Fakultät für Physik und Astronomie

Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg

Diplomarbeit

im Studiengang Physik

eingereicht von

René Friedrich Steinbrügge

aus Malsch

2010

Weiterentwicklung eines Geschwindigkeitsfilters zur Beobachtung ladungsändernder Prozesse hochgeladener Ionen

Die Diplomarbeit wurde von René Friedrich Steinbrügge

ausgeführt am

Max-Planck-Institut für Kernphysik Heidelberg

unter der Betreuung von

Priv.-Doz. Dr. José R. Crespo López-Urrutia

Abstract

Weiterentwicklung eines Geschwindigkeitsfilters zur Beobachtung ladungsändernder Prozesse hochgeladener Ionen

Resonante Photoionisations- und Rekombinationsprozesse wurden in dieser Arbeit untersucht. Durch Neukonstruktion des dabei eingesetzten Wien'schen Geschwindigkeitsfilters wurde dieser entscheidend verbessert. Das Instrument wurde zur q/m-Separation von aus einer Elektronenstrahlionenfalle extrahierten hochgeladenen Ionen verwendet. Während einer Messkampagne an der Synchrotronstrahlungsquelle BESSY II konnte damit erstmals die resonate Photoionisation von Fe^{15+} beobachtet und vermessen werden. Die dabei erreichte Genauigkeit ermöglicht die Überprüfung und Unterscheidung zwischen verschiedenen Vorhersagen auf einem bisher nicht erreichten Niveau. Zusätzlich wurden bei Messungen zur dielektronischen Rekombination mehrere neue Verfahren erfolgreich erprobt, die auf der Analyse der extrahierten Ionen basieren und in Zukunft bessere Messungen erwarten lassen.

Upgrade of a velocity filter for observation of charge changing processes in higly charges ions

Resonant photoionisation- and photorecombination processes of highly charged ions had been investigated in this work. A new design of the Wien-type velocity filter in use before, has significantly improved the device. This was used to separate highly charged ions extracted from an electron beam ion trap depending on their q/m-ratio. During a beamtime at the synchrotron radiation source BESSY II, resonant photoionisation of Fe^{15+} was observed and measured for the first time. The precision of this measurements allows to test and distinguish between various predictions on a hitherto unreached level. Furthermore, several new methods based on analysis of the extracted ions which were sucessfull tested during measurements of dielectronic recombination, promise further improvements in future measurements.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung **1**

2 Theorie **7**

2.1 Die Struktur des Atoms 7

2.2 Ladungsändernde Prozesse 13

2.2.1 Übergänge zwischen den Zuständen 13

2.2.2 Photoionisation 17

2.2.3 Rekombination 19

3 Aufbau des Experiments **23**

3.1 Funktionsprinzip einer EBIT 25

3.1.1 Eigenschaften des Elektronenstrahls 25

3.2 Die FLASH-EBIT 28

3.2.1 Elektronenkanone 28

3.2.2 Falle und Magnet 29

3.2.3 Kollektor 31

3.2.4 Injektionssystem 32

3.2.5 Germaniumdetektor 32

3.3 Extraktion der Ionen 33

3.3.1 Elektrostatischer Ablenker 33

3.3.2 Elektrostatische Linsen 36

3.3.3 Blenden 37

3.3.4 Positionsempfindlicher Detektor 38

3.4 Datenaufnahme 40

3.5 Steuerung der Extraktion 42

4 Verbesserung des Wienfilters **43**
4.1 Theorie 44
4.2 Bisheriger Wienfilter 45
4.3 Simulation verschiedener Designs 47
4.4 Verbesserter Wienfilter 51
4.5 Strahlrohr 55

5 Messungen **57**
5.1 Bestimmung der Ladungszustandsverteilung in der EBIT 57
5.1.1 Einstellen der Extraktion 57
5.1.2 Identifikation der Ionen 59
5.2 Resonante Photoionisation von Fe^{15+} 63
5.2.1 Synchrotonstrahlung und BESSY II 63
5.2.2 Messprinzip der Photoionisation 66
5.2.3 Datenauswertung und systematische Effekte 67
5.2.4 Messergebnisse der Photoionisation 70
5.3 Dielektronische Rekombination von hochgeladenem Eisen 79
5.3.1 Messprinzip 79
5.3.2 Datenauswertung und systematische Effekte 81
5.3.3 Ergebnisse 85

6 Zusammenfassung **95**

Kapitel 1

Einleitung

Entfernt man von einem Atom einen Großteil seiner Elektronen, so erhält man ein hochgeladenes Ion. Die Ionen bekommen dabei eine Elektronenstruktur die analog zu der eines leichteren Elements ist. Deshalb nennt man die Ionen mit einem verbliebenen Elektron wasserstoffartig, die mit zwei Elektronen heliumartig und entsprechend weiter. Da die theoretische Beschreibung der Atome mit steigender Anzahl an Elektronen durch Korrelationseffekte komplizierter wird, stellen hochgeladene Ionen eine ausgezeichnete Möglichkeit zum Untersuchen der elektromagnetischen Wechselwirkung dar. Aufgrund ihrer einfacheren Elektronenstruktur lassen sie sich einerseits leichter theoretisch beschreiben und andererseits können durch Untersuchungen entlang einer isoelektronischen Reihe unterschiedliche Beiträge zur Bindungsenergie, wie zum Beispiel Relativistik, quantenelektrodynamische Korrekturen und Kerngrößeneffekte, variierend gewichtet werden. Durch die hohe Ladung des Atomkerns ist die elektromagnetische Wechselwirkung allerdings um ein Vielfaches stärker als in neutralen Atomen. So skalieren die Bindungsenergien quadratisch mit der Kernladungszahl Z, die relativistischen und quantenelektrodynamischen Korrekturen sogar mit der vierten Potenz von Z.

Auf der Erde kommen hochgeladene Ionen nicht natürlich vor, da ihre Erzeugung verhältnismäßig hohe Energien erfordet und sie sofort Elektronen aus der Umgebung bis zur vollständigen Neutralisation einfangen würden. Für ihre Untersuchung müssen sie somit in geeigneten Vorrichtungen erzeugt und gespeichert werden. Dies ist unter anderem mit Elektronenstrahl-Ionenfallen (EBIT, von engl. electron beam ion trap) möglich, welche seit ihrer Entwicklung eine Vielzahl an Experimenten ermöglicht haben [1].

Im Weltraum besteht jedoch fast die gesamte sichtbare Materie aus hochionisierten Atomen [2], weshalb diese für die Astrophysik von entscheidender Bedeutung sind. Da Erkenntnisse über das ferne Universum fast ausschließlich aus der die Erde erreichenden elekromagnetischen Strahlung gewonnen werden können, ist insbesondere die Wechselwirkung der Ionen mit Photonen von Interesse. So lassen sich aus den in astrophysikalischen Spektren auftretenden Emissions- und Absorptionslinien Informationen über die relativen Häufigkeiten der verschiedenen Elemente und deren Ionisationszustände, sowie deren Temperatur, Dichte und Geschwindigkeit im beobachteten Gebiet bestimmen. Hierzu ist allerdings eine genaue Kenntnis der zugrunde liegenden Prozesse notwendig. Im Vakuumviolett- und Röntgenbereich spielen die Absorptionsmechanismen der hochgeladenen Ionen dabei eine wichtige Rolle. So erhalten die nicht so häufig auftretenden mittelschweren Elemente, mit dem besonders prominenten Beispiel des Eisens, dennoch ein Übergewicht in der Strahlungsbilanz astrophysikalischer heißer Plasmen. Dies hat einfache Gründe: Erstens wird pro Photon jeweils eine höhere Energie umgesetzt, und zweitens bewirken wesentlich höhere Übergangswahrscheinlichkeiten der zugrunde liegenden Prozesse eine um Größenordnungen verstärkte Aktivität solcher Ionen.

Da diese Strahlung jedoch größtenteils von der Erdatmosphäre absorbiert wird, ist die Untersuchung dieser Spektralbereiche nur mit satellitenbasierten Röntgenobservatorien möglich. Mit den 1999 gestarteten Observatorien *Chandra* und *XMM-Newton* [3,4] lassen sich inzwischen Beobachtungen von so hoher Qualität machen (s. Abb. 1.1), das die Unsicherheiten bei der Interpretation dieser Daten größtenteils auf den theoretischen Modellen zur Beschreibung der Wechselwirkungen zwischen Ionen und Photonen beruhen. Ungenaue Vorhersagen führen zum Beispiel zu einer extrem verfälschten Bestimmung der Dopplerverschiebung und damit der Auströmgeschwindigkeit stellarer Winde. In extremen Fällen könnte dabei sogar die Flussrichtung des Plasmastroms verkehrt ermittelt werden.

Um diese Unsicherheiten zu beseitigen, ist es erforderlich die theoretischen Berechnungen mit Labordaten zu überprüfen. Von besonderer Bedeutung ist dabei die Photoionisation, welche bei der Absorption im Bereich der Röntgenstrahlung eine dominante Rolle einimmt. Hierbei wird ein Photon von dem Ion absorbiert und dessen Energie auf ein Elektron übertragen, welches das Ion verlässt. Neben diesem direkten Prozess ist zudem die resonante Anregung eines Elektrons innerhalb des Ions mit anschließendem Augerzerfall möglich.

Aufgrund der Schwierigkeit hochgeladene Ionen in ausreichender Dichte in Reich-

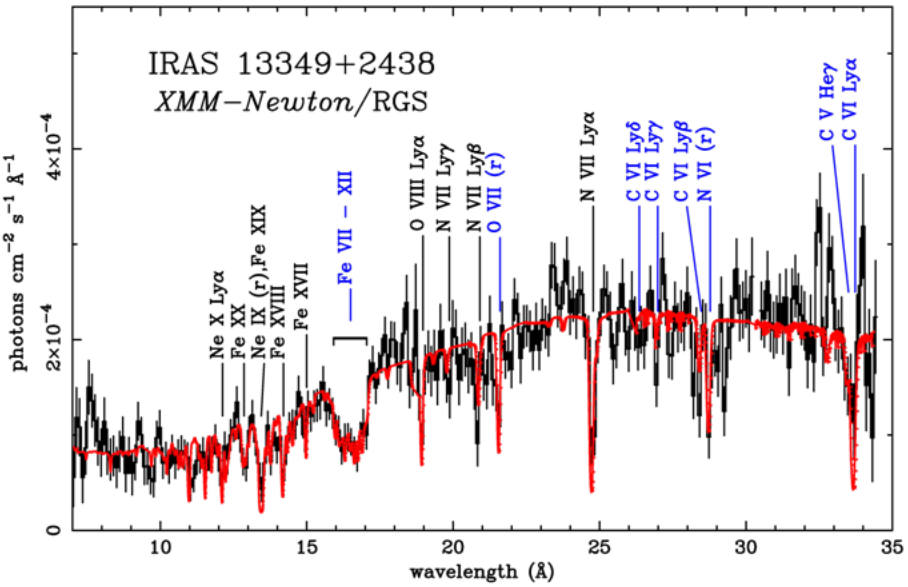

Abbildung 1.1: Spekrum des Quasars IRAS 13349+2438, aufgenommen mit dem Röntgenobservatorium *XMM-Newton* [5]. Es sind deutlich die Absorptionslinien von verschiedenen hochgeladenen Ionensorten zu erkennen.

weite einer Strahlungsquelle herzustellen, existierten bisher nur wenige Messungen zur Photoionisation hochgeladener Ionen. Die maximal erreichte Ionisationsenergie betrug 140 eV, die höchsten Ladungszustände waren Xe^{7+} und Ce^{9+}. Erst mit der Entwicklung einer transportablen aber dennoch leistungsstarken EBIT [6] wurde es möglich resonate Wechselwirkungen zwischen Ionen und Photonen im Röntgenbereich zu untersuchen, indem sie an entsprechende Strahlungsquellen angeschlossen wurde. Zum Nachweis der Photoionisation müssen die Ionen aus der Falle extrahiert und nach Ladungszuständen getrennt werden. Mit dieser von Martin Simon entwickelten Methode konnte erstmals die Photonionisation von hochgeladenem Eisen (Fe^{12+} und Fe^{14+}) vermessen werden [7–9]. Diese Ionen haben eine zentrale Bedeutung beim Strahlungstransport im Sonneninneren und bei der Diagnostik von Röntgendoppelsternen.

Genau wie die Photoionisation ist auch der Zeitumkehrprozess, die dielektronische Rekombination hochgeladener Ionen, von Interesse. Das Ion fängt ein freies Elektron, die frei werdende Energie wird auf ein gebundenes Elektron übertragen, welches dadurch in einen angeregten Zustand übergeht aus dem es radiativ zurückfällt. Dieser Prozess ist bei Plasmen mit hochgeladenen Ionen von größerer Bedeutung als die direkte, nicht resonante Photorekombination. Neben der Astrophysik [10] ist dabei

in letzter Zeit ihre Rolle in der Plasmadiagnostik in den Blickpunkt gerückt. Bei einer gezielten oder ungewollten Verunreinigung von Plasmen mit schweren Elementen lässt sich die bei der dielekrtischen Rekombination emittierte Strahlung zur Bestimmung von Temperatur und Dichte des Plasmas benutzen. Dies ist für die Entwicklung von Kernfusionsreaktoren von Bedeutung, da die zur Kernfusion benötigten Stoßenergien effektiv nur in sehr heißen Plasmen erzeugt werden können.
Zur Untersuchung der dielektrischen Rekombination bieten sich EBITs mit ihrem Elektronenstrahl geradezu an an, weshalb zur dielektrischen Rekombination bereits eine Vielzahl an Experimenten an ihnen durchgeführt wurden [11–14]. Die Rekombination wurde in diesen Experimenten üblicherweise durch Detektion der ausgesandten Photonen nachgewiesen, wobei sich teilweise die Resonanzen verschiedener in der EBIT vorhandener Ladungszustände überlagern. Diesen Umstand kann man umgehen, wenn man die Rekombination durch die Änderung der Ladungsverteilung in der Falle nachweist, wozu die Ionen aus der Falle extrahiert werden. Diese Methode wurde von Ali *et al.* [15] sowie DeWitt *et al.* [16,17] entwickelt und unter anderem an der Heidelberg-EBIT [18, 19] weiter verbessert. Der gleichzeitige Nachweis mehrerer Ionensorten mittels eines positionsempfindlichen Detektors ermöglichte dabei eine einfachere Normierung der Signale und eine höhere Detektionseffizienz . Andere verwandte Experimente werden neuerdings an der Tokyo-EBIT durchgeführt [20].
Zur Ladungsseparation der extrahierten Ionen wurden dabei meist Dipolmagneten verwendet. Diese sind allerdings aufgrund ihrer Größe oft für Photoionisationsmessungen an Synchrotronen nur bedingt geeignet, da an der Strahlquelle nur ein begrenzter Platz zur verfügung steht und der gesamte Aufbau zudem transportabel sein muss. Deshalb wurde bei den bisherigen Photoionisationsmessungen unserer Gruppe [7–9] ein Wienfilter zur Ladungstrennung eingesetzt, welcher jedoch nicht für Messungen mit hochgeladenen Ionen ausgelegt war, so dass sich starke Einschränkungen für den Betrieb ergaben. Deshalb wurde der Wienfilter in dieser Diplomarbeit weiterentwickelt. Komplette Simulationen der neuentworfenen Elektrodenanordnung, die eine höhere Spannungsfestigkeit und eine verbesserte Ultrahochvakuumtauglichkeit aufwies, wurden dazu durchgeführt. Dadurch konnten die Bedingungen für die Messungen zur Photoionisation, welche in einer mehrwöchigen Kampangne am Synchrotron BESSY II durchgeführt wurden, deutlich verbessert werden. Dies traf auch auf die Messungen zur Photorekombination zu, welche dabach in dedizierten Messungen am Max-Planck-Institut für Kernphysik untersucht wurde. Diese Messungen und deren Analyse stellen einen wichtigen Teil dieser Arbeit dar.

Im ersten Kapitel werden die theoretischen Grundlagen der Photoionisation und Rekombination dargestellt. Es folgt eine Beschreibung der Elektronenstrahlionenfalle FLASH-EBIT, sowie der zur Extraktion verwendeten Instrumente. Dabei wird auf den Wienfilter in einem gesonderten Kapitel eingegangen, da an ihm umfangreiche Änderungen durchgeführt wurden. Im Kapitel *Messungen* wird zuerst allgemein die Methode zur Bestimmung der Ladungsverteilung beschrieben, bevor auf die speziellen Methoden und Ergebnisse der Experimente zur Photoionisation und dielektrischen Rekombination eingegangen wird. Am Ende der Arbeit werden die Ergebnisse zusammengefasst und ein Ausblick auf weitere Experimente gegeben.

Kapitel 2

Theorie

2.1 Die Struktur des Atoms

Durch Streuversuche mit α-Teilchen an dünnen Goldfolien stellte Rutherford 1909 fest, dass die positiven Ladungsträger sowie fast die gesamte Masse des Atoms sich in einem kleinen Volumen – dem Atomkern – befinden [21]. Auf dieser Basis erstellte Bohr 1913 ein Atommodell, bei dem sich die Elektronen auf kreisförmigen Bahnen um den Atomkern bewegen. Da diese Bahnen nach der klassischen Mechanik und Elekrodynamik jedoch nicht stabil sind, postulierte Bohr, dass die Elektronen sich nur auf Bahnen mit einem quantisierten Drehimpuls $|L| = n\hbar\,(n = 1, 2, \ldots)$ bewegen können [22]. Aus dieser Quantisierung folgt, dass die Elektronen im gebundenen Zustand diskrete Energien haben. Der Übergang zwischen zwei Bahnen erfolgt durch Emission oder Absorption eines Photons. Aufgrund der Energieerhaltung können die Photonen ebenfalls nur diskrete Energien und somit diskrete Frequenzen haben, wodurch erstmals das diskrete Emissions- und Absorptionsspektrum von Atomen erklärt werden konnte. Den Grund für die Quantisierung des Drehimpulses lieferte allerdings erst die Quantenmechanik: De Broglie schlug 1924 vor, in Analogie zum Welle-Teilchen-Dualismus des Lichtes auch massiven Teilchen eine von ihrem Impuls abhängige Wellenlänge $\lambda = \hbar/p$ zu geben [23]. Diesen Ansatz weiter verfolgend, entwickelte Schrödinger 1926 eine Wellenmechanik für Teilchen [24–28]. Hierbei werden die Teilchen durch komplexwertige Wellenfunktionen ψ beschrieben, deren Betragsquadrat $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ die Wahrscheinlichkeit angibt, das Teilchen zu dem Zeitpunkt t an dem Ort $\vec{r}$ zu finden. Diese Wellenfunktionen müssen die zeitabhängige Schrödinger-

Gleichung

$$\hat{\mathrm{H}}\psi(\vec{r},t) = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) \tag{2.1}$$

erfüllen, welche die Basisgleichung der Quantenmechnik darstellt. Hierbei ist $\hat{\mathrm{H}}$ der Hamilton-Operator des Systems

$$\hat{\mathrm{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r + V(\vec{r,t})\,. \tag{2.2}$$

Für ein statisches Potential lässt sich die Wellenfunktion in einen zeitabhängigen und einen zeitunabhänigen Teil separieren

$$\psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}\,, \tag{2.3}$$

wobei E ein Eigenwert des Hamiltonoperators ist und die Energie des Teilchens darstellt. Der ortsabhängige Teil der Wellenfunktion muss somit die Gleichung

$$\hat{\mathrm{H}}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})\,, \tag{2.4}$$

erfüllen. Betrachtet man das System bestehend aus einem Kern mit Ladung Z und Masse M und einem Elektron, so kann man sich auf die Bewegung des Elektrons relativ zum Kern beschränken. Unter Verwendung der reduzierten Masse $\mu = \frac{m_e M}{m_e+M}$ lautet der Hamiltonoperator für das Coulombpotential des Kerns

$$\hat{\mathrm{H}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r - \frac{Z^2e^2}{|\vec{r}|} \tag{2.5}$$

für den sich Gleichung 2.4 analytisch lösen lässt. Für $E > 0$ gibt es ein kontinuierliches Energiespektrum und das Elektron ist nicht an den Kern gebunden. Für $E < 0$ werden die Wellenfunktionen durch die Quantenzahlen n, l, m beschrieben:

$$\psi(\vec{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi) \tag{2.6}$$

$$R_{nl}(r) = \mathrm{e}^{-\rho/2}\rho^{l+1}\frac{(n-l-1)!(2l+1)!}{[(n+l)!]^2}L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \tag{2.7}$$

$$\rho = \left(\frac{-8\mu E}{\hbar^2}\right)^{1/2} r \tag{2.8}$$

Hierbei sind $L_p^k(x)$ die Laguerreschen Polynome und $Y_{lm}(\theta, \psi)$ die Kugelflächenfunktionen. Das Symbol $n = 1, 2, \ldots$ stellt die Hauptquantenzahl der Lösung dar, die Drehimpulsquantenzahl $l = 0, 1, \ldots, n-1$ gibt den Betrag des Drehimpulses an $|\vec{L}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}$, die magnetische Quantenzahl $m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l$ seine z-Komponente $L_z = \hbar m$. Die Energie des Elektrons hängt nur von der Hauptquantenzahl ab:

$$E_{nlm} = E_n = -\mu c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} \tag{2.9}$$

Diese Energien stimmen mit denen des Bohr'schen Modells überein, allerdings hängt die Energie nun nicht mehr vom Drehimpuls des Elektrons ab und es existieren auch Zustände ohne Drehimpuls ($l = 0$).

Die Schrödingergleichung (2.1) erfüllt nicht die Symmetrieanforderungen der speziellen Relativitätstherie, da sie die zweite Ableitung in Ortskoordinaten, aber nur die erste Ableitung in der Zeit enthält. Sie ist somit nur bei nichtrelativistischen Geschwindigkeiten der Teilchen annähernd gültig. Deshalb entwickelte Dirac eine Theorie, in der der Hamiltonoperator nur noch lineare Impulskomponenten enthält [29]. Für ein freies Teilchen lautet er

$$\hat{\mathrm{H}} = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m_0 c^2 \,, \tag{2.10}$$

wobei c die Lichtgeschwindigkeit und m_0 die Ruhemasse des Teilchens ist. Damit der Hamiltonoperator die relativistische Energie-Impuls-Beziehung

$$E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4 \tag{2.11}$$

erfüllt, müssen die Einträge des Koeffizientenvektors $\vec{\alpha} = \{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3\}$ und der Koeffizient β 4×4-Matrizen sein. Hierbei lassen sich die α_i durch die Paulischen Spinmatrizen σ_i ausdrücken:

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \tag{2.12}$$

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{2.13}$$

Für β gilt

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix}, \qquad \mathbb{1}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{2.14}$$

Für ein Teilchen mit Impuls $\vec{p}$ hat der Hamiltonoperator nach Gleichung (2.10) die Eigenwerte $E_\pm = \pm\sqrt{c^2\vec{p}^2 + m_0^2c^4}$. Die Lösungen zu der negativen Energie E_- werden dabei als Zustände des Antiteilchens interpretiert. Die Eigenwerte $E_\pm$ sind zweifach entartet, was auf die zwei verschiedenen Einstellungsmöglichkeiten des Spins relativ zur Impulsrichtung zurückzuführen ist. Die Einführung eines Spins für das Teilchen folgt dabei direkt aus der Lösung der Dirac-Gleichung[1].
Fügt man dem Hamiltonoperator 2.10 einen zusätzlichen Term für das Coulomb-Potential des Atomkernes hinzu, so lautet die Dirac-Gleichung für ein Elektron

$$\left(c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta m_e c^2 - \frac{Z\alpha}{|\vec{r}|}\right)\psi = E\psi\,. \tag{2.15}$$

Auch hierfür lassen sich die Eigenwerte E analytisch berechnen

$$E_{nj} = m_e c^2\left[1 + \left(\frac{Z\alpha}{n - j - \frac{1}{2} - \sqrt{\left(j+\frac{1}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2}}\right)^2\right]^{-\frac{1}{2}}, \tag{2.16}$$

Die Energien hängen nun auch vom Gesamtdrehimpuls $J = L + S$ ab, der sich aus Bahndrehimpuls L und Elektronenspin S zusammensetzt. Die Quantenzahl $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \ldots, n - \frac{1}{2}$ gibt dabei den Betrag des Gesamtdrehimpulses $|\vec{J}| = \hbar\sqrt{j(j+1)}$ an. Entwickelt man 2.16 nach Potenzen von $Z\alpha$, so erhält man

$$E_{nj} = m_e c^2\left[1 - \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} - \frac{(Z\alpha)^4}{2n^3}\left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n}\right) + \ldots\right]. \tag{2.17}$$

Der erste Term ist die Ruheenergie des Elektrons, der zweite ist die nichtrelativistische Bindungsenergie (2.9). Der dritte Term gibt die relativistischen Korrekturen an, welche unter anderem durch die relativistische Massenzunahme des Elektrons und die Wechselwirkung des Spins mit dem Bahndrehimpuls des Elektrons entstehen. Da diese Korrekturen um den Faktor $\frac{(Z\alpha)^2}{n}$ kleiner sind als die klassische Bindungsenergie, wird die Abhängigkeit der Bindundsenergie vom Gesamtdrehimpuls j als

[1] Für ein detaillierte Beschreibung der Lösung der Dirac-Gleichung siehe z.B. [30]

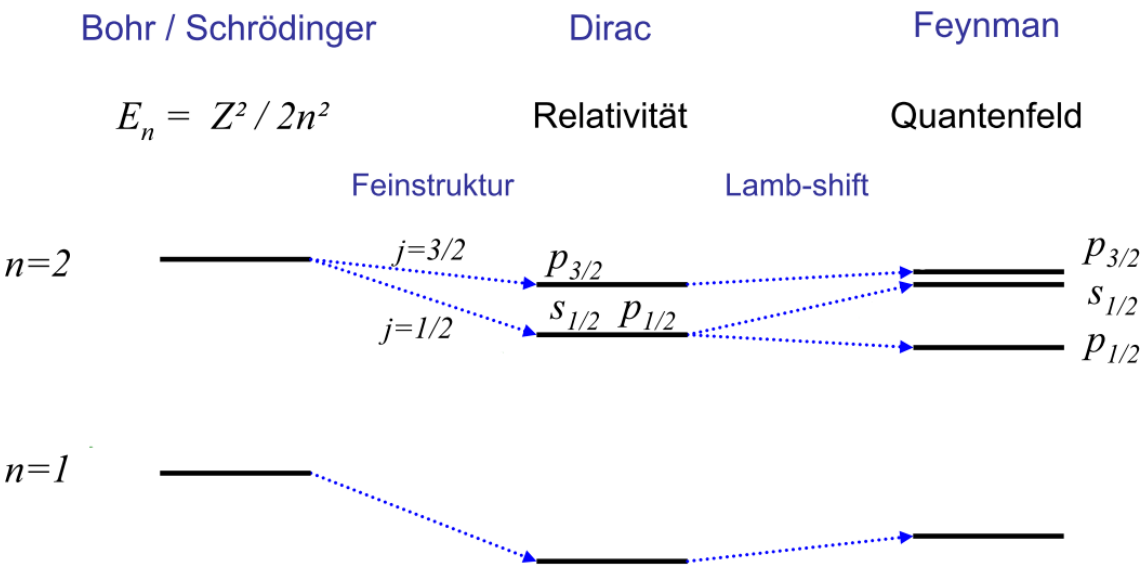

Abbildung 2.1: Termschema des Wasserstoffatoms, dargestellt ist Aufspaltung und Verschiebung der Energieniveaus durch die Berücksichtigung von relativistischen und quantenfeldtheoretischen Effekten, wobei letztere nicht maßstabsgetreu dargestellt sind

Feinstruktur bezeichnet.

Behandelt man die Wechselwirkung zwischen Kern und Elektron im Rahmen der Quantenelektrodynamik, so gibt es eine weitere Korrektur der Energieniveaus, den Lamb-Shift [31]. Hierbei wird das elektrische Feld ebenfalls quantisiert und die Kraft zwischen Kern und Elektron durch virtuelle Photonen vermittelt. Aufgrund der Heisenberg'schen Unschärferelation [32, 33] ist es möglich, dass das Elektron für kurze Zeit ein virtuelles Photon emittieren und anschließend wieder absorbieren kann. Diese Wechselwirkung mit sich selbst erhöht die Energie des Elektrons (Selbstenergie), wodurch die Bindungsenergie reduziert wird. Zudem können im Vakuum kurzzeitig Elektron-Positron-Paare entstehen. Durch diese Vakuum-Polarisation spürt das Elektron eine höhere Kernladung und wird dadurch stärker gebunden. Die hierdurch hervorgerufenen Korrekturen skalieren mit $\frac{(Z\alpha)^4}{n^3}$ und bewirken eine zusätzliche Abhängigkeit der Bindungenergie vom Bahndrehimpuls l.

Zur Bezeichnung der verschiedenen Zustände wird folgende Nomenklatur benutzt:

$$nl_j\,, \tag{2.18}$$

wobei der Drehimpuls l durch Buchstaben kodiert wird: $0\hat{=}s$, $1\hat{=}p$, $2\hat{=}d, 3\hat{=}f, \ldots$

Die bisher angegebenen Modelle beschreiben nur das Verhalten eines Elektrons im Coulomb-Feld des Kernes. Für Atome mit mehreren Elektronen muss man die Wechselwirkung zwischen den einzelnen Elektronen berücksichtigen. Der Hamiltonoperator eines Atoms mit N Elektronen lautet

$$\hat{\mathrm{H}} = \sum_{i=1}^{N} \left(\hat{\mathrm{H}}_i + \sum_{j>i}^{N} \hat{\mathrm{W}}_{ij} \right) . \tag{2.19}$$

Die $\hat{\mathrm{H}}_i$ sind die Ein-Elektron-Hamiltonoperatoren (2.5), die $\hat{\mathrm{W}}_{ij}$ beschreiben die Wechselwirkung zwischen den Elektronen. Nichtrelativistisch lässt sich diese Wechselwirkung als Coulomb-Abstoßung beschreiben.

$$\hat{\mathrm{W}}_{ij}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \frac{\alpha^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \tag{2.20}$$

Im relativistischen Fall müssen noch weitere Korrekturen wie die Spin-Spin-Wechselwirkung hinzugefügt werden.

Die Schrödingergleichung lässt sich für diesen Hamiltonoperator nicht mehr exakt analytisch lösen, deshalb ist es notwendig Näherungen vorzunehmen. Vernachlässigt man Korrelationen zwischen den Elektronen, so lässt sich die Lösung als Produkt von orthonormalen Einteilchen-Funktionen schreiben:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N) = \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2)\ldots\psi_N(\vec{r}_N) \tag{2.21}$$

Aufgrund des Pauli-Prinzips [34] müssen die Wellenfunktionen antisymmetrisch unter Vertauschung zweier Teilchen seien. Dies wird zum Beispiel durch Verwendung der Slater-Determinante sichergestellt:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1) & \psi_2(\vec{r}_1) & \cdots & \psi_N(\vec{r}_1) \\ \psi_1(\vec{r}_2) & \psi_2(\vec{r}_2) & \cdots & \psi_N(\vec{r}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1(\vec{r}_N) & \psi_2(\vec{r}_N) & \cdots & \psi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \tag{2.22}$$

Beim Hartree-Fock-Verfahren [35] wird die Wechselwirkung zwischen den Elektronen durch ein effektives radiales Potential angenähert. Da dieses Potential durch die Wellenfunktionen bestimmt wird, entsteht eine selbstkonsistente Gleichung, mit welcher man numerisch durch Iteration die Lösung approximieren kann. Um auch

Korrelationen zwischen den Elektronzuständen zu erfassen, kann man die Wellenfunktion als Linearkombination von N_s Slaterdeteminanten Ψ_ν darstellen.

$$\Psi = \sum_{\nu=1}^{N_s} c_\nu \Psi_\nu \tag{2.23}$$

Die Slaterdeterminanten können dabei verschiedene N-Elektronen-Konfigurationen beschreiben, wenn diese zu gleichen „guten“ Quantenzahlen des Gesamtsystems (J, L, S sowie Parität π) führen. Durch Variation der Koeffizienten lassen sich somit Lösungen finden, welche die Elektron-Elektron-Korrelationen berücksichtigen. Die exakte Lösung lässt durch dieses als Configuration-Interaktion (CI) bezeichnete Verfahren prinzipiell beliebig genau ermitteln, wenn man eine hinreichend große Anzahl an Konfigurationen Ψ_ν in die Lösung einbezieht. Im Multi-Konfigurations-Hartree-Fock-Verfahren (MCHF) [36] werden nun neben den Koeffizienten c_ν zusätzlich auch die Ein-Teilchenzustände Ψ_ν variiert, um den minimalen Energieeigenwert des Systems zu finden. Dieses Verfahren kann ebenfalls mit der Dirac-Gleichung anstelle der Schrödinger-Gleichung durchgeführt werden, um relativistisch korrekte Lösungen zu erhalten. Es wird dann als Multi-Konfigurations-Dirac-Fock-Verfahren (MCDF) bezeichnet [37]. Mit dieser Methode lassen sich die Energieeigenwerte typischerweise auf 0,1% genau berechnen.

2.2 Ladungsändernde Prozesse

2.2.1 Übergänge zwischen den Zuständen

Die Hamiltonoperatoren 2.5 und 2.19 beschreiben die atomaren Freiheitsgrade des Systems. Die Zeitentwicklung ihrer Eigenfunktionen ψ_n lassen sich allein durch die in Gleichung (2.3) enthaltene Exponentialfunktion beschreiben. Um Übergänge zwischen den Zuständen herbeizuführen, müssen weitere Freiheitsgrade wie die eines elektrischen Feldes oder eines ungebundenen Elektrons eingeführt werden. Die Wechselwirkungen zwischen diesen Freiheitsgraden führen zu einem zusätzlichen Operator $\hat{\mathrm{W}}$ im Hamiltonoperator

$$\hat{\mathrm{H}} = \hat{\mathrm{H}}_A + \hat{\mathrm{W}}\,, \tag{2.24}$$

wobei $\hat{\mathrm{H}}_A$ der atomaren Hamiltonoperator nach Gleichung (2.2) ist. Im Rahmen der zeitabhängigen Störungstheorie wird $\hat{\mathrm{W}}$ als Störung dieses atomaren Systems betrachtet. Da die Eigenfunktionen ψ_n von $\hat{\mathrm{H}}_A$ ein vollständiges System bilden, kann die exakte Wellenfunktion nach diesen entwickelt werden.

$$\Psi(t) = \sum_n c_n(t)\psi_n \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n t} \tag{2.25}$$

Befindet sich das System zu Beginn im Zustand ψ_a, so ergibt sich eine Anfangsbedingung für die Koeffizienten

$$c_n(t=0) = \delta_{n,a}\,. \tag{2.26}$$

Durch Lösen der zeitabhängigen Schrödingergleichung (2.4) lassen sich die Koeffizienten $c_n(t)$ für spätere Zeitpunkte bestimmen. In der ersten Ordnung der Störungstheorie erhält man für die Übergangswahrscheinlichkeit $w_{a\to e}(t)$ in den Zustand ψ_e

$$w_{a\to e}(t) = |c_e(t)|^2 = \left|\langle\psi_e|\hat{\mathrm{W}}|\psi_a\rangle\right|^2 \left(\frac{\sin\left[(E_e - E_a)t/2\hbar\right]}{(E_e - E_a)/2}\right)^2 \tag{2.27}$$

Für große Zeiten t wird die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeit $P_{a\to e}$ unabhängig von t.

$$P_{a\to e} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle\psi_e|\hat{\mathrm{W}}|\psi_a\rangle\right|^2 \rho(E_a = E_e) \tag{2.28}$$

Diese Formel wird aufgrund ihrer vielfältigen Anwendungsmöglichkeiten als *Fermis Goldene Regel* bezeichnet. $\rho(E)$ gibt dabei die Dichte der Endzustände an. Durch die Bedingung $E_a = E_e$ sind nur solche Übergänge erlaubt, bei denen die Gesamtenergie des Systems erhalten bleibt. Aus der Übergangswahrscheinlichkeit lassen sich die Lebensdauer $\tau = 1/P$ sowie die Breite $\Gamma = \hbar P$ des Übergangs berechnen. Um den Wirkungsquerschnitt σ zu erhalten, muss man die Übergangswahrscheinlichkeit auf den Fluss der Projektile im Anfangszustand ψ_a normieren.

Wechselwirkung mit dem elektromagnetischen Feld

Klassisch lässt sich das elektromagnetische Feld durch das skalare Potential Φ und das Vektorpotential $\vec{A}$ beschreiben

$$\vec{E} = -\nabla\Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}\,, \qquad \vec{B} = \nabla \times \vec{A}\,. \tag{2.29}$$

Um die Wechselwirkung eines Teilchens mit dem Feld zu beschreiben, wird der kinetische Impuls $\hat{\vec{\mathrm{p}}} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\vec{\nabla}$ durch den kanonischen Impuls ersetzt:

$$\hat{\vec{\mathrm{p}}} \to \hat{\vec{\mathrm{p}}} + \frac{1}{c}\vec{A} \tag{2.30}$$

Der Hamiltonoperator eines Atoms lautet dann

$$\hat{\mathrm{H}} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\left[\hat{\vec{\mathrm{p}}}_i + (e/c)\vec{A}(r_i,t)\right]^2}{2\mu} + \hat{\mathrm{V}} = \hat{\mathrm{H}}_A - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\mathrm{i}}{c}\vec{\nabla}_i\vec{A} + \frac{\mathrm{i}}{c}\vec{A}\,\vec{\nabla}_i - \frac{1}{c^2}|\vec{A}|^2\right)\,. \tag{2.31}$$

Der letzte Term ist quadratisch in A und beschreibt Zwei-Photonen-Prozesse und kann bei kleinen Feldern vernachlässigt werden. Verwendet man zusätzlich die Coulomb-Eichung für das Vektorpotential ($\vec{\nabla}\vec{A} = 0$), so erhält man für den Wechselwirkungsoperator

$$\hat{\mathrm{W}} = -\frac{i}{c}\sum_{i=1}^{N}\vec{A}\,\vec{\nabla}_i\,. \tag{2.32}$$

Der Hamiltonoperator für ein quellenfreies elektromagnetisches Feld lässt sich darstellen als[2]

$$\hat{\mathrm{H}}_F = \sum_{\lambda}\hbar\omega_\lambda\hat{\mathrm{b}}_\lambda^\dagger\hat{\mathrm{b}}_\lambda\,. \tag{2.33}$$

Die Operatoren $\hat{\mathrm{b}}_\lambda^\dagger$ und $\hat{\mathrm{b}}_\lambda$ sind die Erzeugungs- beziehungsweise Vernichtungsoperatoren eines Photons der Mode λ mit $\omega_\lambda = c|\vec{k}_\lambda|$, wobei $\vec{k}_\lambda$ der zu der Mode gehörende Wellenvektor ist. Die Eigenfunktionen dieses Hamiltonoperators lassen sich durch die

[2] Für eine Herleitung siehe z.B [38]

Anzahl der Photonen n_λ in jeder Mode beschreiben

$$|\psi\rangle = |n_{\lambda_0}, n_{\lambda_1}, \ldots\rangle \,. \tag{2.34}$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit eines Atoms von einem Zustand ψ_a in den Zustand ψ_e durch Absorption eines Photons der Mode λ beträgt somit nach *Fermis Goldener Regel*

$$P_{a\to e} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{i}{c} \sum_{i=1}^{N} \langle \psi_e | \langle \ldots, n_\lambda, \ldots | \vec{A}\, \vec{\nabla}_i | \ldots, n_\lambda - 1, \ldots \rangle | \psi_a \rangle \right|^2 \rho(E_e = E_a + \hbar\omega_\lambda) \,. \tag{2.35}$$

Autoionisierende Zustände

Befindet sich ein Atom mit $N > 1$ Elektronen in einem angeregten Zustand ψ_a, so kann die Anregungsenergie E größer als die Ionisationsenergie des Atoms sein. Dieser Zustand liegt dann energetisch in den Kontinuumszuständen des Ions mit $N-1$ Elektronen, so dass sich die Eigenfunktionen des kompletten Hamilton-Operators in diesem Energiebereich schreiben lassen als

$$\Psi(E) \simeq a(E)\psi_a + \int b(E, E')\psi_f(E')\,\mathrm{d}E' \,, \tag{2.36}$$

wobei die Zustände $\psi_f(E)$ das System aus einem freien Elektron mit der Energie E und dem Ion mit $N-1$ Elektronen im Grundzustand beschreibt. Durch die Coulombabstoßung zwischen den Elektronen

$$\hat{\mathrm{W}} = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j>i}^{N} \frac{\alpha^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \tag{2.37}$$

wechselwirkt der diskrete Zustand mit denen des Kontinuums. Somit ist es möglich, dass der angeregte Zustand strahlungslos in den ionisierten Zustand übergeht, was als Autoionisation oder *Auger-Effekt* bezeichnet wird [39]. Die Übergangsrate lässt sich wieder mit *Fermis Goldener Regel* (2.28) bestimmen

$$P = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \psi_f(E) | \hat{\mathrm{W}} | \psi_a \rangle \right|^2 \rho_f(E) \,, \tag{2.38}$$

wobei $\rho_f(E)$ die Dichte der Kontinuumszustände $\psi_f(E)$ beschreibt.

2.2.2 Photoionisation

Als direkte Photoionisation bezeichnet man den Prozess, bei dem ein Photon von einem Ion absorbiert wird und seine Energie dabei auf ein Elektron überträgt, welches dadurch nicht mehr an das Ion gebunden ist und es verlässt.

$$X^{q+} + \gamma \rightarrow X^{(q+1)+} + e^- \tag{2.39}$$

Damit dieser Prozess möglich ist, muss die Energie des Photons $E_\gamma = \hbar\omega$ größer sein als das Ionisationspotential I_p des Ions. Die darüber hinaus gehende Energie nimmt das Elektron als kinetische Energie auf

$$E^e_{kin} = \hbar\omega - I_p \,. \tag{2.40}$$

Der Wirkungsquerschnitt für diese Reaktion hat einen scharfen Anstieg an der Schwellenenergie $E_\gamma = I_p$ und fällt nach dieser Ionisationskante kontinuierlich ab, und lässt sich hier durch die Kramer-Formel abschätzen:

$$\sigma^p_i h = \frac{64\pi a_0^2 \alpha}{3\sqrt{3}n^2} \left(\frac{Z^2}{n^2}\frac{R_y}{\hbar\omega}\right)^3 , \tag{2.41}$$

wobei α die Feinstrukturkonstante, a_0 der Bohr'sche Radius und R_y die Rydbergenergie bezeichnen. Z ist die Ladung des Ions und n die Hauptquantenzahl des herausgelösten Elektrons.

Ist die Photonernergie so groß, dass auch Elektronen aus einer weiter innen liegenden Schale des Ions herausgelöst werden können, so gibt es eine weitere Ionisationskante. Durch diese Art der Photoionisation entsteht ein Loch in einer inneren Schale, wodurch sich das Ion in einem angeregten Zustand befindet. Aus diesem kann es sich entweder radiativ durch Aussenden eines Photons oder, falls die Anregungsenergie groß genug ist, auch durch einen Auger-Prozess abregen.

Ein angeregter Zustand kann auch entstehen, wenn das Photon ein inneres Elektron auf eine höhere Schale anhebt. Dazu muss die Energie des Photons gerade der Übergangsenergie zwischen beiden Zuständen entsprechen. Es handelt sich also um einen resonanten Prozess. Fällt der angeregte Zustand wiederum durch Aussenden eines Photons in den Grundzustand zurück, so erhält man resonante Photonenstreuung. Ist die Anregungsenergie größer als die Ionisationsenergie, so kann der Zustand auch durch einen Auger-Prozess zerfallen. Dieser Vorgang wird als resonante Pho-

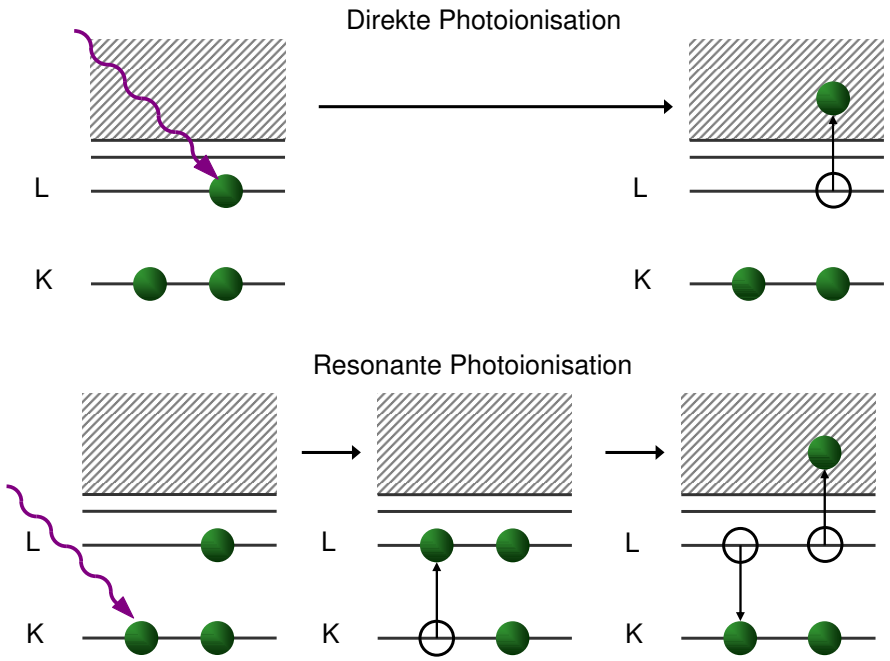

Abbildung 2.2: Vergleich direkte und resonante Photoionisation: Anfangs- und Endzustand sind bei beiden Prozessen gleich.

toionisation bezeichnet. Der Endzustand dieses Prozesses (ein Ion der Ladung $q+1$ sowie ein freies Elektron mit der kinetischen Energie $E^e_{kin} = \hbar\omega - I_p$) unterscheidet sich dabei nicht von der direkten Photoionisation. Aufgrund dieser Ununterscheidbarkeit gibt es quantenmechanische Interferenzen zwischen beiden Prozessen, was sich auf das Profil des Wirkungsquerschnitts auswirkt. Das aus der Überlagerung von resonanten und kontinuierlichen Prozessen entstehende Profil wird durch die Beutler-Fano-Funktion beschrieben [40]:

$$F(q_F, \epsilon) = \frac{(q_F + \epsilon)^2}{1 + \epsilon^2}, \quad \epsilon = \frac{E_{res} - \hbar\omega}{2\Gamma}, \tag{2.42}$$

wobei Γ die Breite der Resonanz ist. Der Fano-Asymmetrie-Faktor hängt von der Stärke der Kopplung zwischen beiden Prozessen ab. Aus dem Profil der Resonanz lassen sich somit zusätzliche Informationen über die Zustände des Atoms, die Lebensdauer sowie über das Verhältnis von radiativer und autoionisierender Abregung erfahren. Im Falle destruktiver Interferenz ist $q_F = 0$, was einem negativen Lorentz-Profil entspricht, der Wirkungsquerschnitt ist geringer als der des direkten Prozesses alleine. Das Maximum wird durch die Interferenz von der Resonanzenergie ($\epsilon = 0$)

verschoben und liegt bei $\epsilon = 1/q_F$. Die Interferenzeffekte sind besonders ausgeprägt, wenn beide Prozesse ähnlich große Übergangswahrscheinlichkeits-Amplituden aufweisen. Für Resonanzen weit oberhalb der Ionisationsschwelle ist der Fano-Faktor groß, so dass die Asymmetrie hingegen kaum ausgeprägt ist und das Profil in ein Lorentz-Profil übergeht. Bei der experimentellen Messung des Profils wird der Verlauf aufrund der endlichen Auflösung des Experiments verschmiert, weshalb für die Bestimmung des Fano-Parameters eine hohe Messgenauigkeit erforderlich ist.

2.2.3 Rekombination

Kommt ein freies Elektron in die Nähe eines Ions, so kann es spontan von diesem eingefangen werden. Das Elektron ist dann fest an das Ion gebunden, wodurch sich die Ladung des Ions um eins verringert. Dieser Prozess wird als Rekombination bezeichnet. Da der gebundene Zustand des Elektrons eine niedrigere Energie hat als der freie Zustand, wird bei diesem Prozess Energie frei, die aus dem System abgeführt oder als innere Energie gespeichert werden muss.

$$\Delta E = E^e_{kin} + E_B\left(nl_j\right) \tag{2.43}$$

Hierbei ist E^e_{kin} die kinetische Energie des Elektrons vor der Rekombination und $E_B(nl_j)$ die Bindungsenergie des Elektrons im Ion, welche vom Zustand nl_j, in den es eingefangen wurde, abhängt.
Bei hohen Elektronendichten ist es möglich, dass die Energie von einem weiteren freien Elektron aufgenommen wird, was als Dreikörperrekombination bezeichnet wird. Bei niedrigen Dichten dominieren Photorekombinationsprozesse, bei denen die Energie über ein Photon abgeführt wird.

Radiative Rekombination

Bei der radiativen Rekombination wird die frei werdende Energie ΔE direkt auf ein Photon übertragen:

$$X^{q+} + e^- \rightarrow X^{(q-1)+} + \gamma \tag{2.44}$$

Dieser Prozess ist für alle Elektronenenergien möglich und kann als Zeitumkehrprozess der direkten Photoionisation betrachtet werden. Der Wirkungsquerschnitt kann

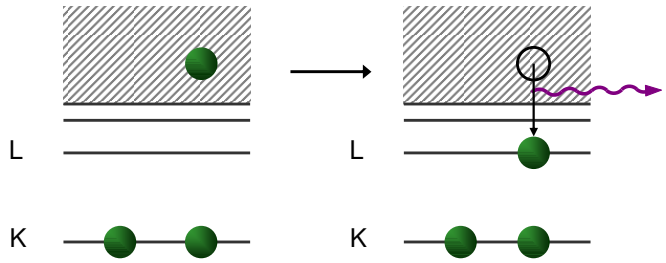

Abbildung 2.3: Radiative Rekombination, der Zeitumkehrprozess der direkten Photoionisation.

nach Kim und Pratt [41] näherungsweise angegeben werden

$$\sigma_n^{RR} = \frac{8\pi\alpha^3 Z_{eff}^4}{\sqrt{27}n^3 E_{kin}^e E_\gamma}\,, \tag{2.45}$$

wobei Z_{eff} eine effektive Ladung des Ions beschreibt, welche berücksichtigt, dass die positive Ladung des Atomkerns durch die Elektronen der inneren Schalen abgeschirmt wird.

Dielektronische Rekombination

Ist die freiwerdende Energie ΔE genau so groß wie die Anregungsenergie eines Elektrons in dem Ion, so kann das eingefangene Elektron seine Energie resonant an dieses Elektron übergeben und so einen doppelt angeregten Zustand des Ions erzeugen.

$$X^{q+} + e^- \;\rightarrow\; \left[X^{(q-1)+}\right]^{**} \tag{2.46}$$

Dieser Prozess entspricht einem zeitumgekehrten Auger-Prozess. Der angeregte Zustand des Ions ist nicht stabil, zerfällt er über einen Auger-Prozess, so erhält das Ion wieder seine ursprüngliche Ladungszahl und der gesamte Prozess ist eine resonante Streuung des freien Elektrons. Regt sich der Zustand durch Aussendung von Photonen ab, so dass die Anregungsenergie unter die Ionisationschwelle des Auger-Zerfalls fällt, so ist das Ion nun stabil im neuen Ladungszustand $(q-1)$. Der gesamte Prozess

$$X^{q+} + e^- \;\rightarrow\; \left[X^{(q-1)+}\right]^{**} \;\rightarrow\; X^{(q-1)+} + n\gamma \tag{2.47}$$

wird aufgrund der Beteiligung von zwei Elektronen dielektronische Rekombination (DR) genannt. Sie entspricht der Zeitumkehrung der resonanten Photoionisation.

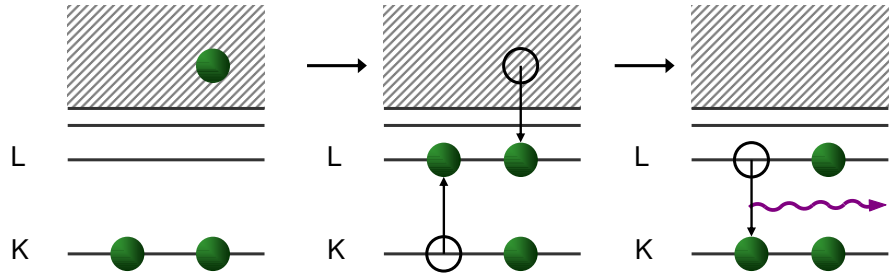

Abbildung 2.4: Dielektronische Rekombination, ein Vergleich mit der resonanten Photoionisation (Abbildung 2.2) zeigt die Zeitumkehrung zwischen beiden Prozessen.

Nimmt man an, dass nur ein angeregter Zwischenzustand d zur DR beiträgt, so lässt sich der Wirkungsquerschnitt σ_{DR} als Produkt aus dem Querschnitt σ_d für den dielektronischen Einfang des Elektrons in den Zwischenzustand und der Fluoreszensausbeute Ω des Zerfalls dieses Zustands berechnen. Über das Prinzip des detaillierten Gleichgewichts lässt sich σ_d auf die Breite Γ_a des autoionisierenden Übergangs vom Zwischenzustand in den Anfangszustand a zurückführen [42]

$$\sigma_d = \frac{\pi\hbar^2}{2m_e}\frac{g_d}{2g_a}\frac{1}{E}\frac{\Gamma_a\Gamma_d}{(E-E_d)^2+\Gamma_d^2/4}\,. \tag{2.48}$$

Hierbei ist E die Energie des freien Elektrons und E_d die Resonanzenergie. Für die Zerfallsbreite des Zwischenzustands gilt $\Gamma_d = \Gamma_a + \Gamma_\gamma$, wobei Γ_γ die Breite der radiativen Abregung des Zwischenzustands ist. $g_a = 2J_a + 1$ und $g_d = 2J_d + 1$ beschreiben die vom Gesamtdrehimpuls J abhängigen statistischen Gewichte des Anfangs- und Zwischenzustands, wobei der Anfangszustand aufgrund der zwei möglichen Spineinstellungen des freien Elektrons einen zusätzlichen Faktor zwei erhält. Mit der Fluoreszensausbeute

$$\Omega = \frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma_\gamma + \Gamma_a} = \frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma_d} \tag{2.49}$$

ergibt sich somit für den Wirkungsquerschnitt

$$\sigma_{DR} = \sigma_d\Omega = \frac{\pi\hbar^2}{4m_e}\frac{g_d}{g_a}\frac{1}{E}\frac{\Gamma_a\Gamma_\gamma}{(E-E_d)^2+\Gamma_d^2/4}\,. \tag{2.50}$$

Die Nomenklatur für diesen Prozess orientiert sich an der in der Augerelektronen-

spektroskopie verwendeten. Es werden hierbei drei Buchstaben verwendet, wobei der erste die Schale des Elektrons im Ursprungszustand angibt. Die beiden anderen Buchstaben geben die Schalen an, in denen sich die Elektronen im angeregten Zustand nach dem Einfangen des Elektrons befinden. Bei einer KLL-Resonanz wird also ein Elektron aus der K-Schale in die L-Schale angeregt, während das freie Elektron ebenfalls in die L-Schale eingefangen wird, wie in Abbildung 2.4 dargestellt wird.

Resonante Prozesse höherer Ordnung

Als Rekombination höherer Ordnung werden Prozesse beschrieben, bei denen analog zur dielektronischen Rekombination ein freies Elektron vom Ion eingefangen wird, dieses seine Energie aber auf mehrere Elektronen im Ion verteilt. Werden zwei Elektronen angeregt, so spricht man von trielektronischer Rekombination. Zur Benennung dieser Prozesse wird die Nomenklatur der DR auf fünf Buchstaben erweitert, um zusätzlich die Anfangs- und Endschale des zweiten angeregten Elektrons zu beschreiben. Bei einer KL-LLL TR werden somit je ein Elektron aus K- und L-Schale in die L-Schale angeregt, während das freie Elektron ebenfalls in die L-Schale rekombiniert.

Kapitel 3

Aufbau des Experiments

Die Untersuchung der ladungsändernden Prozesse lässt sich in drei Abschnitte unterteilen: Zuerst müssen die hochgeladenen Ionen erzeugt werden. Anschließend ändern die Ionen durch Wechselwirkung mit Photonen (Photoionisation) oder Elektronen (Rekombination) ihre Ladung. Zuletzt wird die Ladungsverteilung der Ionen gemessen, um den Prozess zu detektieren. Bei der Rekombination können auch die ausgesandten Photonen detektiert werden.

Der in dieser Diplomarbeit verwendete Aufbau ist in Abbildung 3.1 schematisch dargestellt. Zur Erzeugung und Speicherung der Ionen wurde die FLASH-EBIT verwendet. Mit ihr ist es möglich, hochgeladene Ionen mit ausreichender Targetdichte herzustellen. Der Elektronenstrahl der EBIT stellt hier gleichzeitig auch die Projektile für die Rekombination. Für die Photoionisation sind Photonenenergien von einigen hundert eV nötig, welche von der Synchrotronstahlungsquelle BESSY II erzeugt wurden. Um die Ladungsverteilung der Ionen zu bestimmen, wurden diese aus der EBIT extrahiert, mit einem Wienfilter nach Ladungszuständen separiert und anschließend detektiert. Zudem wurden mit einem fensterlosen Germaniumdetektor die von der Ionenwolke ausgesandten oder gestreuten Röntgenphotonen ab einer Energie von etwa 350 eV gemessen. Um eine bessere Statistik zu erreichen, finden Erzeugung, Wechselwirkung und Detektion der Ionen nicht sequentiell nacheinander statt, sondern es laufen alle Prozesse kontinuierlich und gleichzeitig ab. Dies ist möglich, da die EBIT eine ausreichende Ionenproduktionsrate hat und die Prozesse schnell genug ablaufen, sodass sich ein Gleichgewicht einstellt.

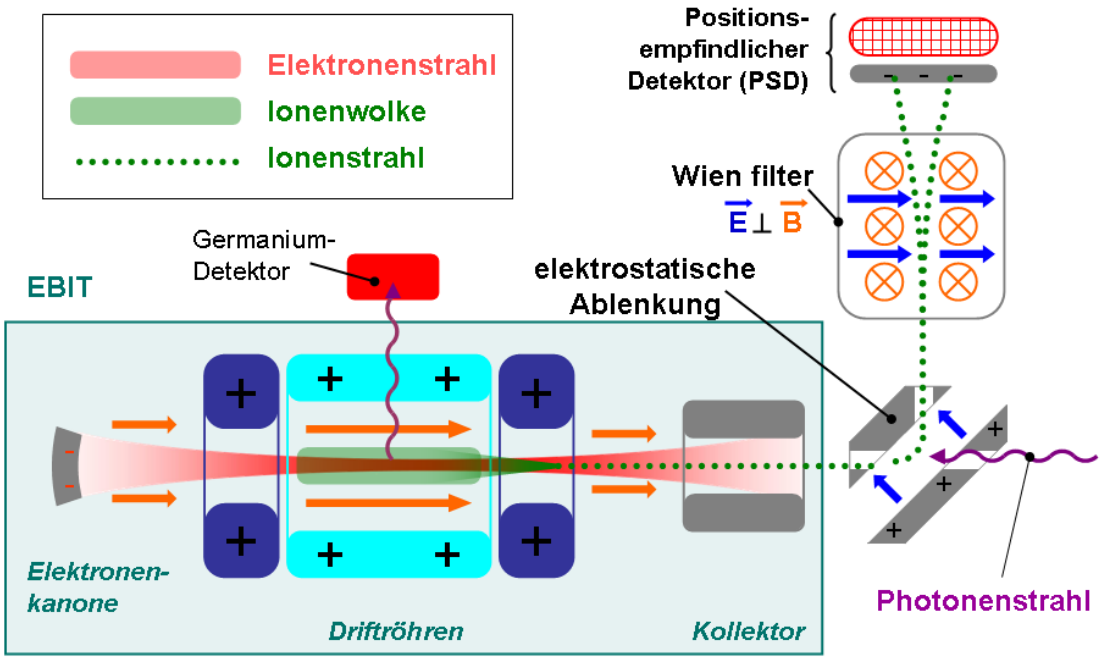

Abbildung 3.1: Grundprinzip der Experimente: In einer EBIT werden hochgeladene Ionen produziert und mit Elektronen oder Photonen in Reaktion gebracht. Um die resultierende Ladungsänderung der Ionen zu messen, werden diese aus der EBIT extrahiert und mit einem Wienfilter nach Ladungszuständen getrennt und anschließend detektiert.

3.1 Funktionsprinzip einer EBIT

In einer Elektronenstrahlionenfalle werden Atome durch Elektronenstöße ionisiert. Hierzu wird von einer Elektronenkanone ein Elektronenstrahl erzeugt, welcher die Fallenregion durchquert und anschließend von einem Kollektor aufgefangen wird. Um möglichst hohe Stromdichten zu erreichen, wird die Fallenregion von einem Magnetspulenpaar in Helmholtzkonfiguration umschlossen, welches ein starkes homogenes Magnetfeld parallel zum Elektronenstrahl erzeugt. Da sich die Elektronenkanone ausserhalb des Spulenpaares befindet, ist das Magnetfeld am Entstehungsort der Elektronen kleiner als in der Falle. Die Trajektorien der Elektronen sind an die magnetischen Feldlinien gebunden, so dass sich der Elektronenstrahl durch das Magnetfeld stark komprimieren lässt. Durch die hohe negative Ladungsdichte des Elektronenstrahls werden die entstehenden positiven Ionen in radialer Richtung gefangen. Um die Ionen auch in axialer Richtung einzufangen, besteht die Fallenregion aus mindestens drei zylindrischen, entlang der Strahlachse angeordneten Elektroden, den Driftröhren. Legt man an die beiden äusseren Driftröhren ein ausreichend hohes positives Potential an, so können die Ionen die Fallenregion nicht mehr verlassen. Die Ionen werden nun durch weitere Stöße mit dem Elektronenstrahl so lange höher ionisiert, bis die Energie des Elektronenstrahls geringer als die Bindungsenergie des am schwächsten gebundenen Elektrons ist. Da sich der Ladungszustand der Ionen durch Rekombination und Ladungsaustausch mit neutralen Atomen auch wieder verringern kann, befindet sich in der Falle ein Gemisch aus verschiedenen Ladungszuständen. Um die Streuung des Elektronenstrahls mit Restgasatomen und die Rekombination der Ionen mit selbigen zu minimieren, befindet sich die gesamte Vorrichtung in einer Ultrahochvakuumkammer.

3.1.1 Eigenschaften des Elektronenstrahls

Die Kompression des Elektronenstrahls durch das Magnetfeld lässt sich anschaulich durch die Gyrationsbewegung der Elektronen beschreiben. Hat ein Elektron eine Geschwindigkeitskomponente in der Ebene senkrecht zum Magnetfeld, so beschreibt es in dieser eine Kreisbahn mit Radius r_g. Der von dieser Kreisbahn eingeschlossene magnetische Fluss

$$\Phi = \pi r_g^2 B \tag{3.1}$$

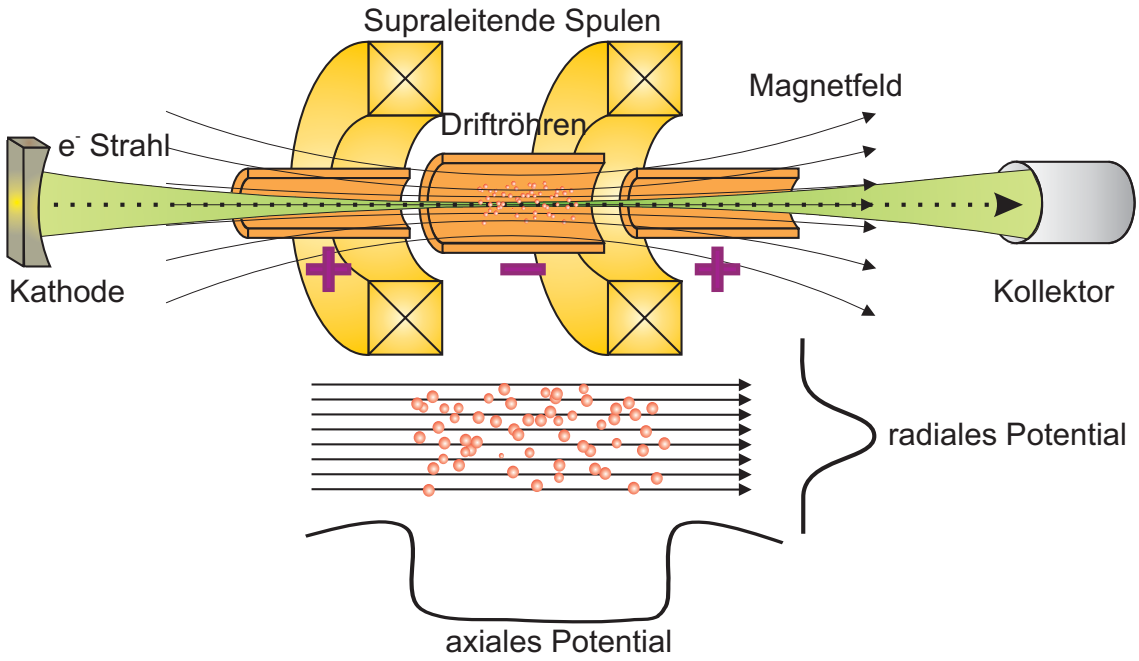

Abbildung 3.2: Prinzip einer EBIT: Die durch Elektronenstoß ionisierten Atome werden radial durch die Raumladung des Elektronenstrahls und axial durch das von den Driftröhren erzeugte Potential gefangen. [43]

bleibt erhalten, so dass sich die Kompression direkt aus dem Verhälnis der Magnetfelder an der Kathode ergibt

$$\left(\frac{r_{g,K}}{r_g}\right)^2 = \frac{B}{B_K}\,. \tag{3.2}$$

Hierbei ist B_K das Magnetfeld am Ort der Kathode und B das in der Falle.

Eine ausführlichere Beschreibung ist die *optische Theorie* von Hermann [44], welche neben dem Magnetfeld noch die Temperatur T_K und den Radius r_K der Kathode berücksichtigt. Mit ihr erhält man einen zeitlich gemittelten Radius des Elektronenstrahls, genannt Hermann-Radius,

$$r_H = \sqrt{\frac{m_e I}{\pi\epsilon_0 v_e B^2} + \sqrt{\left(\frac{m_e I}{\pi\epsilon_0 v_e B^2}\right)^2 + \frac{8kT_K m_e}{e^2 B^2} r_K^2 + \frac{B_K^2}{B^2} r_K^4}} \tag{3.3}$$

innerhalb dessen sich nach [45] 80% aller Elektronen befinden.

Raumladung des Elektronenstrahls

Aufgrund der hohen Ladungsdichte des Elektronenstrahls hat dieser einen nicht vernachlässigbaren Einfluss auf das elektrische Potential innerhalb der Driftröhren. Betrachtet man den Elektronenstrahl als unendlich langen Zylinder mit dem Radius r_H und nimmt eine gleichförmige Verteilung der Elektronen in diesem an, so ist die Ladungsdichte ρ innerhalb des Strahls konstant

$$\rho = \frac{I}{\pi r_H^2 v} \tag{3.4}$$

und ausserhalb null. Hierbei ist I der Strahlstrom und v die Geschwindigkeit der Elektronen. Um das Potential Φ zu erhalten, muss die Poissongleichung

$$\Delta\Phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \tag{3.5}$$

gelöst werden. Aufgrund der Zylindersymmetrie des Elektronenstrahls hängt das Potential nur vom Radius ab. Mit der durch das Potential Φ_D der Driftröhre mit Radius r_D vorgegebenen Randbedingung $\Phi_e(r_D) = \Phi_D$ erhält man die Lösung

$$\Phi = \Phi_D + \Phi_e \tag{3.6}$$

$$\Phi_e(r) = \begin{cases} \Phi_0 \left(\left(\frac{r}{r_H}\right)^2 + 2\ln\left(\frac{r_h}{r_D}\right) - 1 \right) & r \leq r_H \\ \Phi_0 \cdot 2\ln\left(\frac{r}{r_D}\right) & r > r_H \end{cases} , \tag{3.7}$$

wobei Φ_e das durch die Raumladung des Elektronenstrahls verursachte Potential ist. Das charakteristische Potential Φ_0 hängt dabei von der Ladungsdichte des Elektronenstrahls ab und lässt sich unter Verwendung von (3.4) schreiben als

$$\Phi_0 = \frac{I}{4\pi\epsilon_0 v} = \frac{I}{4\pi\epsilon_0}\sqrt{\frac{m}{2E}} , \tag{3.8}$$

wobei im letzten Schritt die Geschwindigkeit der Elektronen durch ihre Energie ausgedrückt wurde. Da für die Extraktion der Ionen ein konstantes Potential notwendig ist, muss bei einer Änderung der Elektronenstrahlenergie der Elektronenstrom entsprechend angepasst werden (mehr dazu in Abschnitt 5.3.1).

Energie des Elektronenstrahls

Damit der Elektronenstrahl den Kollektor erreicht, muss das Potential am Ort der Entstehung der Elektronen geringer sein als im weiteren Verlauf des Strahls. Deshalb wird die Kathode auf ein negatives Potential U_{cath} gelegt. Bei einem positiven Potential U_D an einer Driftröhre ergibt sich somit für die Energie des Elektronenstrahls

$$E_e = e\left(-U_{cath} + U_D + \Phi_e\right) . \tag{3.9}$$

3.2 Die FLASH-EBIT

Die FLASH-EBIT wurde am Max-Planck-Institut für Kernphysik entwickelt und 2005 in Betrieb genommen. Sie wurde speziell für den Einsatz an modernen externen Strahlungsquellen (wie freien Elektronenlasern und Synchrotrons) konzipiert. Sie lässt sich in einem Standardcontainer transportieren und ist am Zielort innerhalb weniger Tage einsatzbereit. Dennoch gehört sie mit Elektronenstrahlenergien von bis zu 80 keV und Elektronenstrahlströmen bis 500 mA sowie einem Magnetfeld bis zu 6 T zu den derzeit leistungsstärksten Elektronenstrahlionenfallen. Der Name leitet sich vom *Freie Elektronen Laser in Hamburg* (FLASH) ab, an dem die erste Messkampagne durchgeführt wurde [46].
Im Folgenden werden die wichtigsten Bauteile kurz beschrieben, für eine ausführliche Beschreibung sei auf [6] verwiesen[1].

3.2.1 Elektronenkanone

Der Aufbau der Elektronenkanone ist in Abbildung 3.3 dargestellt. Zentrales Element ist die Kathode. Sie ist sphärisch-konkav geformt („Pierce-Geometrie“) und besteht aus einer porösen Wolframmatrix, die mit Bariumoxid dotiert ist. Dieses hat eine Austrittsarbeit von nur 1,2 eV, so dass durch Aufheizen der Kathode auf Temperaturen von $T_K = 1300 - 1500$ K Elektronen emmitiert werden. An die Kathode kann ein negatives Potential von bis zu 2000 V gegen Erde angelegt werden, wodurch die Elektronen von der Fokus-Elektrode, welche auf ein höheres Potential gelegt wird, abgesaugt werden und den Elektronenstrahl bilden. Der Strahlstrom

[1] Die FLASH-EBIT hieß zunächst noch Tesla-EBIT, da auch das Projekt in Hamburg zunächst unter dem Namen *Tesla Test Facility* lief.

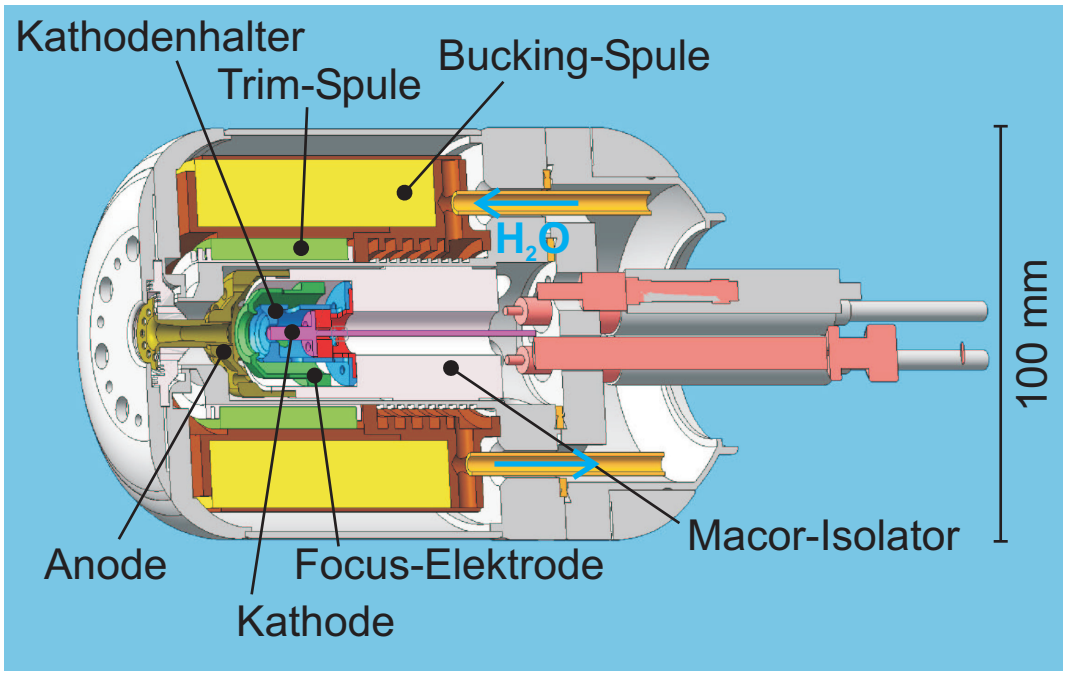

Abbildung 3.3: Schnitt durch die Elektronenkanone der FLASH-EBIT. (Bild aus [6])

lässt sich dabei über das Potential der Fokus-Elektrode steuern. Je größer die Differenz zum Kathodenpotential ist, desto mehr Elektronen werden abgesaugt. Es können so Ströme bis zu 500 mA erreicht werden. Die Anode dient dem Anschluss der Elektronen an Felder ausserhalb der Kanone. Da für einen kleinen Strahlradius, wie in Abschnitt 3.1.1 beschrieben, das Magnetfeld an der Kathode möglichst klein sein muss, ist es nötig die Kathode gegen das von den supraleitenden Spulen der Falle erzeugte Magnetfeld abzuschirmen. Zu diesem Zweck sind Kathode und Fokus-Elektrode von Trim- und Bucking-Spule umschlossen, welche so gepolt sind, dass das von ihnen erzeugte Magnetfeld dem der Falle entgegengesetzt ist. Um die von den Spulen und der Heizung der Kathode erzeugte Wärme abzuführen, wird eine Wasserkühlung verwendet.

3.2.2 Falle und Magnet

Die Falle selbst besteht aus 9 radialsymmetrischen Elektroden, den Driftröhren (siehe Abbildung 3.4). Sie können einzeln auf Potentiale von bis zu 2 kV gelegt werden, um einen für das Experiment geeigneten axialen Verlauf des Potentials zu erzeugen. Zudem können die Driftröhren zusammen auf bis zu 20 kV gegen Erde

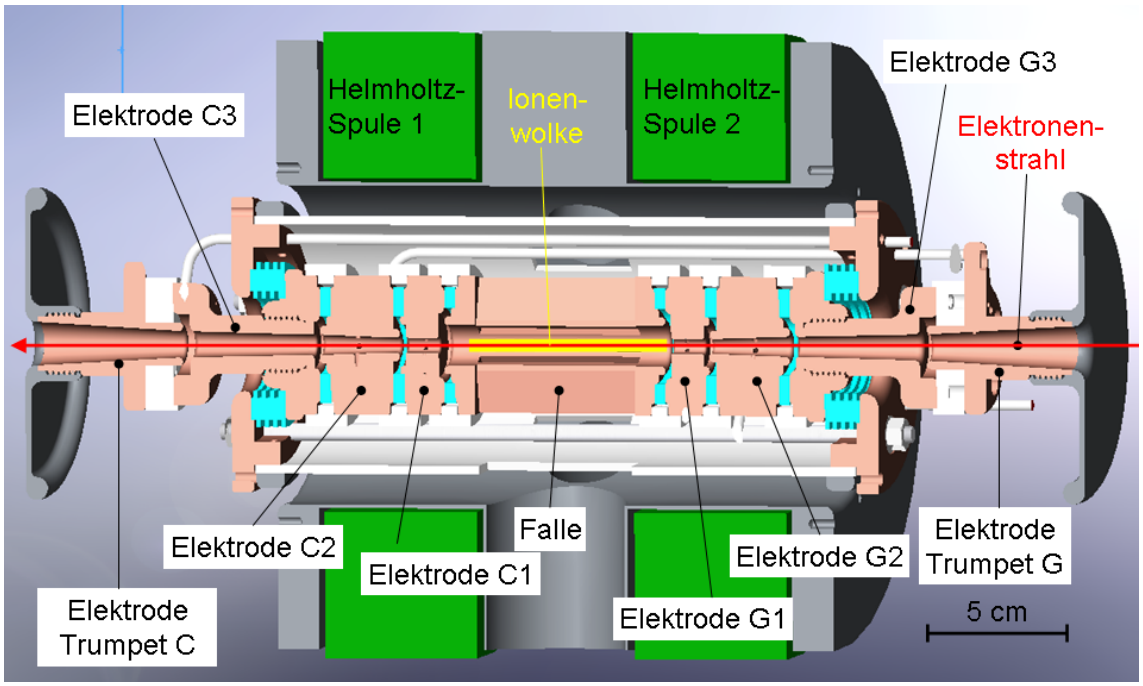

Abbildung 3.4: Axiale Schnittansicht der Fallenelektroden und des supraleitenden Magneten. Bei der Kennzeichnung der Elektroden wird zwischen Kanonen- (G) und Kollektorseite (C) der Falle unterschieden.

hochgelegt werden, um so einerseits die Energie des Elektronenstrahls zu erhöhen und andererseits die Extraktion von Ionen zu ermöglichen, da diese so beim Verlassen der Fallenregion kinetische Energie gewinnen. Die eigentliche Fallenelektrode ist die mittlere Driftröhre. Sie hat eine Länge von 50 mm und einen Durchmesser von 14 mm. Da die anderen Elektroden einen kleineren Durchmesser haben, ergibt sich – auch ohne Potentialdifferenz zwischen den Driftröhren – durch die Raumladung des Elektronenstrahls ein axiales Fallenpotential in dieser Driftröhre. Um Untersuchungen an den gespeicherten Ionen durchzuführen, hat die Fallenelektrode mehrere radiale Sichtschlitze. Durch diese Zugänge können nun verschiedene Detektoren und Spektrometer die von der Ionenwolke ausgesandte Strahlung beobachten. Zudem werden diese Zugänge zur Injektion der neutralen Atome verwendet. Durch einen dieser Schlitze lässt sich ein Cr:YAG-Kristall (Yttrium-Aluminium-Granat) mit einem Durchmesser von 10 mm in die Falle einführen. Dieser Kristall floureszíert, wenn er von Elektronen-oder Photonenstrahl getroffen wird, wodurch sich deren Positionen in der Falle feststellen lassen (siehe auch Abschnitt 3.3.1).

Um die Fallenelektroden herum befinden sich die Helmholtzspulen zur Erzeugung

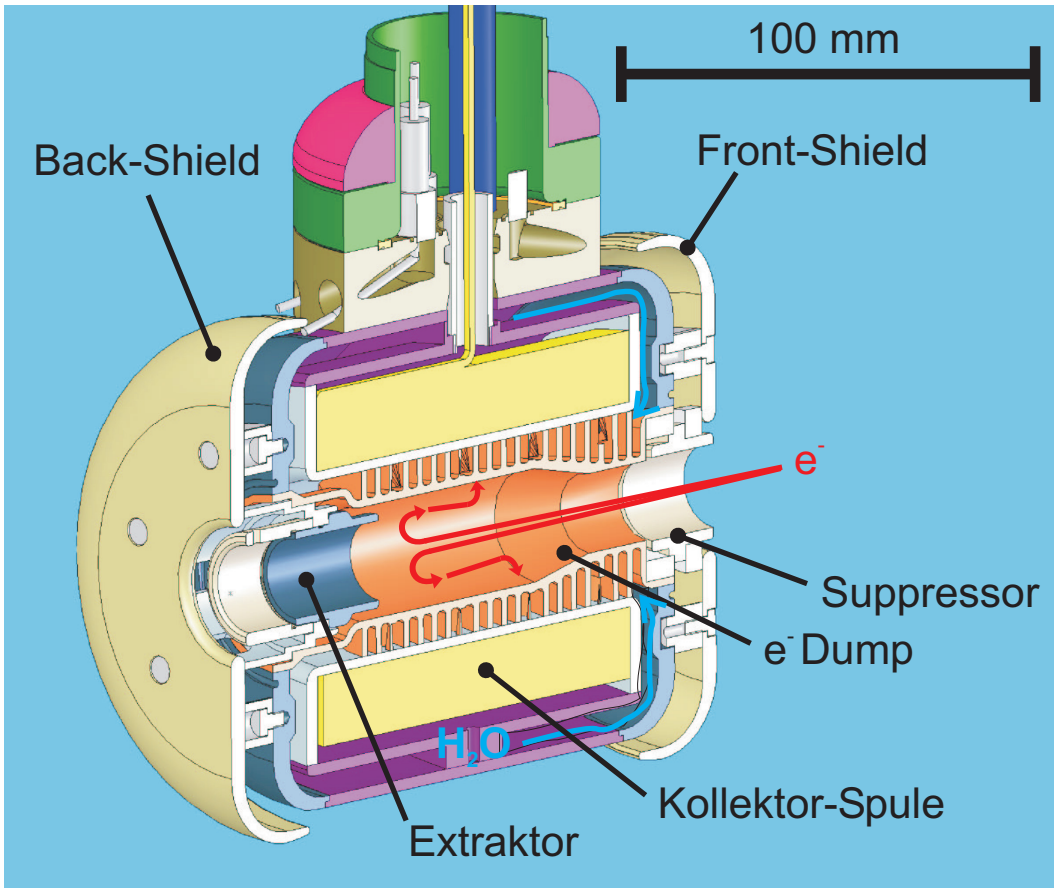

Abbildung 3.5: Schnitt durch den Kollektor der FLASH-EBIT. (Bild aus [6])

des Magnetfelds, welches den Elektronenstrahl komprimiert. Hierbei handelt es sich um Spulen aus dem Supraleiter Nb_3Sn, welcher eine Sprungtemperatur von 17 K hat. Mit diesen Spulen lässt sich ein Magnetfeld von 6 T im Fallenzentrum erreichen. Der Magnet wird mittels eines auf Kompressortechnologie basierenden Kältekopfs gekühlt. Die Driftröhren sind ebenfalls thermisch mit den Kältekopf verbunden, so dass die gesamte Fallenregion auf ungefähr 6 K gekühlt wird, wodurch der Partialdruck des Restgases abnimmt.

3.2.3 Kollektor

Mit dem Kollektor (Abb. 3.5) wird der Elektronenstrahl nach dem Durchqueren der Fallenregion eingefangen. Dazu liegt er auf einem Potential, welches etwa 2 kV positiver als das der Kathode ist (in der Regel auf Erdpotential). Dadurch wird sichergestellt, dass die Elektronen nur mit geringer Energie auf den Kollektor treffen,

wodurch sich der Wärmeeintrag der Elektronen reduziert. Um Ionen aus der Falle extrahieren oder mit einem Photonenstrahl in die Falle schießen zu können, besitzt die Kollektorelektrode eine zylindrische Form. Hierdurch wird auch die Fläche der absorbierenden Elektrode größer als bei einer simplen Platte. Durch die Kollektorspule wird das Restmagnetfeld des Fallenmagneten kompensiert, wodurch sich der Elektronenstrahl aufweitet und somit nicht konzentriert auf eine Stelle des Kollektors trifft. Der Extraktor liegt auf einem tieferen Potential als die Kathode, wodurch sicher gestellt ist, dass die Elektronen nicht den Kollektor durchqueren können. Um die beim Aufprall der Elektronen entstehende Wärme abzuführen, wird auch hier eine Wasserkühlung verwendet. Die weiteren Elektroden Front-Shield, Back-Shield und Supressor dienen zur Strahlführung von Elektronen- oder Ionenstrahl.

3.2.4 Injektionssystem

Die zu ionisierenden Atome müssen als Gas in die EBIT eingeführt werden. Aufgrund des niedrigen Drucks in der EBIT geschieht dies über ein fünffach differentielles Pumpsystem, mit zwei separat gepumpten Vorstufen. Da das in den hier dargestellten Messungen verwendete Eisen in reiner Form erst bei sehr hohen Temperaturen einen nennenswerten Dampfdruck erreicht, wurde stattdessen Eisenpentacarbonyl ($Fe(CO)_5$) verwendet. Dieses hat einen Dampfdruck von etwa 50 mbar bei 300 K und lässt sich somit in die EBIT injizieren. Die Moleküle werden durch Stöße mit dem Elektronenstrahl aufgebrochen, so dass Eisen-, Sauerstoff- und Kohlenstoffionen in der EBIT erzeugt werden.

3.2.5 Germaniumdetektor

Zur Detektion der von der Ionenwolke ausgesandten Röntgenstrahlung wird ein IGLET-Detektor (engl. *intrinsic germanium low energy type*) verwendet. Der Detektor besteht aus einem Germaniumkristall, welcher eine Bandlücke von nur 2,96 eV hat. Trifft ein Photon auf diesen, so werden Photoelektronen erzeugt, die ihre Energie auf Elektron-Loch-Paare übertragen, wobei deren Anzahl proportional zur Energie des Photons ist. Die Elektronen werden von einer an den Kristall angelegten Spannung abgesaugt, wodurch ein messbares elektrisches Signal entsteht.
Der fensterlose Detekor befindet sich in einem Abstand von ca. 15 cm vom Fallenzentrum. Zur Unterdrückung von Streulicht der glühenden Kathode, auf das der Detektor auch zum Teil empfindlich ist, sowie zur thermischen Abschirmung der

Falle befindet sich zwischen Detektor und Falle eine dünne Kunststofffolie. Da diese für Röntgenstrahlung nahzu transparent ist, können Photonen mit Energien ab 350 eV detektiert werden.

3.3 Extraktion der Ionen

Legt man an die Driftröhren auf der Kollektorseite der Falle ein geringeres Potential an als auf der Kanonenseite, werden die Ionen, sofern sie genug thermische Energie haben, die Falle bevorzugt in Richtung Kollektor verlassen. Aufgrund des positiven Potentials der Driftröhren gegenüber dem Kollektor werden die positiven Ionen dabei beschleunigt. Im Gegensatz zu den Elektronen können die Ionen den Kollektor durchqueren und somit aus der EBIT extrahiert werden. Da der Photonenstrahl ebenfalls durch den Kollektor in die EBIT geführt wird, ist es notwendig die Ionen aus diesem herauszulenken. Dazu wird ein elektrostatischer Ablenker benutzt, der die Ionen energieselektiv um 90° ablenkt. Die Ionen werden durch einen Wienfilter geführt, welcher sie nach ihrem Ladungs-zu-Masse-Verhältnis trennt und anschließend auf einem positionsempfindlichen Detektor nachgewiesen. In Abbildung 3.6 ist der Aufbau mit weiteren zur Strahlführung benutzten Komponenten dargestellt, die in den folgenden Unterabschnitten beschrieben werden. Da an dem Wienfilter im Rahmen dieser Arbeit umfangreiche Änderungen durchgeführt wurden, wird er getrennt in Kapitel 4 beschrieben.

3.3.1 Elektrostatischer Ablenker

Der elektrostatische Ablenker (engl. *bender*, siehe Abbildung 3.7) wurde speziell für Photoionisationsmessungen konstruiert [47]. Besonderer Wert wurde dabei auf eine möglichst kompakte Bauweise gelegt, da der Fokuspunkt des vom Synchrotron produzierten Photonenstrahls einen festen Abstand vom Ende der Beamline hat und hierdurch der zur Verfügungs stehende Platz begrenzt wird. Er besteht aus zwei konzentrischen zylinderförmigen Elektroden, deren Achse um 45° gegenüber dem Ionenstrahl gedreht ist. Durch Löcher mit 8 mm Durchmesser im inneren Zylinder gelangen die Ionen zwischen die Elektroden und werden dort durch das elektrische Feld zwischen den Zylindern reflektiert (Einfallswinkel = Ausfallswinkel), so dass sich eine Gesamtablenkung von 90° ergibt. Durch ein weiteres Loch im Aussenzylinder lässt sich der Photonenstrahl durch den Ablenker führen. Aufgrund dieser

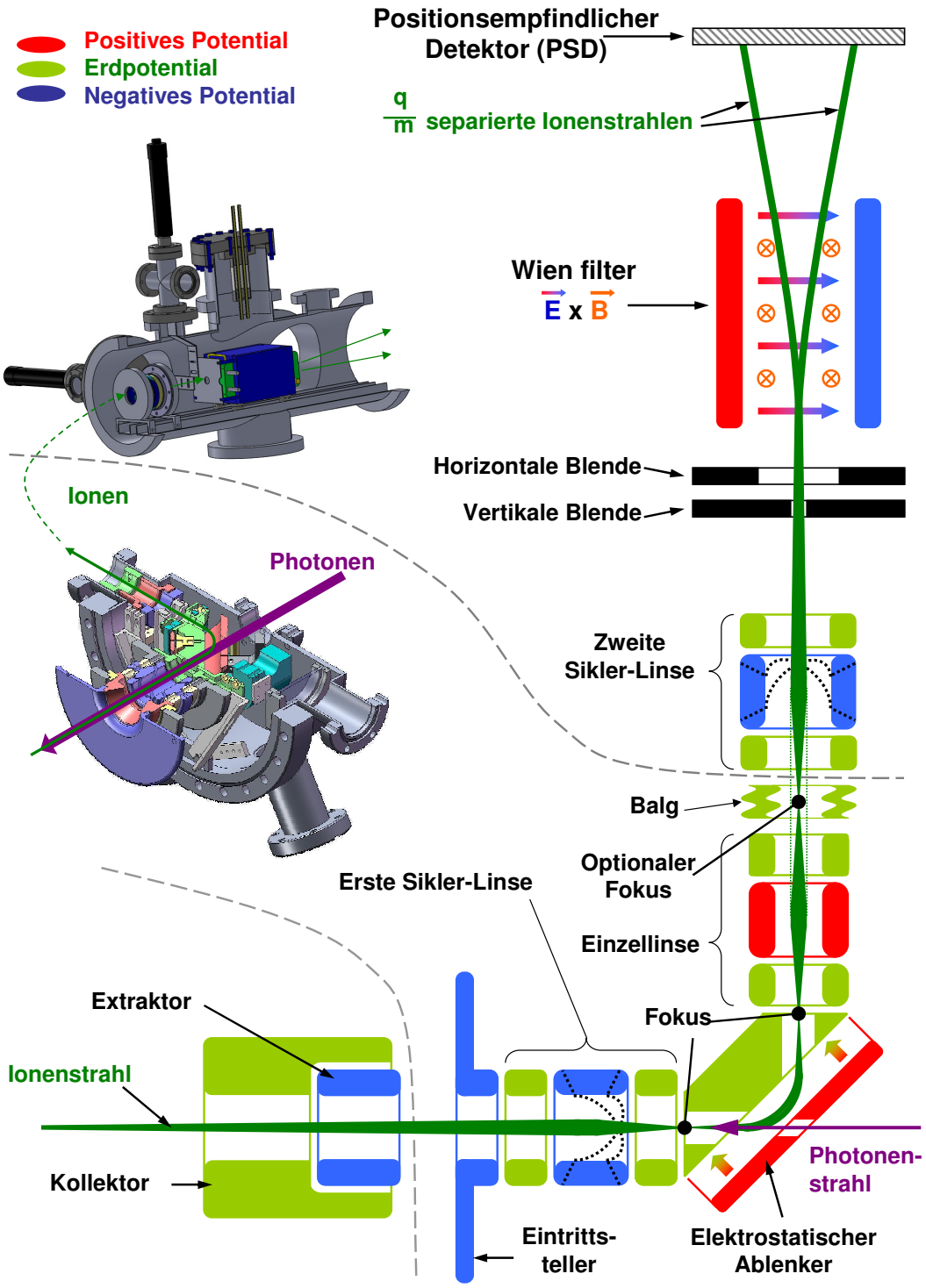

Abbildung 3.6: Schematische Darstellung der zur Extraktion verwendeten Instrumente.

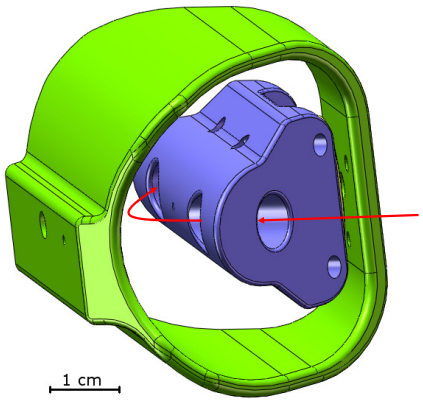

Abbildung 3.7: Die Elektroden des elektrostatischen Ablenkers, der innere Zylinder ist blau, der äußere grün dargestellt. Der Strahlverlauf der Ionen ist rot eingezeichnet.

Geometrie fokussiert der Ablenker doppelt, Ionen aus dem Eingangsfokus werden nach der Ablenkung wieder horizontal und vertikal fokussiert. Die Fokuspunkte befinden sich dabei vor der Eintritts- und hinter der Austrittsöffnung. Die benötigte Spannung U_{bend} zwischen den Zylindern hängt von der kinetischen Energie der Ionen ab, welche wiederum durch die Extraktionsspannung U_{extr} bestimmt ist. Aus Simulationen ergibt sich in Übereinstimmung mit experimentellen Befunden

$$U_{bend} = U_{extr} \cdot 0,6821\,. \tag{3.10}$$

Durch diese energieselektive Eigenschaft des Ablenkers lässt sich sicherstellen, dass nur Ionen aus der Falle den Bender passieren können, da von anderen Orten kommende Ionen ein anderes Extraktionspotential haben. Da für die Ablenkung nur die Potentialdifferenz zwischen den Elektroden von Bedeutung ist, wird der Innenzylinder in der Regel geerdet und die Spannung durch ein positives Potential am Außenzylinders geregelt.

Der Ablenker ist an einem gemeinsamen Rahmen unterhalb eines Spiegels montiert. Durch einen Linearmanipulator lässt sich dieser Spiegel in den Strahlengang bewegen. Der Spiegel ist dabei um 45° gegen die Strahlachse gedreht, so dass durch ein seitlich an der Vakuumkammer des Ablenkers angebrachtes Fenster über diesen Spiegel axial in die Falle geblickt werden kann. Mit einer vor diesem Fenster montierten Kamera lässt sich somit die Fluoreszens von Elektronen- und Photonenstrahl auf dem in die Falle eingefahrenen YAG-Kristall aufnehmen, wodurch festgestellt

werden kann, ob sich beide Strahlen überlappen. Dies ist für die Photoionisation von entscheidender Bedeutung, da der Elektronenstrahl auch die Position der Ionen angibt.

3.3.2 Elektrostatische Linsen

Zur Strahlführung wurden drei elektrostatische Linsen verwendet. Die erste befindet sich vor dem Ablenker und fokussiert den Ionenstrahl auf den Eintrittsfokuspunkt des Ablenkers. Da der Ablenker beweglich montiert ist, wird hierfür eine Sikler-Linse verwendet, welche den Ionenstrahl auch senkrecht zur Flugrichtung positionieren kann. Die zweite Linse, eine Einzellinse, befindet sich hinter dem Ablenker. Sie bündelt den vom Austrittsfokus kommenden Ionenstrahl durch den Balg in die Wienfilter-Kammer. Hier folgt eine zweite Sikler-Linse, mit deren Ablenk-und Fokuseigenschaften der Strahl mögichst parallel und mittig in den Wienfilter geführt wird.

Einzellinse

Eine Einzellinse besteht aus drei hintereinander angeordneten hohlzylinderförmigen Elektroden. Die äußeren Elektroden sind dabei meist geerdet, während an die mittlere Elektrode ein Potential U_{fok} angelegt wird. So entsteht zwischen den Elektroden ein wohldefiniertes radialsymmetrisches elektrisches Feld. Abhängig von der Polarität der angelegten Spannung werden die Ionen beim ersten Übergang zwischen den Elektroden fokussiert und beim zweiten defokussiert oder umgekehrt. Insgesamt ergibt sich jedoch immer eine Fokussierung. Die Brennweite der Linse lässt sich durch die angelegte Spannung steuern.

Sikler-Linse

Die Sikler-Linse (benannt nach ihrem Erfinder G. Sikler) ist eine Weiterentwicklung der Einzellinse. Ihre mittlere Elektrode wird durch zwei Schnitte in vier Segmente geteilt (s. Abb. 3.8). An diese Segmente wird eine Fokusspannung U_{fok} angelegt, wodurch sie wie eine Einzellinse fokussierend wirkt. Legt man zwischen den gegenüberliegenden Segmenten symmetrisch zusätzliche Spannungsdifferenzen U_{ver} und

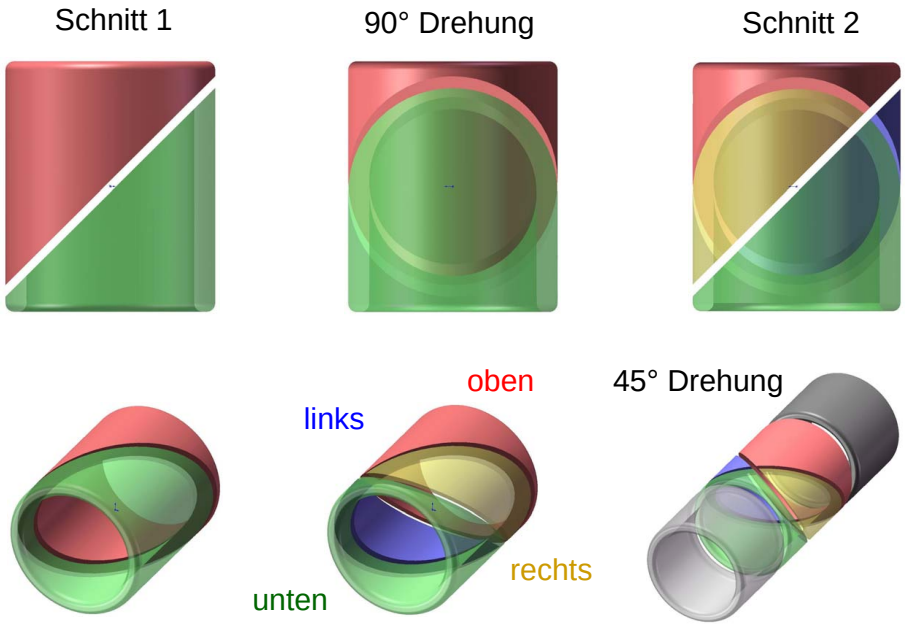

Abbildung 3.8: Konstruktion einer Siklerlinse. Ein Rohr wird mit einen Schnitt in zwei Segmente geteilt, anschließend wird es um 90° gedreht und ein weiterer Schnitt durchgeführt (oben). Dadurch entstehen vier Elektroden (unten mitte), der Einbau mit 45° Verdrehung zu den Schnittlagen (rechts unten) sorgt dafür, dass die einzelnen Elemente wie zwei Ablenk-Plattenpaare angesteuert werden können (oben, unten, links, rechts). (Bild aus [47])

U_{hor} an

$$\begin{aligned} U_{oben} &= U_{fok} + U_{ver} \quad , \quad U_{links} &= U_{fok} + U_{hor} \,, \\ U_{unten} &= U_{fok} - U_{ver} \quad , \quad U_{rechts} &= U_{fok} - U_{hor} \,, \end{aligned} \tag{3.11}$$

so wirken sie zusätzlich wie Ablenkplatten und der Strahl lässt sich somit in den zwei Dimensionen senkrecht zur Bewegung steuern. Durch das Addieren einer weiteren Spannung $U_{ast}/2$ zu U_{oben} und U_{unten} sowie $-U_{ast}/2$ zu U_{links} und U_{rechts} lassen sich astigmatische Fehler der Linsen korrigieren.

3.3.3 Blenden

Vor dem Wienfilter befinden sich zwei senkrecht zueinander stehende Schlitzblenden (siehe Abbildung 3.9). Jede Blende besitzt drei rechteckige Schlitze mit einer Breite von 18 mm und einer Höhe von 6 mm, 3 mm und 1,5 mm. Über Linearmanipulatoren kann zwischen den verschiedenen Schlitzgrößen gewechselt werden. Durch diese

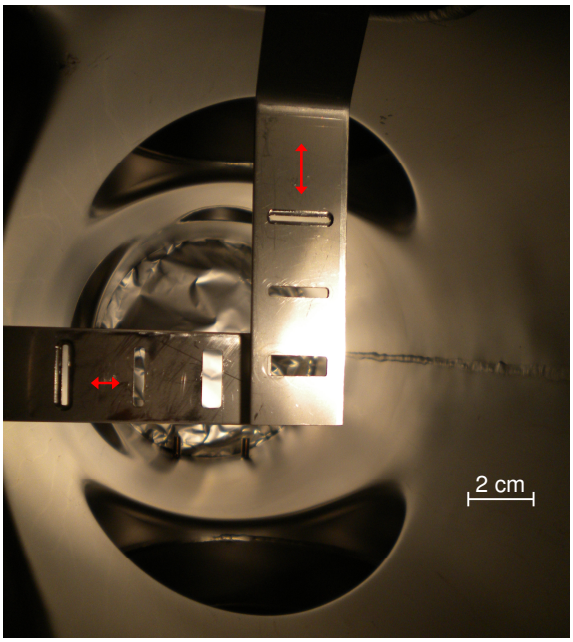

Abbildung 3.9: Foto der Blenden in der Vakuumkammer, der Wienfilter ist noch nicht eingebaut.

Konstruktion erhält man mit nur zwei Manipulatoren eine zweidimensional bewegliche Blende mit drei verschiedenen Größen. Mit dieser Blendenkonstruktion werden Ionen, die sich zu weit von der Strahlachse entfernt haben, abgeschnitten. Hierdurch verringert sich zwar die Zählrate der Ionen, durch die Unterdrückung von schlecht fokussierten Ionen wird jedoch die Auflösung erheblich verbessert.

3.3.4 Positionsempfindlicher Detektor

Um die Aufspaltung des Ionenstrahls durch den Wienfilter messen zu können, wird ein positionsempfindlicher Detektor benötigt, der einzelne Ionen nachweisen können muss. Hierfür wird das Produkt DLD40 der Firma *Roentdek* verwendet. Es handelt sich hierbei um eine Kombination von zwei Mikrokanalplatten (MCP, von engl. *micro channel plate*) und einer positionsempfindlichen „delay-line"-Anode. Bei den MCPs handelt es sich um 1,5 mm dicke Halbleiter-Scheiben mit einem Durchmesser von 40 mm. Sie sind mit feinen Kanälen durchzogen, welche einen Durchmesser von 25 μm haben, und 7° gegen die Oberfläche geneigt sind. Die Neigungswinkel der Kanäle der zweiten MCP sind gegenüber der ersten um etwa 180° gedreht („Chevron-Konfiguration"). Trifft ein geladenes Teilchen auf die Innenseite eines Kanals, so löst es dort Sekundärelektronen aus. Durch das Anlegen einer Spannung zwischen Ober-

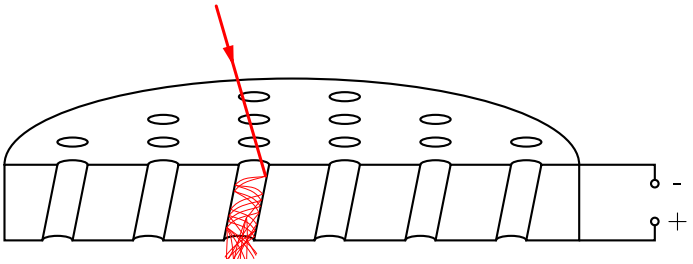

Abbildung 3.10: Funktionsprinzp einer MCP. Die Platte ist von kleinen Kanälen durchsetzt (nicht maßstabsgetreu dargestellt). Triff ein Ion auf die Innenwand eines Kanals, so löst es eine Kaskade an Sekundärelektronen aus. Durch die angelegte Spannung werden die Elektronen zur Unterseite der Platte beschleunigt. (Bild aus [19])

und Unterseite der Scheiben werden die Elektronen in diesem Kanal beschleunigt. Dabei treffen sie wiederrum auf dessen Wände, so dass die Kanäle wie Elektronenvervielfacher wirken, an deren Ende eine Elektronenlawine austritt (siehe Abb. 3.10). Dadurch kommt es zu einer Verstärkung des Signals um bis zu 10^7. Die typischerweise angelegte Spannung beträgt 2400 V, sie kann zur Unterdrückung von Signalen von niederenergetischen Teilchen abgesenkt werden. Die aus den MPCs austretenden Elektronen treffen auf die „delay-line“-Anode, welche auf einem positiven Potential liegt. Diese besteht aus zwei senkrecht zueinander verlaufenden flachen Drahtwindungen. Treffen die Elektronen auf die Signaldrähte, so lösen sie an diesem Punkt einen Spannungspuls aus, der sich durch die Drähte ausbreitet. Parallel zu den Signaldrähten verlaufen Referenzdrähte, die auf niedrigerem Potential liegen und daher ein schwächeres Elektronensignal erhalten. Bildet man die Differenz aus Signal- und Referenzdraht, so lassen sich elektromagnetische Störsignale unterdrücken. Aus der Differenz der Ankunftszeit der Pulse an den beiden Enden eines Drahtes lässt sich der Enstehungsort des Pulses bestimmen. Da die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Pulse in den Drähten nahe an der Lichtgeschwindigkeit liegt, wird hierfür die effektive Ausbreitungsgeschwindigkeit quer zu den Windungen genutzt, welche bei diesem Modell 0,73 ns/mm beträgt. Dadurch lässt sich mit einem Draht die Position quer zu seinen Wicklungen bestimmen, durch die Verwendung von zwei senkrecht zueinander gewickelten Drähten enthält man beide Koordinaten. Durch diese Anordnung wird eine Ortsauflösung von unter 100 μm bei Zählraten bis zu 1 MHz erreicht. Die Höhe der Pulse hängt von der Energie der auftreffenden Teilchen ab, sie kann genutzt werden, um hochgeladene (und damit energiereiche)

Ionen vom Untergrund zu unterscheiden (siehe auch Abschnitt 5.3.1).

3.4 Datenaufnahme

Zur Datenaufnahme wurde ein System mit der Bezeichnung *MPA-3* der Firma *FAST ComTec* verwendet. Dieses ermöglicht die Digitalisierung von bis zu 16 Parametern mit Signalraten von bis zu 6 MHz und frei definierbaren Koinzidenzbedingungen. Das Hauptmodul dieses Systems mit über einer PCI-Karte in einem PC verbunden und verfügt über vier Eingänge für Analog-Digital-Wandler (engl. *analog to digital converter*, kurz ADC), wobei deren Anzahl durch die Verwendung eines Erweiterungsmoduls auf acht erhöht wurde. Als ADCs wurden vier *7072T Dual Timing*-Module der gleichen Firma verwendet. Jedes Modul enthält dabei zwei ADCs, die in verschiedenen Modi betrieben werden können:

SVA (engl. *sampling voltage analyser*) Die am Eingang anliegende Spannung (0 – 10 V) wird digitalisiert, sobald am „Gate“-Eingang ein Puls eintrifft.

TDC (engl. *time to digital converter*) Die Zeit zwischen zwei NIM-Pulsen (Start- und Stoppsignal) wird gemessen und digitalisiet.

PHA (engl. *puls height analysis*) Trifft am Eingang ein Spannungspuls ein, so wird dessen Höhe gemessen (0,025 – 10 V) und digitalisiert. Gleichzeitig wird ein TTL-Signalpuls erzeugt, welcher verwendet werden kann, um eine SVA-Messung auszulösen.

Zwei ADCs wurden im TDC-Modus betrieben, um die Differenz zwischen den Ankunftszeiten der Pulse des positionsempfindlichen Detektors zu messen. Die Pulse wurden dabei zuvor durch einen *Orctec GG8010 Gate and Delay Generator* geführt, wodurch sichergestellt wurde, dass der Stopp-Puls nach dem Start-Puls ankommt. Zudem konnte der hierbei erzeugte TTL-Puls genutzt werden, um das Digitalisieren von Steuerspannungen auszulösen. Somit ließ sich durch koinzidentes Messen der beiden ADCs ein zweidimensionales Abbild der auf den Detektor auftreffenden Ionen erzeugen. Des weiteren wurde ein ADC im PHA-Modus betrieben, um die Höhe der vom Germanium-Detektor kommenden Pulse zu messen. Die restlichen ADCs wurden im SVA-Modus betrieben um diverse für die Auswertung benötigte Steuerspannungen einzulesen (s. Abb. 3.11).

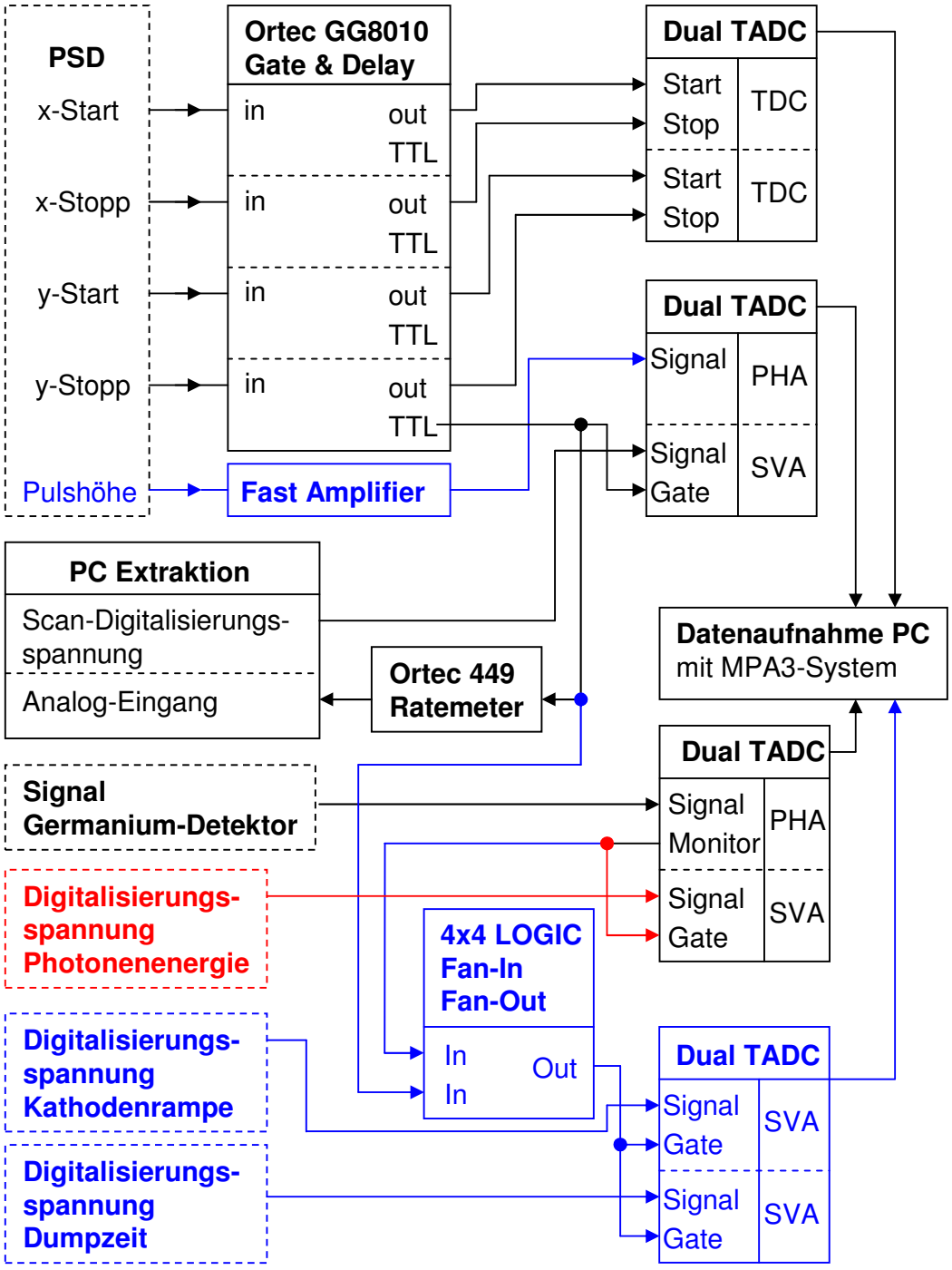

Abbildung 3.11: Schematische Darstellung der Datenaufnahme. Die rot dargestellten Komponenten wurden nur bei der Photoionisationsmessung, die blau dargestellten nur bei der Rekombinationsmessung verwendet. Durch die Verwendung des 4x4-LOGIC-Fan-In-Fan-Out werden die Digitalisierungsspannungen von Kathodenrampe und Dumpzeit digitalisiert, sobald ein Ereignis am PSD oder Germaniumdetektor registriert wird.

Mit der zugehörigen Software *MPANT* lassen sich vor Beginn der Messung ein- und zweidimensionale Histogramme der gemessenen Daten definieren, wobei die einzelnen Kanäle durch Bedingungen verknüpft werden können. Diese Histogramme werden dann während der Messung in Echtzeit dargestellt, so dass noch während des Experiments eine vorläufige Datenanalyse möglich ist. Diese Histogramme können nach Ende der Messung abgespeichert werden. Da sie allerdings keine Zeitinformationen mehr enthalten und somit auch keine Änderungen der Bedingungen möglich sind, sind sie für eine weitergehende Datenanalyse nur begrenzt geeignet. Deshalb lässt sich bei einer Messung zusätzlich eine Protokolldatei („Listfile“) anlegen. In ihr werden sämtliche von den ADCs erzeugten Daten zeitaufgelöst abgespeichert, es bleiben somit alle Informationen erhalten. Zur weiteren Analyse können diese Dateien benutzt werden um im „Replay“-Modus der Software das Experiment mit anderen Bedingungen für die Histogramme zu wiederholen. Zudem ist es möglich, diese Dateien mit eigener Software einzulesen.

3.5 Steuerung der Extraktion

Mit Ausnahme des Netzgerätes für den Wienfilter-Magneten lassen sich alle für die Potentialerzeugung verwendeten Netzteile mit einer Steuerspannung einstellen. Diese Steuerspannungen werden von einem Rechner mit einer *National Instruments* Digtital-Analog-Wandler-Karte vom Typ *6703* erzeugt. Die ausgegebenen Spannungen lassen sich über ein *LabView*-Programm einstellen. Dieses Programm bietet zudem die Möglichkeit, bis zu drei Parameter in vorgegebenen Bereichen abzutasten. Dabei werden zusätzlich zu den Steuerspannungen noch Digitalisierungsspannungen für diese Parameter erzeugt, welche den Spannungsbereich der ADCs des Datenaufnahmesystems besser ausnutzen als die Steuerspannungen. Über einen Analog-Eingang der DAQ-Karte kann dabei die von einem Ratemeter gemessene Zählrate des positionsempfindlichen Detektors gemessen werden, womit sich diese Scans zur Optimierung der Extraktion verwenden lassen (siehe auch Abschnitt 5.1.1). Zudem lassen sich durch Scannen des elektrischen Feldes des Wienfilters die extrahierten Ionen identifizieren (siehe Abschnitt 5.1.2).

Kapitel 4

Verbesserung des Wienfilters

Der Wienfilter ist ein Geschwindigkeitsfilter für geladene Teilchen, welcher 1898 von Willi Wien entwickelt wurde [48]. In ihm stehen elektrisches Feld $\vec{E}$ und magnetisches Feld $\vec{B}$ senkrecht zueinander und auch zur Bewegungsrichtung $\vec{v}$ der Teilchen ($\vec{E} \perp \vec{B} \perp \vec{v}$). Für Teilchen mit der Geschwindigkeit

$$v_{Wien} = \frac{E}{B} \tag{4.1}$$

kompensieren sich der elektrische und der magnetische Teil der Lorentzkraft, das Teilchen wird nicht abgelenkt und kann den Wienfilter passieren. Werden die Teilchen vorher durch ein elektrostatisches Feld beschleunigt, so hängt ihre Geschwindigkeit von ihrem Ladungs-zu-Masse-Verhältnis ab,

$$v = \sqrt{2\frac{Uq}{m}} \tag{4.2}$$

wodurch der Wienfilter bei gleicher Masse der Teilchen zur Ladungsseparation benutzt werden kann.
Da die Verbesserung des Wienfilters eine Hauptaufgabe dieser Diplomarbeit darstellte, soll auf dieses Instrument besonders eingegangen werden.

4.1 Theorie

Auf ein Teilchen mit Ladung q und Geschwindigkeit $\vec{v}$ in einem elektrischen Feld $\vec{E}$ sowie einem Magnetfeld $\vec{B}$ wirkt die Lorentz-Kraft

$$\vec{F} = q\left(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}\right) . \tag{4.3}$$

Wählt man $\vec{E} = E\vec{e_x}$ und $\vec{B} = B\vec{e_y}$ so erhält man die Bewegungsgleichungen

$$m\ddot{x} = q\left(E - B\dot{z}\right) \tag{4.4}$$

$$m\ddot{y} = 0 \tag{4.5}$$

$$m\ddot{z} = qB\dot{x} , \tag{4.6}$$

wobei x, y und z die Ortskoordinaten des Teilchens sind. Startet das Teilchen im Ursprung mit der Geschwindigkeit $\vec{v}\left(0\right) = v_0\vec{e_z}$ so lassen sich die Trajektorien explizit berechnen:

$$x\left(t\right) = rG\left[1 - \cos\left(\omega t\right)\right] \tag{4.7}$$

$$\dot{x}\left(t\right) = v_0 G \sin\left(\omega t\right) \tag{4.8}$$

$$z\left(t\right) = -rG\sin\left(\omega t\right) + \frac{E}{B}t \tag{4.9}$$

$$\dot{z}\left(t\right) = v_0 G\cos\left(\omega t\right) + \frac{E}{B} \tag{4.10}$$

$$r = \frac{mv_0}{qB} , \text{ Zyklotronradius} \tag{4.11}$$

$$\omega = \frac{qB}{m} , \text{ Zyklotronfrequenz} \tag{4.12}$$

$$G = \frac{E/B - v_0}{v_0} , \text{ Geschwindigkeitsverhältnis} \tag{4.13}$$

Ist die Länge des Wienfilters l groß gegenüber der transversalen Auslenkung der Teilchen rG, so vereinfacht sich Gleichung 4.9 zu

$$z\left(t\right) \approx \frac{E}{B}t, \tag{4.14}$$

wodurch sich die Zeitabhängigkeit in (4.7) und (4.8) eliminieren lässt.

$$x\left(z\right) = rG\left[1 - \cos\left(\omega\frac{B}{E}z\right)\right] \tag{4.15}$$

$$\dot{x}\left(z\right) = v_0 G \sin\left(\omega\frac{B}{E}z\right) \tag{4.16}$$

Schließt sich an den Wienfilter eine feldfreie Driftstrecke an, so ist die Auslenkung der Teilchen im Wienfilter vernachlässigbar gegenüber der auf der Driftstrecke. Um eine möglichst große Aufspaltung zwischen zwei Ladungszuständen (q_1,q_2) zu erreichen, muss daher die Differenz der Transversalgeschwindigkeit $\Delta\dot{x}$ beim Verlassen des Wienfilters ($z = l$) möglichst hoch sein. Um dies zu erreichen, wird die Wienfilter-Geschwindigkeit als Mittelwert der Teilchengeschwindigkeiten gewählt

$$v_{Wien} := \frac{E}{B} = \frac{v_1 + v_2}{2}, \tag{4.17}$$

so dass $G_1 = -G_2$ gilt. Somit vereinfacht sich $\Delta\dot{x}$ zu

$$\Delta\dot{x} = \dot{x_1} - \dot{x_2} = \frac{v_2 - v_1}{2}\left(\sin\left(\omega_1 z\right) + \sin\left(\omega_2 z\right)\right) \tag{4.18}$$

und es gilt nur noch das optimale Magnetfeld zu bestimmen. Nimmt man nur kleine Ladungsunterschiede ($q_1 \approx q_2$) an, so ergibt sich folgende Näherung:

$$B_{max} \approx \frac{\pi}{2}\frac{m v_{Wien}}{z}\frac{q_1 + q_2}{q_1^2 + q_2^2} \tag{4.19}$$

4.2 Bisheriger Wienfilter

In den bisherigen Messungen zur Photoionisation von M.C. Simon [7–9,47] wurde ein Wienfilter der Firma *Colutron Research Corporation* Typ *Model 600-B* verwendet. Das elektrische Feld wird in diesem Modell von insgesamt 16 Elektroden erzeugt. Je eine Ablenkplatte oben und unten erzeugen das Hauptfeld. Um die Randeffekte zu minimieren und ein möglichst homogenes Feld zu erreichen, befinden sich an beiden Seiten je 7 weitere 0.1 mm dünne Elektroden (engl.: *shims*). Die Shims werden mittels eines Spannungsteilers auf äquidistante Potentiale zwischen denen der beiden Hauptablenkplatten gelegt, wobei je zwei gegenüberliegende Shims das gleiche Potential haben. Zwischen den Shims befinden sich 0,4 mm dicke Kaptonfolien zur

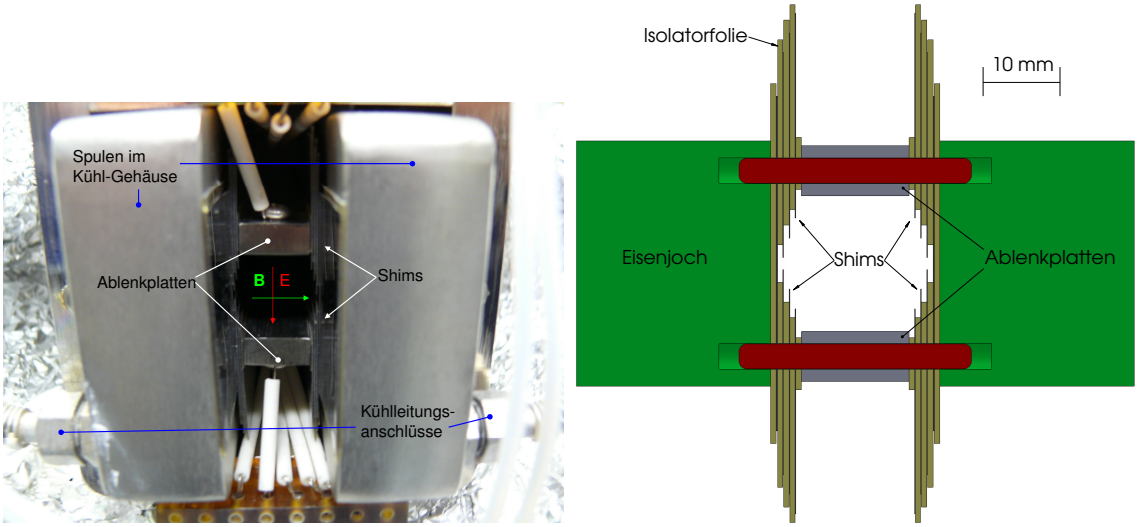

Abbildung 4.1: Links: Der Wienfilter, wie er in vorherigen Experimenten verwendeten wurde. Rechts: Schematischer Querschnitt, dargestellt sind die Eisenjoche der Spulen (grün), die Shims und die Ablenkplatten (grau), die haltenden Stifte (rot), sowie die Isolatorscheiben (gelb), die Spulen und das Gehäuse des Wienfilters fehlen aufgrund der Übersichtlichkeit.

elektrischen Isolierung. Shims und Isolatorfolien sind mit zwischen den Eisenjochs verlaufenden Stiften befestigt (siehe Abbildung 4.1). Weitere Parameter des Wienfilters sind in Tabelle 4.1 angegeben. Das Magnetfeld wird von zwei rechteckigen Spulen erzeugt, die jeweils ein Eisenjoch umschließen und sich seitlich der Shims befinden. Durch die für die Erzeugung des Magnetfeldes benötigten Ströme (mehrere Ampere) wärmen sich die Spulen stark auf, so dass sie gekühlt werden müssen. Dazu sind sie von einem Edelstahl-Gehäuse umschlossen, welches von einem Kühlmittel durchflossen werden kann.

Damit die Ionen nicht an Restgasatomen streuen und somit dem Experiment verloren gehen, befindet sich der gesamte Wienfilter in einer Ultrahochvakuumkammer. Aus dieser werden die Anschlüsse für die Elektroden und Spulen sowie für die Kühlung der Spulen mit Hilfe von Durchführungen nach außen geleitet. Jedoch verursachte die Kühlung der Spulen immer wieder Probleme: Da für die Spulen korrodierbare Materialien verwendet wurden, sieht der Hersteller die Verwendung von Tetrafluorethan (HFC-134a) als Kühlmittel vor. Dieses wird jedoch erst unter Druck flüssig und muss mit bis zu 15 bar durch die Leitungen gepumpt werden. Die Zuleitungen zu den Spulen waren im Vakuum mit dem Spulengehäuse verschraubt. Diese Verschraubung und die zugehörige Dichtung war aufgrund der großen Druckdiffe-

renz jedoch nicht vollkommen dicht. Hierdurch wurde das Vakuum in der Kammer so stark beeinträcht, dass diese Kühlung nicht zum Einsatz kommen konnte. Daher wurde anfänglich auf die Kühlung verzichtet. Durch die Spulen konnte daher nur so wenig Strom fließen, dass sie nicht überhitzten, wodurch der einstellbare Bereich des Magnetfeldes stark eingeschränkt wurde. Auch das elektrische Feld konnte nicht beliebig variiert werden: Aufgrund des geringen Abstands der einzelnen Shims von 0,4 mm und der daraus resultierenden kurzen Kriechstrecken sowie den scharfen Kanten der nur 0,1 mm dünnen Shims war die maximale Spannung zwischen den Ablenkplatten vom Hersteller lediglich mit 300 V angegeben, was einem elektrischen Feld von 16,8 V/mm entspricht. Aufgrund dieser Einschränkungen wurde beschlossen, den Wienfilter für die nächsten Experimente zu überarbeiten.

4.3 Simulation verschiedener Designs

Um die Auswirkungen einer Designänderung auf die ionenoptischen Eigenschaften des Wienfilters abzuschätzen, wurde er zunächst mit Hilfe der Software *SIMION* simuliert. Mit diesem Programm lassen sich die Flugbahnen von geladenen Teilchen bei vorgegebenen Potentialen numerisch berechnen. Dazu gibt man zuerst eine Elektrodengeometrie vor, diese wird von dem Programm auf ein dreidimensionales Gitter abgebildet. Für die nicht zu einer Elektrode gehörenden Gitterpunkte wird nun das Potential bestimmt, indem die Laplace-Gleichung mit den Potentialen der Elektroden als Randbedigungen iterativ numerisch gelöst wird. Hierzu wird in einem Schritt jedem dieser Gitterpunkte der Mittelwert seiner nächsten Nachbarn zugewiesen. Dies wird solange wiederholt, bis die Unterschiede zwischen zwei Schritten unter eine festgesetzte Schwelle fallen. Ausgehend von dem so erhaltenen Potential werden nun die Flugbahnen der Teilchen schrittweise berechnet, indem aus den umliegenden Gitterpunkten der Potentialgradient am Ort des Teilchens interpoliert wird und anschließend die Position für den nächsten Schritt unter Verwendung der resultierenden Kräfte bestimmt wird. Zudem bietet *SIMION* die Möglichkeit, die Simulation über in der Scriptsprache *Lua* geschriebene Benutzerprogramme zu steuern.

Untersuchte Designs

Es wurden vier verschiedene Elektrondenanordnungen simuliert:

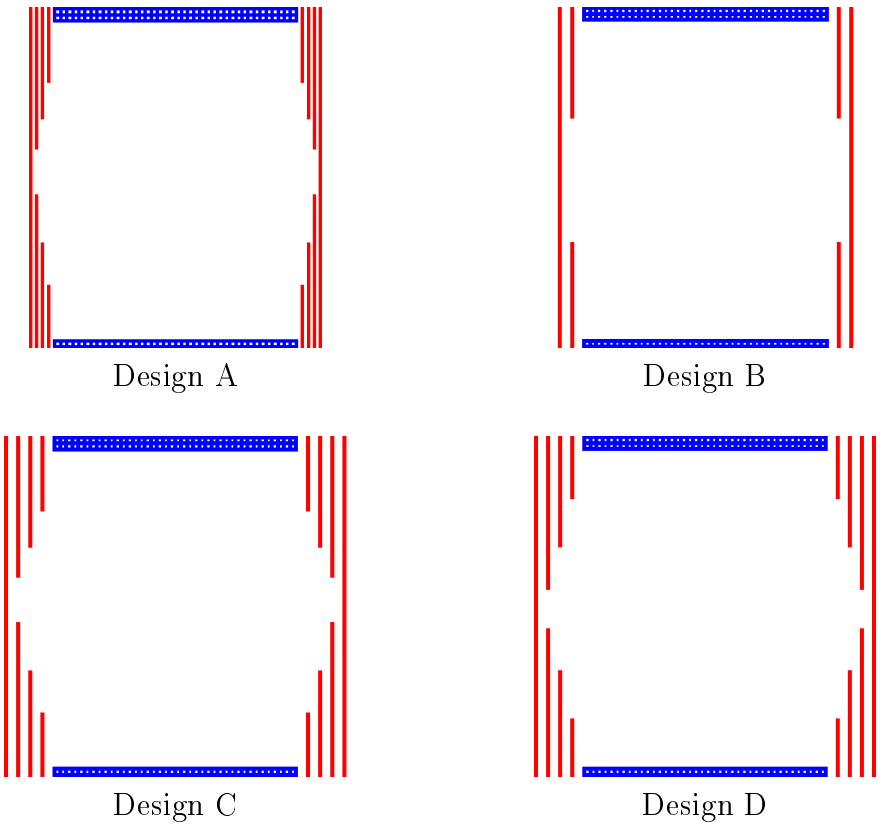

Abbildung 4.2: Frontansicht auf die in 4.3 beschriebenen Designs. Die Shims sind in rot, die Ablenkplatten in blau dargestellt.

A Eine von *Colutron* gelieferte Geometrie des Wienfilters, welche als Ausgangspunkt für die Änderungen genutzt wurde. Dieses Design besaß (aus unbekannten Gründen) im Gegensatz zu dem realen Wienfilter eine leicht asymmetrische Anordnung der Shims.

B Eine Konfiguration, in dem die Anzahl der Shims auf jeder Seite auf drei reduziert wurde, um die Abstände zwischen den Shims zu vergrößern und somit die Hochspannungsfestigkeit zu erhöhen. Dies stellt eine konstruktionstechnisch sehr einfache Lösung dar, für die es keiner weiteren Umbauten der Wienfilter-Halterung bedarf, da der Abstand zwischen den Spulen trotz größerem Abstand zwischen den Shims gleich bleibt.

C In dieser Variante wurde der Abstand der Shims von 0.4 mm auf 1.0 mm erhöht. Da die Anzahl der Shims gleich bleibt, verbreitert sich so der gesamte Wienfilter. Dadurch, dass die Spulen nun weiter vom Zentrum des Wienfilters entfernt sind,

ist das auf die Ionen wirkende Magnetfeld bei gleichem Spulenstrom geringer.

D Wie Design C, allerdings wurden hierbei die Shims symmetrisch angeordnet, um so ein homogeneres Feld erreichen zu können.

Parameter der Simulation

Zur Bestimmung der ladungsselektiven Eigenschaften der verschiedenen Designs wurde die Aufspaltung eines Ionenstrahls aus 21-und 22-fach positiv geladenen Eisenionen simuliert. Die Ionen starten dabei zentral vor dem Wienfilter mit einer kinetischen Energie von 300eV/q. Um einen ausgedehnten Ionenstrahl zu simulieren, wurden je Ladungszustand die Bahnen von 100 Ionen berechnet, deren Startpunkte auf einem Kreis mit Radius 0,35 mm um die Strahlmitte verteilt lagen. Nach dem Verlassen des Wienfilters fliegen die Ionen noch auf einer Driftstrecke von 200 mm. Diese Simulation wurde für verschieden starke E- und B-Felder durchgeführt. Dazu wurde ein Benutzerprogramm geschrieben, welches das Magnetfeld in vorgegebenen Schritten verändert. Für jedes Magnetfeld wird wiederum schrittweise das elektrische Feld in einem vorgegebenen Rahmen verändert, wobei in jedem Schritt die Flugbahnen der Ionen simuliert werden und die jeweils minimalen und maximalen x-und y-Koordinaten des Ionenstrahls nach der Driftstrecke abgespeichert wurden. Nach der Simulation wurde aus diesen Daten für jedes Magnetfeld das elektrische Feld mit der höchsten Aufspaltung zwischen den verschiedenen Ladungszuständen ermittelt.

Ergebnisse

Abbildung 4.3a) zeigt den Abstand der Auftreffpunkte der beiden Ionensorten. Er hängt wie in Gleichung 4.18 sinusförmig vom Magnetfeld ab. Der maximale Abstand wird bei ca. 350 G erreicht, wobei die größte Aufspaltung vom Design D erreicht wird. Die Sprünge im Verlauf von Design B entstehen vermutlich durch numerische Ungenauigkeiten. An diesen Stellen zeigt die optimale Wienfilter-Geschwindigkeit, wie in Abbildung 4.3b) zu sehen, ebenfalls einen Sprung, da elektrisches und magnetisches Feld nur in diskreten Schritten geändert wurden. Da diese Sprünge der Wienfilter-Geschwindigkeit jedoch auch bei den anderen Designs auftreten, dies aber bei diesen zu keinen Sprüngen des Abstands führt, ist das Design B als weniger stabil anzusehen.

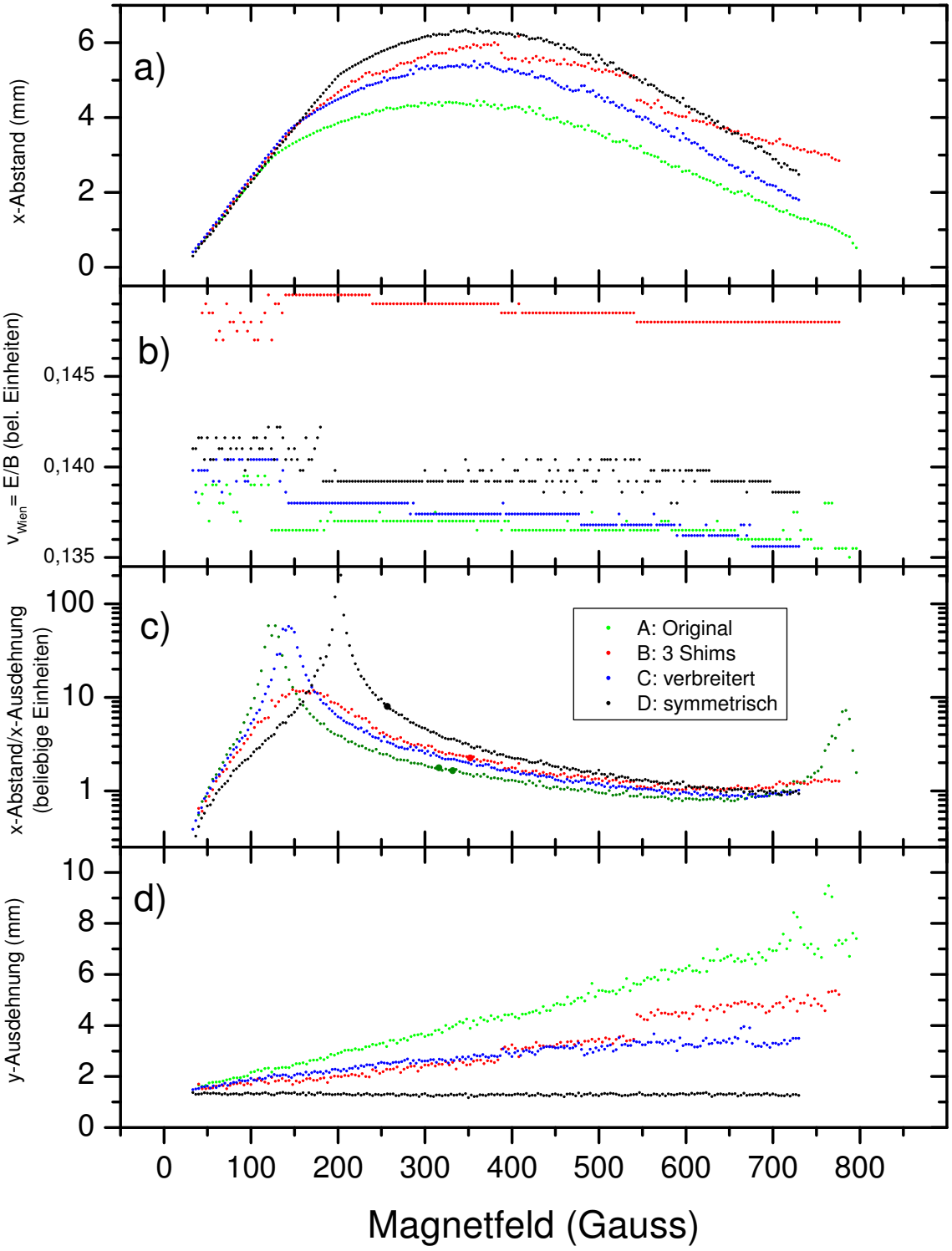

Abbildung 4.3: Ausgewählte Ergebnisse der Wienfilter-Simulationen für die unterschiedlichen Designs.

Die allgemeine Abnahme der Wienfilter-Geschwindigkeit bei höheren Magnetfeldern in Abbildung 4.3b) wird von den elektrischen Randfeldern der Ablenkplatten verursacht. In der Praxis fällt das elektrische Feld hinter dem Wienfilter nicht sofort auf null ab.
Ein Anhaltspunkt für die Homogenität des elektrischen Feldes ist die Ausdehnung der Strahlen in y-Richtung. Bei einem idealen Wienfilter sollte keine Aufweitung des Strahles in diese Richtung erfolgen. Das von Ablenkplatten und Shims erzeugte elektrische Feld ist jedoch nicht komplett homogen, so dass es hier eine Ausdehnung geben kann, welche mit steigendem Magnetfeld (und damit auch größer werdendem elektrischen Feld, da E/B konstant bleibt) zunimmt. In Abbildung 4.3d) ist die Summe der Ausdehnung der beiden Strahlen angegeben. Es zeigt sich, dass das Feld durch einen größeren Abstand der Shims (Design C), sowie durch eine symmetrische Anordnung (Design D) deutlich homogener wird. Insbesondere bei Design D scheint die Inhomogenität des elektrischen Feldes keine Rolle mehr zu spielen, da hier die Ausdehnung konstant ca. 1,4 mm beträgt, was dem Strahldurchmesser vor dem Wienfilter entspricht.
In Abbildung 4.3c) ist der Abstand der Strahlen durch ihre Ausdehnung in x-Richtung geteilt, was der Auflösung des Wienfilters entspricht. Da der Wienfilter bei bestimmten Magnetfeldern die Strahlen nicht nur nach Ladungszustand aufspaltet, sondern zusätzlich noch auf Detektorebene fokussiert, können hier große Werte erreicht werden. Auch hier ergibt das symmetrische Shimdesign die besten Werte, während nur das Erhöhen des Shimabstandes keine Auswirkungen hat. Das Design mit nur drei Shims hat viel schlechtere Fokussierungseigenschaften.

4.4 Verbesserter Wienfilter

Erhöhung der Spannungsfestigkeit

Aufgrund der Ergebnisse der Simulation wurde Design D als Grundlage für die Verbesserungen ausgewählt. Die Spulen mit Eisenjoch sowie die Ablenkplatten wurden vom bisherigen Wienfilter übernommen. Da die alten Shims zu scharfe Kanten hatten, welche die Hochspannungsfestigkeit beeinflussten, mussten neue Shims angefertigt werden. Um deren Kanten mit einem möglichst großem Radius abrunden zu können, wurde ihre Dicke von 0,1 mm auf 0,7 mm erhöht. Zudem wurden die Shims besonders glatt poliert, um die Potentialgradienten an der Oberfläche mög-

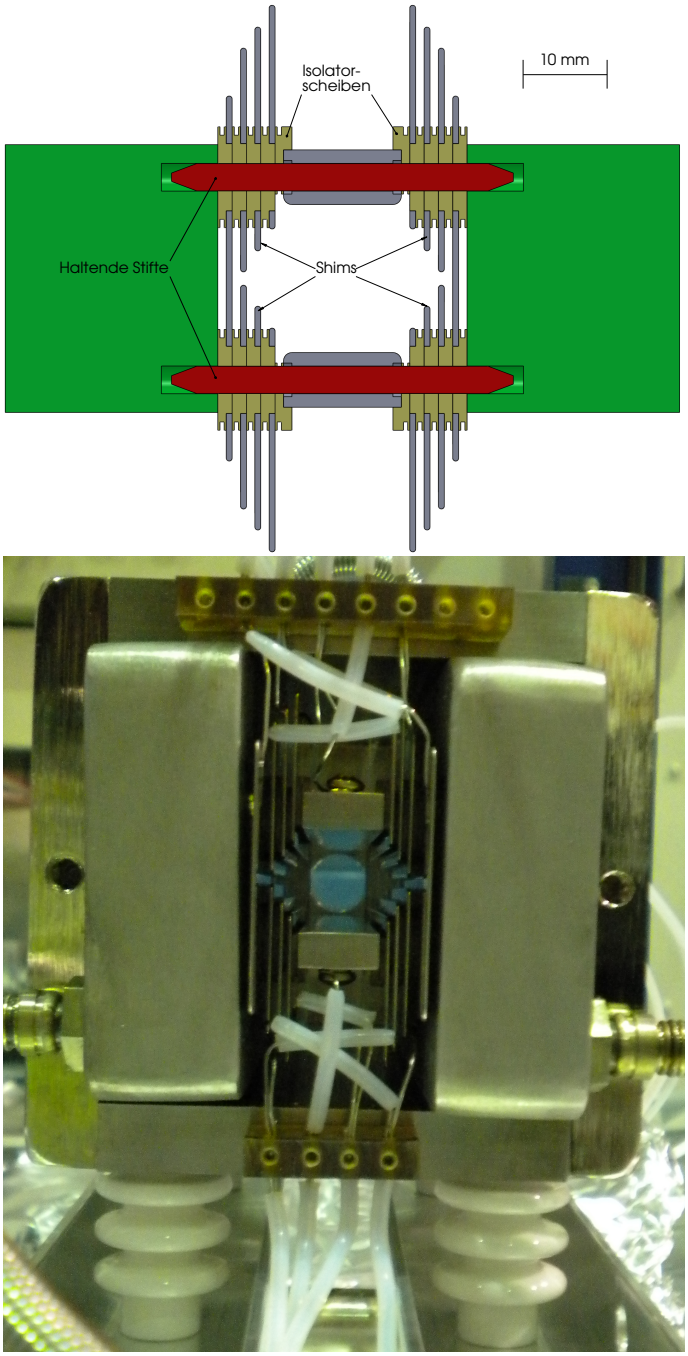

Abbildung 4.4: Oben: Schematischer Querschnitt durch den neuen Wienfilter, dargestellt sind die Eisenjochs der Spulen (grün), die Shims und die Ablenkplatten (grau), die haltenden Stifte (rot), sowie die Isolatorscheiben (gelb), die Spulen und das Gehäuse des Wienfilters fehlen aufgrund der Übersichtlichkeit. Unten: Rückansicht des umgebauten Wienfilters.

lichst gering zu halten. Zur Befestigung der Shims im Wienfilter wurde das bisherige Konzept der Halterung durch Stifte beibehalten, so dass die bereits in den Eisenjochs vorhandenen Löcher weiterverwendet werden konnten. Da bei dieser Art der Befestigung allerdings sehr kurze Kriechstrecken entlang des Stiftes zwischen den Shims bestehen, mussten hier Anpassungen vorgenommen werden. Deshalb wurden die zur Befestigung dienenden Löcher in den Shims auf einen Durchmesser von 8 mm vergrößert, so dass in diese Löcher ein Isolatorring gelegt werden konnte, wodurch eine zusätzliche Kriechstrecke von 2,3 mm zwischen Shims und Stift erzeugt wurde (siehe Abbildung 4.5). Die Verbreiterung der Shims erhöhte auch deren Steifigkeit und es wurden keine fixierenden Isolatorfolien mehr zwischen den Shims benötigt, was einen positiven Effekt auf die Qualität des erreichbaren Vakuums hatte. Als Abstandshalter zwischen zwei Shims wurde nur noch eine weitere Isolatorscheibe auf dem Stift benötigt. In den Rand der Scheibe wurde eine 1 mm tiefe Kerbe geschnitten, wodurch die Kriechstrecke zwischen den Shims auf 3mm vergrößert wurde (siehe Abbildung 4.5). Diese Abstandshalter befinden sich immer direkt neben den Isolatorscheiben in den Shims, somit konnten beide Scheiben zu einem einzigen Bauteil verbunden werden. Die Isolatorscheiben zwischen der innersten Shim und den Ablenkplatten mussten an einer Seite abgeschnitten werden, damit sie nicht über die Ablenkplatte hinaus stehen und so das elektrische Feld beeinflussen. Um ein Drehen dieser Scheiben um die Stiftachse zu verhindern, wurden diese Scheiben so gefertigt, dass sie auf der Aussenseite der Ablenkplatten etwas überstehen. Durch diese Konstruktion der Isolatoren wurde gewährleistet, dass die minimale Kriechstrecke zwischen zwei Elektroden mindestens 3 mm beträgt. Als Material für die Isolatoren wurde Polyetheretherketon (PEEK) verwendet, da es mit einer Durchschlagsfestigkeit von 24 kV/mm ausreichend gut isoliert und zudem aufgrund seiner thermischen und mechanischen Eigenschaften auch für Anwendungen im Ultrahochvakuum geeignet ist. In Tabelle 4.1 werden die Parameter von dem neuen und dem alten Wienfilter verglichen.

Bei Tests zur Spannungsfestigkeit wurden zwischen den einzelnen Shims Spannungen bis zu 2 kV angelegt. Dabei konnten keine Überschläge oder Kriechströme festgestellt werden. Somit ist der Wienfilter mindestens bis zu einer Spannungsdifferenz von 16 kV zwischen den beiden Ablenkplatten hochspannungsfest. Dies entspricht einer elektrischen Feldstärke in der Mitte des Filters von 900 V/mm, einer Steigerung um einen Faktor 50 verglichen mit dem bisherigen Modell.

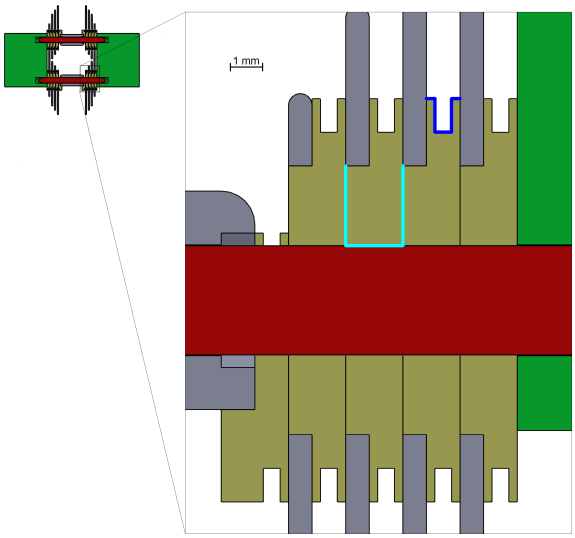

Abbildung 4.5: Detailansicht der Isolation zwischen den Shims. Farblich eingezeichnet sind Beispiele für die kürzesten Kriechstrecken zwischen zwei Shims: Entlang des Abstandshalter (dunkelblau), sowie entlang des Stiftes (türkis).

Tabelle 4.1: Vergleich der Parameter von altem und neuem Wienfilter

		alter Wienfilter	neuer Wienfilter
Länge	(mm)	152	152
Abstand der Ablenkplatten	(mm)	17,6	17,6
Abstand der Eisenjochs	(mm)	20,4	29,6
Abstand der Shims	(mm)	0,4	1.0
Dicke der Shims	(mm)	0,1	0,7
Maximales Elektrisches Feld	(V/mm)	16,8	>900
minimale Kriechstrecke zwischen zwei Shims	(mm)	0,4	3,0

Änderungen an der Spulenkühlung

Um die Probleme mit den undichten Verschraubungen der Kühlleitungen der Spulen zu beheben, wurden alle Verbindungen der Kühlschläuche im Vakuum fest verschweißt. Die Spulen waren somit direkt mit dem Flansch verbunden, der die Durchführungen für die Kühlflüssigkeit trägt (siehe Abbildung 4.6). Dieser Flansch kann daher nicht von außen an die Vakuumkammer des Wienfilters montiert werden, sondern muss beim Einbau in die Vakuumkammer mit dem Wienfilter mitgeführt werden, um ihn dann von Innen an seine Position zu bringen. Um den Flansch zu befestigen und abzudichten, wird er von aussen verschraubt. Damit diese Schrauben nicht im Vakuum liegen, müssen sie – im Gegensatz zum normalen Flansch – inner-

halb des abdichtenden Kupferringes liegen. Da die Kühlmittelleitungen im Vakuum aus Metall bestehen, stellen sie eine elektrische Verbindung zum Wienfilter dar. Um den Wienfilter als Ganzes auf ein elektrisches Potential hochlegen zu können, müssen sie deshalb gegen die Wienfilterkammer isoliert sein. Die Durchführungen wurden aus diesem Grund nicht direkt in den Flansch eingelassen, sondern durch eine 7 cm lange Keramik-Röhre von diesem getrennt. Ausserhalb des Vakuums kann das Kühlmittel durch nicht elektrisch leitende Plastikschläuche gepumpt werden, um die Durchführungen gegen das Erdpotential zu isolieren.

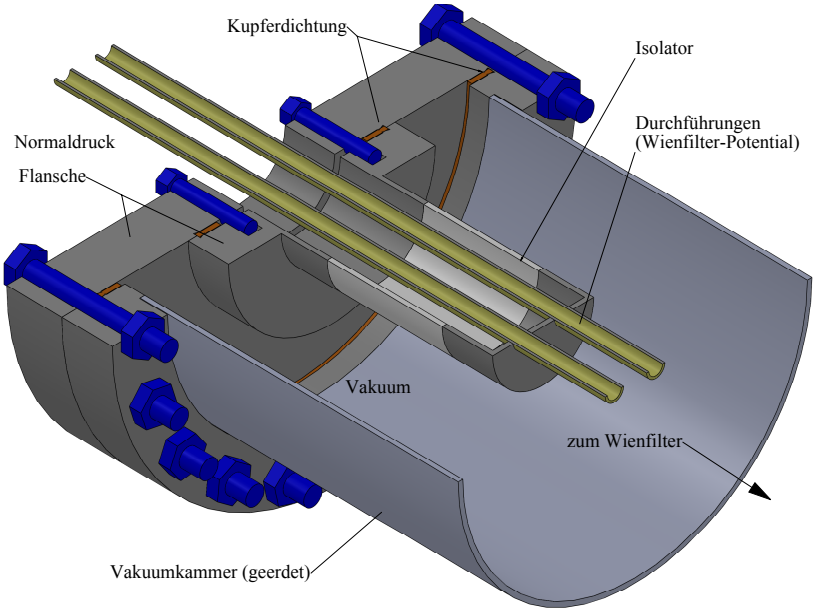

Abbildung 4.6: Querschnitt durch die Kühlmitteldurchführung. Zu sehen ist ein Teil der Wienfilterkammer sowie die beiden Flansche mit der Keramikisolierung (weiß) und den Durchführungen (gelb). Bei dem inneren Flansch liegen die Schrauben (blau) innerhalb des Kupferringes.

4.5 Strahlrohr

Aufgrund der Verbreiterung des Wienfilters und der Möglichkeit den Wienfilter hochlegen zu können, musste der Wienfilter in eine neue Vakuumkammer eingebaut werden. Hierzu wurde ein CF200-Rohr mit einer Länge von 692 mm verwendet, so dass neben dem Wienfilter auch die zweite Siklerlinse und die Blenden in dieses mit

eingebaut werden konnten (siehe Abbildung 4.7). Um eine einfache Montage von Wienfilter und Siklerlinse zu ermöglichen, wurden beide auf einem Schienenpaar befestigt. Der Wienfilter wurde dabei mit vier Keramikisolatoren gegen die Schienen isoliert. Somit ließ sich zudem eine exakte Ausrichtung von Wienfilter und Siklerlinse zueinander erreichen. Diese Schiene wurde dann an vier in das Rohr eingeschweißten Bolzen befestigt.

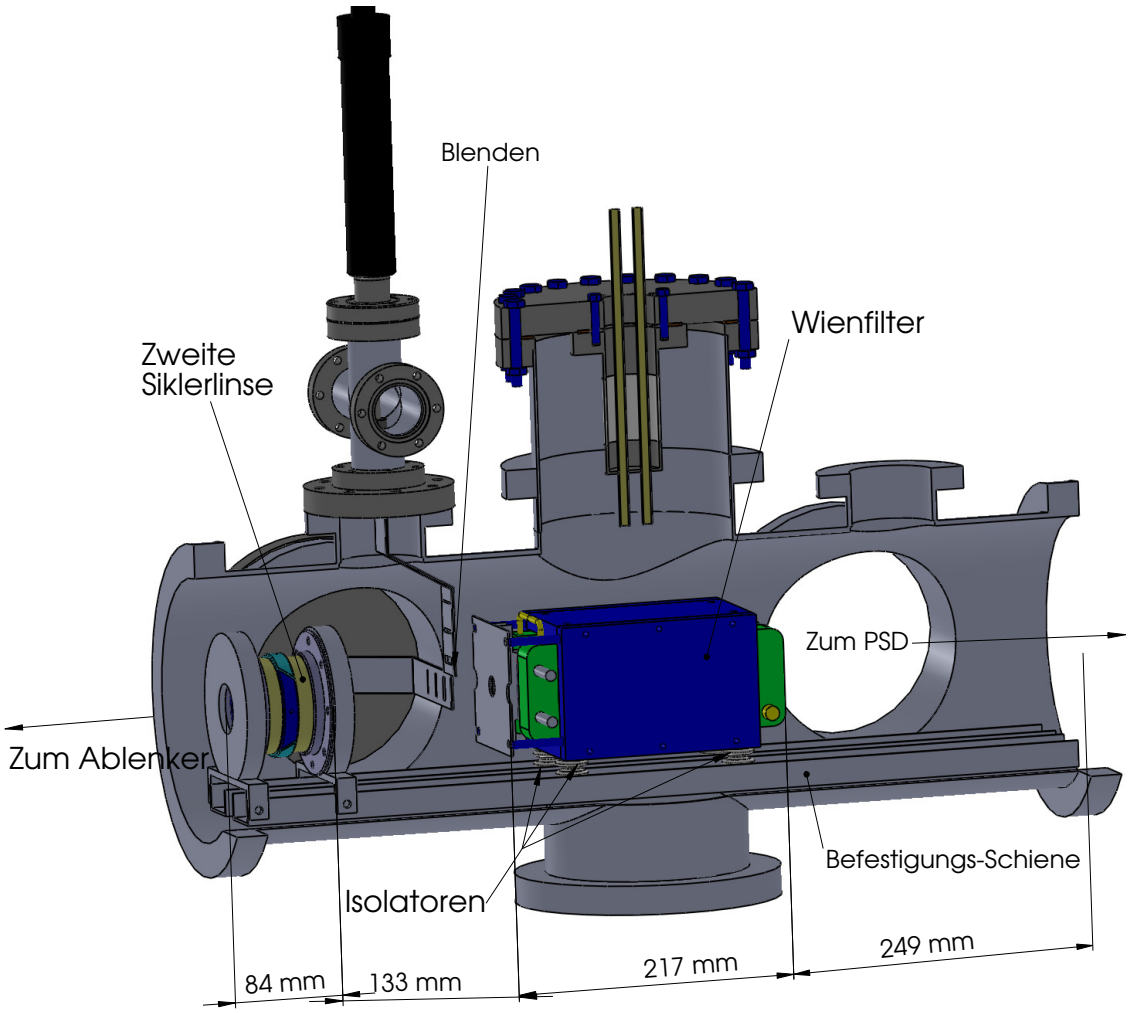

Abbildung 4.7: Vakuumkammer des Wienfilters.

Zur Erzeugung und Überwachung des Vakuums in der Kammer wurden zudem eine Turbomolekularpumpe sowie eine Drucksonde angeschlossen. Aufgrund des großen Volumens der Kammer und der vielen neuen Bauteile war mehrmaliges Ausheizen notwendig, bis sich ein akzeptabler Druck in der Kammer einstellte. Mittlerweile werden jedoch dauerhaft Drücke $< 5 \cdot 10^{-8}$ erreicht.

Kapitel 5

Messungen

Mit dem verbesserten Wienfilter und dem in Kapitel 3 beschriebenen Aufbau wurden zwei Messungen durchgeführt:

- Die resonante Photoionisation von 15-fach positiv geladenem Eisen wurde vermessen.
- Der zeitumgekehrte Prozess der Photoionisation – die dielektronische Rekombination – wurde für helium- bis berylliumartiges Eisen untersucht.

Für beide Messungen ist es notwendig, die Ladungszustandsverteilung in der Falle zu ermitteln, weshalb zuerst die hierzu angewandten Methoden beschrieben werden.

5.1 Bestimmung der Ladungszustandsverteilung in der EBIT

5.1.1 Einstellen der Extraktion

Zu Beginn der Extraktion sind alle Spannungen der Extraktion auf 0 V gesetzt. Nun werden die Driftröhren so eingestellt, dass das Potential der Elektrode C1[1], niedriger als das der Elektrode G1 ist. Zudem müssen die Potentiale von C2, C3 und Trumpet C niedriger sein als das von C1. Die Ionen verlassen die Falle nun bevorzugt in Richtung Kollektor, wobei sie durch die Potentialdifferenz zwischen diesem und der Falle beschleunigt werden und anschließend den Kollektor durchqueren. Die

[1] Die Bezeichnungen der Fallenelektroden sind in Abbildung 3.4 dargestellt. Ihre Reihenfolge von der Kanone zum Kollektor lautet: Trumpet G, G3, G2, G1, Falle, C1, C2, C3, Trumpet C.

Beschleunigungsspannung hängt dabei vom Potential der Driftröhre C1 sowie von dem dortigen Raumladungspotential des Elektronenstrahls (s. Gl. 3.7) ab:

$$U_{extr} = U_{C1} + \Phi_e \,. \tag{5.1}$$

Anschließend werden die unten beschriebenen Prozesse nach folgendem Schema ausgeführt:

Schritt 1: Einstellen des Benders Es wird die am elektrostatischen Ablenker angelegte Spannung gescannt, wobei beim ersten Durchgang Gleichung (3.10) zur Abschätzung des Scan-Bereichs benutzt wird. Bei diesem Scan können mehrere Maxima der Zählrate des PSDs auftreten, da auch ausserhalb der Fallenregion Atome durch den Elektronenstrahl ionisiert werden. Um das zur Fallenregion gehörende Maximum zu finden, wird die Spannung auf den Wert eines Maximums gesetzt und anschließend die Potentiale der Driftröhren variiert. Handelt es sich um Ionen aus der Falle, so lässt sich das Signal am PSD durch Ändern des Potentials von C1 unterdrücken. Dies sollte auch bei starker Erhöhung der Potentiale von C2, C3 und Trumpet C der Fall sein, da dies eine Potentialbarriere für die Ionen aus der Falle darstellt. Eine starke Erhöhung der Potentiale an den Elektroden auf der Kanonenseite der Falle sollte dagegen keine Auswirkungen auf die Zählrate haben.

Schritt 2: Optimierung der Ionenoptik Die Spannungen der Bauteile der Ionenoptik werden in folgender Reihenfolge gescannt und jeweils auf den Wert mit der höchsten Zählrate am PSD gesetzt (Bezeichnungen aus Abbildung 3.6):

1. Eintrittsteller
2. Erste Sikler-Linse
3. Einzellinse
4. Zweite Sikler-Linse

Bei den Sikler-Linsen wird zunächst die Fokusspannung gescannt und anschließend die horizontale und vertikale Ablenkspannung gemeinsam in einem 2D-Scan. Als Scanbereich wird dabei beim ersten Durchgang der gesamte einstellbare Bereich verwendet, bei weiteren Durchgängen ein entsprechend kleiner gewählter Bereich um den aktuellen Wert.

Die Schritte 1 und 2 werden wiederholt, bis die Zählrate des PSD ein Maximum erreicht. Anschließend wird das Magnetfeld des Wienfilters auf den gewünschten Wert eingestellt.

Schritt 3: Identifikation der Ionen (wie im folgenden Abschnitt 5.1.2 beschrieben).

Können die gewünschten Ionen identifiziert werden, so wird die Wienfilter-Spannung auf einen Wert eingestellt, bei dem die gewünschten Ionen auf dem PSD beobachtet werden können. Ist dies nicht der Fall, so wird das elektrische Feld auf einen Wert gesetzt, bei dem mehrere Spots auf dem PSD zu sehen sind.

Schritt 4: erneute iterative Optimierung der Ionenoptik wie in Schritt 2. Nach dem Erreichen einer zufrieden stellenden Zählrate sollte versucht werden, durch manuelle Änderungen der Parameter (insbesondere der Siklerlinse vor dem Wienfilter) möglichst gut getrennte Spots der einzelnen Ionenarten zu erzeugen. Hierzu kann auch die Größe der Blendenschlitze verändert werden. Kleinere Blendenschlitze verringern zwar die Zählrate, können aber durch Abschneiden der schlecht fokussierten Strahlbereiche zur Verbesserung der Auflösung beitragen.

Konnten in Schritt 3 die Ionen identifiziert werden, so hat ist der Optimierungsprozess abgeschlossen, ansonsten wird mit Schritt 3 fortgefahren. Durch das beschriebene Verfahren werden nur lokal optimale Einstellungen gefunden, deshalb können bei mehrmaligem Durchführen unterschiedliche Ergebnisse auftreten.
In Tabelle 5.1 sind optimierte Parameter für verschiedene Extraktionsspannungen aufgeführt. Sie können bei weiteren Experimenten als Richtwerte verwendet werden. Da die Wienfilterkammer allerdings durch einen Balg mit der EBIT verbunden ist und somit die Ausrichtung bei jedem Aufbau etwas unterschiedlich ist, empfiehlt es sich die Parameter jeweils neu zu optimieren.

5.1.2 Identifikation der Ionen

Die spezifischen Ladung q/m der Ionen, welche den Wienfilter durchqueren, hängt nach den Gleichungen (4.1) und (4.2) folgendermaßen vom elektrischen und magnetischen Feld des Wienfilters ab:

$$\frac{q}{m} = \frac{1}{2U}\left(\frac{E}{B}\right)^2 . \tag{5.2}$$

$\mathbf{U_{extr}}$	(V)	**256**	**328**	**685**	**3000**	**3200**	**3480**
Eintritssteller	(V)	855	803	1427	2200	2200	2200
Sikler 1 U_{fok}	(V)	868	708	1714	2000	2000	2000
Sikler 1 U_{ver}	(V)	−191,7	−140,8	−195,9	200	200	200
Sikler 1 U_{hor}	(V)	40,9	−6,0	0	-300	-300	-300
Sikler 1 U_{ast}	(V)	66,5	30,5	0	-170	-170	-170
Ablenker	(V)	230,7	223,3	435,6	1882	1973	2155
Einzellinse	(V)	235	259	460	1900	1913	1970
Sikler 2 U_{fok}	(V)	760	54,3	122,4	5800	5800	6300
Sikler 2 U_{ver}	(V)	−250,6	−162,6	−140,8	-140	-200	-200
Sikler 2 U_{hor}	(V)	−1,0	0	18,4	-50	-50	100
Sikler 2 U_{ast}	(V)	11,0	20,3	30,6	0	0	0
Wienfilter E-Feld	(V)	99,7	102,5	59,6	353	353	385
Wienfilter Spulen	(V)	3,91	3,93	2,24	4,01	4,01	4,05

Tabelle 5.1: Optimierte Extraktionsparameter für verschiedene Extraktionsspannungen. Für den Wienfilter ist die Spannung zwischen den Ablenkplatten sowie die Spannung an den Magnetspulen angegeben. Die ersten drei Einstellung wurden während der Photoionisationsmessungen gefunden, die letzten drei im Rahmen der Untersuchung der dielektronischen Rekombination.

Da die Ionen vor dem Wienfilter durch den elektrostatischen Ablenker energieselektiv abgelenkt werden, ist die Beschleunigungsspannung U für alle Ionen, die den Wienfilter erreichen, gleich, so dass die spezifische Ladung nur von den Feldern des Wienfilters abhängt. Das magnetische Feld des Wienfilters lässt sich aufgrund von Hysterese nur schwer reproduzierbar variieren, es wird daher auf einem konstanten Wert gehalten. Zur Bestimmung der Ladungsverteilung in der Falle wird nun das elektrische Feld verändert. Dazu scannt man die Spannung zwischen den Ablenkplatten in einem Bereich, der groß genug gewählt ist, um möglichst viele verschiedene Ladungszustände zu detektieren. Mit dem Datenaufnahmesystem wird dabei neben dem Bild des PSDs auch die Digitalisierungsspannung des elektrischen Feldes, welche vom Steuerprogramm ausgegeben wird, aufgezeichnet. Bei der Erhöhung des elektrischen Feldes wandern die Spots der Ionen mit ansteigender spezifischer Ladung nacheinander über den positionsempfindlichen Detektor. Da der Ionenstrahl nur in x-Richtung aufgespalten wird, reicht es aus, nur die Projektion des PSD-Bildes auf diese Achse zu betrachten. Trägt man diese in einem zweidimensionalen Histogramm über das elektrische Feld auf (siehe Abbildung 5.1), so werden die verschiedenen Ladungszustände durch geneigte Linien dargestellt.
Um die Linien den entsprechenden Ladungszuständen zuzuordnen, wird nun ein

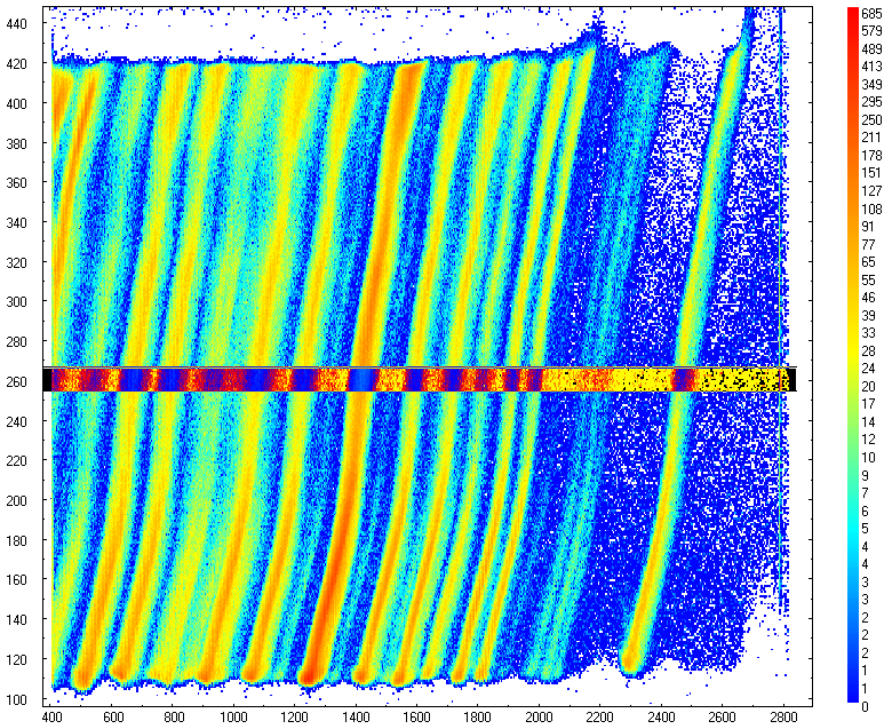

Abbildung 5.1: Ergebnis eines Scans des elektrischen Feldes des Wienfilters. Die Abszisse entspricht dem elektrischen Feld, die Ordinate der x-Koordinate des Wienfilters. Die schrägen Linien stammen von den einzelnen Ladungszuständen der Ionen, die mit größer werdendem Feld über den Detektor wandern. Der invertierte Ausschnitt wird zur Bestimmung der Ladungszustände auf die Abszisse projiziert (siehe Abb. 5.2).

schmaler horizontaler Ausschnitt, auf dem die einzelnen Linien möglichst gut zu erkennen sind, auf die x-Achse (Wienfilter-Spannung) projiziert. Die höchsten Peaks in dem so erhaltenen Spektrum gehören zu q/m-Werten, die von mehreren Elementen erreicht werden können, wie zum Beispiel $q/m = \frac{1}{4}$ (He^{1+}, C^{3+}, O^{4+}, Fe^{14+}) oder $q/m = \frac{1}{2}$ (He^{2+}, C^{6+}, N^{7+}, O^{8+}). Hat man einen dieser Peaks identifiziert, so kann man die Kalibrierung der restlichen Peaks relativ zu diesem durchführen:

$$\left(\frac{q}{m}\right)_i = \left((ch_i - ch_{fix}) \cdot f_{id} + \sqrt{\left(\frac{q}{m}\right)_{fix}}\right)^2 . \tag{5.3}$$

Hierbei ist ch_{fix} die Kanalzahl des identifizierten Peaks und $(q/m)_{fix}$ seine spezifische Ladung. Die spezifischen Ladungen $(q/m)_i$ der anderen Peaks ergeben sich aus ihren Kanalzahlen ch_i. Die Konstante f_{id} muss dabei durch Probieren so gewählt werden, dass sich für möglichst alle Peaks ein q/m-Verhältnis ergibt, welches

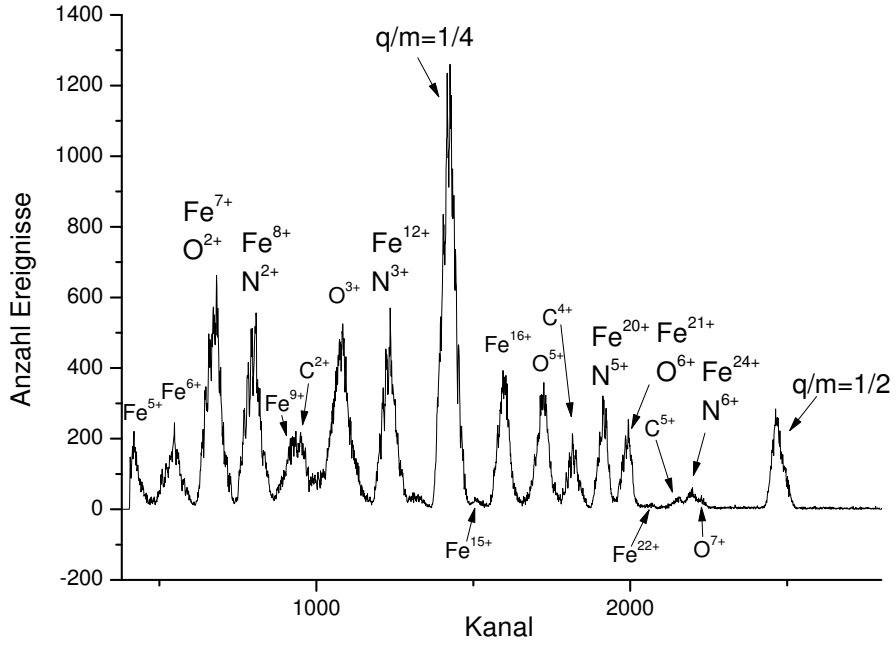

Abbildung 5.2: Projektion des in Abbildung 5.1 invertierten Bereichs. Der höchste Peak wurde als $q/m = 1/4$ festgesetzt, womit die anderen Peaks identifiziert werden konnten.

den in der Falle vorhandenen Ladungszuständen zugeordnet werden kann. Diese Art der relativen Kalibrierung hat den Vorteil, das man unabhängig von Verschiebungen der Peaks wird, welche sich schon allein durch die Auswahl des projizierten Bereichs ergibt. Die im Allgemeinen nicht zur Steuerspannung proportionale Digitalisierungsspannung führt ebenfalls zu vom Scanbereich abhängigen Verschiebungen, welche auszugleichen mit einem ähnlich großen Aufwand verbunden wäre.
Mit den Peaks hat man auch die zu ihnen gehörenden Linien im zweidimensionalen Histogramm indentifiziert. Durch einen senkrechten Schnitt in diesem kann man nun erkennen, welche Ionen bei einer bestimmten Wienfilter-Spannung gleichzeitig auf dem positionsempfindlichen Detektor auftreffen.

5.2 Resonante Photoionisation von Fe^{15+}

Wird in einem hochgeladenen Ion durch resonante Absorption eines Photons ein Elektronenübergang angeregt, dessen Energie über der Ionisationschwelle des Ions liegt, so gibt es zwei Möglichkeiten der Abregung (siehe Abschnitt 2.2.2): radiativ durch Aussenden eines Photons und über einen Auger-Zerfall. Mit dem in Kapitel 3 beschriebenen Aufbau lassen sich beide Prozesse nachweisen.
In einer Messkampagne, bei der die FLASH-EBIT mit dem Synchrotron BESSY II in Berlin gekoppelt wurde, wurde der Zerfall nach resonanter Photonenabsorption durch Fe^{14+} und Fe^{15+} untersucht. Zur Detektion des autoionisierenden Zerfalls wurden die Ionen aus der EBIT extrahiert und ladungszustandsselektiv detektiert. Die resonant gestreuten Photonen ließen sich durch den Germanium-Detektor nachweisen.
Im Folgenden werden die ersten Messergebnisse der resonanten Photoionisation von $Fe^{15+} \rightarrow Fe^{16+}$ präsentiert.

5.2.1 Synchrotonstrahlung und BESSY II

Die Energien der Übergänge, welche in den beschriebenen Experimenten untersucht wurden, lagen im Röntgen-Bereich zwischen 700 und 900 eV. Um Photonenstrahlen in diesem Energiebereich in ausreichender Intensität zu erzeugen, werden spezielle Lichtquellen, wie zum Beispiel Synchrotrone, benötigt. Im Folgenden wird das Prinzip der Synchrotronstrahlung im Allgemeinen und die verwendete Anlage BESSY II im Besonderen kurz beschrieben.

Synchrotronstrahlung

Erfährt eine bewegte Ladung eine Geschwindigkeitsänderung, wird den Prinzipien der Elektrodynamik folgend elektromagnetische Strahlung abgestrahlt, die maximal wird für Kreisbewegungen und proportional zum Inversen der vierten Potenz der Masse ist. Dieser Umstand und der damit verbundene Energieverlust wurde zunächst als Störfaktor bei ringförmigen Elektronenbeschleunigern wahrgenommen. Später wurde diese Strahlung jedoch auch parasitär genutzt, sowie ursprünglich als Beschleuniger geplante Ringe zu Strahlungsquellen umfunktioniert. Nach dem gestiegenen Interesse an Experimenten an diesen Synchrotronen der ersten Generation wurden Beschleuniger errichtet, die ausschließlich zur Nutzung der Synchrotron-

Strahlung dienten und als Synchrotrone der zweiten Generation bezeichnet werden. An ihnen konnten nun viele Anwender die Strahlung nutzen, ohne auf Beschleuniger-Experimente Rücksicht nehmen zu müssen. Hierbeit konnte die Entwicklungsarbeit auf die wesentlichen Parameter der Strahlung, die in der Brillianz zusammengefasst sind, fokussiert werden, was neue Möglichkeiten in der Forschung mit hochenergetischen Photonen eröffnete. Eine weitere wesentliche Verbesserung erfuhren die Synchrotron-Strahlungsquellen durch die Verwendung von komplizierteren, linearen Magnetelementen, so genannten Undulatoren. Mit ihnen konnte der Photonenstrahl, im Gegensatz zu den bisher verwendeten Dipolmagneten, deutlich effektiver und genauer geformet werden, was zu den Synchrotronen der dritten Generation führte.
An einem solchen Synchtrotron der dritten Generation, BESSY II in Berlin, wurden die hier vorgestellten Experimente zur Photoionisation durchgeführt, weshalb im Folgenden diese Anlage und die wesentlichen Elemente kurz beschrieben und spezifische Charakteristika genannt werden. Zuvor wird jedoch das Funktionsprinzip dieser Magnetelemente erläutert.

Undulator Um die Elektronen in einem Speicherring auf einer geschlossenen Bahn zu halten, werden diese mit Dipolmagneten abgelenkt. Diese so bewirkte Richtungsänderung lässt die Synchrotronstrahlung abstrahlen. Synchrotrone der dritten Generation manipulieren die Bahn der Elektronen zusätzlich, mit komplizierteren Magnetelementen, sogenannten *insertion devices* (ID), die auf geraden Strecken in den Ring eingelassen sind. Ein Haupttyp dieser IDs, wie er auch bei BESSY zum Einsatz kommt, ist ein *Undulator*.
In einem Undulator sind mehrere Dipolmagnete gegenläufig gepolt hintereinander geschaltet, so dass das durchlaufende Elektron eine sinusförmige Kurvenbahn vollführt. Diese mehrmaligen Ablenkungen der Elektronen führen dazu, dass viele Photonen mit gleicher Frequenz und Richtung emittiert werden, was zu einer deutlichen Erhöhung der Intensität und Brillianz führt. Aufgrund von relativistischen Effekten wird dabei die maximale Intensität in die Vorwärtsrichtung entlang der Hauptachse des Undulators emittiert.
Die Stärke der Elektronenauslenkungen lässt sich mit der Magnetfeldstärke im Undulator steuern, welche wiederum durch den Abstand der beiden Magnetreihen eingestellt wird. So ist es möglich, die Frequenz und damit die Energie der Photonen durch den Undulator auf ein schmales Band einzuschränken, welches durch einen Monochromator weiter verschärft wird.

Neben Undulatoren kommen in modernen Strahlungsquellen auch Abwandlungen und Weiterentwicklungen dieses Prinzips zum Einsatz, welche als *Wiggler* oder *FEL-Undulatoren*, benannt nach Freien-Elektronen-Lasern, bezeichnet werden. Letztere bewirken durch ihre Konstruktion Laser-Eigenschaften der abgestrahlten Photonen wie Kohärenz, was in neuesten Röntgenstrahlquellen wie der LCLS (*Linac Coherent Light Source*) und dem im Bau befindlichen XFEL (*X-Ray Free-Electron Laser*) angewandt wird.

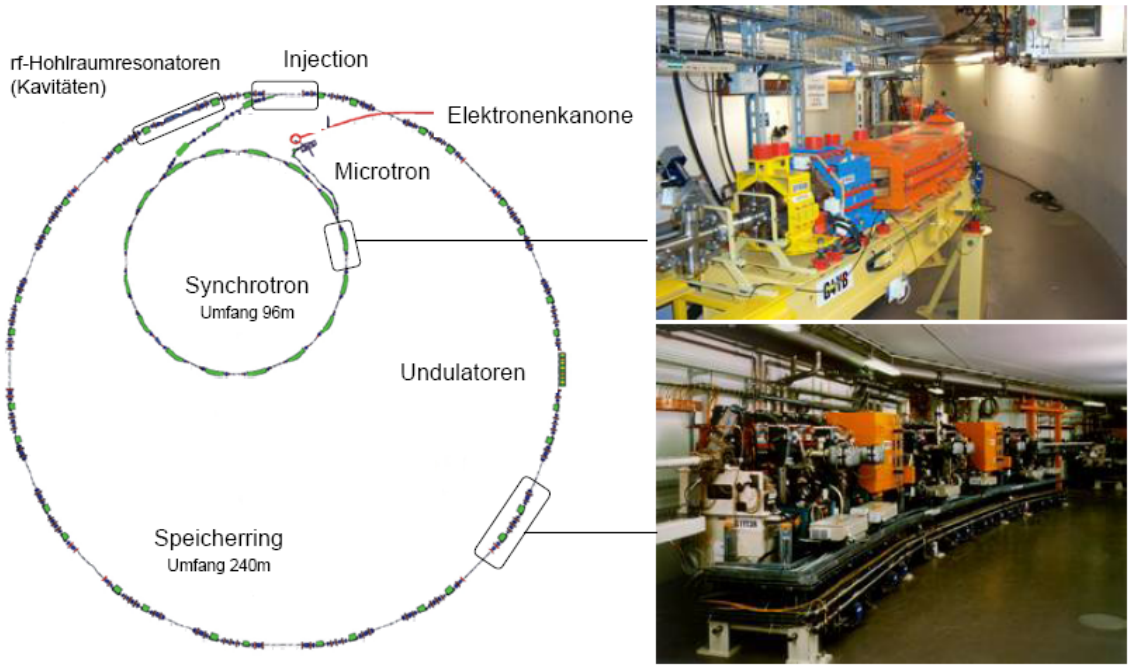

Abbildung 5.3: Aufbauschema und Fotographien der wesentlichen Komponenten von BESSY II. Es sind das vorbeschleunigende Mikrotron, das endbeschleunigende Synchrotron und der Speicherring mit den Undulatoren zur Formung des Strahls erkennbar. (Abbildung entnommen aus [47])

Synchrotron BESSY II Auf Betreiben der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt wurde in den 1970er Jahren in Berlin ein Synchrotron der zweiten Generation errichtet (Berliner Elektronenspeicherring-Gesellschaft für Synchrotronstrahlung, BESSY), welches sehr erfolgreich arbeitete. Hierauf folgte in den 1990er Jahren mit BESSY II in Berlin-Adlershof ein Synchrotron der dritten Generation. In dem Speicherring mit einem Umfang von 240 m sind 14 Undulatoren sowie ein Radiofrequenz-Hohlraumresonator eingesetzt, welcher den durch das Abstrahlen der Syn-

Elektrode	Offset	Tr. G	G3	G2	G1	Falle	C1	C2	C3	Tr. C	Kath	Strom
Spannung (V)	256	140	80	60	120	80	83	33	33	51	160	7,5 mA

Tabelle 5.2: Potentialle der Fallenelektroden der EBIT während der Photoionisationsmessung. Mit Offset ist das an alle Drifröhren angelegte Potential gemeint, zu dem die einzelnen Potentiale der Driftröhren addiert werden. Kath ist die an die Kathode angelegte Spannung, Strom der Elektronenstrahlstrom der EBIT.

chrotronstrahlung enstehenden Energieverlust der Elektronen ausgleicht. Die Elektronen werden mit einer Energie von 1,7 GeV in den Speicherring injiziert, nachdem sie von einem Mikrotron auf 50 MeV vorbeschleunigt und von dem eigentlichen Synchrotron mit 96 m Umfang auf die Endgeschwindigkeit beschleunigt werden. Typischerweise finden drei Injektionen pro Tag statt, bei diesen wird ein Strahlstrom von 300 mA eingestellt, der mit einer Lebensdauer von etwa 12 Stunden exponentiell abnimmt. Abbildung 5.3 zeigt den Aufbau von BESSY II.

Die verwendete Beamline Um das durch den Undulator schon energetisch stark fokussierte Synchrotron-Licht weiter zu verschärfen, wird an der verwendeten Beamline U49/2-PGM1 [50] ein Plan-Gitter-Monochromator eingesetzt. Mit diesem ist es möglich, im Energiebereich von 85 bis 1600 eV eine Photonen-Energie-Auflösung $E/\Delta E$ von 5000 bei 1,6 keV und von bis zu 30.000 bei 100 eV zu erreichen. Dies ermöglichte die Aufnamhne von sehr gut aufgelösten Spektren der Photoionisation, wie sie im Folgenden vorgestellt werden.

5.2.2 Messprinzip der Photoionisation

Der Elektronenstrahl der EBIT wird so eingestellt (siehe Tablle 5.2), dass das Mutterion, in diesem Fall Fe^{15+}, maximal produziert wird, das zu detektierende Photoion jedoch möglichst wenig. Dies wird erreicht, indem die Energie des Elektronenstrahls (siehe Gleichung 3.9) unterhalb der Ionisationsenergie des zu detektierenden Ions, hier Fe^{16+}, gehalten wird. Auf Grund der Existenz metastabiler Zustände ist es jedoch möglich, dass trotzdem Fe^{16+} erzeugt wird, dessen Menge jedoch zum einen als konstant und zum anderen als gering anzunehmen ist, weshalb keine großen Störungen der Messungen mit Ausnahme eines konstanten Untergrunds zu erwarten sind.
Der Photonenstrahl wird im Fallenvolumen mit der Ionenwolke zum Überlapp ge-

bracht. Um die Photoionisation zu beobachten, wird die Energie der Photonen über den erwarteten Energiebereich variiert. Dies geschieht in Form von nahezu frei einstellbaren Stufen, auf welchen bei diesem Experiment jeweils etwa eine Sekunde gemessen wurde. Die Variation der Energie wird technisch realisiert durch eine programmierte Winkelveränderung des Monochromatorgitters sowie einer gleichzeitigen Änderung des Magnetreihenabstands im Undulator.
Bei ausreichender Photonenenergie wird innerhalb des Fallenvolumens Fe^{15+} zu Fe^{16+} photoionisiert. Um diesen Prozess nachzuweisen, wird mit dem in Kapitel 3 beschriebenen Aufbau die Zunahme an 16-fach geladenen Eisenionen detektiert. Hierzu wird der Falleninhalt mit möglichst großer Effizienz und Gleichförmigkeit aus der Falle extrahiert, mit dem Wienfilter nach Ladungszuständen getrennt und auf dem positionsempfindlichen Detektor abgebildet. Bei entsprechenden Einstellungen (siehe Tabelle 5.1 für U_{extr}=339 V) sind auf dem PSD die Spots von Mutter- und Photoion erkennbar. Der Spot von Fe^{16+} wird dabei durch den von N^{4+} überlagert, da beide Ionen das gleiche q/m-Verhältnis haben und somit vom Wienfilter nicht getrennt werden. Durch Absenken der MCP-Spannung des PSDs konnte die Zählrate von N^{4+} jedoch soweit reduziert werden, dass dies nur noch einen kleinen nahezu konstanten Beitrag zum Untergrund darstellte.
Mit Hilfe des Datenaufnahmesystems (siehe Abschnitt 3.4) ist es nun möglich, über eine vom Monochromator ausgegebene Digitalisierungsspannung die eingestellte Photonenenergie und gleichzeitig die Zahl der Ereignisse zeitaufgelöst aufzunehmen. Hieraus lässt sich leicht ein Anstieg an detektierten Photoionen bei bestimmten Photonenenergien nachweisen, indem man die Ereignisse im Bereich des Spots des Photoions auf dem Detektor getrennt beobachtet und in ein Histogramm projiziert, wie es in Abbildung 5.4 dargestellt ist.

5.2.3 Datenauswertung und systematische Effekte

Die Auswertung der während der Messung vom Datenaufnahmesystem erzeugten Listfiles erfolgte durch die in *LabVIEW* erstellte Software-Farm *cow, chicken* und *sheep* [51]. Mit diesen Programmen war es möglich, das PSD-Bild und die entsprechenden Intensitäten darzustellen, die interessanten Bereiche auszuwählen und auf den Parameter der Photonenenergie zu projizieren.
Bei der Auswertung der Photoionisationsspektren sind einige systematische Effekte zu berücksichtigen, die zum einen die Auflösung der Linien betreffen, zum ande-

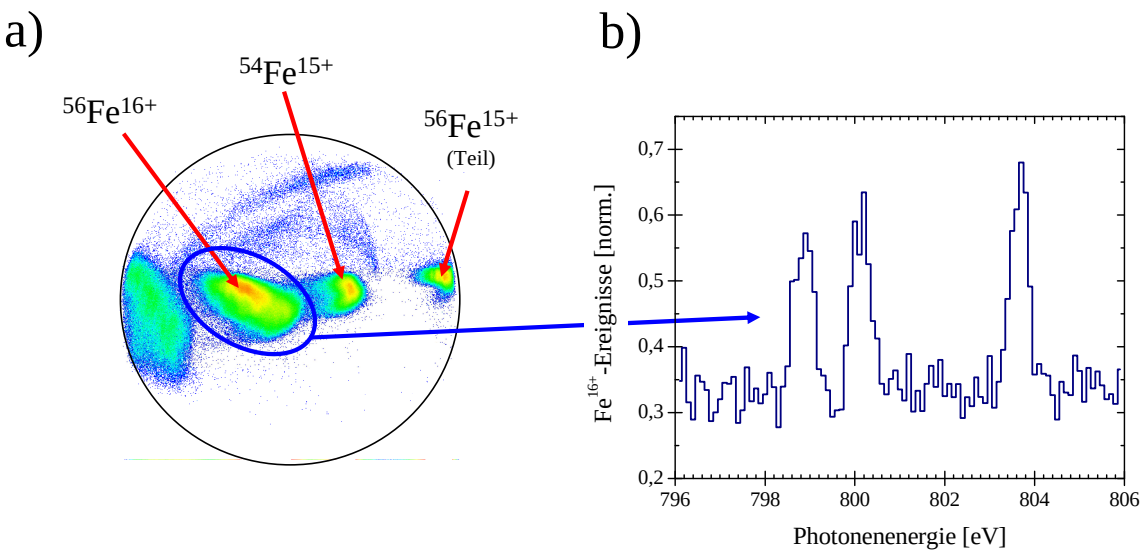

Abbildung 5.4: Prinzip der Datenauswertung: a) auf dem PSD werden die verschiedenen Ionensorten an unterschiedlichen Positionen dargestellt. Mit der koinzident aufgenommenen Photonenenergie kann die Ereignisrate des interessanten Photoions (hier Fe^{16+}) auf die Photonenenergie projiziert werden, was zu einem Resonanzspektrum führt (b).

ren auch Artefakte im Spektrum hervorrufen, welche durch Normierungen behoben werden können.

Effekte durch Austrittsspalt-Öffnung und Schrittweitenwahl

Das vom Monochromator abgelenkte Licht hat am Ort des Experiments eine gewisse spektrale Energieverteilung in der Ebene. Um diese weiter zu verringern, wird vor dem Experiment mit Hilfe eines variablen Spalts der gewünschte Energiebereich herausgeschnitten. Dadurch wird der Photonenfluss jedoch deutlich verringert, was bei sehr kleinen Austrittsspalten und kleinen Wirkungsquerschnitten des zu beobachtenden Effekts zu Problemen führen kann. Bei den hier verwendeten Photonenenergien von 800 eV beträgt die Dispersion etwa 8 meV pro μm Spaltbreite. Die optimale Einstellung hängt von der gewünschten Präzision ab. Zudem muss die Spaltbreite und somit die Bandbreite des Photonenstrahls passend zur Schrittweite gewählt werden. Kleine Schrittweiten von ca. 100 meV bewirken keine Verbesserung der Messung, wenn die Bandbreite des Photonenstrahls 3 eV beträgt. Ebenso ist es bei Scans über weite Bereiche mit großen Schrittweiten sinnvoll, eine größere Spaltöffnung zu wählen, da hier eine kleinere auch keine Verbesserung bringen würde, sondern durch den

verringerten Photonenfluss die Messung deutlich erschweren würde.
In Abbildung 5.5 ist dargestellt, wie sich die Auflösung einer gemessenen Photoionisations-Resonanzlinie in Abhängigkeit der Spaltöffnung verändert. Des Weiteren

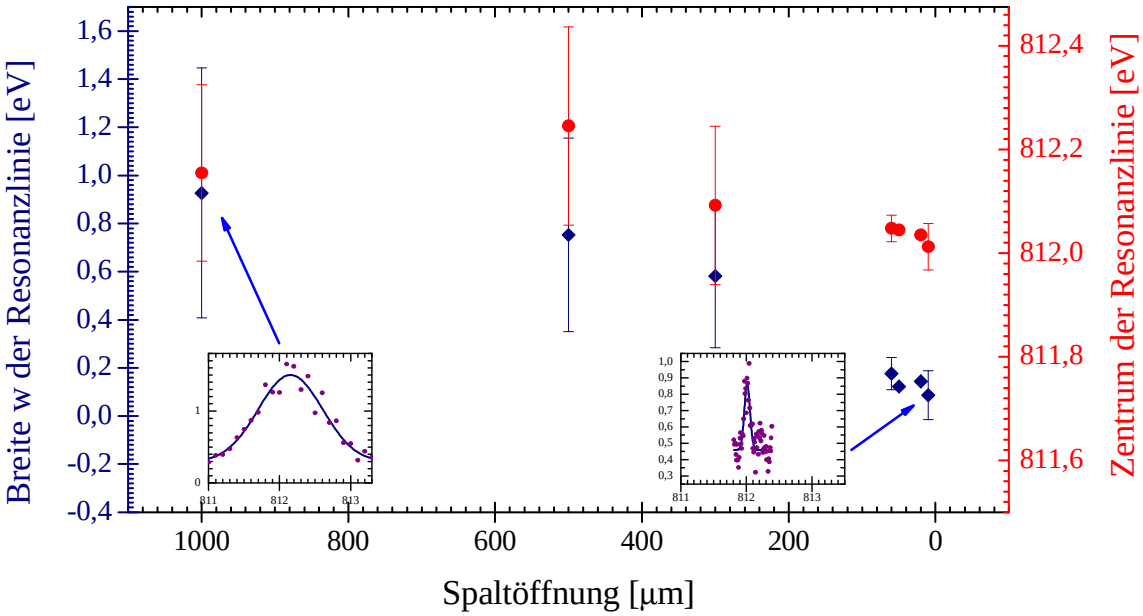

Abbildung 5.5: Effekte auf die gemessene Resonanzlinie durch Variation des Austrittsspalts. Es ist deutlich die Auflösungsverbesserung zu erkennen, jedoch auch eine leichte Verschiebung der Resonanzenergie.

zeigt sie, dass sich die Schwerpunktsenergien der gemessenen Resonanzlinien bei kleinerer Spaltöffnung und somit besserer Auflösung zu leicht niedrigeren Werten verschieben. Dieser Effekt wird auch später in Abbildung 5.10 deutlich und hängt nach den Ausführungen in [52] mit unterschiedlichen Einstell- und Aufnahmezeiten der Photonenenergie zusammen. Da es sich bei den hier präsentierten Daten um vorläufige Kalibrationen handelt, wurden die Energien für diesen Effekt nicht gesondert korrigiert.

Artefakte durch unterschiedliche Energie-Einstellzeiten

Die Photonenenergie wurde wie beschrieben durch gleichzeitige Rotation des Monochromatorgitters und einer Abstandsveränderung der Magnetreihen des Undulators eingestellt. Bei bestimmten Schrittweiten, insbesondere bei sehr kleinen, wird dies nicht immer simultan und gleichförmig für jede Energiestufe durchgeführt. So ist es

möglich, dass zwei Energiestufen alleine durch die Rotation des Monochromatorgitters eingestellt werden können, ohne den Undulator zu bewegen. Dies führt dazu, dass sich die Einstellzeit zwischen zwei Stufen in diesem Fall deutlich verkürzt. Die Datenaufnahme wurde nicht getriggert, sondern es wurde kontinuierlich gemessen. Während des Einstellens der neuen Photonenenergie wurde jedoch die Digitalisierungsspannung nicht verändert, so dass die Messwerte in dieser Zeit weiterhin der vorherigen Photonenenergie zugeordnet wurden. Ist diese Zeit nicht konstant, sind Artefakte wie Einbrüche in der Intensität bei bestimmten Photonenenergien die Folge.
Zudem ist es möglich, dass auf Grund von Instabilitäten der EBIT-Einstellungen oder des Elektronenstrahls, welche viele Ursachen haben können, sich die Produktionsrate von Mutterionen kurzfristig deutlich verringert. Auch dies hat natürlich Einfluss auf die Anzahl der detektierten Photoionen.
Um das gewonnene Spektrum für diese Effekte zu korrigieren, wird das Singal auf eine Referenz normiert. Der Wienfilter wird deshalb so eingestellt, das neben dem Photoion noch mindestens ein weiterer Ladungszustand auf dem PSD gemessen werden kann. Ist der Photonenstrahl im Bereich einer Resonanz, so ändert sich nur die Zählrate des Photoions (Bei sehr starken Resonanzen kann es auch zu einer Abnahme des Mutterions führen). Die beschriebenen systematischen Effekte betreffen jedoch alle Ladungszustände, weshalb diese als Referenz verwendet werden können. So wurde in der Datenauswertung sowohl das Photoion als auch ein anderes, meist (aus praktischen Gründen) ein bestimmtes Isotop des Mutterions, ausgewertet und deren Verhältnis ermittelt. Diese Division korrigiert die systematischen Effekte, wie Abbildung 5.6 am Beispiel einer mit sehr kleinen Schrittweiten aufgenommenen Resonanzlinie zeigt.

5.2.4 Messergebnisse der Photoionisation

Bei der Messkampagne konnten eine Reihe von Resonanzen der Photoionisation von $Fe^{15+} \rightarrow Fe^{16+}$ gefunden werden. Die Resonanzen ergeben sich durch die Anregung eines Elektrons des Mutterions durch das Röntgenphoton von der L- in die M-Schale. Es lassen sich bei den gefundenen Resonanzen drei Gruppen gemäß Abbildung 5.7 unterscheiden: Anregungen von $2p \rightarrow 3s$, $2p \rightarrow 3d$ und $2s \rightarrow 3p$.
Für die Energie-Kalibrierung der hier präsentierten vorläufigen Auswertungen der Daten wurde die direkte Monochromator-Einstellung gewählt. Eine genauere Aus-

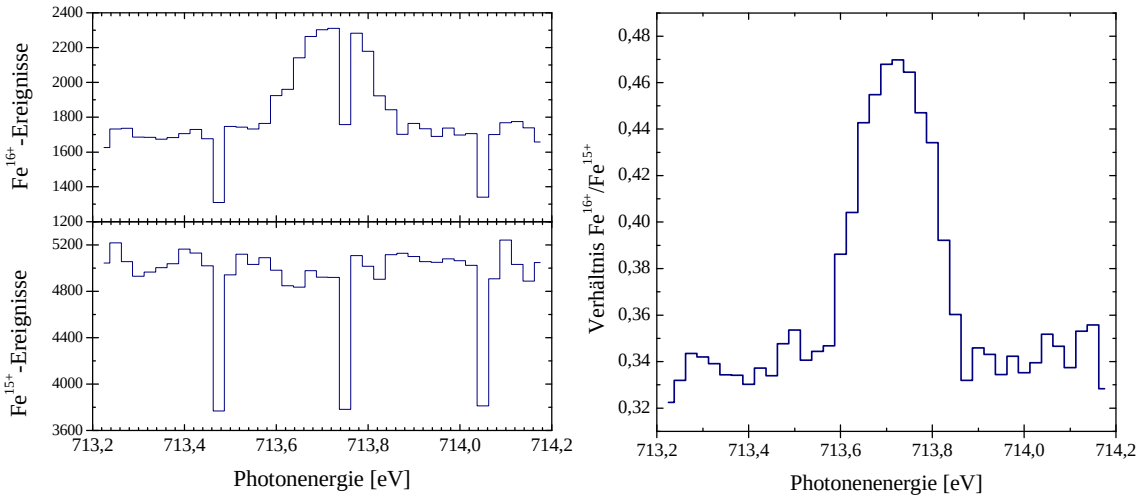

Abbildung 5.6: Korrektur systematischer Effekte am Beispiel unterschiedlicher Einstellzeiten der Energiestufen der Photonenenergie: Nur eine Ionensorte zeigt Resonanzen, beide jedoch die systematischen Effekte. Eine Division der beiden Ereignishäufigkeiten führt zu einem korrigierten Spektrum.

wertung mit Hilfe einer Kalibrierung mit einem Referenzgas folgt in [49]. Zur Identifizierung und Theorie-Vergleich wurden Berechnungen von Ming F. Gu *et al.* [53] herangezogen, welche in allen Darstellungen der Resonanzen eingepflegt sind. Diese zeigen die berechneten Resonanzenergien sowie die Gesamtabsorption der Röntgenphotonen resonanter Energie durch das Mutterion. Weiter enthalten diese Berechnungen Informationen darüber, in welchem Verhältnis der so angeregte Zustand autoionisierend oder radiativ zerfällt.

Für die hier dargestellten Ergebnisse ist allein der autoionisierende Anteil von Interesse. Um einen relativen Resonanzstärkenvergleich durchzuführen, wurden die theoretischen Resonanzstärken in den folgenden Darstellungen auf die jeweils erste deutlich isolierte Resonanz skaliert.

Resonanzspektren

Während der Messkampagne wurden Resonanzspektren der Photoionisation von Fe^{15+} mit unterschiedlichen Auflösungen aufgenommen. Abbildung 5.8 zeigt im oberen Teil ein Übersichtsspektrum über den Energiebereich, auf welchen sich die meisten Untersuchungen konzentrierten. Dieser erstreckt sich von 690 bis 910 eV und enthält somit die Hauptresonanzen der Anregungen von 2p $\rightarrow$ 3s, 2p $\rightarrow$ 3d und

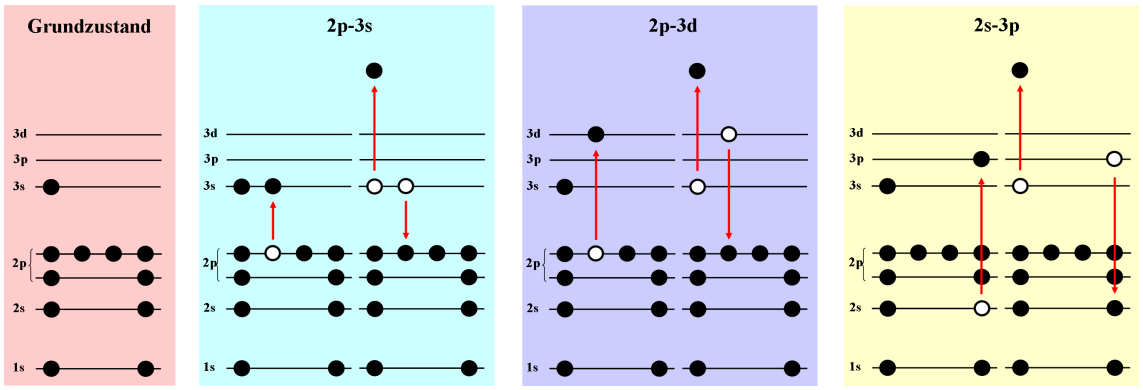

Abbildung 5.7: Schematische Darstellung des Grundzustands und der durch Photoabsorption angeregten Zustände von Fe^{15+} sowie deren autoionisierende Zerfälle, welche in den Experimenten beobachtet wurden. Die Schemata sind nach steigenden Anregungsenergien sortiert.

2s $\rightarrow$ 3p. Wie in dieser Abbildung gut zu sehen ist, treten diese Resonanzen als isolierte Gruppen auf, was die Anregungen aus oder in verschiedene Unterschalen verdeutlicht.

Bedingt durch die große Schrittweite (1 eV) und einem entsprechend groß gewählten Austrittsspalt (1000 μm, der aber durch die endliche räumliche Ausdehnung der Ionenwolke in Dispersionrichtung von etwas über 300 Mikrometer nicht voll zum Tragen kommt), der zu einer Bandbreite des Photonenstrahls von ca. 3 eV führt, ist das Übersichtsspektrum nicht besonders gut aufgelöst, zeigt dafür aber recht gut die erwarteten Resonanzstärkenverhältnisse, auch zwischen den Resonanzgruppen.

Des Weiteren sind in Abbildung 5.8 die Resonanzgruppen der *2p-3s*-Resonanzen (links unten) sowie der *2p-3d*-Resonanzen (rechts unten) mit höherer Auflösung, bedingt durch einen engeren Austrittsspalt in Kombination mit einer kleineren Schrittweite des Photonenenergie-Scans, dargestellt. Alle Hauptresonanzen (mit Ausnahme des $[2s_{1/2}3s_{1/2}3p_{3/2}]_{1/2,3/2}$-Dubletts, welches nicht gesondert als Detailscan untersucht wurde) in diesem Bereich sind gut aufgelöst und zeigen gute Übereinstimmungen mit der MBPT-Theorie von M. F. Gu et al. [53].

In Abbildung 5.9 sind die *2p-3s*-Resonanzen gesondert dargestellt. Neben der vergleichsweise großen Anzahl von Resonanzen ist hier zu bemerken, dass eine starke Absorptionsresonanz (bei 815,2 eV, mit **g** bezeichnet) vollständig radiativ zerfällt und daher keine Photoionisationsresonanz zeigt. Da neben der Photoionisation auch zeitgleich die resonante Streuung untersucht wurde, konnte diese Resonanz im Pho-

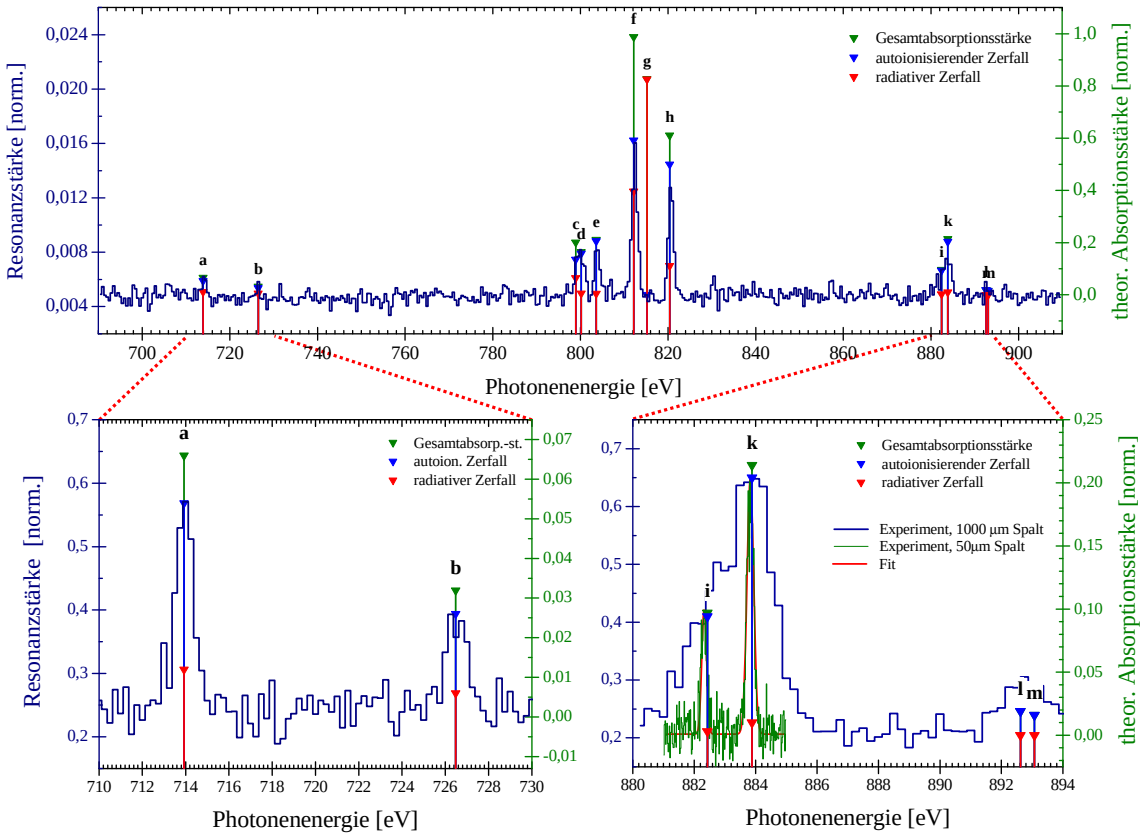

Abbildung 5.8: Übersichtsspektrum der resonanten Photoionisation von Fe^{15+} zu Fe^{16+} mit theoretischen Resonanzstärken nach Gu et al. [53]. Oben: Übersichtsspektrum von 690 bis 910 eV. Unten links: Detailaufnahmen der 2p-3s-Resonanzen. Unten rechts: Detailaufnahmen der 2p-3d-Resonanzen.

tonenspektrum bei erwarteter Energie nachgewiesen werden, was in [49] weiter ausgeführt wird.

Beitrag der Messung zur Entscheidung zwischen konkurrierenden theoretischen Berechnungen

Neben der hier zum Vergleich herangezogenen *multi body perturbation theory* (MBPT) [53] beschäftigen sich diverse andere theoretische Berechnungsmodelle mit angeregten Zuständen hochgeladener Ionen, welche etwa durch Absorption von Photonen erzeugt werden können, und deren diversen Zerfallskanälen. Eine weitere prominente Methode ist das von E. Behar und anderen angewandte HULLAC-Verfahren [54]. In der genannten Referenz liegen explizite Energiewerte für die 2p-3s-Resonanzen

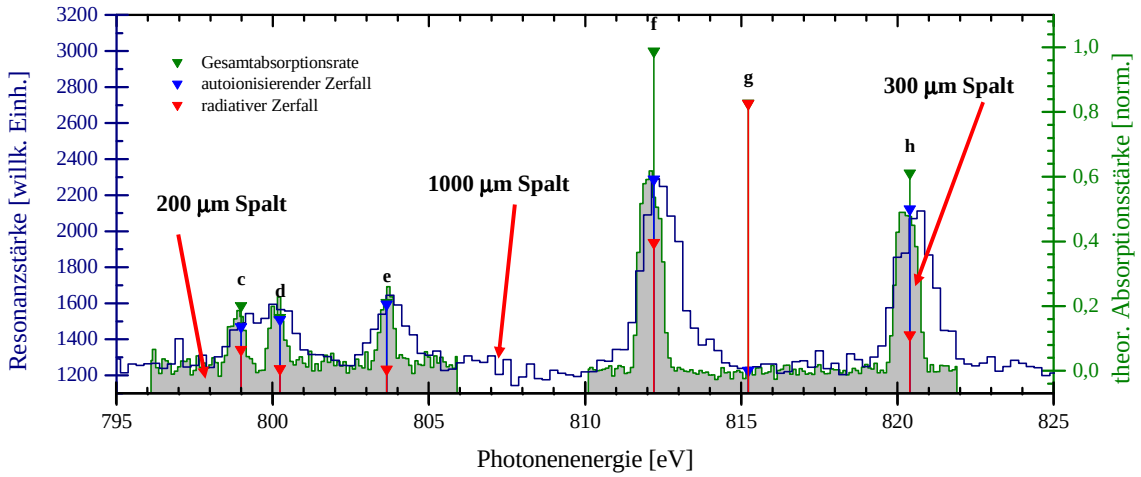

Abbildung 5.9: *2p-3d*-Resonanzen der Photoionisation von Fe^{15+}.

in Fe^{15+} vor, mit denen die gemessenen Werte im Folgenden verglichen werden. Berechnungen der Photoionisation und Resonanzstreuung von Fe^{15+} nach dem *multi-configuration Dirac Fock*-Verfahren (MCDF) werden derzeit von Z. Harman und anderen [55] ausgeführt und ein Vergleich von deren Ergebnissen mit den hier vorgestellten Messungen wird in [49] erfolgen.

Abbildung 5.10 zeigt eine Übersicht über die beiden 2p-3s-Resonanzen (a), sowie mehrere Detailaufnahmen mit verschiedenen Einstellungen bezüglich Austrittsspalt und Schrittweite für die $[2p^3_{3/2}]_{3/2}$-Resonanz (b). Im Vergleich zu den beiden vorliegenden theoretischen Energiewerten nach MBPT (blaube Dreiecke, Bezeichnung durch Kleinbuchstaben) und HULLAC (rote Karos, Bezeichnung durch Zahlen) ist deutlich zu erkennen, dass die Werte nach HULLAC in beiden Fällen um rund 1 eV zu niedig berechnet wurden, die Berechnungen nach MBPT hingegen innerhalb der Ungenauigkeit der gemessenen Werte liegt. Zudem werden auch bei den restlichen Spektren die Werte nach MBPT sehr genau experimentell bestätigt. So lässt sich bereits bei dieser vorläufigen Auswertung und Darstellung der Messergebnisse für die Photoionisation von Fe^{15+} eine eindeutige Entscheidung zwischen den beiden verglichenen Theorien zugunsten von MBPT treffen.

Diskussion und Ausblick

In Tabelle 5.3 sind die bei der Auswertung der Photoionisations-Resonanzen von Fe^{15+} erhaltenen Daten zusammengestellt und die Abweichungen zu den beiden

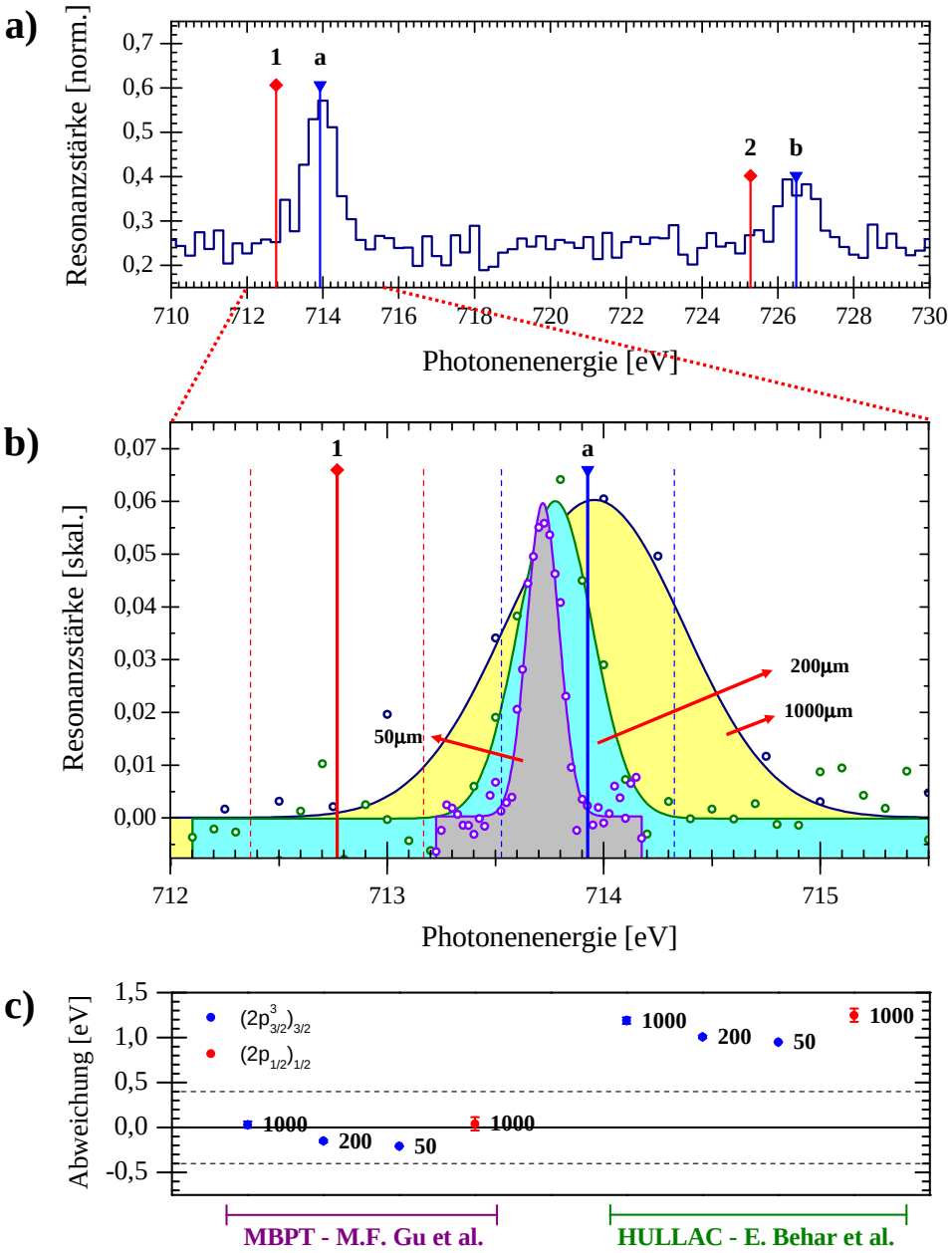

Abbildung 5.10: Vergleich der *2p-3s*-Resonanzen mit Energieberechnungen nach MBPT [53] (blaues Dreieck) und HULLAC [54] (rotes Karo). a) Übersicht der beiden *2p-3s*-Resonanzen. b) Detailaufnahmen der $[2p^3_{3/2}]_{3/2}$-Resonanz mit verschiedenen Austrittsspalt-Öffnungen. Die farbig unterlegten Kurven sind an die Messdaten angepasste Gauss-Verteilungen. Die gestrichelten Linien geben die Unsicherheiten der Lage der theoretischen Werte aufgrund der bei dieser Auswertung nicht erfolgten Energiekalibration an. c) Abweichungen der angepassten Resonanzenergien beider *2p-3s*-Resonanzen zu den beiden Theorien. Es sind ebenfalls die Austrittsspalt-Öffnungen in μm angegeben.

verglichenen theoretischen Berechnungen nach MBPT [53] und HULLAC [54] angegeben.
Wie in dem Vergleich mit den theoretischen Berechnungen zu sehen ist, können die Energie-Werte sowie in der graphischen Darstellung die relativen Resonanzstärken, wie sie von Gu et al. [53] berechnet wurden, sehr gut bestätigt werden. Es wird zudem deutlich, dass zwischen den beiden theoretischen Methoden unterschieden werden kann. Bei einer späteren vollständigen Analyse der Daten in [49], soll insbesondere eine genauere Kalibration der Photonenenergie und eine Bestimmung des absoluten Wirkungsquerschnitts einer der 2p-3d-Resonanzen erfolgen. Zudem wird die bei der Kampagne durchgeführte Messung des radiativen Zefallskanals ebenfalls analysiert werden.
Daten dieser Art fehlten bisher in der experimentellen Atomphysik. Die Arbeit von Martin Simon zur Photoionisaton von Fe^{14+} [9], auf der die hier durchgeführten Photoionisationsexperimente aufbauen, brachte die erste experimentelle Bestätigung der Genauigkeit von MBPT-Vorhersagen bei der atomphysikalischen Berechnung der Interaktion von Röntgenphotonen mit hochgeladenen Ionen in diesem Energiebereich. Dabei werden etliche, zum Teil noch häufig eingesetzte Vorhersagen, signifikant verneint. Gerade Eisenionen sind astrophysikalisch sehr interessant, da diese in den Spektren aktiver Galaxiekerne dominant sind. Hier gibt es Röntgenabsorptionsspektren, aufgenommen von Satelliten-Detektoren *Chandra* und XMM-Newton (s. Abb. 1.1), aus deren Analyse Aussagen über die Austrittsgeschwindigkeit der Ionen aus den aktiven Galaxiekernen möglich sind. *Chandra* zeigt Röntgenabsorptionen mit Anregung der L-Schale von Eisen, welche als breite, nicht aufgelöste Strukturen erscheinen. Hier sind sehr genaue Rechnungen der Anregungsenergie sowie der Absorptionsquerschnitte notwendig, um diese Spektren interpretieren und auf die gewünschten Aussagen über Geschwindigkeiten zu kommen. Die Ergebnisse der Photoionisation von Fe^{14+} in [9] und der hier vorgestellten Photoionisation von Fe^{15+} haben im Wesentlichen die richtige Theorie identifiziert und zu der Interpretation solcher Absorptionsspektren beitragen.
Viele weitere astrophysikalische Beobachtungen bedürfen experimenteller Unterstützung. So gibt es eine aktuelle Diskussion über den Verbleib eines großen Anteils baryonischer Materie des Kosmos, welche Berechnungen zufolge vorhanden sein muss, jedoch bisher nicht eindeutig entdeckt wurde. Diese soll sich in riesigen Strukturen geringer Dichte zwischen Galaxien, dem sog. *warm hot intergalactic medium*, befinden, welche schwer zu detektieren ist. Die Interpretation der bisherigen Beob-

Tabelle 5.3: Zusammenstellung der gemessenen Photoionisations-Resonanzen in Fe^{15+}. Bei den gemessenen Resonanzenergien gibt der erste Fehler die statistische Unsicherheit an, der zweite ist eine Abschätzung der Kalibrationsgenauigkeit, basierend auf vorherigen Messungen [47]. GES, RAD und AI geben die theoretischen Resonanzstärken für den gesamten Prozess (GES), die resonante Streuung (RAD) und die resonante Photoionisation (AI) an. Die blauen Werte bei den Resonanzen a und b geben mit HULLAC berechnete Resonanzenergien, sowie deren Abweichung vom gemessenen Wert an. Die grüne Zeile vergleicht den gemessenen Wert der nicht aufgelösten Resonanzen l und m mit einem mit den autoionisierenden Resonanzstärken der beiden Resonanzen gewichteten Mittelwert der theoretischen Berechnungen.

Resonanz	Übergang	Zwischenzustand	E_{theo} [eV]	GES	RAD	AI	E_{exp} [eV]	ΔE [eV]	Spalt μm	Schritt [eV]
a	2p-3s	$[2p_{3/2}3]_{3/2}$	713,926	0,066	0,012	0,054	713,718(4)(400)	-0,208(40)(400)	50	0,025
1			712,768					0,950(4)(400)		
b	2p-3s	$[2p_{1/2}]_{1/2}$	726,484	0,032	0,006	0,026	726,525(7)(100)	-0,041(7)(400)	1000	0,25
2			725,276					1,25(1,4)(400)		
c	2p-3d	$[2p_{3/2}^3 3s_{1/2}3d_{5/2}]_{3/2}$	798,979	0,201	0,065	0,136	798,863(20)(500)	0,116(20)(500)	200	0,1
d	2p-3d	$[2p_{3/2}^3 3s_{1/2}3d_{5/2}]_{1/2}$	800,227	0,164	0,006	0,158	800,141(18)(500)	0,086(18)(500)	200	0,1
e	2p-3d	$[2p_{1/2}3s_{1/2}3d_{5/2}]_{3/2}$	803,645	0,211	0,005	0,206	803,664(14)(500)	-0,019(14)(500)	200	0,1
f	2p-3d	$[2p_{1/2}3s_{1/2}3d_{5/2}]_{3/2}$	812,200	0,988	0,396	0,592	812,092(13)(500)	0,108(13)(500)	300	0,1
g	2p-3d	$[2p_{1/2}3s_{1/2}3d_{3/2}]_{1/2}$	815,223	0,827	0,826	0,001	–	–	300	
h	2p-3d	$[2p_{1/2}3s_{1/2}3d_{3/2}]_{3/2}$	820,396	0,611	0,111	0,500	820,297(12)(500)	0,099(12)(500)	300	0,1
i	2s-3p	$[2s_{1/2}3s_{1/2}3p_{1/2}]_{1/2}$	882,436	0,097	0,003	0,094	882,311(8)(600)	0,125(8)(600)	50	0,02
k	2s-3p	$[2s_{1/2}3s_{1/2}3p_{3/2}]_{3/2}$	883,883	0,214	0,010	0,204	883,825(5)(600)	0,058(5)(600)	50	0,02
l	2s-3p	$[2s_{1/2}3s_{1/2}3p_{3/2}]_{1/2}$	892,62	0,019	0,000	0,019	–	–	–	–
m	2s-3p	$[2s_{1/2}3s_{1/2}3p_{3/2}]_{3/2}$	893,076	0,016	0,000	0,016	–	–	–	–
l, m	2s-3p	$[2s_{1/2}3s_{1/2}3p_{3/2}]_{1/2,3/2}$	892,828				892,831(62)(600)	0,245(62)(600)	1000	0,25

achtungen ist stark abhängig von genauen Kenntnissen über Energien und Resonanzstärken, und so erfahren Messungen zur Photoabsorption wie die hier vorgestellten eine weitere Bedeutung in der Astrophysik.

5.3 Dielektronische Rekombination von hochgeladenem Eisen

Die dielektronische Rekombination ist der Umkehrprozess zur resonanten Photoionisation. Da für diesen Prozess Elektronen als Projektile benötigt werden, bietet sich die Untersuchung in einer EBIT mit derem Elektronenstrahl geradezu an. Elektronenstrahlen können im Gegensatz zu Photonenstrahlen auch mit Energien im hohen keV-Bereich problemlos erzeugt werden, weshalb es möglich ist, auch höhere Ladungszustände zu untersuchen. So wurde in dieser Arbeit die Rekombination von helium- (Fe^{24+}) bis beryllium- (Fe^{21+}) artigem Eisen untersucht, deren Resonanzenergien in einem Bereich von 4500 – 5000 eV liegen. Durch die hohen Elektronenstrahlenergien lassen sich auch hohe Extraktionspannungen erreichen, die es ermöglichen, die Eigenschaften der Extraktion bei Ionenenergien von 3400 V/q zu bestimmen.

5.3.1 Messprinzip

Der Elektronenstrahl der EBIT erzeugt einerseits durch Stoßionisation die hochgeladenen Eisenionen, andererseits können die Ionen auch mit den Elektronen des Strahls rekombinieren. Zur Untersuchung der dielektronischen Rekombination wird nun die Energie des Elektronenstrahls variiert. Da die Resonanzenergien der untersuchten KLL-Resonanzen deutlich über der Bindungsenergie der Elektronen in der L-Schale liegt, werden hierbei Ionen bis zum heliumartigen Ladungszustand erzeugt. Befindet sich die Energie des Elektronenstrahls im Bereich einer Resonanz, so verringert sich die Anzahl der Ionen des entsprechenden Ladungszustands und die Anzahl im um eins niedrigeren Ladungszustand steigt. Zum Nachweis dieser Änderung der Ladungszustandsverteilung werden die Ionen aus der Falle extrahiert und im Wienfilter nach Ladungszuständen separiert und anschließend auf dem PSD detektiert. Zusätzlich zu den Ionen werden die bei der dielektronischen Rekombination ausgesandten Photonen mit einem Germaniumdetektor gemessen.

Steuerung des Elekronenstrahls

Zur Variation der Elektronenstrahlenergie (Gl. 3.9) wird das Potential der Kathode verändert. Da sich mit der Energie des Elektronenstrahls nach Gleichung 3.8 auch

die durch den Strahl verursachte Raumladung ändert, muss, um das Extraktionspotential für die Ionen konstant zu halten, gleichzeitig der Strahlstrom verändert werden. Zu diesem Zweck wurde ein *LabView*-Programm entwickelt, welches neben der Variation der Kathodenspannung auch den Strahlstrom so steuert, dass

$$\frac{I}{\sqrt{U_{Falle} + U_{cath}}} \propto \Phi_e \tag{5.4}$$

konstant bleibt. Das Programm liest dazu den aktuellen Wert des Stahlstromes ein, vergleicht ihn mit dem Sollwert und passt dementsprechend die Steuerspannung für das Netzgerät der Fokusspannung der Kanone an. Die Kathodenspannung wird dabei gleichförmig von ihrem Start- auf ihren Maximalwert erhöht. In den bisherigen Experimenten wurden weder die Änderung der Raumladung durch das Verfahren der Strahlenergie beachtet, noch der Strahlstrom aktiv geregelt. Nach einigen vorhergehenden Tests zur Stabilisierung des Strahlstroms [56] ist das für diese Messung entwickelte Programm eine Neuerung und potentiell wichtige Verbesserung auch für andere Experimente. Da die Stromregelung bei starken Änderungen der Kathodenspannung übersteuert, wurde die Kathodenspannung anschließend in der gleichen Geschwindigkeit wieder auf den Anfangswert gesenkt. Um Auswirkungen der Scanrichtung auf die gemessenen Resonanzenergien feststellen zu können, wird für beide Rampen eine unterschiedliche Digitalisierungsspannung an das Datenaufnahmesystem ausgegeben. Um die Zeitpunkte der Dumps (siehe nächsten Abschnitt) gleichmäßig auf die Elektronenstrahlenergien zu verteilen, wird vor jeder steigenden Rampe eine zufällige Zeitspanne gewartet, so dass sich über eine große Anzahl von Durchläufen eine Gleichverteilung ergibt.

Dumps

Durch das Aufheizen der Kathode gelangen auch Barium- und Wolframatome in das Fallenvolumen. Werden sie dort ionisiert, so bleiben sie in der Falle gefangen. Aufgrund ihrer im Vergleich zu Eisen viel größeren Massenzahl verdrängen sie dieses aus der Falle, so dass insbesondere die Erzeugung von hochgeladenen Eisen-Ionen stark unterdrückt wird. Deshalb muss die Falle regelmäßig geleert werden. Aufgrund des höheren Injektionsdrucks der Eisenatome sammeln sich diese viel schneller wieder in der Falle als die Barium- und Wolframatome. Zum Leeren der Falle wird das Potential an der Fallenelektrode kurzeitig stark erhöht, wodurch die Ionen nicht mehr

axial gefangen sind und aus der Falle entweichen, dieser Vorgang wird als „Dump“ bezeichnet.
Um bei dieser Messung Resonanzen feststellen zu können, musste die Zeit zwischen zwei Dumps mit 15 s sehr kurz gewählt werden, wodurch die Ladungsverteilung der Ionen in der Falle nicht mehr als statisch angenommen werden kann. Deshalb wurde das *LabView*-Programm zur Steuerung der Driftröhrenspannungen so modifiziert, das es zusätzlich eine Digitalisierungsspannung ausgibt, welche die seit dem letzten Dump vergangene Zeit angibt.

Messung der PSD-Pulshöhen

Die spezifische Ladungen q/m sind im Fall von helium- und borartigem Eisen identisch mit auch in der Falle vorhandenen Stickstoff- und Sauerstoffionen

$$\left(\frac{q}{m}\right)_{\mathrm{Fe}^{24+}} = \frac{24}{56} = \frac{6}{14} = \left(\frac{q}{m}\right)_{\mathrm{N}^{6+}} \tag{5.5}$$

$$\left(\frac{q}{m}\right)_{\mathrm{Fe}^{21+}} = \frac{21}{56} = \frac{6}{16} = \left(\frac{q}{m}\right)_{\mathrm{O}^{6+}} \quad , \tag{5.6}$$

sie können somit durch den Wienfilter nicht von diesen getrennt werden. Um diese Ionen dennoch detektieren zu können, wurde zu jedem vom PSD gemessenem Ereignis zusätzlich zu der Ortsinformation auch die Höhe der Pulse vom Datenaufnahmesystem digitalisiert. Aufgrund der höheren kinetischen Energie der Eisenionen erzeugen diese einen höheren Puls als die leichten Untergrundionen. Durch diese zusätzliche Information war es möglich, die MCP-Spannung des PSDs auf 2425 V anzuheben, um die Zählrate zu erhöhen. Zwar steigt dadurch auch die Anzahl der detektierten Hintergrundionen, diese können jedoch in der Datenauswertung aufgrund ihrer geringeren Pulshöhen unterdrückt werden. Abbildung 5.11 zeigt die Auswirkungen der Pulshöhenanalyse, die Zählrate der nicht zu Eisen gehörenden Spots auf dem PSD wird deutlich reduziert.

5.3.2 Datenauswertung und systematische Effekte

Zur Datenauswertung wurde das bei der Messung vom Datenaufnahmesystem erzeugte Listfile verwendet. Mit der Bibliothek *lualst2* [57] wurden die Messdaten aus dem Listfile extrahiert und für die weitere Verarbeitung in ein einfaches Binärformat umgewandelt, wobei die Messdaten von PSD und Germanium-Detektor

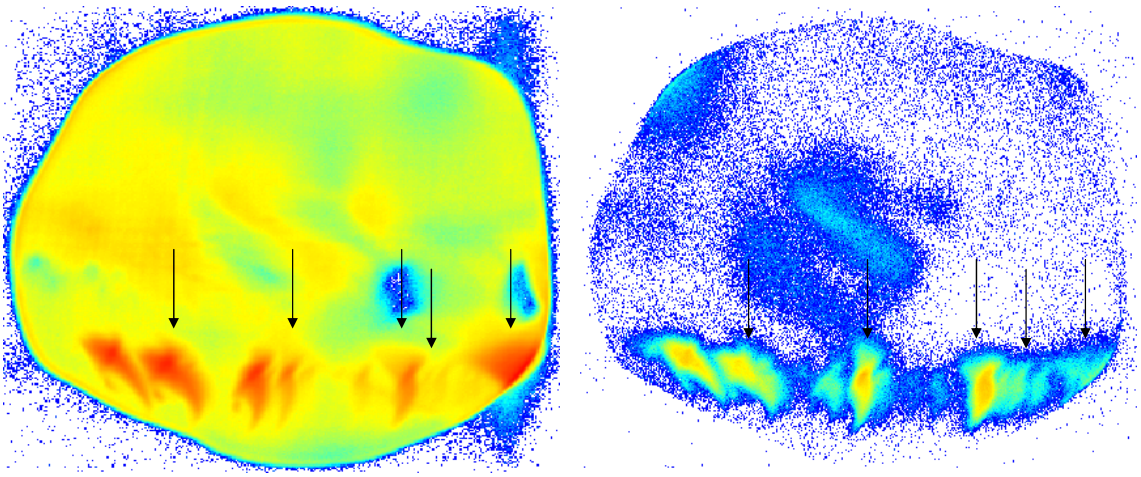

Abbildung 5.11: Auswirkungen der Pulshöhenanalyse. Links: PSD-Bild ohne Pulshöhenanalyse. Rechts: PSD-Bild eingeschränkt auf Ereignisse mit hohen Pulsen. Die Pfeile markieren von links nach rechts die Positionen von Fe^{24+}, Fe^{23+}, Fe^{22+}, ${}_{54}Fe^{21+}$, Fe^{21+}.

getrennt wurden. Um den Untergrund zu reduzieren, wurden nur noch die PSD-Ereignisse mit hohen Pulsen betrachtet. Das Bild des PSD wurde in verschiedene Bereiche aufgeteilt, die jeweils einer Ionensorte entsprechen (siehe Abb. 5.12). Zur Bestimmung der Resonanzen wurde die Anzahl der Ereignisse in diesen Bereichen in Abhängigkeit der Energie des Elektronenstrahls dargestellt.

Einfluss des Dumps

Wie in Abschnitt 5.3.1 beschrieben, kann aufgrund der kurzen Zeitspanne zwischen zwei Dumps nicht mehr von einer zeitlich konstanten Ladungsverteilung in der Falle ausgegangen werden. Um diese Zeitabhängigkeit zu reduzieren, werden nur Ereignisse berücksichtigt, die in einer bestimmten Zeitspanne nach dem Dump auftreten. Diese Zeitspannen werden so gewählt, dass in ihnen eine möglichst hohe Zahl an Ionen gemessen wird. Da der Zeitpunkt der maximalen Produktion für die verschiedenen Ladungszustände unterschiedlich ist, wurden diese Zeitspannen jeweils getrennt für die verschiedenen Ionensorten bestimmt. Dazu wurde die Zahl der Ereignisse in Abhängigkeit von der Zeit nach dem Dump sowie von der Pulshöhe betrachtet, wie in Abbildung 5.13 dargestellt. Die Anzahl der Ionen steigt nach dem Dump schnell an, danach fällt sie langsam ab, da das Eisen von schwereren Ionen verdrängt wird. Für die weitere Auswertung wurde nur der Bereich verwendet, in dem die Ionenproduktion hoch ist. Die Pulshöhe ist hierbei nahezu symmetrisch um einen Mittelwert

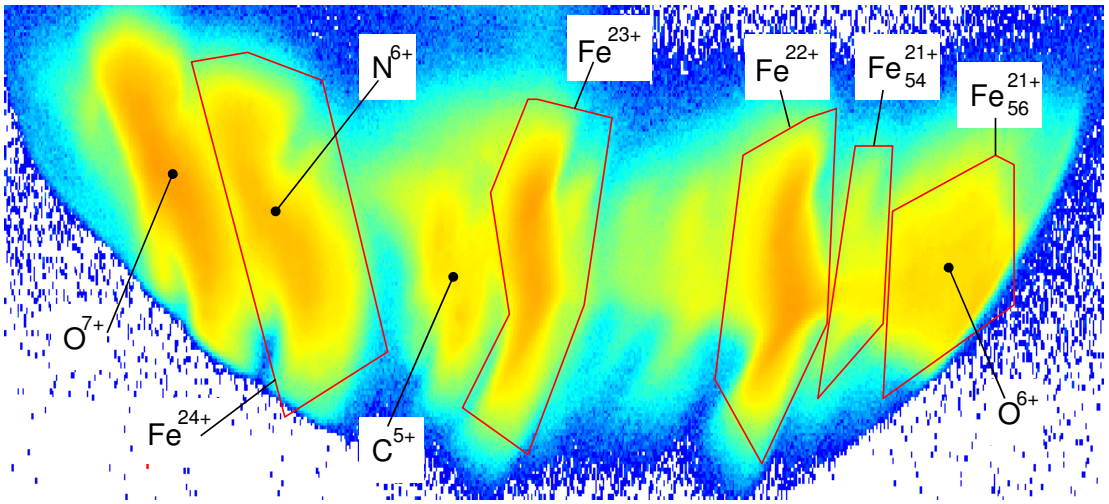

Abbildung 5.12: Auschnitt des PSD-Bildes der DR-Messung mit den identifizierten Ionen. Dargestellt sind zudem die Bereiche, die einer Ionensorte zur Auswertung zugeordnet wurden. Von borartigem Eisen konnten zwei Isotope identifiziert werden. Die Spots von Fe^{24+} und Fe^{21+}_{56} überlagern sich mit denen von N^{6+} beziehungsweise O^{6+}.

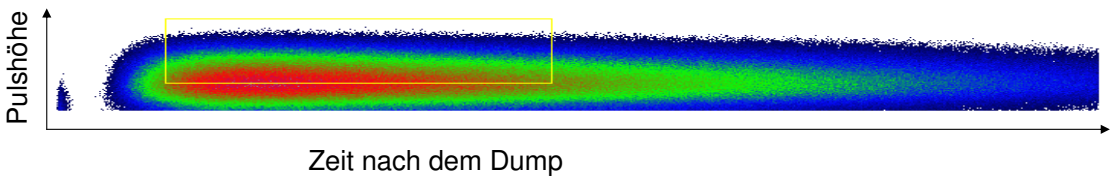

Abbildung 5.13: Histogramm der Anzahl der gemessenen Ionen in Abhängigkeit von der Zeit nach dem Dump und der Pulshöhe, beispielhaft dargestellt für das Fe^{23+}-Ion. Der gelbe Rahmen umgrenzt den Bereich, der zur weiteren Auswertung verwendet wurde.

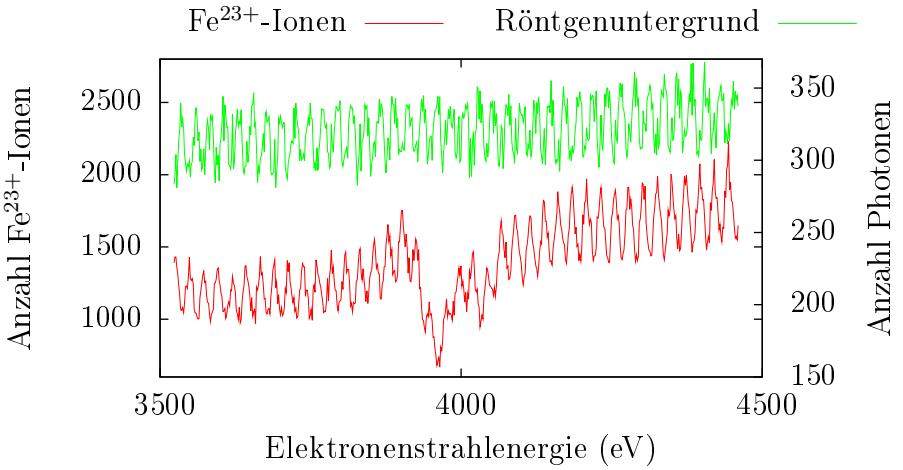

Abbildung 5.14: Elektronenstrahlenergieabhängige Schwankungen, die sowohl bei den Ionen, als auch im Röntgensignal auftraten.

verteilt. Um Störungen durch leichtere Ionen zu unterdrücken, wurden nur Ereignisse mit einer Pulshöhe über diesem Mittelwert verwendet. Durch dieses Verfahren ist es möglich, den Anteil der ungewünschten Ionen soweit zu unterdrücken, dass auch für die helium- und borartigen Ladungszustände noch Resonanzen messbar sind, obwohl diese auf dem positionsempfindlichen Detektor von anderen Ionen überlagert werden.

Einfluss des Elektronenstrahls

Bei der Auswertung der Daten fielen periodische, von der Energie des Elektronenstrahls abhängige Schwankungen auf. Da diese Schwankungen auch bei Untergrund-Röntgenphotonen auftraten (s. Abb. 5.14), handelt es sich hierbei vermutlich um Schwankungen der Elektronendichte in der Falle. Die Theorie des Elektronenstrahls von Herrmann [44] beschreibt Schwankungen des Strahlradius mit der Zyklotronwellenlänge

$$\lambda_c = \frac{2\pi v}{\omega_c} \quad , \quad \omega_c = \frac{eB}{m_e} \quad . \tag{5.7}$$

Durch die Änderung der Elektronenstrahlenergie ändert sich auch deren Geschwindigkeit v und somit λ_c. Deshalb sind je nach Strahlenergie unterschiedlich viele Wellenbäuche in der Falle, so dass die mittlere Dichte der Elektronen schwankt. Eine erste grobe Rechnung hierzu ergab eine Anzahl von 30 Schwankungen beim Durch-

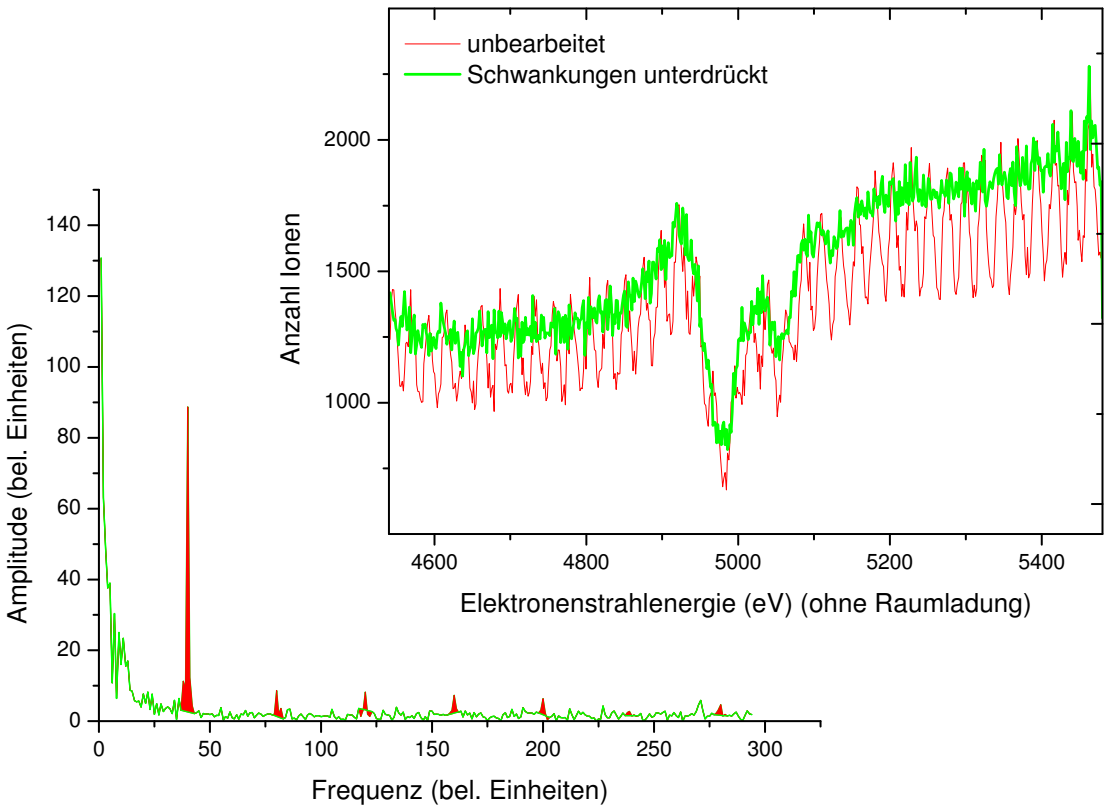

Abbildung 5.15: Unterdrückung der Schwankungen durch Fourierfilterung. Unten links: Frequenzspektrum des Spektrums von Fe^{23+}, die rot dargestellten Spitzen gehören zu den Schwankungen und wurden unterdrückt. Oben rechts: Vergleich von unbearbeitetem und gefiltertem Spektrum

fahren der Elektronenstrahlenergie, was in etwa mit den beobachteten 40 Schwankungen übereinstimmt.
Um diese Schwankungen aus den Daten zu entfernen, wurden die Spektren fouriertransformiert, die den Schwankungen entsprechenden Frequenzen sowie deren Harmonische unterdrückt und anschließend wieder zurücktransformiert (siehe Abbildung 5.15).

5.3.3 Ergebnisse

Beobachtung der ausgesandten Photonen

Mit dem Germaniumdetektor wurden die während der Messung von der Falle ausgestrahlten Photonen detektiert. Abbildung 5.16 zeigt das Röntgenspektrum in Abhängigkeit von der Elektronenstrahlenergie. Durch das rote Rechteck wird der Ener-

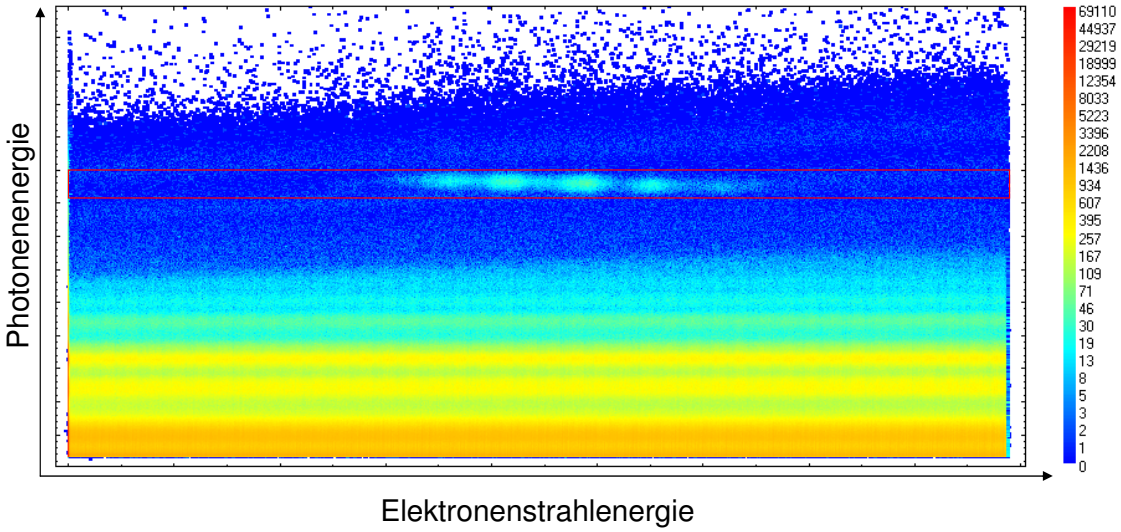

Abbildung 5.16: Spektrum der Photonenenergie in Abhängigkeit der Elektronenstrahlenergie. Das rote Rechteck umgrenzt den Photonenenergiebereich, in dem Photonen aus KLL-Resonanzen beobachtet werden.

giebereich markiert, in dem die bei der dielektronischen Rekombination ausgesandten Photonen liegen. Da diese Photonen bei dem Übergang eines Elektrons von der L- in die K-Schale emittiert werden, ist ihre Energie unabhängig vom Ladungszustand der Ionen (da alle noch ein Elektron in der K-Schale haben). Liegt die Energie des Elektronenstrahls im Bereich einer Resonanz, so kommt es in diesem Bereich zu verstärkter Emmision von Röntgenstrahlung. Man erkennt deutlich mehrere Resonanzen, die helium-, lithium-, berylium-, bor- und kohlenstoffartigen Eisenionen zugeordnet werden können.

Zur weiteren Auswertung wird dieser Bereich auf die x-Achse (Elektronenstrahlenergie) projiziert, so dass man die Anzahl der gemessenen DR-Photonen in Abhängigkeit der Energie erhählt. Zur Bestimmung der Resonanzenergien wurde ein quadratischer Untergrund abgezogen und eine Summe von Gaussverteilungen gleicher Breite an das resultierende Spektrum angepasst (s. Abb. 5.17). Hierbei ergaben sich 15 Peaks mit einer Halbwertsbreite von 27.2(3) eV.

Zur Kalibration der Elektronenstrahlenergie wurden die Resonanzen 2 und 14 an theoretische, durch MCDF-Rechnungen [55] erhaltene, Werte angepasst. Die ermittelten Resonanzenergien sind in Tabelle 5.4 angegeben, aufgrund der begrenzten Auflösung ist eine eindeutige Zuordnung der Resonanzen zu einem Übergang nicht immer möglich.

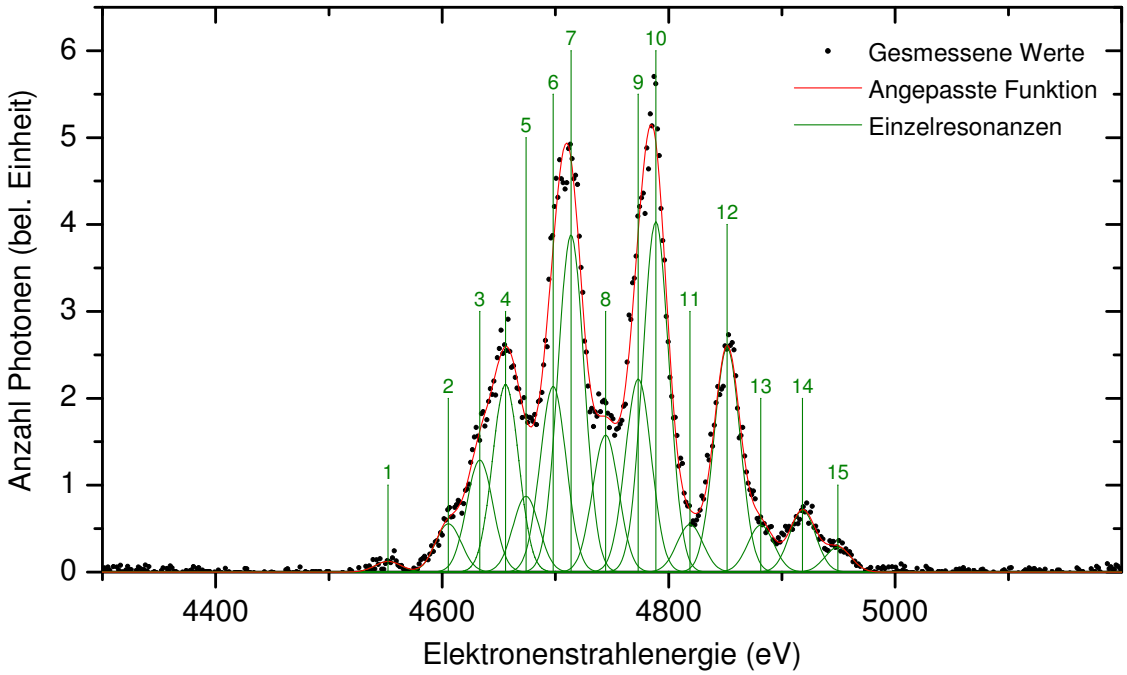

Abbildung 5.17: Röntgenspektrum der dielektronischen Rekombination von hochgeladenen Eisenionen. Dargestellt sind die gemessenen Werte sowie die angepassten Funktionen. Die senkrechten Linien markieren die Resonanzenergien der angepassten Kurven.

Tabelle 5.4: Ergebnisse der röntgenspektroskopischen Untersuchung. Angegeben sind die experimentell bestimmten Resonanzenergien für helium- bis kohlenstoffartiges Eisen. Durch Vergleich mit theoretischen MCDF-Rechnungen wurden den Resonanzen einzelne Übergänge zugeordnet, was aufgrund der begrenzten Auflösung nicht immer eindeutig möglich war. In diesen Fällen sind mehrere Zwischenzustände angegeben. Bei den mit * markierten Resonanzen handelt es sich um trielektronische Rekombination.

Nr	Ladungs-zustand	Zwischenzustand	Resonanzenergie in eV		Differenz
			experimentell	theoretisch	in eV
1	He-artig	$[1s(2s^2)_0]_{1/2}$	4552,2(16)	4553,7	−1,5(16)
2	He-artig	$[(1s2s)_0 2p_{1/2}]_{1/2}$	4605,4	4605,4	—
3	He-artig	$[(1s2s)_1 2p_{3/2}]_{1/2}$	4633,2(14)	4631,2	2,0(14)
	He-artig	$[(1s2p_{1/2})_1 2p_{3/2}]_{5/2}$	4633,2(14)	4638,8	−5,6(14)

Fortsetzung auf nächster Seite

Fortsetzung von Tabelle 5.4

Nr	Ladungs-zustand	Zwischenzustand	Resonanzenergie in eV experimentell	theoretisch	Differenz in eV
4	He-artig	$[(1s2p_{1/2})_1 2p_{3/2}]_{1/2}$	4656,2(21)	4658,6	−2,4(21)
	He-artig	$[1s(2p^2_{3/2})_2]_{5/2}$	4656,2(21)	4663,9	−7,7(21)
5	He-artig	$[1s(2p^2_{3/2})_2]_{3/2}$	4674,3(65)	4676,9	−2,6(65)
6	He-artig	$[1s(2p^2_{3/2})_0]_{1/2}$	4697,8(33)	4697,6	0,2(33)
7	Li-artig	$[((1s2s)_1 2p_{1/2})_{3/2} 2p_{3/2}]_2$	4713,6(14)	4713,5	0,1(14)
	Li-artig	$[(1s2s)_1(2p_{3/2})^2_2]_3$	4713,6(14)	4718,1	−4,5(14)
	Li-artig	$[((1s2s)_1 2p_{1/2})_{3/2} 2p_{3/2}]_1$	4713,6(14)	4718,4	−4,8(14)
8	Li-artig	$[(1s2s)_1(2p_{3/2})^2_2]_2$	4744,4(12)	4743,4	1,0(12)
9	Li-artig	$[(1s2s)_0(2p_{3/2})^2_0]_0$	4773,4(17)	4771,8	1,6(17)
10	Be-artig	$[(1s2s^2 2p_{1/2})_0 2p_{3/2}]_{3/2}$	4788,7(12)	4782,2	6,5(12)
	Be-artig	$[1s2s^2(2p^2_{3/2})_2]_{5/2}$	4788,7(12)	4787,3	1,4(12)
	Be-artig	$[1s2s^2(2p^2_{3/2})_2]_{3/2}$	4788,7(12)	4799,4	−10,7(12)
12	B-artig	$[1s2s^2(2p_{1/2})^2 2p_{3/2}]_1$	4851,7(09)	4851,7	0,0(9)
	B-artig	$[(1s2s^2 2p_{1/2})_1(2p^2_{3/2})_2]_2$	4851,7(09)	4853,7	−2,0(9)
	B-artig	$[(1s2s^2 2p_{1/2})_1(2p^2_{3/2})_2]_3$	4851,7(09)	4857,4	−5,7(9)
13	B-artig	$[(1s2s^2 2p_{1/2})_0(2p^2_{3/2})_2]_2$	4881,5(11)	4870,6	10,9(11)
	B-artig	$[(1s2s^2 2p_{1/2})_1(2p^2_{3/2})_0]_1$	4881,5(11)	4872,3	9,2(11)
	B-artig*	$[(1s2s^2 2p^0_{1/2})_{1/2} 2p^3_{3/2}]_2$	4881,5(11)	4883,2	−1,7(11)
	B-artig*	$[(1s2s^2 2p^0_{1/2})_{1/2} 2p^3_{3/2}]_1$	4881,5(11)	4893,8	−12,3(11)
14	C-artig	$[1s2s^2 2p_{1/2}(2p^2_{3/2})_2]_{5/2}$	4918,1	4918,1	—
15	C-artig*	$[(1s2s^2 2p^2_{1/2})_0 2p^3_{3/2}]_{3/2}$	4949,1(12)	4944,5	4,6(12)
	C-artig*	$[(1s2s^2 2p^2_{1/2})_1 2p^3_{3/2}]_{5/2}$	4949,1(12)	4949,1	0,0(12)
	C-artig*	$[(1s2s^2 2p^2_{1/2})_1 2p^3_{3/2}]_{1/2}$	4949,1(12)	4954,5	−5,4(12)
	C-artig*	$[(1s2s^2 2p^2_{1/2})_1 2p^3_{3/2}]_{3/2}$	4949,1(12)	4956,2	−7,1(12)

Extrahierte Ionen

Aus der EBIT konnten gleichzeitig helium- bis borartige Ionen extrahiert und auf dem PSD detektiert werden. Durch die Strahlstromregelung und die dadurch konstant gehaltene Extraktionsspannung waren die Positionen der Ladungszustände auf dem PSD unabhängig von der Elektronenstrahlenergie. Somit konnten die Bereiche auf dem PSD für die unterschiedlichen Ladungszustände einfach bestimmt werden (s. Abb. 5.12). Für das borartige Eisen wurde dabei nur eine vergleichsweise niedrige Zählraten erreicht, da das detektierte Isotop ^{54}Fe nur eine natürliche Häufigkeit von 5,8% hat und das Hauptisotop ^{56}Fe das gleiche q/m-Verhältnis wie O^{6+} hat und somit von diesem auf dem PSD überlagert wird. Zwar ist es durch Pulshöhenanalyse möglich, diese beiden Ionen zu unterscheiden, da hierbei jedoch auch viele Ereignisse von Eisenionen verworfen werden, reduziert sich auch dabei die Zählrate.
Aus den gemessenen Daten wurden, wie in Abschnitt 5.3.2 beschrieben, die Spektren für die verschiedenen Ladungszustände gewonnen. Zur Ermittlung der Resonanzenergien wurden auch hier ein quadratischer Untergrund abgezogen und die Summe von mehreren Gaussverteilungen an die gemessenen Werte angepasst. Diese Ergebnisse sind in Abbildung 5.18 dargestellt.
Die Resonanzen eines Ladungszustandes sind dabei in den Spektren von mehreren Ionensorten zu erkennen. Durch die Rekombination nimmt die Zählrate in diesem Ladungszustand ab und im niedrigeren Ladungszustand zu. Jedoch lassen sich die die Resonanzen auch in höheren Ladungszuständen nachweisen. So enthält das Spektrum von helium-artigem Eisen auch Resonanzen, die der Rekombination lithium- und beryllium-artigen Ionen entsprechen. Dies ist durch die sequentielle Ionisation in der EBIT zu erklären. Da für die Erzeugung von helium-artigem Eisen zunächst die niedrigeren Ladungszustände erzeugt werden müssen, sinkt auch die Produktionsrate vom helium-artigen Eisen, wenn durch resonante Rekombination weniger dieser Ladungszustände in der Falle vorhanden sind. In Tabelle 5.5 sind die angepassten Resonanzen der verschiedenen Ladungszustände nach den sie verursachenden dielektronischen Rekombinationen angeordnet. Die Resonanzen B-3a und B-3b konnten nicht zugeordnet werden, ebenso ist die Zuordnung der Resonanz Be-4 zu einer borartigen DR fraglich, da im borartigem Spektrum hier keine Resonanz festgestellt wurde. Allerdings hängt dies auch mit der schwachen Statistik der borartigen Ionen zusammen.

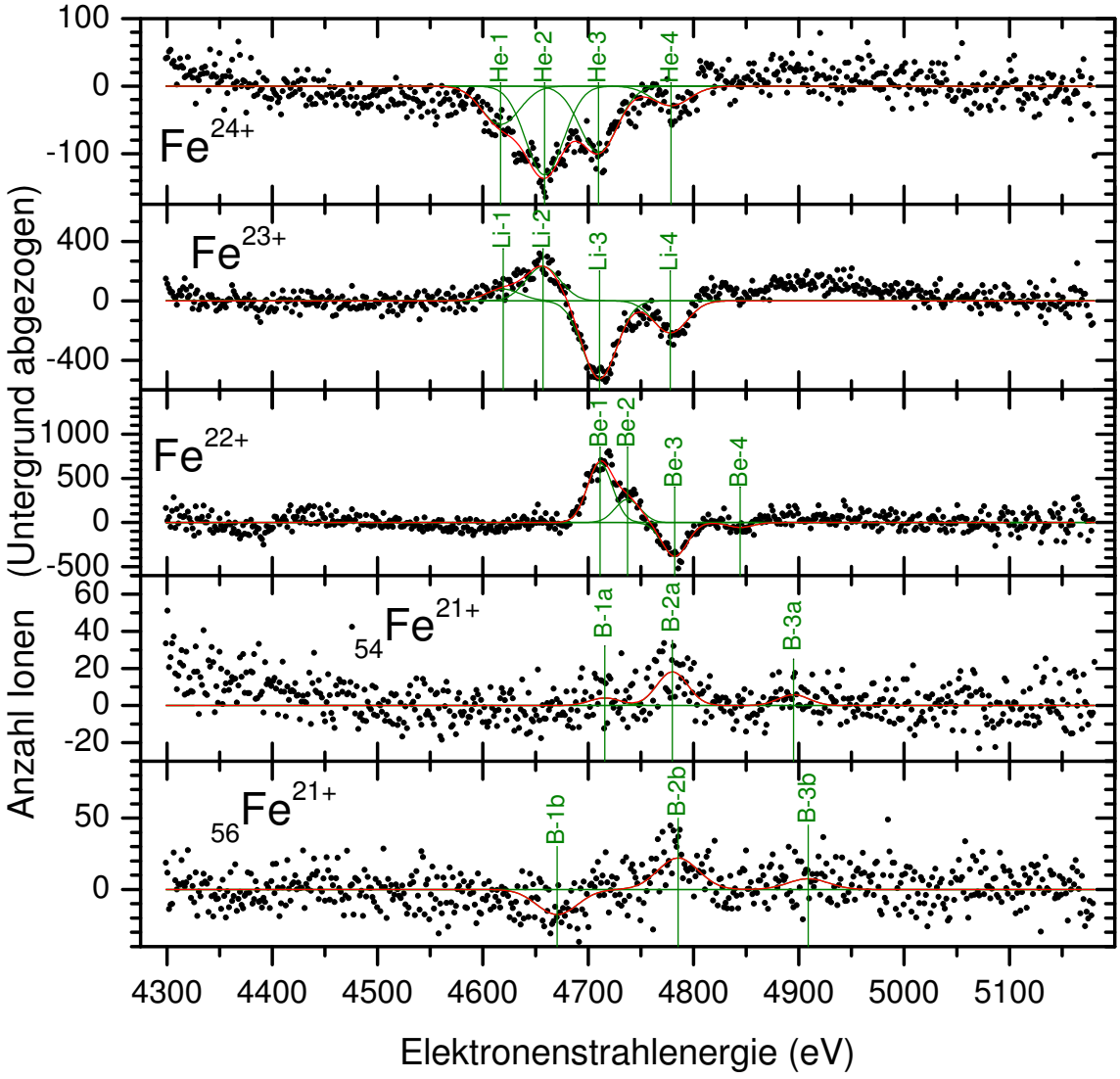

Abbildung 5.18: Anzahl der detektierten Ionen in den unterschiedlichen Ladungszuständen. Die gemessenen Daten sind als schwarze Punkte dargestellt. An diese Daten wurden einzelne Resonanzen (grüne Linien) angepasst, die rote Linie stellt die Summe der Resonanzen dar. Die negativen Zählraten ergeben sich, da ein quadratischer Untergrund abgezogen wurde.

Tabelle 5.5: Durch Extraktion der Ionen gemessene Resonanzen der dielektrischen Rekombination von hochgeladenen Eisenionen. Die angepassten Gauss-Peaks unterschiedlicher Ladungszustände lassen sich den gleichen Resonanzen zuordnen. Die Daten werden mit MCDF-Rechnungen verglichen. Die Energienormierung erfolgte über die Peaks He-2 und Be-3.

Peak	Ladungs-	Zwischenzustand	Energie in eV		Differenz
	zustand		Experiment	Theorie	in eV
He- 1	He-artig	$[(1s2s)_0 2p_{1/2}]_{1/2}$	4616,8(25)	4605,4	11,4(25)
Li - 1			4619,2(36)		13,8(36)
Li - 2	He-artig	$[(1s2p_{1/2})_1 2p_{3/2}]_{1/2}$	4657,1(18)	4658,6	−1,5(18)
He- 2			—		—
B - 1b			4670,4(37)		11,8(37)
He- 3	Li-artig	$[((1s2s)_1 2p_{1/2})_{3/2} 2p_{3/2}]_2$	4709,8(15)	4713,5	−3,7(15)
Li - 3			4710,7(12)		−2,8(12)
Be- 1			4711,1(13)		−2,4(13)
B - 1a			4715,8(103)		2,3(103)
Be- 2	Li-artig	$[(1s2s)_1 (2p_{3/2})^2_2]_2$	4737,4(19)	4743,4	−6,0(19)
Li - 4	Be-artig	$[(1s2s^2 2p_{1/2})_0 2p_{3/2}]_{3/2}$	4777,9(14)	4782,2	−4,3(14)
He- 4			4778,6(34)		−3,6(34)
B - 2a			4779,8(27)		−2,4(27)
Be- 3			—		—
B - 2b			4785,3(33)		3,1(33)
Be- 4	B-artig	$[1s2s^2 (2p_{1/2})^2 2p_{3/2}]_1$	4844,2(38)	4851,7	−7,5(38)
B - 3a			4895,0(76)		
B - 3b			4908,9(95)		

Um den Einfluss der niedrigeren Ladungszustände auf das Messergebnis zu unterdrücken, wird das Verhältnis zwischen zwei aufeinander folgenden Ladungszuständen betrachtet. Da sich die Rekombinationen niedriger Ladungszustände auf beide Ionensorten gleich auswirkt, erscheinen in diesem Spektrum dann nur die Resonanzen des höheren Ladungszustands. Dies ist in Abbildung 5.19 für die hier untersuchten Ionensorten dargestellt.

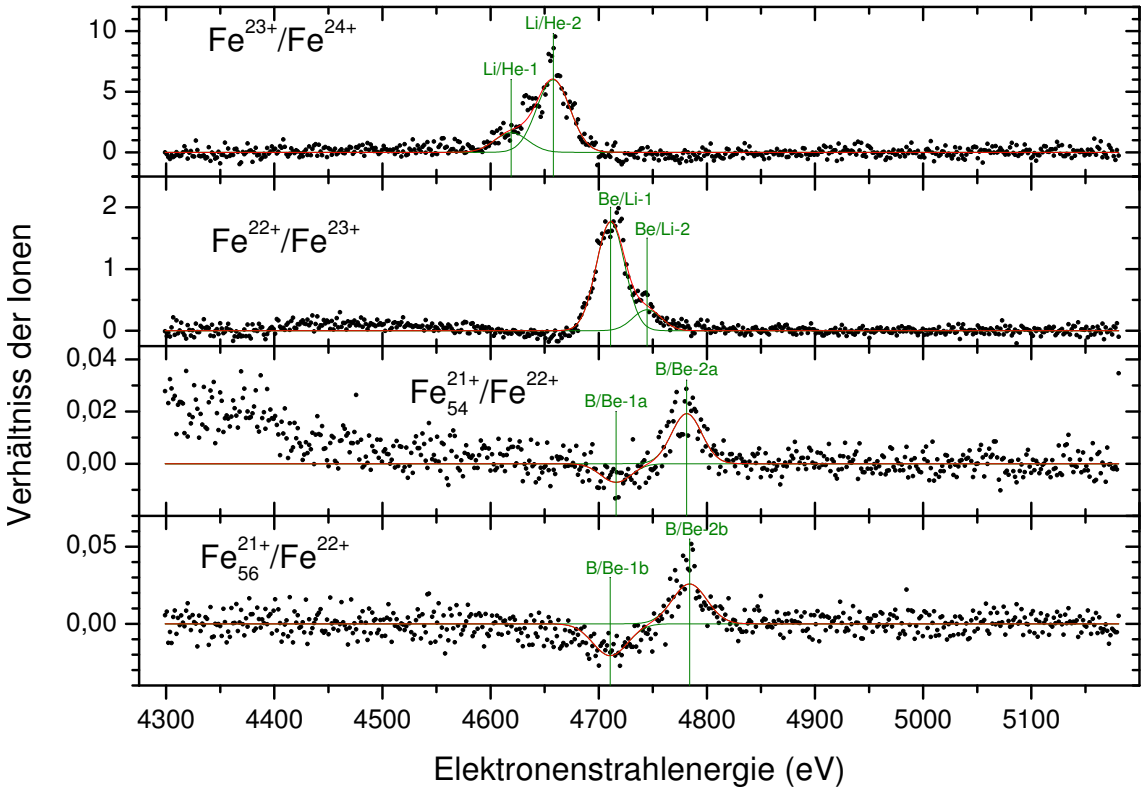

Abbildung 5.19: Verhältnisse der Zählraten aufeinanderfolgender Ladungszustände. An die gemessenen Daten (schwarze Punkte) wurden einzelne Resonanzen (grüne Linien) angepasst, die rote Linie stellt deren Summe dar.

Durch die Division der Spektren sind die Einbrüche in den Spektren verschwunden und es bleiben nur noch Resonanzen übrig, die zwischen den Ladungszuständen stattfinden. Lediglich beim Vergleich von bor- und beryllium-artigem Eisen ist noch eine zu der litiumartigen Resonanz gehörende Signatur im Spektrum zu erkennen, was an dem schwachen Signal-zu-Rausch-Verhältnis der Detektion der borartigen Ionen liegt.

Tabelle 5.6: Zuordnung der angepassten Resonanzen aus Abbildung 5.19 zu dielektronischen Rekombinationsprozessen. Der Fehler setzt sich hierbei zum großen Teil (1,1 eV) aus der Energiekalibrierung zusammen, die von Tabelle 5.5 übernommen wurde.

Peak	Ladungs-zustand	Zwischenzustand	Energie in eV		Differenz in eV
			Experiment	Theorie	
Li/He- 1	He-artig	$[(1s2s)_1 2p_{3/2}]_{1/2}$	4619,0(24)	4631,2	−12,2(24)
Li/He- 2	He-artig	$[(1s2p_{1/2})_1 2p_{3/2}]_{1/2}$	4657,9(13)	4658,6	−0,7(13)
B/Be - 1b	Li-artig	$[((1s2s)_1 2p_{1/2})_{3/2} 2p_{3/2}]_2$	4710,6(17)	4713,5	−2,9(17)
Be/Li- 1			4710,9(12)		−2,6(12)
B/Be - 1a			4716,0(28)		2,5(28)
Be/Li- 2	Li-artig	$[(1s2s)_1 (2p_{3/2})^2_2]_2$	4744,7(16)	4743,4	1,3(16)
B/Be - 2a	Be-artig	$[(1s2s^2 2p_{1/2})_0 2p_{3/2}]_{3/2}$	4781,3(17)	4782,2	−0,9(17)
B/Be - 2b	Be-artig		4784,0(18)		1,8(18)

Kapitel 6

Zusammenfassung

Ziel dieser Arbeit war die Untersuchung ladungsändernder Reaktionen zwischen Photonen, Elektronen und hochgeladenen Ionen. Zu diesem Zweck sollte insbesondere die Ionenanalyse verbessert werden. Der zuvor verwendete Wienfilter musste an die besonderen Bedingungen der Experimente angepasst werden. Dazu wurden verschiedene Elektrodenanordnungen des Wienfilters simuliert und verglichen. Anhand dieser Resultate wurde das Design des Wienfilters verändert, wobei insbesondere auf eine hohe Spannungsfestigkeit Wert gelegt wurde. Durch entsprechende Konstruktion der Elektroden und Isolatoren konnte die maximal anlegbare Spannung um mehr als einen Faktor 50 gesteigert werden. Zudem wurde der Wienfilter in eine neue Vakuumkammer eingebaut, in welcher ein Druck von $2{\cdot}10^{-8}$ mbar erreicht wurde. Der Wienfilter wurde verwendet um aus der FLASH-EBIT extrahierte hochgeladene Ionen nach ihren q/m-Verhältnissen zu trennen um sie anschließen auf einem positionsempfindlichen Detektor nachzuweisen. Hierbei wurden Auflösungen zwischen 26 (bei q/m = 0,15) und 90 (bei q/m =0,36) erreicht. Hierbei ist zu beachten, dass sich die gesamte Extraktion im Randmagnetfeld des 6 T-Magneten der FLASH-EBIT befindet und die Ionen vor der Ladungsseperation elektrostatisch mit einem Biegeradius von 42 mm abgelenkt werden. Zur Unterscheidung zwischen den verschiedenen Ladungszuständen eines Ions sind diese Auflösungen ausreichend.

Anschließend wurde der Wienfilter verwendet um ladungsändernde Prozesse von hochgeladenen Ionen zu untersuchen. Zur Messung der resonanten Photoionisation wurde die FLASH-EBIT und das neuentwickelte Extraktionsstrahlrohr in einer mehrwöchigen Messkampagne mit dem Synchrotron BESSY II in Berlin verbunden. Durch gleichzeitige Messung der Zählraten von Photo- und Mutterionen wurde

erstmals die Photoionisation von Fe^{15+} nachgewiesen. Dies stellt den höchsten Ladungszustand dar, dessen Photoionisationsspektrum je vermessen wurde. Die dabei erreichte Genauigkeit ermöglicht bereits in der in dieser Arbeit vorgestellten vorläufigen Auswertung eine Überprüfung von verschiedenen theoretischen Berechnungen dieses Prozesses. Derzeit wird die FLASH-EBIT auf eine Stahlzeit am freien Elektronenlaser LCLS ins Stanford vorbereitet. Mit der in dieser Arbeit angewandten Methode können dort aufgrund der höheren Energie und Brillianz dieser Strahlungsquelle viele weitere Übergänge untersucht werden.
Des weiteren wurde eine Messung zur dielektronischen Rekombination von hochgeladenem Eisen durchgeführt. Hierbei gelang es gleichzeitig den Intensitätsverlauf von vier Ladungszuständen (Fe^{24+} bis Fe^{21+}) als Funktion der Elektron-Ion-Wechselwirkungsenergie zu bestimmen. Dies wurde möglich durch die Entwicklung eines Steuerungsprogramms für den Elektronenstrahlstrom der EBIT. Hierdurch konnte die Extraktionsspannunung konstant gehalten werden, was die Extraktion der Ionen erheblich vereinfacht. Zudem konnte durch eine Analyse der Pulshöhen des positionsempfindlichen Detektors auch zwischen Ionen mit unterschiedlicher Ladung aber gleichen q/m-Verhältis unterschieden werden, wodurch sich der Untergrund stark verringern ließ. Durch die hier erstmals angewendeten Methoden der Strahlstromstabilisierung und der Pulshöhenanalyse, werden weitere Verbesserungen möglich sein, insbesondere wenn zusätzlich evoporative Kühlung [58] angewendet wird.
Der Wienfilter hat sich in diesen Messungen als q/m-separierendes Element bewährt. Dabei wurde der volle Leistungsbereich jedoch noch nicht ausgeschöpft. Bei weiteren Experimenten können sowohl das elektrische Feld, als auch, bei entsprechender Kühlung der Spulen, das Magnetfeld noch deutlich erhöht werden. Verbesserungen der Auflösung lassen sich eher von Änderungen der Strahloptik erwarten. So wird derzeit ein neuer elektrostatischer Ablenker konstruiert, der einen größeren Biegeradius hat und somit eine höhere Extraktionseffizienz und Auflösugn ermöglichen soll.

Literaturverzeichnis

[1] M. Levine, R. Marrs, J. Bardsley, P. Beiersdorfer, C. Bennett, M. Chen, T. Cowan, D. Dietrich, J. Henderson, D. Knapp, A. Osterheld, B. Penetrante, M. Schneider and J. Scofield. 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*, 43(3):431 – 440, 1989

[2] T. Fang and C. R. Canizares. Probing Comology with the X-Ray Forest. *The Astrophysical Journal*, 539:532–539, 2000

[3] F. B. Paerels and S. M. Kahn. High-Resolution X-Ray Spectroscopy with Chandra AND XMM-Newton. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 41(1):291–342, 2003

[4] P. Beiersdorfer. LABORATORY X-RAY ASTROPHYSICS. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 41(1):343–390, 2003

[5] M. Sako, S. M. Kahn, E. Behar, J. S. Kaastra, A. C. Brinkman, Th. Boller, E. M. Puchnarewicz, R. Starling, D. A. Liedahl, J. Clavel and M. Santos-Lleo. Complex resonance absorption structure in the X-ray spectrum of IRAS 13349+2438. *A&A*, 365(1):L168–L173, 2001

[6] S. W. Epp. *Röntgen-Laserspektroskopie hochgeladener Ionen in einer EBIT am Freie-Elektronen-Laser FLASH.* Dissertation, Universität Heidelberg & Max-Planck-Institut für Kernphysik, 2007

[7] M. C. Simon, M. Schwarz, S. W. Epp, C. Beilmann, B. L. Schmitt, Z. Harman, T. M. Baumann, P. H. Mokler, S. Bernitt, R. Ginzel, S. G. Higgins, C. H. Keitel, R. Klawitter, K. Kubicek, V. Mäckel, J. Ullrich and J. R. C. 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*, 43(6):065003, 2010

[8] M. Simon, M. Schwarz, B. Schmitt, C. Beilmann, S. Epp, T. Baumann, K. Kubicek, R. Ginzel, S. Higgins, R. Klawitter, V. Mäckel, S. Bernitt, P. Mokler, J. Ullrich and J. Lopez-Urrutia. Photoionization of ions in arbitrary charge states by synchrotron radiation in an electron beam ion trap. In *Journal of*

Physics: Conference Series, volume 194, p. 012009 (6 pp.). 2009 2009. XXVI International Conference on Photonsic, Electronic, and Atomic Collisions, ICPEAC 2009, Kalamazoo, Michigan, USA

[9] M. C. Simon, J. R. C. López-Urrutia, C. Beilmann, M. Schwarz, S. W. Epp, B. L. Schmitt, T. M. Baumann, E. Behar, S. Bernitt, R. Follath, R. Ginzel, Z. Harman, C. H. Keitel, R. Klawitter, a. P. H. M. K. Kubicek, and V. Mäckel, G. Reichardt, O. Schwarzkopf and J. Ullrich. Resonant and Near-Threshold Photoionization Cross Sections of Fe^{14+}. *Physical Review Letters, angenommen*, 2010

[10] J. Dubau and S. Volonté. Dielectronic Recombination and its Applications in Astronomy. *Reports on Progress in Physics*, 43:199, 1980

[11] 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*, 47(3):2039, 1993

[12] D. A. Knapp, P. Beiersdorfer, M. H. Chen, J. H. Scofield and D. Schneider. Observation of Interference between Dielectronic Reacceleration and Radiative Recombination in Highly-Charged Uranium Ions. *Physical Review Letters*, 74:54, 1995

[13] A. J. González-Martinez, J. R. Crespo López-Urrutia, J. Braun, G. Brenner, H. Bruhns, A. Lapierre, V. Mironov, R. Soria Orts, H. Tawara, M. Trinczek, J. Ullrich and J. H. Scofield. State-Selective Quantum Interference Observed in the Recombination of Highly Charged $Hg^{75+...78+}$ Mercury Ions in an Electron Beam Ion Trap. *Physical Review Letters*, 94:203201, 2005

[14] C. Beilmann, O. Postavaru, L. H. Arntzen, R. Ginzel, C. H. Keitel, V. Maeckel, P. H. Mokler, M. C. Simon, H. Tawara, I. I. Tupitsyn, J. Ullrich, J. R. C. Lopez-Urrutia and Z. Harman. Intershell trielectronic recombination with K-shell excitation in Kr^{30+}. *Physical Review A*, 80(5), NOV 2009

[15] R. Ali, C. P. Bhalla, C. L. Cocke and M. Stockli. Dielectronic recombination on heliumlike argon. *Phys. Rev. Lett.*, 64(6):633–636, Feb 1990

[16] D. R. DeWitt, D. Schneider, M. W. Clark, M. H. Chen and D. Church. Dielectronic-recombination cross sections of hydrogenlike argon. *Phys. Rev. A*, 44(11):7185–7188, Dec 1991

[17] D. R. DeWitt, D. Schneider, M. H. Chen, M. W. Clark, J. W. McDonald and M. B. Schneider. Dielectronic recombination cross sections of neonlike xenon. *Phys. Rev. Lett.*, 68(11):1694–1697, Mar 1992

[18] J. R. Crespo López-Urrutia, J. Braun, G. Brenner, H. Bruhns, A. Lapierre, A. J. González Martínez, V. Mironov, R. Soria Orts, H. Tawara, M. Trinczek and J. Ullrich. Optimization of the Charge State Distribution of the Ion Beam Extracted from an EBIT by Dielectronic Recombination. *Review of Scientific Instruments*, 75(5):1560, 2004

[19] S. Bernitt. *Optimierung der Ladungszustandsverteilung in einer EBIT durch resonante Photorekombination.* Diplomarbeit, Universität Heidelberg & Max-Planck-Institut für Kernphyisk, 2009

[20] 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. *Phys. Rev. Lett.*, 100(7):073203, Feb 2008

[21] E. Rutherford. Scattering of Alpha and Beta Particles of Matter and the Structure of the Atom. *Philosophical Magazine*, 21:669, 1911

[22] N. Bohr. The Constitution of Atoms and Molecules. I and II. *Philosophical Magazine*, 26:1, 1913

[23] L. de Broglie. *Recherches sur la théorie des quanta.* Ph.D. thesis, Paris, 1924

[24] E. Schrödinger. Quantisierung als Eigenwertproblem (Erste Mitteilung). *Annalen der Physik*, 79:361, 1926

[25] E. Schrödinger. Quantisierung als Eigenwertproblem (Zweite Mitteilung). *Annalen der Physik*, 79:489, 1926

[26] E. Schrödinger. Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen. *Annalen der Physik*, 79:734, 1926

[27] E. Schrödinger. Quantisierung als Eigenwertproblem (Dritte Mitteilung). *Annalen der Physik*, 80:437, 1926

[28] E. Schrödinger. Quantisierung als Eigenwertproblem (Vierte Mitteilung). *Annalen der Physik*, 81:109, 1926

[29] P. A. M. Dirac. The Quantum Theory of the Electron. *Proceedings of the Royal Society*, 117:610, 1928

[30] W. Nolting. *Quantenmechanik - Methoden und Anwendungen.* Springer, Berlin ; Heidelberg [u.a.], 6., überarb. aufl. edition, 2006

[31] W. E. Lamb and R. C. Retherford. Fine Structure of the Hydrogen Atom by a Microwave Method. *Phys. Rev.*, 72(3):241–243, Aug 1947

[32] W. Heisenberg. Über quantenmechanische Umdeutung kinematischer und mechanischer Bewegungen. *Zeitschrift für Physik*, 33:879, 1926

[33] W. Heisenberg. Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik. *Zeitschrift für Physik*, 43:172, 1927

[34] W. Pauli. Über den Zusammenhang des Abschlusses der Elektronengruppen im Atom mit der Komplexstruktur der Spektren. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 31:765–783, 1925. 10.1007/BF02980631

[35] D. R. Hatree. Approximate Wave Functions and Atomic Field for Mercury. *Physical Review*, 46:738, 1934

[36] C. F. Fischer and H. P. Saha. Multiconfiguration Hatree-Fock Results with Breit-Pauli Corrections for Forbidden Transitions in the $2p^4$ Configuration. *Physical Review A*, 28:3169, 1983

[37] I. P. Grant, D. Mayers and N. Pyper. Studies in Multiconfiguration Dirac-Fock Theory I. The Low-Lying Spectrum of Hf III. *Journal of Physics B*, 9:2777, 1976

[38] H. Friedrich. *Theoretische Atomphysik*. Springer-Lehrbuch. Springer, Berlin ; Heidelberg [u.a.], 1990

[39] P. Auger. Comptes Rendus 180, 65. *Journale de Physique et Radium*, 6:205, 1925

[40] U. Fano. Effects of Configuration Interaction on Intensities and Phase Shifts. *Phys. Rev.*, 124(6):1866–1878, Dec 1961

[41] Y. S. Kim and R. H. Pratt. Direct Radiative Recombination of Electrons with Atomic Ions: Cross Sections and Rate Coeffizients. *Physical Review A*, 27(6):2913, 1983

[42] S. Schippers. Experimente zur Photorekombination atomarer Ionen an Schwerionenspeicherringen, 2002

[43] C. Beilmann. *Beobachtung resonanter Elektroneneinfangprozesse höherer Ordnung in hochgeladenem Krypton*. Diplomarbeit, Universtiät Heidelberg & Max-Planck-Institut für Kernphysik, 2008

[44] G. Herrmann. Optical Theory of Thermal Velocity Effects in Cylindrical Electron Beams. *Journal of Applied Physics*, 29:2, 1958

[45] F. J. Currell, editor. *The Physics of Multiply and Highly Charged Ions*. Kluwer Academic, 2003

[46] S. W. Epp, J. R. Crespo-López-Urrutia, G. Brenner, V. Mäckel, H. P. 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*, 98:183001, 2007

[47] M. C. Simon. *Photoionisation hochgeladener Ionen durch weiche Röntgenstrahlung in einer Elektronenstrahl-Ionenfalle*. Disseration, Universität Heidelberg & Max-Planck-Institut für Kernphysik, 2010

[48] W. Wien. Untersuchungen über die electrische Entladung in verdünnten Gasen. *Annalen der Physik*, 301(6):440–452, 1898

[49] K. J. S. 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*, 467-468(Part 1):466 – 469, 2001

[50] C. Beilmann. Persönliche Mitteilung

[51] M. Schwarz. *Photoionisation von neonartigem Argon in einer Elektronenstrahl-Ionenfalle*. Diplomarbeit, Universität Heidelberg & Max-Planck-Institut für Kernphysik, 2009

[52] C. Beilmann. Dissertation, 2011. In Vorbereitung

[53] M. Gu, T. Holczer, E. Behar and S. Kahn. Inner-shell absorption lines of FeVI-Fe XVI: A many-body perturbation theory approach. *Astrophysical Journal*, 641(2, Part 1):1227–1232, 2006

[54] E. Behar, M. Sako and S. Kahn. Soft X-ray absorption by Fe-0 to Fe15+ in active galactic nuclei. *Astrophysical Journal*, 563(2, Part 1):497–504, 2001

[55] Z. Harman. Persönliche Mitteilung

[56] S. Bernitt. Persönliche Mitteilung

[57] S. Bernitt. lualist2 - a library for MPA3 listfile processing with Lua. Version vom 14.09.2009

[58] C. Beilmann, J. R. C. López-Urrutia, P. H. Mokler and J. Ullrich. High resolution resonant recombination measurements using evaporative cooling technique. *Journal of Instrumentation*, 5(09):C09002, 2010

Erklärung

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

Heidelberg, den 28. September 2010