Anlenkers ($r_i=9$ mm, $r_a=22.5$ mm, $w=38.57$ mm) für die 90° -Ablenkung ein Wert für f von 0.6821, wie in (4.26). Die maximale "Wurfweite" würde hier bei 114.4° auftreten.

Wien-Filter

Ausgehend von (4.27) und dem Trägheitsgesetz kann die Bewegungsgleichung für geladene Teilchen im gekreuzten elektrischen und magnetischen Feld des Wien-Filters angeschrieben werden

$$\ddot{\vec{x}} = \frac{q}{m} \left(\vec{E} + \dot{\vec{x}} \times \vec{B} \right) . \quad (\text{A.13})$$

Wählt man das kartesische Koordinatensystem so, dass $\hat{E} = \hat{y}$, $\hat{B} = \hat{z}$ und beim Eintritt des Teilchens ($t = 0$) in den Wien-Filter $\hat{v} = \hat{x}$ gilt, so findet die Bewegung in der xy -Ebene statt und man erhält die beiden gekoppelten Differentialgleichungen zweiter Ordnung

$$\begin{aligned} \ddot{x} &= \frac{q}{m} \dot{y} B_z \\ \ddot{y} &= \frac{q}{m} (E_y - \dot{x} B_z) \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

mit $\dot{\vec{x}} = \vec{v}$ bzw. $\ddot{\vec{x}} = \dot{\vec{v}}$ sowie $v_{pass} = \frac{E}{B}$ (4.28) und $\omega_z = \frac{qB}{m}$ (4.4) folgen die gekoppelten Differentialgleichungen erster Ordnung

$$\begin{aligned} \dot{v}_x &= \omega_z v_y \\ \dot{v}_y &= \omega_z (v_{pass} - v_x) \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

mit folgender Lösung zu der Anfangsbedingung $\vec{v}(t = 0) = v_0 \hat{x}$

$$\begin{aligned} v_x(t) &= v_{pass} - (v_{pass} - v_0) \cos(\omega_z t) \\ v_y(t) &= (v_{pass} - v_0) \sin(\omega_z t) . \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Daraus erkennt man, dass bei unendlicher Ausdehnung des Wien-Filters alle Teilchen Oszillationen mit der Zyklotronfrequenz ω_z durchführen und immer wieder zu $y = z = 0$ zurückkehren. Für die volle Amplitude A dieser Bewegung gilt

$$A = 2 \frac{v_{pass} - v_0}{\omega_z} . \quad (\text{A.17})$$

Durch die endliche Länge l und den endlichen Plattenabstand d (elektrisches Feld $E_y = \Delta U/d$) gelten für unerwünschte Oszillationen *a priori* Einschränkungen. Nach einem Viertel der Periodendauer τ der Oszillationen erreicht die Geschwindigkeit in y -Richtung ein Maximum. Bis dahin sollten die Teilchen den Wien-Filter wieder verlassen haben, da andernfalls die weitere räumliche Separation der Ladungszustände auf der anschließenden Driftstrecke (Wienfilter \rightarrow Detektor: s_{drift}) beeinträchtigt wird. Daraus lässt sich eine Bedingung für das höchst zulässige elektrische Feld bzw. die Spannung ΔU an den Feldplatten angeben, damit keine Oszillationen auftreten

$$\begin{aligned} v \cdot \frac{\tau}{4} &= \frac{E}{B} \cdot \frac{\pi}{2 \omega_z} \geq l \\ \omega_z &= \frac{q}{m} B = \frac{1}{2 U_{extr}} \frac{E^2}{B} \\ l &\leq \frac{\pi U_{extr}}{E} \\ \Delta U &\leq U_{extr} \frac{\pi d}{l} . \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Um bei einem Ladungszustand-Scan immer die maximale Auflösung zu erzielen müsste man bei dieser Einstellung des elektrischen Felds das magnetische variieren. Praktisch ist es jedoch viel einfacher, das schlechter reproduzierbare Magnetfeld konstant zu halten und das elektrische Feld zu ändern. Soll der Scan bis zur maximalen spezifischen Ladung $(q/m)_{max}$ reichen, so gilt für das Magnetfeld

$$B \leq \frac{\pi}{l} \sqrt{\frac{U_{extr}}{2 \left(\frac{q}{m}\right)_{max}}} . \quad (\text{A.19})$$

Da nach dem Wien-Filter eine Driftstrecke s_{drift} folgt mit $s_{drift} \gg l$ ist in erster Linie Ablenkungswinkel α für die Ortsauflösung Δy am Detektor entscheidend. Im *linearen* Bereich, wo Oszillationen noch keine Auswirkungen haben gilt

$$\tan \alpha \approx \frac{v_y(t_{x=l})}{v_x(t_{x=l})} \approx \frac{\Delta y}{s_{drift}} \approx \frac{(v_{pass} - v_0) \omega_z l}{v_0^2} \approx (v_{pass} - v_0) \frac{B l}{2 U_{extr}} . \quad (\text{A.20})$$

Der relevante Fall im Photoionisations-Experiment sind zwei benachbarte Ladungszustände ($\Delta q = e$) eines Elements (m). Damit folgt für die Separation am Detektor

$$\Delta y = s_{drift} \frac{e B l}{\sqrt{2 m q U_{extr}}} . \quad (\text{A.21})$$

Wien-Filter Position

Die z -Komponente eines in z -Richtung ausgerichteten magnetischen Dipolfeldes (Fernfeld des supraleitenden Helmholtz-Spulenpaares) hat auf in der xz -Ebene die Form

$$B_z(x, z) = \tilde{B} \frac{x^2 - 2z^2}{(x^2 + z^2)^{5/2}} . \quad (\text{A.22})$$

Ionen, die sich bei $x=0$ und $z=z_0$ (Position des elektrostatischen Ablenkens) mit v_x in x -Richtung bewegen, erfahren eine Beschleunigung in y -Richtung proportional zu B_z , v_x und q/m . Zweimalige Zeitintegration liefert die Auslenkung

$$\Delta y_{\tilde{B}_{EBIT}} = \int \int d^2t \left(\frac{q}{m} v_x \cdot B_z(x, z_0) \right) \propto \frac{q \tilde{B}}{m v_x z_0^2} \frac{x^2}{\sqrt{x^2 + z_0^2}} . \quad (\text{A.23})$$

Experimentelles Fanoprofil

Die typischerweise gaussförmige experimentelle Verbreiterung eines Fanoprofils gemäß (2.17) erfordert die Faltung dieser beiden Funktionen

$$F_{Fano \otimes Gauss}(E_{res}, q, \gamma, FWHM) = \int_{-\infty}^{\infty} dE F_{Fano}(E_{res} - E, q, \gamma) \cdot F_{Gauss}(E, FWHM), \quad (\text{A.24})$$

wobei $F_{Gauss}(E, FWHM)$ eine auf 1 normierte Gaussfunktion (dimension einer inversen Energie) um $E=0$ mit Halbwertsbreite $FWHM$ darstellt. Dieses Integral kann analytisch nicht gelöst werden. Will man zusätzlich zu den Parametern des Fanoprofils auch die experimentelle Breite als Fitparameter bei der Analyse der Daten extrahieren, so führt bei einer gaussförmigen Verbreiterung kein Weg an einem Programm vorbei, das die gefaltene Funktion diskret erzeugt.

Prinzipiell stellt sich die Frage, ob die Verbreiterung mit einem Gauss zwingend ist. Es handelt sich ja nicht um eine Dopplerverbreiterung, bei der die Gaussform physikalisch begründet ist. Tatsächlich kann man auf Grund von Austrittspalt und Dispersion auch Argumente für die Verwendung einer Rechteckfunktion für die Verbreiterung finden. Weiters (österreichisch für "Ferner") kann man die Dichteverteilung der Ionenwolke miteinbeziehen. Als kombinierte Funktion bot sich daher ein parabelförmiges Profil an, welches im eine analytische Lösung des Faltungsintegrals zulässt. Diese normierte Parabelfunktion hat die Form

$$F_{Parabel}(E) = \begin{cases} \frac{3}{4b} \left(1 - \left(\frac{E}{b}\right)^2\right) & , |E| < b \\ 0 & , |E| > b \end{cases} , \quad (\text{A.25})$$

wobei b ein Maß für die Breite der Funktion. Die Lösung des Faltungsintegrals ergibt zwar keinen simplen Ausdruck, dennoch kann dieser in herkömmlichen Fitprogrammen (**Origin** oder **Fityk**) definiert werden. Abbildung A.3 zeigt das Ergebnis dieser Verbreiterung mit zwei verschiedenen Werten für b .

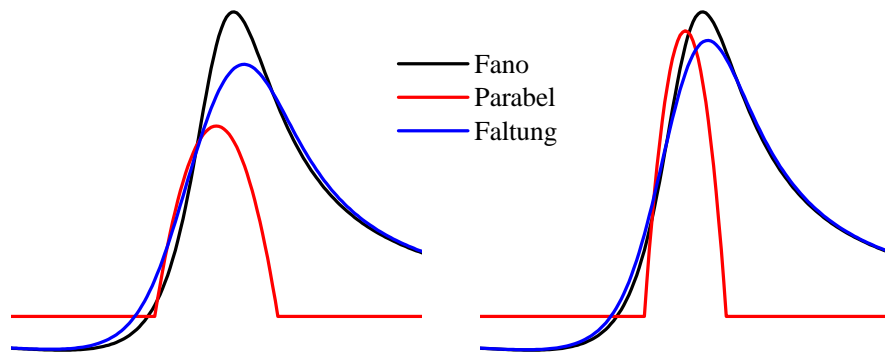


Abbildung A.3: Faltung eines Fanoprofils mit zwei verschiedenen breiten Parabelfunktionen gemäß (A.25).

Erweiterte lineare Regression

Die Resonanzen durch Photonen zweiter Ordnung können als Bedingung in eine lineare Regression für eine Verbesserung der Kalibrierung dienen. Für die absoluten Kalibrierungspunkte der Absorptionmessung muss folgender Ausdruck, der sich aus (4.33) ergibt, minimiert werden

$$\sum_i \left(a \cdot E_{mono}^i + b - \underbrace{(E_{tat}^i - E_{mono}^i)}_{\Delta E_{Kal.}^i} \right)^2 . \quad (\text{A.26})$$

Ein ähnlicher Ausdruck lässt sich aus einer Resonanz konstruieren, deren Position gemäß nomineller Monochromatorwerte in erster und zweiter Ordnung bekannt ist.

$$E_{mono}^{1.O}(1+a) + b \Leftrightarrow 2 \left(E_{mono}^{2.O}(1+a) + b \right) , \quad (\text{A.27})$$

daher muss folgender Ausdruck minimiert werden

$$\left(a \cdot (2E_{mono}^{2.O} - E_{mono}^{1.O}) + b + (2E_{mono}^{2.O} - E_{mono}^{1.O}) \right)^2 \quad (\text{A.28})$$

Durch die Identifikation von $E_{mono}^i = -\Delta E_{Kal}^i = 2 E_{mono}^{2.O} - E_{mono}^{1.O}$ ergibt sich daraus eine formal identische Bedingung zu (A.26), welche in der linearen Regression mitberücksichtigt wird.

Anhang B

Erweiterte Ausführungen und nützliche Informationen

Überlappung herstellen

Die Prozedur zur Gewährleistung der Photonen-Ionen Überlappung enthält folgende Schritte:

- Grobeinrichtung der FLASH-EBIT in Bezug auf die Undulator-Beamline.
- Photonenstrahl durch die Bohrung im Spiegel fädeln, mittels vorderem EBIT-Justierfuß (Zielscheibe auf Rückseite des Ablenkers, dann 46 mm Distanz mit dem Z-Manipulator).
- Der Photonenstrahl ist nun normalerweise auf der Irisblende in der Kollektorkammer zu sehen. Position der FLASH-EBIT mittels der beiden hinteren Justierfüße justieren, sodass der Photonenstrahl zentral durch die Irisblende verläuft.
- Der Photonenstrahl sollte mittels des Strahlteilers zwischen Falle und Elektronenkanone sichtbar sein. Falls nicht: systematisches Suchen durch kleine Verstellungen an allen Justierfüßen.

Nach dieser Grobeinrichtung folgt die eigentliche Herstellung der Überlappung mittels Cr:YAG-Kristall, wofür der EBIT-Betrieb zwischen den Photoionisations-Messungen immer wieder unterbrochen werden muss.

- Elektronenstrahl abstellen (physikalische Trennung von der Kathode vom leistungsstarken Netzgerät).
- Kathodenheizung reduzieren (vorerst nur geringfügig, falls die Bewegung des Kristallhalters mit der CCD-Kamera mitverfolgt werden soll - Werte der Filamentheizspannung um 4.5 V sind oft ausreichend, um die benötigten μm -Strom zu erzeugen).
- Cr:YAG-Kristall mittels Linear-Manipulator langsam in den Fallenbereich verschieben; dabei ständig kleine Bewegungen am Drehmanipulator durchführen, damit (i)

der Führungsbolzen in der Führungsnabe nicht hängen bleibt und (ii) man spürt, wann das Fallenzentrum erreicht ist und die Führungsnabe die Drehung um 90° zulässt.

- Kathode mit einem leistungsschwachen HV-Netzgerät verbinden, das maximale Ströme im unteren μA Bereich erzeugt (eventuell Strombegrenzung). Elektronenstrahl durch negative Fokusspannung blockieren.
- Bandpass- oder Interferenzfilter im passenden Bereich zur Fluoreszenzstrahlung nicht vergessen.
- CCD-Kamera (LUCA) auf Videomodus stellen und Elektronenstrahl abbilden. Das Auftreten der Fluoreszenz durch den Elektronenstrahl ist dabei extrem sensitiv auf die Fokusspannung (einzelne Volt-Schritte). Nach dem Aufleuchten der Fluoreszenz Video abspeichern. Position des Elektronenstrahls im Kamera-Koordinatensystem bestimmen.
- Photonenstrahl kontinuierlich abbilden und FLASH-EBIT durch feine Justage an den Justierfüßen bewegen, bis der Photonenstrahl an der selben Stelle erscheint, wie zuvor der Elektronenstrahl.

Details zur weiterentwickelten Sikler-Linse

Die vier zentralen Elemente der Sikler Linse müssen nach der Herstellung durch die beiden Schnitte beim Zusammenbau möglichst exakt ausgerichtet werden. Einige konstruktive Entwicklungen haben sich dabei bewährt. Solche, die bereits in der zweiten Generation (siehe Tabelle B.1) umgesetzt wurden, sind mit [†] gekennzeichnet, jene der dritten Generation mit [‡]:

- Bei der Durchführung der beiden Schnitt greift eine Halterung das zentrale Element von außen und ist groß genug dimensioniert, um beim Schneiden nicht getrennt zu werden[†].
- Damit die Elemente radial die richtige Position einnehmen, hat der äußere, ringförmige Fortsatz des zentralen Elements eine Führungsnut[†]. Die Gegenstücke sind zwei Isolatorringe, zwischen denen der Fortsatz eingeklemmt wird (bei den meisten bestehenden Linsen sind diese Isolatorringe aus PEEK). Der Innen-Durchmesser ist auf Passung gefertigt und die einzelnen Elemente können dort satt aufliegen. Die äußere Kante der Führungsnut ist mit einer 45° -Phase ausgeführt[‡]. Auf diese Weise wird das Element gegen die Passung am Innen-Durchmesser gedrückt und präzise gehalten, ohne dass bei der Fertigung mit der entsprechenden Präzision gearbeitet werden muss. Bei einer geraden Außenkante, wie wie beim Vorgängermodell[†] noch verwendet wurde, ist die Passung überbestimmt.
- Die polare Ausrichtung wird durch Bohrungen gewährleistet, in welche nur während des Zusammenbaus Metallbolzen gesteckt werden[†]. Um die bestmögliche Genauigkeit zu erzielen und nicht durch typische Fertigungstoleranzen begrenzt zu sein, wird

das ungeschnittene zentrale Element zusammen mit den Isolatorringen gebohrt[‡] (gepresster Zusammenbau). Die eindeutige Markierung aller Elemente darf auf keinen Fall vergessen werden, damit die gemeinsam gebohrten Löcher beim Zusammenbau der einzelnen Elemente wieder zusammen kommen. Nach dem die Elemente mit Hilfe der Metallbolzen in den Ausrichtbohrungen schichtweise übereinander aufgebaut wurden, werden sie zusammengeklemt. Die Metallbolzen können nun entfernt werden. Die einzelnen Elemente werden durch Presskraft in Position gehalten[‡]. Keramikbolzen, die eingebaut bleiben können, haben sich nicht bewährt, weil sie zu spröde sind[‡]. Da die Ausrichtbohrungen nach dem Zusammenbau frei ist, kann sie gleichzeitig als Entlüftung für die elektrische Kontaktierung der einzelnen Elemente dienen[‡].

- Nach Durchführung der beiden Schnitte zeigen die vier entstehenden Elemente eine Symmetrie, die es nahe legt die fertige Sikler Linse in Bezug auf die Lage beim Schneiden um 45° verdreht einzubauen[‡]. Damit erreicht man eine Ansteuerung der einzelnen Elemente, die jener von zwei Ablenk-Plattenpaaren entspricht. Folglich ist auch die Benennung der Elemente als *oben*, *unten*, *links* und *recht* angebracht (engl.: *top*, *bottom*, *left*, *right*).

Die Segmente werden mit vier individuellen Spannungen beaufschlagt (U_{bot} , U_{top} , U_{lef} , U_{rig}) und stellen vier freie Parameter dar. Bei der Ansteuerung sind vorerst nur drei Manipulationen von Interesse: (i) Fokussierung (ii) vertikale Richtungskorrektur unten-oben und (iii) horizontale Richtungskorrektur links-rechts. Die vierte Manipulation ist eine astigmatistische Korrektur. Für eine astigmatismusfreie Strahlmanipulation gilt folgende Bedingung

$$U_{fok} = \frac{U_{bot} + U_{top}}{2} = \frac{U_{lef} + U_{rig}}{2} . \quad (\text{B.1})$$

Offensichtlicher Weise hängt die Fokussierstärke mit U_{fok} zusammen und die Stärke der Richtungskorrektur von mit den Differenzen der einzelnen Spannungen in Bezug zu U_{fok}

$$\begin{aligned} (i) &\propto U_{fok} \\ (ii) &\propto U_{fok} - U_{bot} = U_{top} - U_{fok} = U_{ver} \\ (iii) &\propto U_{fok} - U_{lef} = U_{rig} - U_{fok} = U_{hor} \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Ist (B.1) nicht erfüllt, so sind die horizontale und die vertikale Fokussierstärke unterschiedlich, was einer astigmatischen Abbildung entspricht.

$$\begin{aligned}
 U_{fok}^{ver} &= \frac{U_{bot} + U_{top}}{2} \\
 U_{fok}^{hor} &= \frac{U_{lef} + U_{rig}}{2} \\
 U_{fok} &= \frac{U_{fok}^{ver} + U_{fok}^{hor}}{2} \\
 U_{ast} &= U_{fok} - U_{fok}^{ver} = U_{fok}^{hor} - U_{fok}
 \end{aligned} \tag{B.3}$$

Aus den vier anschaulichen Manipulationen durch $(U_{fok}, U_{ver}, U_{hor}, U_{ast})$ lassen sich die Spannungen für die einzelnen Segmente errechnen $(U_{bot}, U_{top}, U_{lef}, U_{rig})$. In den LabView-Programmen, die zur Steuerung der Ionen-Extraktion geschrieben wurden, ist diese Umrechnung integriert.

$$\begin{aligned}
 U_{bot} &= U_{fok} - U_{ver} - U_{ast} \\
 U_{top} &= U_{fok} + U_{ver} - U_{ast} \\
 U_{lef} &= U_{fok} - U_{hor} + U_{ast} \\
 U_{rig} &= U_{fok} + U_{hor} + U_{ast}
 \end{aligned} \tag{B.4}$$

Insgesamt wurden inzwischen neun Stück dieser kompakten Sikler-Linsen gefertigt (siehe Tabelle B.1). In den Elektronenstrahl-Ionenfallen, die in Heidelberg stehen bzw. dort gebaut wurden, sind sie an diversen Postionen im Einsatz (\rightarrow Manipulation des Elektronenstrahls und/oder des gesamten Ionenstrahls bzw. des ladungszustand-selektierten Ionenstrahls). Die Erfindung von 2006 wurde 2009 der *Max-Planck-Innovation GmbH* zur Patentierung vorgeschlagen. Obwohl von der Idee betrachtet als patentfähig befunden wurde die Erfindung als *qualifiziertes Know-how* gelistet, da beschreibende Veröffentlichungen bereits existierten.

Steuerung der Ionen-Extraktion

Fast alle elektrostatischen Komponenten der neuen Ionen-Extraktion werden zentral über ein LabView-Programm gesteuert. Vorgesehen, jedoch noch nicht umgesetzt, ist auch die Steuerung des Wien-Filter B -Felds. Die meisten nicht integrierten Elektroden waren während der bisherigen Messungen geerdet (Nr. 7 *Symmetriablende*, Nr. 8 *Innenzylinder*). Ablenkplatten beim Wien-Filter Eingang und die *Post Ion Optik Eingang* (Nr. 10) wurden, wenn notwendig, ohne Programmierung mit Spannung versorgt. Im Standardmodus werden die alle Parameter einzeln mit einstellbaren Werten angesteuert. Mit der Scanfunktion können einzelne oder bis zu drei Parameter in vorgegebenen Bereichen abgetastet werden, was zu Optimierungszwecken verwendet werden kann. Eine wichtige Anwendung ist das Scannen des Wien-Filter E -Feldes um einen q/m -Spektrum zu erhalten, welches zur Ionenidentifikation benötigt wird.

Tabelle B.1: Liste der bisher gefertigten Sikler-Linsen.

EBIT	Gen.*	Position (Anmerkung)
TITAN	1	vor Kollektor
TITAN	1	nach Kollektor (siehe Abbildung 4.13)
Heidelberg	1	Extraktion Wiener Kammer, nach Magneten
Heidelberg	2	nach Kollektor
FLASH	3	nach Kollektor
FLASH	3	nach Ablenker, vor Wien-Filter
Heidelberg	3	Doppel-Sikler (1) Verzögerungs-Station [156]
Heidelberg	3	Doppel-Sikler (2) Verzögerungs-Station
HYPER	3	vor Kollektor (im Aufbau durch Thomas Baumann)

* Generationen: (1) original nach Sikler [143] (2) erste Weiterentwicklung durch Ginzler/Simon (3) ausgereifte Form im Rahmen dieser Arbeit (siehe Anhang, Seite 150).

Ionenidentifikation im Wien-Filter Scan

Bei der Identifizierung benutzt man die Proportionalität gemäß (4.30), wobei der Proportionalitätsfaktor zu ermitteln bleibt und aus mehreren Gründen eine Verschiebung (engl.: *offset*) in Betracht gezogen werden muss. Offensichtlich bewirkt die Wahl des Projektionsbereichs im zweidimensionalen Wien-Filter Scan eine Verschiebung (siehe Abbildung 4.29). Auch die Digitalisierung bei der Datenaufnahme und das Steuersignal können zur Verschiebung beitragen. Praktisch hat es sich am einfachsten erwiesen, die Kalibrierung bei der Identifikation an einem starken Ionensignal anzuhängen, denn für die stärksten Peaks im q/m Spektrum kommen gewöhnlicher Weise nicht viele Werte in Frage (z.B. $(q/m)_{fix}=1/4$ oder $1/2$). Dann lässt sich das Spektrum mit einem Faktor f_{ID} stauchen bzw. strecken, bis man einen Wert findet, bei dem die weiteren Peaks bei sinnvollen q/m -Verhältnissen auftreten

$$\frac{q}{m} = \left(f_{ID} \cdot (ch - ch_{fix}) + \sqrt{\left(\frac{q}{m} \right)_{fix}} \right)^2, \quad (\text{B.5})$$

wobei ch der Kanal (engl.: *channel*) ist zu dem das Wien-Filter E -Feld digitalisiert wurde und ch_{fix} ist der Kanal, wo der Peak mit angenommenen $q/m = q/m_{fix}$ zu sehen ist und um den die Kalibrierung aufgehängt (fixiert) wird. Wie man sieht erfüllt (B.5) $q/m = q/m_{fix}$ für $ch = ch_{fix}$ sowie $q/m \propto E^2$ ($E \propto ch$).

Freie Elektronen Laser

Bei den Betrachtungen zur Erzeugung von Synchrotronstrahlung in Magnetfeldstrukturen wurde die Rückkopplung des Strahlungsfelds auf die emittierenden Elektronen nicht

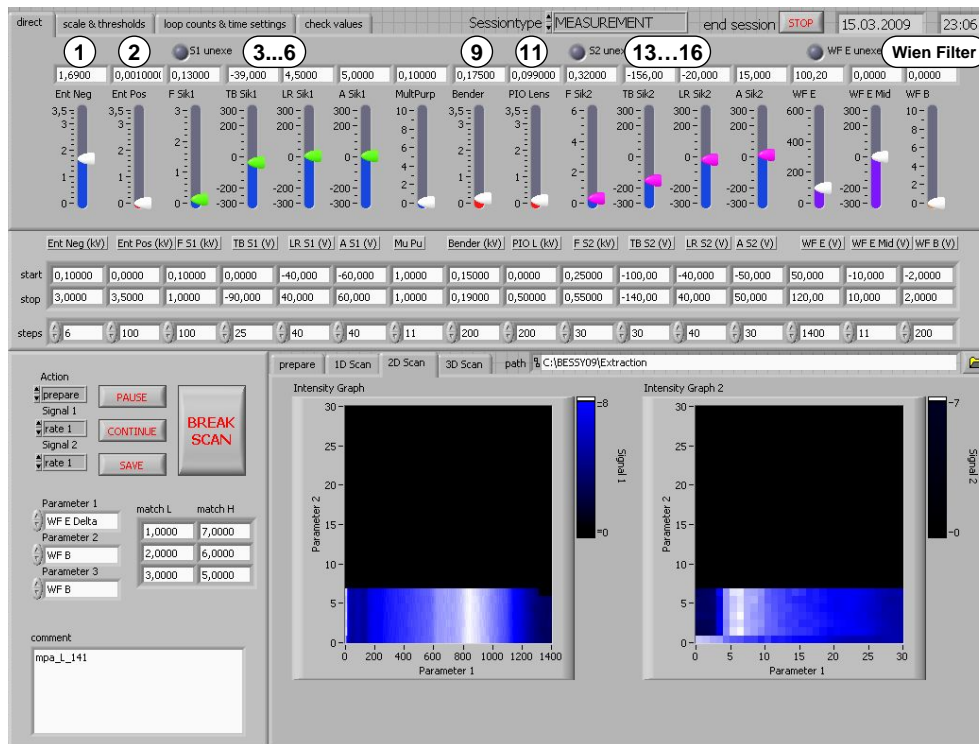


Abbildung B.1: Oberfläche des LabView-Programms zur flexiblen Steuerung der neuen Ionen-Extraktion. Eine direkte Kontrolle der Hauptparameter ist im oberen Bereich möglich. Die eingefügten Nummern entsprechen der Zuordnung gemäß Abbildung 4.19. Scans des Wien-Filter E -Felds wurden mit diesem Programm ausgeführt. Zur Optimierung der Einstellungen kann die Korrelation von bis zu drei Parametern durch entsprechende Scans ermittelt werden.

mitberücksichtigt. Für eine hohe Anzahl an Undulatorperioden kommen genau auf diese Weise interessante Effekte hinzu, die beim *Freie Elektronen Laser* genutzt werden.

Die quadratische Zunahme der Intensität mit der Zahl der Perioden N des Undulators trieb die Entwicklung immer längerer Magnetfeldstrukturen voran. In einem Speicherring ist die Länge der geraden Teilstrecken allerdings begrenzt, weshalb der Weg für die vierte Generation der modernen Strahlungsquellen mit den *Freien Elektronen Lasern* (FEL) zu linearen Bauweisen übergeht. Bezieht man die eng verknüpfte Geschichte der Teilchenbeschleuniger mit ein, wo man von linearen Prinzipien zu kreis- und ringförmigen gelangte, um in kleineren Apparaten höhere Energien zu erreichen, so kann man hier auch von einer Rückkehr zur Geraden sprechen. Diese Entwicklung beinhaltet jedoch wesentlich mehr, als bloß den Übergang zu längerer Undulatoren, sowohl in Hinblick auf die eingesetzten Technologien, als auch auf die auftretenden physikalischen Effekte. Zu nennen ist hier in erster Linie die Rückkopplung des emittierten Strahlungsfeldes auf die freien Elektronen, die zu einer Strukturierung des Bündels in sogenannte Mikrobündel führt (engl.: *microbunches*). Ein derartiges Mikrobündel agiert wie ein Teilchen mit der Ladung $Q = e \cdot N_e$ und nicht wie N_e einzelne Elektronen mit Ladung e (Vergleiche Abbildung B.2). Da die Ladung quadratisch in die Abstrahlleistung eingeht, führt dies zu einem zusätzlichen Faktor N_e . Dieser Effekt ist als *selbstverstärkende spontane Emission* (engl.: *self amplifying spontaneous emission - SASE*) geläufig und wurde bereits 1970 in der Doktorarbeit von J. Madey [195]

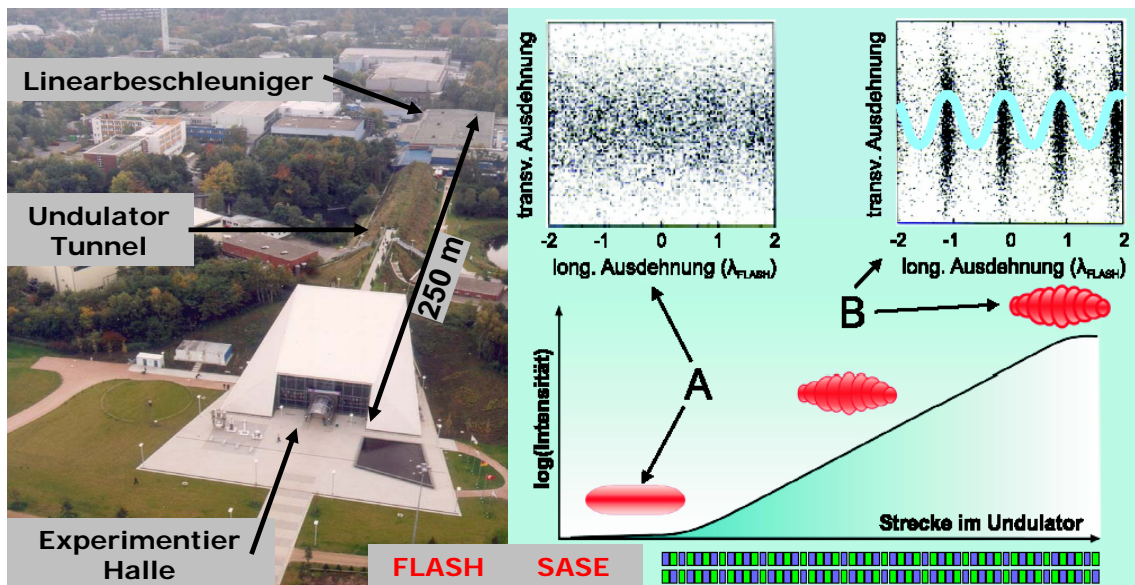


Abbildung B.2: Links: Auf der Luftaufnahme des 250 m langen FLASH sind die Abschnitte Linearbeschleuniger, Undulator-Tunnel und Experimentier Halle erkennbar. Rechts: Die Rückwirkung des emittierten Strahlungsfeldes führt im Elektronenbündel zu einer Strukturierung, welche die Intensität und Kohärenz der Strahlung deutlich erhöht. Damit diese Selbstverstärkung durch spontane Emission (SASE) eintritt muss das Elektronenbündel höchsten Qualitätsansprüchen genügen. Eine beliebig große Verstärkung ist auf Grund von Sättigungseffekten nicht möglich.

behandelt. Von besonderer Bedeutung ist dieser Effekt für höhere Photonen-Energien, wo die Verstärkung nicht mittels Resonator hervorgerufen werden kann, weil die dafür notwendigen 90° -Spiegel nicht existieren, wie sie vergleichsweise für FELs im sichtbaren Bereich eingesetzt werden [196]. Ein gezieltes Einleiten der Verstärkung (engl.: *seeding*) mit Hilfe von *high harmonic generation* (HHG) wird allerdings bereits diskutiert. Damit SASE eintritt, muss das Elektronenbündel in Hinblick auf räumliche Ausdehnung, Divergenz und Energiebreite höchsten qualitativen Anforderungen genügen. FEL-Strahlung besitzt dafür einzigartige Eigenschaften was Intensität, Kohärenz, spektrale Breite und Zeitstruktur betrifft und eröffnet damit neue Möglichkeiten im Bereich der Photonenphysik. Trotz dieser vielen Vorteile ist nicht davon auszugehen, dass Synchrotron-Strahlungsquellen in naher Zukunft von dieser Weiterentwicklung abgelöst werden könnten, denn es handelt sich um eine äußerst aufwändige Technologie, die simultan nur die Bedienung eines einzelnen Experiments zulässt.

Zwei existierende FEL sollen hier noch erwähnt werden. Zum einen FLASH, der *Freie Elektronen Laser in Hamburg*, welcher die erste Realisierung eines Röntgen-FELs darstellt (genaugenommen VUV). Die FLASH-EBIT wurde von meinem Vorgänger Dr. *Sascha Epp* im Rahmen seiner Dissertation [49] speziell für Resonanzspektroskopie Experimente am FLASH gebaut, was auch die Namensgebung erklärt. 2006 gelang die Vermessung des Übergangs $2^2S_{1/2} - 2^2P_{1/2}$ in Li-artigen Fe^{23+} Ionen in der FLASH-EBIT anhand der Detektion von resonant gestreuten FLASH Photonen [48]. Eine Resonanzenergie von 48.6127 eV wurde mit einem statistischen Fehler von nur 1.1 meV ermittelt. Allerdings kommt noch ein systematischer Fehler von 15 meV hinzu, da der Monochromator zum

Zeitpunkt der Messung nur vorläufig kalibriert war. Daher kam es im März 2008 zu einer zweiten Kampagne, in der eine Kalibrierung mittels Neon-Absorptionslinien erfolgte. Während dieser Strahlzeit (im Zeitraum des Doktorats mitorganisiert) wurden noch zwei weitere Übergänge vermessen (siehe Tabelle B.2).

Tabelle B.2: Ergebnisse der Resonanz-Laserspektroskopie der Strahlzeit am FLASH im März 2008 mit der FLASH-EBIT (preliminäre Werte).

Ion	Übergang	Resonanzenergie \pm stat. \pm Kalibr.-Fehler
Fe ²³⁺	$2\ ^2S_{1/2} - 2\ ^2P_{1/2}$	48.5716 eV \pm 0.4 meV \pm 0.4 meV
Fe ²³⁺	$2\ ^2S_{1/2} - 2\ ^2P_{3/2}$	64.5466 eV \pm 0.5 meV \pm 0.4 meV
Cu ²⁶⁺	$2\ ^2S_{1/2} - 2\ ^2P_{1/2}$	55.128 eV \pm 2.6 meV \pm 0.4 meV

FLASH ist für den VUV Spektralbereich ausgelegt und hat eine Länge von ca. 250 m, die sich auf den Linearbeschleuniger, die Undulatorstrecke und die Experimentierhalle aufteilen. Die Erfolge von FLASH waren entscheidend für das Großprojekt eines Röntgen-FEL (XFEL) in Hamburg. Die Doktorarbeit von *Sascha Epp* enthält eine gut strukturierte Beschreibung von FLASH und umfangreiche Verweise auf Literatur, weshalb für Details auf diese Arbeit verweisen sei [49].

Der zweite FEL mit (zukünftiger) Relevanz für die Heidelberger EBIT-Gruppe ist die *Linac Coherent Light Source* (LCLS) in Stanford welcher im April 2009 erstmals Licht erzeugte und im September 2009 den Nutzerbetrieb aufnahm. Dipl.-Phys. *Christian Beilmann* wird die FLASH-EBIT voraussichtlich im zweiten Halbjahr 2010 nach Stanford transportieren, um dort Experimente mit keV FEL-Strahlung durchzuführen. Photoionisations- und Resonanzspektroskopie-Experimente sind angedacht, wobei besonderes Augenmerk auf Nutzung der extrem hohen Intensitäten (Multi-Photonen Prozesse) und der Kohärenz gelegt werden soll.

Erweiterter Ausblick

"Wenn die Chancen die Risiken nicht aufwiegen, dann bin ich mittlerweile zu schlau dafür."

Dr. Sascha W. Epp

Empfehlungen für ein permanentes Setup

Aspekte, die bei der Planung eines permanenten EBIT-Setup für Photoionisations-Experimente an modernen Synchrotron-Strahlungsquellen bedacht werden sollten, werden hier zusammengefasst. Zunächst soll auf einige Vorteile eingegangen werden, die eine Kathode mit Loch bietet. Die ersten Experimente von Kravis *et al.* [50] waren so ausgelegt.

- Ionen würden nicht Richtung Photonenstrahl extrahiert, was die Anforderung an die Kompaktheit der Ionen-Extraktion deutlich reduziert

- Der Photonenfluss könnte während der Messung mit einer Photodiode gemessen werden
- Der Photonenstrahl trifft nicht die Kathode (Beeinflussungen des Elektronenstroms durch den Photonenstrahl wurden beobachtet)

Es sollte in der Planung berücksichtigt werden, dass die Justage des Experiments in einer derartigen Anordnung schwieriger ist. Cr:YAG-Kristalle sollten an entscheidenden Stellen eingeschoben werden können (Kathode, Fallenanfang, Fallende, ...). Die Driftröhren könnten beispielsweise mit einer Vorrichtung, die einen Kristall aufnehmen und manipulieren kann, ausgerüstet werden. In diesem Zusammenhang sollte überdacht werden, ob die zentralen Driftröhren mit gleichem Innendurchmessern ausgeführt werden, damit beim Wechsel auf den *magnetic trapping mode* die raumladungsbedingte Falle nicht kompensiert werden muss.

Elektronenkanone und -kollektor sollten auf jeden Fall vom Erdpotential isoliert werden (Super-EBIT-Prinzip), wobei hier in erster Linie eine positive Beaufschlagung interessant ist, um Ionen mit niedrigen Ionisationspotentialen in kontinuierlicher Extraktion messen zu können. Auch für höhere Ionisationspotentiale kann die Extraktionsenergie damit freier gewählt werden.

q/m -Koinzidenzen

Für die Untersuchung langer isonuklearer und isoelektronischer Sequenzen ist es notwendig Methoden zu integrieren, welche die Einschränkungen durch q/m -Koinzidenzen umgehen. Ladungszustandssensitive Nachweistechiken scheinen dazu geeignet. Die einfachste ist es, die Signalhöhe am MCP des PSD zu nutzen (Pulshöhen-Analyse). Bessere Auflösung erhält man mittels Elektronen-Statistik-Detektoren [197], welche die Elektronen zählen, die ein Ion beim Aufprall auf eine wohldefinierte Oberfläche emittiert.

Elektronen-Spektroskopie

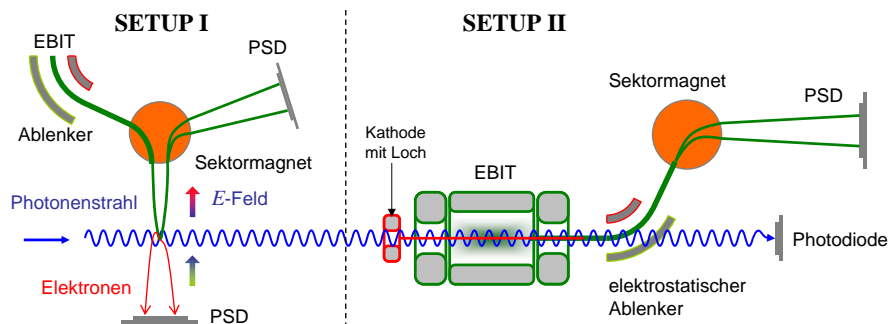


Abbildung B.3: (Rechts - Setup II) Der Aufbau der permanenten Photoionisations-Experiments mit einer EBIT. Eine Kathode mit Loch bringt wesentliche Vorteile. (Links - Setup I) Durch Umstellen der Komponenten und einer zusätzlichen Reaktionskammer kann versucht werden die Photoelektronen koinzident zu spektroskopieren.

Für die Elektronen-Spektroskopie ist ein kleineres Wechselwirkungs-Volumen sinnvoller (gekreuzte Strahlen). Man könnte das EBIT-Setup jedoch so auslegen, dass mit möglichst wenig Aufwand eine Umstellung geschehen kann, die komplementäre Experimente erlaubt (siehe Abbildung B.3). Das elektrische Feld, welches die Elektronen zum Detektor leitet könnte dabei gleichzeitig den Ionenstrahl abbremesen und für erhöhte Dichten im Wechselwirkungs-Bereich sorgen.

Literaturverzeichnis

- [1] J. C. Maxwell, “On the Physical Lines of Force: The Theory of molecular Vortices,” *Philosophical Magazine and Journal of Science*.
- [2] J. D. Jackson, *Klassische Elektrodynamik*. Walter de Gruyter GmbH & Co. KG. D-10785 Berlin, 2006.
- [3] T. Fließbach, *Elektrodynamik: Lehrbuch zur Theoretischen Physik II*. Springer Spektrum Lehrbuch, 2008.
- [4] M. Planck, “Distribution of energy in the normal spectrum,” *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, vol. 2, pp. 237–245, 1900 1900.
- [5] A. Einstein *Annalen der Physik*, vol. 322, pp. 132–148, 1905.
- [6] E. Anders, “Abundances of the elements: Meteoritic and solar,” *Geochimica et Cosmochimica Acta*, vol. 53, pp. 197–214, January 1989.
- [7] A. Weigert, H. J. Wendker, and L. Wisotzki, *Astronomie Und Astrophysik: Ein Grundkurs (German Edition)*. Wiley-VCH Verlag GmbH, October 2009.
- [8] A. Unsöld and B. Baschek, *Der neue Kosmos: Einführung in die Astronomie und Astrophysik (German Edition)*. Springer, 7. Aufl. 2002. korr. nachdruck ed., January 2002.
- [9] D. W. Savin, “Atomic Data Needs for Modeling Photoionized Plasmas,” *Spectroscopic Challenges of Photoionized Plasmas, ASP Conference Series*, Aug 2001.
- [10] T. Fang and C. R. Canizares, “Probing Cosmology with the X-Ray Forest,” *The Astrophysical Journal*, vol. 539, no. 2, pp. 532–539, 2000.
- [11] F. O. W. Cunto, C. Mendoza and C. J. Zeippen, “TOPbase at the CDS,” *Astronomy & Astrophysics*, vol. 275, p. L5, 1993.
- [12] M. J. Seaton, “The Opacity Project,” vol. 322, pp. 117–128, AIP, 1995.
- [13] F. B. S. Paerels and S. M. Kahn, “High-resolution X-ray spectroscopy with Chandra and XMM-Newton,” *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, vol. 41, no. 1, pp. 291–342, 2003.
- [14] P. Beiersdorfer, “Laboratory X-ray Astrophysics,” *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, vol. 41, no. 1, pp. 343–390, 2003.

- [15] R. Dave, R. Cen, J. P. Ostriker, G. L. Bryan, L. Hernquist, N. Katz, D. H. Weinberg, M. L. Norman, and B. O’Shea, “Baryons in the Warm-Hot Intergalactic Medium,” *The Astrophysical Journal*, vol. 552, no. 2, pp. 473–483, 2001.
- [16] M. Viel, E. Branchini, R. Cen, J. P. Ostriker, S. Matarrese, P. Mazzotta, and B. Tully, “Tracing the warm-hot intergalactic medium in the local Universe,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 360, pp. 1110–1122, July 2005.
- [17] R. Cen and J. P. Ostriker, “Where Are the Baryons?,” *The Astrophysical Journal*, vol. 514, no. 1, pp. 1–6, 1999.
- [18] F. Nicastro, S. Mathur, M. Elvis, J. Drake, T. Fang, A. Fruscione, Y. Krongold, H. Marshall, R. Williams, and A. Zezas, “The mass of the missing baryons in the X-ray forest of the warm-hot, intergalactic medium,” *Nature*, vol. 433, pp. 495–498, February 2005.
- [19] R. Cen and J. P. Ostriker, “Where Are the Baryons?II. Feedback Effects,” *The Astrophysical Journal*, vol. 650, no. 2, pp. 560–572, 2006.
- [20] J. N. Bregman, “The Search for the Missing Baryons at Low Redshift,” *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, vol. 45, no. 1, pp. 221–259, 2007.
- [21] C. W. Danforth and J. M. Shull, “The Low- z Intergalactic Medium. I. O VI Baryon Census,” *The Astrophysical Journal*, vol. 624, no. 2, pp. 555–560, 2005.
- [22] E. Behar, M. Sako, and S. M. Kahn, “Soft X-Ray Absorption by Fe^{0+} to Fe^{15+} in Active Galactic Nuclei,” *The Astrophysical Journal*, vol. 563, pp. 497–504, Dec. 2001.
- [23] T. Holczer, E. Behar, and S. Kaspi, “Is the Fe M-Shell Absorber Part of the Outflow in Active Galactic Nuclei?,” *The Astrophysical Journal*, vol. 632, no. 2, pp. 788–792, 2005.
- [24] M. F. Gu, T. Holczer, E. Behar, and S. M. Kahn, “Inner-Shell Absorption Lines of Fe VI-Fe XVI: A Many-Body Perturbation Theory Approach,” *The Astrophysical Journal*, vol. 641, no. 2, pp. 1227–1232, 2006.
- [25] J. D. Gillaspy, “Highly charged ions,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 34, no. 19, pp. R93–R130, 2001.
- [26] G. Balloffet, J. Romand, and B. Vador, “Source demission de spectre continu setendant du visible a lultraviole extreme,” *Comptes rendus hebdomadaires des seances de l academie des sciences*, vol. 252, no. 26, pp. 4139–&, 1961.
- [27] N. Bohr, “The constitution of atoms and molecules,” *Philosophical Magazine*, vol. 6, 1913.
- [28] R. P. Madden and K. Codling, “New Autoionizing Atomic Energy Levels in He, Ne, and Ar,” *Physical Review Letters*, vol. 10, pp. 516–518, Jun 1963.

- [29] A. Rudenko, L. Foucar, M. Kurka, Th, K. U. Kühnel, Y. H. Jiang, A. Voitkiv, B. Najjari, A. Kheifets, S. Lüdemann, T. Havermeier, M. Smolarski, S. Schössler, K. Cole, M. Schöffler, R. Dörner, S. Düsterer, W. Li, B. Keitel, R. Treusch, M. Gensch, C. D. Schröter, R. Moshhammer, and J. Ullrich, “Recoil-Ion Momentum Distributions for Two-Photon Double Ionization of He and Ne by 44 eV Free-Electron Laser Radiation,” *Physical Review Letters*, vol. 101, pp. 073003+, Aug 2008.
- [30] A. A. Sorokin, M. Wellhöfer, S. V. Bobashev, K. Tiedtke, and M. Richter, “X-ray-laser interaction with matter and the role of multiphoton ionization: Free-electron-laser studies on neon and helium,” *Physical Review A*, vol. 75, pp. 051402+, May 2007.
- [31] J. Feist, S. Nagele, R. Pazourek, E. Persson, B. I. Schneider, L. A. Collins, and J. Burgdörfer, “Probing Electron Correlation via Attosecond xuv Pulses in the Two-Photon Double Ionization of Helium,” *Physical Review Letters*, vol. 103, pp. 063002+, Aug 2009.
- [32] J. Feist, S. Nagele, R. Pazourek, E. Persson, B. I. Schneider, L. A. Collins, and J. Burgdörfer, “Nonsequential two-photon double ionization of helium,” *Physical Review A*, vol. 77, pp. 043420+, Apr 2008.
- [33] L. A. A. Nikolopoulos and P. Lambropoulos, “Time-dependent theory of double ionization of helium under XUV radiation,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 40, no. 7, pp. 1347–1357, 2007.
- [34] D. A. Horner, F. Morales, T. N. Rescigno, F. Martín, and C. W. McCurdy, “Two-photon double ionization of helium above and below the threshold for sequential ionization,” *Physical Review A*, vol. 76, pp. 030701+, Sep 2007.
- [35] J. Ullrich, R. Moshhammer, A. Dorn, R. Dorner, Schmidt, and H. Schmidt-Bocking, “Recoil-ion and electron momentum spectroscopy: reaction-microscopes,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 66, no. 9, pp. 1463–1545, 2003.
- [36] S. A. Moussalami, J. M. Bizau, B. Rouvellou, D. Cubaynes, L. Journel, F. J. Wuilleumier, J. Obert, J. C. Putaux, T. J. Morgan, and M. Richter, “First Angle-Resolved Photoelectron Measurements following Inner-Shell Resonant Excitation in a Singly Charged Ion,” *Physical Review Letters*, vol. 76, pp. 4496–4499, Jun 1996.
- [37] A. Gottwald, Ch, and M. Richter, “4d Photoionization of Free Singly Charged Xenon Ions,” *Physical Review Letters*, vol. 82, pp. 2068–2070, Mar 1999.
- [38] A. L. Landers, F. Robicheaux, T. Jahnke, M. Schöffler, T. Osipov, J. Titze, S. Y. Lee, H. Adaniya, M. Hertlein, P. Ranitovic, I. Bocharova, D. Akoury, A. Bhandary, Th, M. H. Prior, C. L. Cocke, R. Dörner, and A. Belkacem, “Angular Correlation between Photoelectrons and Auger Electrons from K-Shell Ionization of Neon,” *Physical Review Letters*, vol. 102, pp. 223001+, Jun 2009.
- [39] M. Kurka, A. Rudenko, L. Foucar, K. U. Kuhnel, Y. H. Jiang, T. Ergler, T. Havermeier, M. Smolarski, S. Schössler, K. Cole, M. Schöffler, R. Dorner, M. Gensch,

- S. Dusterer, R. Treusch, S. Fritzsche, A. N. Grum-Grzhimailo, E. V. Gryzlova, N. M. Kabachnik, C. D. Schroter, R. Moshhammer, and J. Ullrich, "Two-photon double ionization of Ne by free-electron laser radiation: a kinematically complete experiment," *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 42, no. 14, pp. 141002+, 2009.
- [40] M. Martins, K. Godehusen, T. Richter, P. Wernet, and P. Zimmermann, "Open shells and multi-electron interactions: core level photoionization of the 3d metal atoms," *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 39, no. 5, pp. R79–R125, 2006.
- [41] J. B. West, "Photoionization of atomic ions," *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 34, no. 18, pp. R45–R91, 2001.
- [42] H. Kjeldsen, "Photoionization cross sections of atomic ions from merged-beam experiments," *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 39, no. 21, pp. R325–R377, 2006.
- [43] M. Habibi, D. A. Esteves, R. A. Phaneuf, A. L. D. Kilcoyne, A. Aguilar, and C. Cisneros, "Photoionization cross sections for ions of the cerium isonuclear sequence," *Physical Review A*, vol. 80, pp. 033407+, Sep 2009.
- [44] M. Habibi, *Photoionization of the Cerium Isonuclear Sequence and Cerium Endohedral Fullerene*. PhD thesis, University of Nevada, Reno, 2009.
- [45] N. E. Hassan, J. M. Bizau, C. Blancard, P. Cossé, D. Cubaynes, G. Faussurier, and F. Folkmann, "Photoionization cross sections of iron isonuclear sequence ions Fe^{2+} to Fe^{6+} ," *Physical Review A (Atomic, Molecular, and Optical Physics)*, vol. 79, no. 3, pp. 033415+, 2009.
- [46] S. W. J. Scully, A. Aguilar, E. D. Emmons, R. A. Phaneuf, M. Halka, D. Leitner, J. C. Levin, M. S. Lubell, R. Puttner, A. S. Schlachter, A. M. Covington, S. Schippers, A. Müller, and B. M. McLaughlin, "K-shell photoionization of Be-like carbon ions: experiment and theory for C^{2+} ," *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 38, pp. 1967–1975, June 2005.
- [47] H. Yamaoka, M. Oura, K. Kawatsura, T. Hayaishi, T. Sekioka, A. Agui, A. Yoshigoe, and F. Koike, "Photoionization of singly and doubly charged neon ions following inner-shell excitation," *Physical Review A*, vol. 65, pp. 012709+, Dec 2002.
- [48] S. W. Epp, J. R. Crespo López-Urrutia, G. Brenner, V. Mäckel, P. H. Mokler, R. Treusch, M. Kuhlmann, M. V. Yurkov, J. Feldhaus, J. R. Schneider, M. Wellhöfer, M. Martins, W. Wurth, and J. Ullrich, "Soft X-Ray Laser Spectroscopy on Trapped Highly Charged Ions at FLASH," *Physical Review Letters*, vol. 98, no. 18, pp. 183001+, 2007.
- [49] S. W. Epp, *Röntgen-Laserspektroskopie hochgeladener Ionen in einer EBIT am Freie-Elektronen-Laser FLASH*. PhD thesis, Naturwissenschaftlich-Mathematischen Gesamtfakultät der Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2007.

- [50] S. Kravis, M. Oura, Y. Awaya, K. Okuno, and M. Kimura, “An EBIS for use with synchrotron radiation,” vol. 65, pp. 1066–1068, AIP, 1994.
- [51] S. D. Kravis, N. Watanabe, Y. Awaya, M. Kimura, T. Kojima, K. Okuno, and M. Oura, “Feasibility of photoionization of multi-charged ions and a first test of a photon beam ion source (PHOBIS) with the RIKEN EBIS (REBIS),” *Physica Scripta*, vol. T71, pp. 121–126, 1997.
- [52] B. Johnson, M. Meron, A. Agagu, and K. Jones, “Atomic physics and synchrotron radiation: The production and accumulation of highly charged ions,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, vol. 24-25, pp. 391–396, April 1987.
- [53] M. Meron, B. Johnson, K. Jones, and D. Church, “Charge state evolution in an ion trap irradiated by VUV synchrotron radiation,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, vol. 31, pp. 256–261, April 1988.
- [54] D. Church, S. Kravis, M. Meron, B. Johnson, K. Jones, I. Sellin, O. C, J. Levin, and R. Short, “Research with stored ions produced using synchrotron radiation,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, vol. 31, pp. 262–264, April 1988.
- [55] S. D. Kravis, D. A. Church, B. M. Johnson, M. Meron, K. W. Jones, J. Levin, I. A. Sellin, Y. Azuma, N. B. Mansour, H. G. Berry, and M. Druetta, “Inner-shell photoionization of stored positive ions using synchrotron radiation,” *Physical Review Letters*, vol. 66, pp. 2956–2959, Jun 1991.
- [56] I. C. Lyon, B. Peart, J. B. West, and K. Dolder, “Measurements of absolute cross sections for the photoionisation of Ba^+ ,” *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, vol. 19, no. 24, pp. 4137–4147, 1986.
- [57] I. C. Lyon, B. Peart, K. Dolder, and J. B. West, “Measurements of absolute photoionisation cross sections of Ca^+ ions,” *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, vol. 20, no. 7, pp. 1471–1477, 1987.
- [58] I. C. Lyon, B. Peart, and K. Dolder, “Measurements of absolute photoionisation cross sections of Sr^+ ions,” *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, vol. 20, no. 9, pp. 1925–1932, 1987.
- [59] B. Peart, I. C. Lyon, and K. Dolder, “Measurements of absolute photoionisation cross sections of Ga^+ and Zn^+ ,” *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, vol. 20, no. 20, pp. 5403–5410, 1987.
- [60] B. Peart and I. C. Lyon, “Measurements of absolute photoionisation cross sections of K^+ ions,” *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, vol. 20, no. 21, pp. L673–L675, 1987.
- [61] R. Thissen, J. M. Bizau, C. Blancard, M. Coreno, C. Dehon, P. Franceschi, A. Giuliani, J. Lemaire, and C. Nicolas, “Photoionization Cross Section of Xe^+ Ion in the Pure

- $5p^5\ ^2P_{3/2}$ Ground Level,” *Physical Review Letters*, vol. 100, no. 22, pp. 223001+, 2008.
- [62] Melhorn. Springer, 1982.
- [63] B. H. Bransden and C. J. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules*. Longman Publishing Group, 1982.
- [64] V. Schmidt, *Electron Spectrometry of Atoms using Synchrotron Radiation (Cambridge Monographs on Atomic, Molecular and Chemical Physics)*. Cambridge University Press, May 1997.
- [65] E. Schrödinger *Annalen der Physik*, vol. 79, pp. 361, 489, 1926.
- [66] E. Schrödinger *Annalen der Physik*, vol. 80, p. 734, 1926.
- [67] E. Schrödinger *Annalen der Physik*, vol. 81, p. 109, 1926.
- [68] E. Hylleraas, “New calculation of the energy of helium in the ground state and of the deepest term of ortho-helium,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 54, pp. 347–366, 1929.
- [69] U. Fano, “Effects of Configuration Interaction on Intensities and Phase Shifts,” *Physical Review Online Archive (Prola)*, vol. 124, pp. 1866–1878, Dec 1961.
- [70] S. Fritzsche, H. Aksela, C. Dong, S. Heinasmaki, and J. Sienkiewicz, “Theoretical Auger and photoionization studies for open-shell atoms and ions,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, vol. 205, pp. 93–98, May 2003.
- [71] Z. Harman, I. I. Tupitsyn, A. N. Artemyev, U. D. Jentschura, C. H. Keitel, J. R. Crespo López-Urrutia, A. J. G. Martínez, H. Tawara, and J. Ullrich, “Benchmarking high-field few-electron correlation and QED contributions in Hg^{75} to Hg^{78} ions. II. Theory,” *Physical Review A (Atomic, Molecular, and Optical Physics)*, vol. 73, no. 5, pp. 052711+, 2006.
- [72] M. Zimmermann, N. Grun, and W. Scheid, “Photo recombination on highly charged few-electron uranium ions,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 30, no. 22, pp. 5259–5270, 1997.
- [73] I. P. Grant, “Relativistic calculation of atomic structures,” *Advances in Physics*, vol. 19, no. 82, pp. 747–811, 1970.
- [74] J. P. Desclaux, D. F. Mayers, and F. O’Brien, “Relativistic atomic wave functions,” *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, vol. 4, no. 5, pp. 631–642, 1971.
- [75] E. A. Uehling, “Polarization effects in the positron theory,” *Phys. Rev.*, vol. 48, p. 55, 1935.
- [76] M. J. Seaton, “The Quantum Defect Method,” *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.*, vol. 118, 1958.

- [77] E. P. Wigner and L. Eisenbud, "Higher Angular Momenta and Long Range Interaction in Resonance Reactions," *Physical Review Online Archive (Prola)*, vol. 72, pp. 29–41, Jul 1947.
- [78] U. Fano and C. M. Lee, "Variational Calculation of R Matrices. Application to Ar Photoabsorption," *Physical Review Letters*, vol. 31, pp. 1573–1576, Dec 1973.
- [79] D. G. Hummer, K. A. Berrington, W. Eissner, A. K. Pradhan, H. E. Saraph, and J. A. Tully, "Atomic data from the Iron Project. 1. goals and methods," *Astronomy & Astrophysics*, vol. 279, pp. 298–309, NOV 1993.
- [80] S. N. Nahar and A. K. Pradhan, "Atomic data for opacity calculations: XX. Photoionization cross sections and oscillator strengths for Fe II," *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 27, no. 3, pp. 429–446, 1994.
- [81] S. N. Nahar and A. K. Pradhan, "Electron-Ion Recombination Rate Coefficients, Photoionization Cross Sections, and Ionization Fractions for Astrophysically Abundant Elements. I. Carbon and Nitrogen," *The Astrophysical Journal Supplement Series*, vol. 111, no. 1, pp. 339–355, 1997.
- [82] S. Nahar, "Nahar Ohio State University Radiative Atomic Database," *NORAD*, pp. www.astronomy.ohio-state.edu/~nahar/, 2009.
- [83] P. L. Altick and A. E. Glassgold, "Correlation effects in atomic structure using Random-Phase Approximation," *Physical Review A - General Physics*, vol. 133, no. 3A, pp. A632–&, 1964.
- [84] M. Amusia, N. Cherepkov, L. Chernysheva, and S. Sheftel, "On atomic photoionization cross section calculation," *Physics Letters A*, vol. 28, pp. 726–727, March 1969.
- [85] J. West, "Photoionisation cross sections of atomic ions," *Radiation Physics and Chemistry*, vol. 70, pp. 275–289, June 2004.
- [86] G. Mehlman-Balloffet and J. M. Esteva, "Far-Ultraviolet Absorption Spectra with Auto-Ionized Levels of Beryllium and Magnesium," *The Astrophysical Journal*, vol. 157, August 1969.
- [87] A. Carillon, P. Jaegle, and P. Dhez, "Extreme-Ultraviolet Continuum Absorption by a Laser-Generated Aluminum Plasma," *Physical Review Letters*, vol. 25, pp. 140–143, Jul 1970.
- [88] P. K. Carroll and J. T. Costello, "Giant-Dipole-Resonance Absorption in Atomic Thorium by a Novel Two-Laser Technique," *Physical Review Letters*, vol. 57, pp. 1581–1583, Sep 1986.
- [89] P. V. Kampen and G. O'Sullivan, "Trends in 3p photoabsorption in the Ar I iso-electronic sequence: spectra of Sc IV and Ti V," *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 31, no. 4, pp. L135–L139, 1998.

- [90] N. Murphy, “4d photoabsorption in Te V and Te VI,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 32, no. 18, pp. L525–L529, 1999.
- [91] S. Fujioka, H. Takabe, N. Yamamoto, D. Salzmann, F. Wang, H. Nishimura, Y. Li, Q. Dong, S. Wang, Y. Zhang, Y.-J. Rhee, Y.-W. Lee, J.-M. Han, M. Tanabe, T. Fujiwara, Y. Nakabayashi, G. Zhao, J. Zhang, and K. Mima, “X-ray astronomy in the laboratory with a miniature compact object produced by laser-driven implosion,” *Nature Physics*, vol. 5, pp. 821–825, October 2009.
- [92] J. E. Bailey, G. A. Rochau, C. A. Iglesias, Jr, J. J. MacFarlane, I. Golovkin, P. Wang, R. C. Mancini, P. W. Lake, T. C. Moore, M. Bump, O. Garcia, and S. Mazevet, “Iron-Plasma Transmission Measurements at Temperatures Above 150 eV,” *Physical Review Letters*, vol. 99, no. 26, pp. 265002+, 2007.
- [93] R. F. Heeter, S. B. Hansen, K. B. Fournier, M. E. Foord, D. H. Froula, A. J. Mackinnon, M. J. May, M. B. Schneider, and B. K. F. Young, “Benchmark Measurements of the Ionization Balance of Non-Local-Thermodynamic-Equilibrium Gold Plasmas,” *Physical Review Letters*, vol. 99, no. 19, pp. 195001+, 2007.
- [94] M. E. Foord, R. F. Heeter, P. A. M. van Hoof, R. S. Thoe, J. E. Bailey, M. E. Cuneo, H. K. Chung, D. A. Liedahl, K. B. Fournier, G. A. Chandler, V. Jonauskas, R. Kisielius, L. P. Mix, C. Ramsbottom, P. T. Springer, F. P. Keenan, S. J. Rose, and W. H. Goldstein, “Charge-State Distribution and Doppler Effect in an Expanding Photoionized Plasma,” *Physical Review Letters*, vol. 93, pp. 055002+, Jul 2004.
- [95] B. Peart, J. G. Stevenson, and K. T. Dolder, “Measurements of cross sections for the ionization of Ba^+ by energy resolved electrons,” *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, vol. 6, no. 1, pp. 146–149, 1973.
- [96] A. Müller, S. Schippers, R. A. Phaneuf, A. L. D. Kilcoyne, H. Brauning, A. S. Schlachter, M. Lu, and B. M. McLaughlin, “Fine-structure resolved photoionization of metastable Be-like ions C III, N IV, and O V,” *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 58, no. 1, pp. 383–386, 2007.
- [97] J. M. Bizau, J. P. Mosnier, E. T. Kennedy, D. Cubaynes, F. J. Wuilleumier, C. Blancard, J. P. Champeaux, and F. Folkmann, “Photoionization of the Ne-like Si^{4+} ion in ground and metastable states in the 110–184 eV photon energy range,” *Physical Review A (Atomic, Molecular, and Optical Physics)*, vol. 79, no. 3, pp. 033407+, 2009.
- [98] J. M. Bizau, J. P. Champeaux, D. Cubaynes, F. J. Wuilleumier, F. Folkmann, T. S. Jacobsen, F. Penent, C. Blancard, and H. Kjeldsen, “Absolute cross sections for L-shell photoionization of the ions N^{2+} , N^{3+} , O^{3+} , O^{4+} , F^{3+} , F^{4+} and Ne^{4+} ,” *Astronomy & Astrophysics*, vol. 439, pp. 387–399, August 2005.
- [99] J. C. Wang, M. Lu, D. Esteves, M. Habibi, G. Alna’washi, R. A. Phaneuf, and A. L. D. Kilcoyne, “Photoionization and electron-impact ionization of Ar^{5+} ,” *Physical Review A (Atomic, Molecular, and Optical Physics)*, vol. 75, no. 6, pp. 062712+, 2007.

- [100] M. Lu, M. F. Gharaibeh, G. Alnchar39washi, R. A. Phaneuf, A. L. D. Kilcoyne, E. Levenson, A. S. Schlachter, A. Müller, S. Schippers, J. Jacobi, S. W. J. Scully, and C. Cisneros, “Photoionization and electron-impact ionization of Kr^{5+} ,” *Physical Review A*, vol. 74, pp. 012703+, Jul 2006.
- [101] A. S. Schlachter, M. M. Sant’Anna, A. M. Covington, A. Aguilar, M. F. Gharaibeh, E. D. Emmons, S. W. J. Scully, R. A. Phaneuf, G. Hinojosa, I. Alvarez, C. Cisneros, A. Müller, and B. M. McLaughlin, “Lifetime of a K-shell vacancy in atomic carbon created by 1s-2p photoexcitation of C^+ ,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 37, no. 5, pp. L103–L109, 2004.
- [102] K. Kawatsura, H. Yamaoka, M. Oura, T. Hayaishi, T. Sekioka, A. Agui, A. Yoshigoe, and F. Koike, “The 1s-2p resonance photoionization measurement of O^+ ; ions in comparison with an isoelectronic species Ne^{3+} ,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 35, no. 20, pp. 4147–4153, 2002.
- [103] J. P. Champeaux, J. M. Bizau, D. Cubaynes, C. Blancard, S. Nahar, D. Hitz, J. Brunneau, and F. J. Wuilleumier, “Measurements and Calculations of Photoionization Cross Sections of Multiply Charged Ions in Ground and Metastable States along the Isonuclear Series of Oxygen: O^{2+} to O^{4+} ,” *The Astrophysical Journal Supplement Series*, vol. 148, no. 2, pp. 583–592, 2003.
- [104] D. A. Church, K. W. Jones, B. M. Johnson, M. Meron, and I. A. Sellin, “Production and storage of highly charged ions at room temperature,” *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, vol. 17, no. 12, pp. L401–L405, 1984.
- [105] M. Oura, S. Kravis, T. Koizumi, Y. Itoh, T. Kojima, M. Sano, T. Sekioka, M. Kimura, K. Okuno, and Y. Awaya, “Experimental setups for photoionization of multiply charged ions by synchrotron radiation,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, vol. 86, pp. 190–193, March 1994.
- [106] D. Fischer, B. Feuerstein, R. Moshhammer, J. R. Crespo López-Urrutia, I. Draganić, H. Lörch, A. N. Perumal, J. Ullrich, and R. D. DuBois, “Subshell Resolved Measurements of Single Electron Capture in Slow Ne^{7+} - Helium Collisions,” *Hyperfine Interactions*, vol. 146-147, pp. 177–181, March 2003.
- [107] J. R. Crespo López-Urrutia, B. Bapat, I. Draganić, B. Feuerstein, D. Fischer, H. Lörch, R. Moshhammer, J. Ullrich, R. D. DuBois, and Y. Zou, “Physics with Highly-Charged Ions in an EBIT,” *Hyperfine Interactions*, vol. 146-147, pp. 109–113, March 2003.
- [108] W. Lotz, “Electron-impact ionization cross-sections and ionization rate coefficients for atoms and ions,” *The Astrophysical Journal*, vol. S 14, no. Suppl. 128, pp. 207–&, 1967.
- [109] W. Lotz, “Electron-impact ionization cross-sections for atoms up to $Z=108$,” *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, vol. 232, pp. 101–107, April 1970.

-
- [110] J. Scofield, "Ionization Energies - the magic table for EBIT people," *LLNL, Livermore, CA*.
- [111] M. A. Bautista, "Photoionization of Fe XV from threshold to the K-shell," *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 33, no. 12, pp. L419–L426, 2000.
- [112] K. Wille, *Physik der Teilchenbeschleuniger und Synchrotronstrahlungsquellen*. B. G. Teubner Stuttgart, 1992.
- [113] D. Attwood, *Soft X-ray and extreme ultraviolet radiation, principles and applications*. Cambridge University Press, 1999.
- [114] A. Hofmann, *The Physics of Synchrotron Radiation (Cambridge Monographs on Particle Physics, Nuclear Physics and Cosmology)*. Cambridge University Press, July 2004.
- [115] E. Jaeschke, H. Ingwersen, R. Repnow, T. Walcher, B. Huck, and B. Kolb, "First operation of the Heidelberg heavy-ion postaccelerator," *Nuclear Instruments and Methods*, vol. 157, pp. 195–198, November 1978.
- [116] F. Hinterberger, *Physik der Teilchenbeschleuniger: und Ionenoptik (German Edition)*. Springer, 1 ed., April 1997.
- [117] J. W. Cooper, U. Fano, and F. Prats, "Classification of Two-Electron Excitation Levels of Helium," *Physical Review Letters*, vol. 10, pp. 518–521, Jun 1963.
- [118] J. Schwinger, "On the Classical Radiation of Accelerated Electrons," *Physical Review Online Archive (Prola)*, vol. 75, pp. 1912–1925, Jun 1949.
- [119] R. Follath, "New plane-grating monochromators for third generation synchrotron radiation light sources," *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 390, pp. 388–394, May 1997.
- [120] M. Martins, "Design of the high-resolution BUS XUV-beamline for BESSY II," *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, vol. 101-103, pp. 965–969, June 1999.
- [121] R. Follath, J. S. Schmidt, F. Siewert, K. Holldack, T. Zeschke, W. Frentrup, D. Schmitz, and K. J. S. Sawhney, "Commissioning of the U49/2-PGM1 beamline," vol. 705, pp. 348–351, AIP, 2004.
- [122] K. Sawhney, F. Senf, and W. Gudat, "PGM beamline with constant energy resolution mode for U49-2 undulator at BESSY-II," *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 467-468, pp. 466–469, July 2001.
- [123] P. Beiersdorfer, L. Schweikhard, J. R. Crespo López-Urrutia, and K. Widmann, "The magnetic trapping mode of an electron beam ion trap: New opportunities for highly charged ion research," *Review of Scientific Instruments*, vol. 67, no. 11, pp. 3818–3826, 1996.

- [124] X. Lu and F. J. Currell, “Numerical simulation of the charge balance and temperature evolution in an electron beam ion trap,” *Physical Review Special Topics - Accelerators and Beams*, vol. 12, pp. 014401+, Jan 2009.
- [125] B. M. Penetrante, J. N. Bardsley, D. DeWitt, M. Clark, and D. Schneider, “Evolution of ion-charge-state distributions in an electron-beam ion trap,” *Physical Review A*, vol. 43, pp. 4861–4872, May 1991.
- [126] B. M. Penetrante, J. N. Bardsley, M. A. Levine, D. A. Knapp, and R. E. Marrs, “Evaporative cooling of highly charged dysprosium ions in an enhanced electron-beam ion trap,” *Physical Review A*, vol. 43, pp. 4873–4882, May 1991.
- [127] E. D. Donets and V. P. Ovsyannikov, “Onvestigation of ionization of positive-ions by electron-impact,” *Zhurnal eksperimentalnoi i teoreticheskoi fiziki*, vol. 80, no. 3, pp. 916–925, 1981.
- [128] E. D. Donets, “Electron beam ion sources and their development at JINR (invited),” vol. 61, pp. 225–229, AIP, 1990.
- [129] A. J. G. Martínez, *Quantum interference in the dielectronic recombination of heavy highly charged ions*. PhD thesis, Naturwissenschaftlich-Mathematischen Gesamtfakultät der Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2005.
- [130] M. C. Simon, “Elektronen-Emission bei Beschuss von Isolator- und Metall-Oberflächen mit hochgeladenen Ionen,” Master’s thesis, Institut für Allgemeine Physik der Technischen Universität Wien, 2006.
- [131] G. Herrmann, “Optical Theory of Thermal Velocity Effects in Cylindrical Electron Beams,” *Journal of Applied Physics*, vol. 29, no. 2, pp. 127–136, 1958.
- [132] M. C. Simon, M. Schwarz, S. W. Epp, C. Beilmann, B. L. Schmitt, Z. Harman, T. M. Baumann, P. H. Mokler, S. Bernitt, R. Ginzler, S. G. Higgins, C. H. Keitel, R. Klawitter, K. Kubicek, V. Mäckel, J. Ullrich, and J. R. Crespo López-Urrutia, “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*, accepted, 2010.
- [133] G. Y. Liang, T. M. Baumann, J. R. Crespo López-Urrutia, S. W. Epp, H. Tawara, A. Gonchar, P. H. Mokler, G. Zhao, and J. Ullrich, “Extreme-Ultraviolet Spectroscopy of Fe VI-Fe XV and its Diagnostic Application for Electron Beam Ion Trap Plasmas,” *The Astrophysical Journal*, vol. 696, no. 2, pp. 2275–2289, 2009.
- [134] G. Y. Liang, J. R. Crespo López-Urrutia, T. M. Baumann, S. W. Epp, A. Gonchar, A. Lapierre, P. H. Mokler, M. C. Simon, H. Tawara, V. Mackel, K. Yao, G. Zhao, Y. Zou, and J. Ullrich *The Astrophysical Journal*, vol. 702, no. 2, pp. 838–850, 2009.
- [135] R. H. Plumlee, “Space Charge Neutralization in the Ionizing Beam of a Mass Spectrometer,” *Review of Scientific Instruments*, vol. 28, no. 10, pp. 830–832, 1957.

- [136] M. Levine, R. Marrs, and R. Schmieder, “Measurement of instabilities and ion heating in an electron beam ion source,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 237, pp. 429–440, July 1985.
- [137] M. Levine, R. Marrs, J. Bardsley, P. Beiersdorfer, C. Bennett, M. Chen, T. Cowan, D. Dietrich, J. Henderson, and D. Knapp, “The use of an electron beam ion trap in the study of highly charged ions,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, vol. 43, pp. 431–440, September 1989.
- [138] R. E. Marrs, S. R. Elliott, and D. A. Knapp, “Production and Trapping of Hydrogenlike and Bare Uranium Ions in an Electron Beam Ion Trap,” *Physical Review Letters*, vol. 72, pp. 4082–4085, Jun 1994.
- [139] N. Nakamura, A. P. Kavanagh, H. Watanabe, H. A. Sakaue, Y. Li, D. Kato, F. J. Currell, and S. Ohtani, “Evidence for Strong Breit Interaction in Dielectronic Recombination of Highly Charged Heavy Ions,” *Physical Review Letters*, vol. 100, no. 7, pp. 073203+, 2008.
- [140] J. R. Crespo López-Urrutia, B. Bapat, I. Draganic, A. Werdich, and J. Ullrich, “First results from the Freiburg Electron Beam Ion Trap FreEBIT,” *Physica Scripta*, vol. T92, pp. 110–112, 2001.
- [141] H. Wei, F. Yunqing, G. Peirong, Y. Ke, L. Di, C. Weidong, L. Yong, Y. Yang, X. Jun, W. Shimin, G. Zhixian, H. Min, Z. Xuemei, R. Hutton, L. Liljeby, H. Mianhong, and Z. Yaming, “Progress and research at the Shanghai EBIT.,” *Canadian Journal of Physics*, vol. 86, no. 1, pp. 321 – 325, 2008.
- [142] V. L. Ryjkov, M. Brodeur, T. Brunner, M. Smith, R. Ringle, A. Lapierre, F. Ames, P. Bricault, M. Dombisky, P. Delheij, D. Lunney, M. R. Pearson, and J. Dilling, “Direct Mass Measurement of the Four-Neutron Halo Nuclide $He8$,” *Physical Review Letters*, vol. 101, pp. 012501+, Jul 2008.
- [143] M. W. Froese, “The TITAN Electron Beam Ion Trap: Assembly, Characterization, and First Tests,” Master’s thesis, Department of Physics and Astronomy, University of Manitoba, Winnipeg, Manitoba, 2006.
- [144] N. Nakamura, H. Kikuchi, H. A. Sakaue, and T. Watanabe, “Compact electron beam ion trap for spectroscopy of moderate charge state ions,” *Review of Scientific Instruments*, vol. 79, no. 6, pp. 063104+, 2008.
- [145] E. D. Donets, “Historical review of electron beam ion sources (invited),” vol. 69, pp. 614–619, AIP, 1998.
- [146] J. Gillaspay, ed., *Trapping Highly Charged Ions: Fundamentals and Applications*. Nova Science Publishers, 1999.
- [147] R. S. Orts, Z. Harman, J. R. Crespo López-Urrutia, A. N. Artemyev, H. Bruhns, A. J. G. Martínez, U. D. Jentschura, C. H. Keitel, A. Lapierre, V. Mironov, V. M.

- Shabaev, H. Tawara, I. I. Tupitsyn, J. Ullrich, and A. V. Volotka, “Exploring Relativistic Many-Body Recoil Effects in Highly Charged Ions,” *Physical Review Letters*, vol. 97, no. 10, pp. 103002+, 2006.
- [148] H. Bruhns, J. Braun, K. Kubiček, J. R. Crespo López Urrutia, and J. Ullrich, “Testing QED Screening and Two-Loop Contributions with He-Like Ions,” *Physical Review Letters*, vol. 99, no. 11, pp. 113001+, 2007.
- [149] P. Beiersdorfer, A. L. Osterheld, J. H. Scofield, J. R. Crespo López-Urrutia, and K. Widmann, “Measurement of QED and Hyperfine Splitting in the $2s_{1/2}$ - $2p_{3/2}$ X-Ray Transition in Li-like $^{209}\text{Bi}^{80+}$,” *Physical Review Letters*, vol. 80, pp. 3022–3025, Apr 1998.
- [150] D. A. Knapp, R. E. Marrs, M. B. Schneider, M. H. Chen, M. A. Levine, and P. Lee, “Dielectronic recombination of heliumlike ions,” *Physical Review A*, vol. 47, pp. 2039–2046, Mar 1993.
- [151] S. Bernitt, “Optimierung der Ladungszustands-Verteilung in einer EBIT durch resonante Photorekombination,” Master’s thesis, Fakultät für Physik und Astronomie, Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, 2009.
- [152] C. Beilmann, O. Postavaru, L. H. Arntzen, R. Ginzler, C. H. Keitel, V. Mäkel, P. H. Mokler, M. C. Simon, H. Tawara, I. I. Tupitsyn, J. Ullrich, J. R. Crespo López-Urrutia, and Z. Harman, “Intershell trielectronic recombination with K-shell excitation in Kr^{30+} ,” *Physical Review A (Atomic, Molecular, and Optical Physics)*, vol. 80, no. 5, pp. 050702+, 2009.
- [153] G. Brenner, J. R. Crespo López-Urrutia, S. Bernitt, D. Fischer, R. Ginzler, K. Kubiček, V. Mackel, P. H. Mokler, M. C. Simon, and J. Ullrich, “On the transition rate of the Fe X red coronal line,” *The Astrophysical Journal*, vol. 703, no. 1, pp. 68–73, 2009.
- [154] P. Beiersdorfer, R. E. Olson, G. V. Brown, H. Chen, C. L. Harris, P. A. Neill, L. Schweikhard, S. B. Utter, and K. Widmann, “X-Ray Emission Following Low-Energy Charge Exchange Collisions of Highly Charged Ions,” *Physical Review Letters*, vol. 85, pp. 5090–5093, Dec 2000.
- [155] P. Beiersdorfer, K. R. Boyce, G. V. Brown, H. Chen, S. M. Kahn, R. L. Kelley, M. May, R. E. Olson, F. S. Porter, C. K. Stahle, and W. A. Tillotson, “Laboratory Simulation of Charge Exchange-Produced X-ray Emission from Comets,” *Science*, vol. 300, pp. 1558–1559, June 2003.
- [156] R. Ginzler, S. G. Higgins, P. Mrowczynski, P. Northway, M. C. Simon, H. Tawara, J. R. Crespo López-Urrutia, J. Ullrich, G. Kowarik, R. Ritter, W. Meissl, C. Vasko, C. Gösselsberger, A. S. El-Said, and F. Aumayr, “A Deceleration System at the Heidelberg EBIT Providing Very Slow Highly Charged Ions for Surface Nanostructuring,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, submitted, 2010.

- [157] K. Blaum, “High-accuracy mass spectrometry with stored ions,” *Physics Reports*, vol. 425, pp. 1–78, March 2006.
- [158] W. Meissl, R. Ginzler, R. Heller, A. S. El-Said, G. Kowarik, C. Vasko, C. Gosselsberger, R. Ritter, B. Solleder, M. Simon, S. Facsko, J. R. Crespo López-Urrutia, C. Lemell, R. M. Papaleo, W. Moller, J. Ullrich, J. Burgdorfer, and F. Aumayr, “Potential energy - induced nanostructuring of insulator surfaces by impact of slow, very highly charged ions,” *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 194, no. 13, pp. 132027+, 2009.
- [159] W. Meissl, M. Simon, J. R. Crespo López-Urrutia, H. Tawara, J. Ullrich, H. Winter, and F. Aumayr, “Highly charged ion-induced potential electron emission from clean Au(111): Dependence on the projectile angle of incidence,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, vol. 256, pp. 520–523, March 2007.
- [160] M. C. Simon, J. R. Crespo López-Urrutia, C. Beilmann, M. Schwarz, S. W. Epp, B. L. Schmitt, T. M. Baumann, E. Behar, S. Bernitt, R. Ginzler, Z. Harman, C. H. Keitel, R. Klawitter, K. Kubicek, V. Mäckel, P. H. Mokler, G. Reichardt, O. Schwarzkopf, and J. Ullrich, “Resonant and Near-Threshold Photoionization Cross Sections of Fe^{14+} ,” *Physical Review Letters*, submitted, 2010.
- [161] M. C. Simon, M. Schwarz, B. L. Schmitt, C. Beilmann, S. W. Epp, T. M. Baumann, K. Kubicek, R. Ginzler, S. G. Higgins, R. Klawitter, V. Mäckel, S. Bernitt, P. H. Mokler, J. Ullrich, and J. R. Crespo López-Urrutia, “Photoionization of ions in arbitrary charge states by synchrotron radiation in an electron beam ion trap,” *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 194, no. 1, pp. 012009+, 2009.
- [162] T. M. Baumann, “Entwicklung eines Gitterspektrometers zur Untersuchung vakuumultravioletter Strahlung von hochgeladenen Ionen,” Master’s thesis, Fakultät für Physik und Astronomie, Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, 2008.
- [163] A. Saptier, *Focusing of Charged Particles*. Academic Press Inc., 1967.
- [164] A. B. El-Kareh and J. C. J. El-Kareh, *Electron Beams, Lenses and Optics*. Academic Press Inc., 1970.
- [165] M. Schwarz, “Photoionisation von neonartigem Argon in einer Elektronenstrahl-Ionenfalle,” Master’s thesis, Fakultät für Physik und Astronomie, Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, 2009.
- [166] C. R. Corporation, “Instructions, Velocity Filter Model 600-B-H, Model 600-B,” 2321 Yarmouth Avenue, Boulder, CO 80301 US, pp. 1–16, 1997.
- [167] R. H. GmbH, “MCP Dela Line Detector Manual,” *Institut für Kernphysik, Max-von-Laue-Straße 1, D-60438 Frankfurt am Main, Germany*, vol. version (6.2.90.10), pp. 1–86, 2008.
- [168] F. C. GmbH, “MPA-3, Multiparameter Data Acquisition System, User Manual,” *Grünwalder Weg 28a, D-82041 Oberhaching, Germany*, vol. version 1.71, pp. 1–112, 2007.

- [169] F. C. GmbH, “7072, Dual 500ns ADC, User Manual,” *Grünwalder Weg 28a, D-82041 Oberhaching, Germany*, vol. version 2.3, pp. 1–15, 2009.
- [170] A. Lapierre, J. R. Crespo López-Urrutia, T. M. Baumann, S. W. Epp, A. Gonchar, A. J. G. Martínez, G. Liang, A. Rohr, R. S. Orts, M. C. Simon, H. Tawara, R. Versteegen, and J. Ullrich, “Compact soft x-ray spectrometer for plasma diagnostics at the Heidelberg Electron Beam Ion Trap,” *Review of Scientific Instruments*, vol. 78, no. 12, pp. 123105+, 2007.
- [171] J. D. Gillaspay, B. Blagojevic, A. Dalgarno, K. Fahey, V. Kharchenko, J. M. Laming, E. O. Le Bigot, L. Lugosi, K. Makonyi, L. P. Ratliff, H. W. Schnopper, E. H. Silver, E. Takács, J. N. Tan, H. Tawara, and K. Tokési, “Visible, EUV, and X-ray Spectroscopy at the NIST EBIT Facility,” vol. 730, pp. 245–254, AIP, 2004.
- [172] E. Träbert, P. Beiersdorfer, S. B. Utter, and J. R. Crespo López-Urrutia, “Forbidden Transitions in the Visible Spectra of an Electron Beam Ion Trap (EBIT),” *Physica Scripta*, vol. 58, no. 6, pp. 599–604, 1998.
- [173] R. Radtke, C. Biedermann, P. Bachmann, G. Fussmann, and T. Windisch, “Sawtooth oscillations in EBIT,” *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 2, pp. 84–93, 2004.
- [174] S. Molodtsov, S. Fedoseenko, D. Vyalikh, I. Iossifov, R. Follath, S. Gorovikov, M. Brzhezinskaya, Y. Dedkov, R. Püttner, J. S. Schmidt, V. Adamchuk, W. Gudat, and G. Kaindl, “High-resolution Russian–German beamline at BESSY,” *Applied Physics A: Materials Science & Processing*, vol. 94, pp. 501–505, March 2009.
- [175] K. Prince, “A critical comparison of selected 1s and 2p core hole widths,” *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, vol. 101-103, pp. 141–147, June 1999.
- [176] R. Sodhi and C. Brion, “Reference energies for inner shell electron energy-loss spectroscopy,” *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, vol. 34, no. 4, pp. 363–372, 1984.
- [177] M. Coreno, L. Avaldi, R. Camilloni, K. C. Prince, M. de Simone, J. Karvonen, R. Colle, and S. Simonucci, “Measurement and ab initio calculation of the Ne photoabsorption spectrum in the region of the K edge,” *Physical Review A*, vol. 59, pp. 2494–2497, Mar 1999.
- [178] J. M. Esteve, B. Gauthe, P. Dhez, and R. C. Karnatak, “Double excitation in the K absorption spectrum of neon,” *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, vol. 16, no. 9, pp. L263–L268, 1983.
- [179] K. Jones, “Phobis, a photon beam ion source for production of highly-charged ions,” *Physics Letters A*, vol. 97, pp. 377–380, September 1983.
- [180] M. Domke, K. Schulz, G. Remmers, G. Kaindl, and D. Wintgen, “High-resolution study of 1Po double-excitation states in helium,” *Physical Review A*, vol. 53, pp. 1424–1438, Mar 1996.

-
- [181] K. Schulz, G. Kaindl, M. Domke, J. D. Bozek, P. A. Heimann, A. S. Schlachter, and J. M. Rost, "Observation of New Rydberg Series and Resonances in Doubly Excited Helium at Ultrahigh Resolution," *Physical Review Letters*, vol. 77, pp. 3086–3089, Oct 1996.
- [182] J. A. Tully, M. J. Seaton, and K. A. Berrington, "Atomic data for opacity calculations. XIV. The beryllium sequence," *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 23, no. 21, pp. 3811–3837, 1990.
- [183] W. L. Wiese, J. R. Fuhr, and T. M. Deters, "Atomic transition probabilities of carbon, nitrogen, and oxygen - A critical data compilation," *J. Phys. Chem. Ref. Data, Monograph No.*, 1996.
- [184] K. A. R. J. Ralchenko, Yu. and N. A. Team, "NIST Atomic Spectra Database," *National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.*, vol. version 3.1.5, 2008.
- [185] R. D. Cowan, *Theory of Atomic Structure and Spectra*. University of California Press, Berkeley and Los Angeles, California, 1981.
- [186] R. D. Cowan, "Cowans ATOMIC Structure Code - CATS," *Los Alamos Atomic Physics Codes*, p. <http://aphysics2.lanl.gov/tempweb/lanl/>.
- [187] W. C. Chu, H. L. Zhou, A. Hibbert, and S. T. Manson, "Photoionization of the Be isoelectronic sequence: total cross sections," *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 42, no. 20, pp. 205003+, 2009.
- [188] E. Kennedy, "New dual laser plasma investigations of inner-shell excitations," *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, vol. 101-103, pp. 161–166, June 1999.
- [189] H. S. Chakraborty, A. Gray, J. T. Costello, P. C. Deshmukh, G. N. Haque, E. T. Kennedy, S. T. Manson, and J. P. Mosnier, "Anomalous Behavior of the Near-Threshold Photoionization Cross Section of the Neon Isoelectronic Sequence: A Combined Experimental and Theoretical Study," *Physical Review Letters*, vol. 83, pp. 2151–2154, Sep 1999.
- [190] L. Liang, Z. Chao, and Z. Xie, "The study of photoionization of neon-like Ar IX," *Optics Communications*, vol. 282, pp. 558–561, February 2009.
- [191] N. Haque and A. K. Pradhan, "Photoionization of Fe XV," *Physical Review A*, vol. 60, pp. R4221–R4224, Dec 1999.
- [192] K. Butler, C. Mendoza, and C. J. Zeippen, "Atomic data for opacity calculations. XIX. The magnesium isoelectronic sequence," vol. 26, no. 23, pp. 4409–4423, 1993.
- [193] X. Zhang, N. Nakamura, C. Chen, M. Andersson, Y. Liu, and S. Ohtani, "Measurement of the QED energy shift in the $1s^2 2p_{3/2} - 1s^2 2s_{1/2}$ X-ray transition in Li-like $^{208}\text{Pb}^{79+}$," *Physical Review A*, vol. 78, pp. 032504+, Sep 2008.

- [194] F. B. Rosmej, D. Reiter, V. S. Lisitsa, M. Bitter, O. Herzog, G. Bertschinger, and H. J. Kunze, "Influence of charge-exchange processes on x-ray spectra in TEXTOR tokamak plasmas: experimental and theoretical investigation," *Plasma Physics and Controlled Fusion*, vol. 41, no. 2, pp. 191–214, 1999.
- [195] J. M. J. Madey, "Stimulated Emission of Bremsstrahlung in a Periodic Magnetic Field," *Journal of Applied Physics*, vol. 42, no. 5, pp. 1906–1913, 1971.
- [196] D. Nolle, "First lasing of the FELICITA I FEL at DELTA," *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 445, pp. 128–133, May 2000.
- [197] W. Meissl, M. C. Simon, J. R. Crespo López-Urrutia, H. Tawara, J. Ullrich, Hp, and F. Aumayr, "Novel method for unambiguous ion identification in mixed ion beams extracted from an electron beam ion trap," *Review of Scientific Instruments*, vol. 77, no. 9, pp. 093303+, 2006.

Erklärung

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

Heidelberg, den 8. Februar 2010

Martin C. Simon