

# Fakultät für Physik und Astronomie

Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg

Diplomarbeit  
im Studiengang Physik

vorgelegt von  
**Maria Schwarz**  
aus Eberswalde-Finow

**2009**



# Photoionisation von neonartigem Argon in einer Elektronenstrahl-Ionenfalle

Die Diplomarbeit wurde von Maria Schwarz  
ausgeführt am  
Max-Planck-Institut für Kernphysik Heidelberg  
unter der Betreuung von  
Herrn PD Dr. José Ramón Crespo López-Urrutia  
sowie  
Herrn Prof. Dr. J. Ullrich



# Abstract

## **Photoionisation von neonartigem Argon in einer Elektronenstrahl-Ionenfalle**

Die Photoionisation von Ionen war bisher nur bis zu einem Ladungszustand von  $q = 7+$  experimentell untersucht worden. Im Rahmen dieser Diplomarbeit wurden zum ersten Mal hochgeladene Ionen oberhalb dieses Ladungszustandes mittels Synchrotronstrahlung photoionisiert. Dieses Experiment wurde mit einer Elektronenstrahl-Ionenfalle und einer Apparatur zur Analyse der Photoionen, die im Rahmen der Doktorarbeit von M. C. Simon konstruiert wurde, durchgeführt. Im Zuge dieser Diplomarbeit wurde die Ionenoptik dieser Apparatur durch die Erweiterung mit einer elektrostatischen Ablenk- und Fokussierlinse verbessert. Mit der neuen Methode gelang es  $\text{N}^{3+}$ ,  $\text{Ar}^{8+,10+,12+}$  und  $\text{Fe}^{12+,14+}$  zu untersuchen. In dieser Arbeit erfolgt die detaillierte Analyse der Daten von  $\text{Ar}^{8+}$ , sowie ein Vergleich mit der Theorie. Zum ersten Mal wurde eine Ionisationsschwelle eines hochgeladenen Ions mittels Photonen bestimmt. Dabei wurde eine hohe Genauigkeit erreicht, die eine Überprüfung relativistischer Beiträge zulässt.

## **Photoionization of neon-like argon in an electron beam ion trap**

Photoionization of ions has been experimentally carried out so far up to the charge state  $q = 7+$ . In this Diploma thesis, ions in a higher charge state were photoionized by using synchrotron radiation for the first time. This experiment was performed with an electron beam ion trap and an apparatus for the analysis of photoions, which was designed in the course of the doctoral thesis of M. C. Simon. Additionally, within this Diploma thesis, the ion-optic of this apparatus was improved by inserting an electrostatic steering einzel lens. By the new method the photoionization of  $\text{N}^{3+}$ ,  $\text{Ar}^{8+,10+,12+}$  and  $\text{Fe}^{12+,14+}$  was realized. In this thesis the data regarding  $\text{Ar}^{8+}$  are evaluated and compared with theory. For the first time an ionization threshold of a highly charged ion was determined by the use of photons. High accuracy was achieved, which allows for the testing of relativistic energy contributions.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Motivation . . . . .	1
1.2	Photoionen in natürlichen Plasmen . . . . .	3
1.3	Photoionen in künstlich erzeugte Plasmen . . . . .	4
1.4	Vorangegangene Experimente . . . . .	4
1.5	Schwerpunkt dieser Arbeit . . . . .	7
<b>2</b>	<b>Physikalische Grundlagen</b>	<b>11</b>
2.1	Prozesse innerhalb der FLASH-EBIT . . . . .	12
2.1.1	Wechselwirkung von Elektronenstrahl, Atomen und Ionen . . .	12
2.1.2	Andere Prozesse . . . . .	14
2.2	Photoionisation . . . . .	15
2.2.1	Theoretische Modelle . . . . .	22
2.2.2	Autoionisation . . . . .	23
2.2.3	Theorie der $\text{Ar}^{8+}$ -Photoionisation . . . . .	25
2.3	Photoionisation angeregter Ionen (metastabile Zustände) . . . . .	27
2.4	Linienformen der Resonanzen . . . . .	29
2.5	Theorie der elektrostatischen Ionenoptik . . . . .	31
<b>3</b>	<b>Experiment</b>	<b>35</b>
3.1	Anforderungen und Konzept . . . . .	35
3.2	Photonenquelle BESSY II . . . . .	36
3.2.1	Messplätze . . . . .	36
3.2.2	Photonenenergie und Kalibration . . . . .	39
3.3	FLASH-EBIT . . . . .	40
3.3.1	Prinzip der EBIT . . . . .	42

3.3.2	Elektronenkanone . . . . .	42
3.3.3	Falle und Umgebung . . . . .	43
3.3.4	Kollektor . . . . .	46
3.3.5	Der Elektronenstrahl . . . . .	46
3.3.6	Strahldiagnostik in der FLASH-EBIT . . . . .	48
3.4	Extraktions-Strahlrohr . . . . .	49
3.4.1	Aufbau der Ionenoptik . . . . .	50
3.4.2	Ionenoptik vor dem Wienfilter . . . . .	51
3.4.3	Positionsempfindlicher Detektor . . . . .	58
<b>4</b>	<b>Auswertung und Ergebnisse</b>	<b>61</b>
4.1	Datenaufnahme . . . . .	61
4.1.1	Detektion der Ionen . . . . .	63
4.1.2	Identifikation der Ionen: „ $\frac{q}{m}$ -Abtastung“ . . . . .	65
4.2	Photoionisation in der EBIT . . . . .	69
4.2.1	Photoionisation von $N^{3+}$ . . . . .	70
4.2.2	Vergleich der $N^{3+}$ -Daten mit Experiment und Theorie . . . . .	72
4.2.3	Photoionisation von $Ar^{8+}$ . . . . .	73
4.3	Datenanalyse (Argon) . . . . .	74
4.3.1	Kalibration und Korrektur der Photonenergie . . . . .	75
4.3.2	Die $2s5p$ -Resonanz . . . . .	78
4.3.3	Übersichtsmessung . . . . .	80
4.4	Diskussion der Ergebnisse . . . . .	82
4.4.1	Vergleich der $Ar^{8+}$ -Photoionisation mit der Theorie . . . . .	82
4.4.2	Weiterentwicklung der Datenauswertung . . . . .	85
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>87</b>



# Kapitel 1

## Einleitung

*... edler geht's nicht!*

M.C.Simon

### 1.1 Motivation

Das Tor zu den Sternen, zum gesamten Universum sowie der Astrophysik wird durch die Erforschung grundlegender Prozesse im Bereich der Atomphysik geöffnet. Dazu gehört, als einer der dominanten Prozesse, die Photoionisation von hochgeladenen Ionen. Mit dieser wird sich die vorliegende Arbeit beschäftigen, weshalb hier im Detail motiviert werden soll, warum sie in das Interessensfeld der experimentellen Grundlagenforschung gerückt ist.

Unter dem Begriff photoelektrischer Effekt lässt sich die Photoionisation mit weiteren artverwandten Effekten, dem äußeren und inneren photoelektrischen Effekt und dem photovoltaischen Effekt, zusammenfassen. Das Studium dieses, zuerst von A. Einstein als Quantenprozess gedeuteten, Vorgangs ermöglicht den Erhalt von Informationen über den Aufbau von Atomen und Ionen, sowie deren Verhalten in Strahlungsfeldern. Dies ist für die Astrophysik von Bedeutung, die auf, durch die Aufnahme von elektromagnetischen (Absorptions- und Emissions-) Spektren gewonnenen, Daten angewiesen ist, um Vorgänge und Strukturen im Universum zu interpretieren. So lange aber nicht vollständig verstanden ist, wie und in welchem Maß Atome, Ionen, Moleküle beziehungsweise Materie auf elementarer Ebene mit Photonen wechselwirken, kann nicht der volle Informationsgehalt astrophysikalischer Spektren genutzt werden. Aus diesem Grund liefern Experimente, die solche Wech-

selwirkungen auf der Erde realisieren und Wirkungsquerschnitte sowie Resonanzlagen vermessen, wichtige Anhaltspunkte für die Analyse astrophysikalischer Spektren und das Erstellen von Modellen für Sterne und andere astronomische Objekte.

Desweiteren stellen Atome mit schweren Kernen und zahlreichen Hüllenelektronen eine Herausforderung für die Theorie dar, die diese bisher nicht vollständig bewältigt hat. Die Struktur von Atomen und Ionen mit mehr als einem Elektron entspricht einem Mehrkörper-Problem, bei dem sich die Wechselwirkung der Elektronen untereinander nur durch Näherungsverfahren behandeln lässt. Für schwere Kerne, also Atome mit steigender Kernladungszahl  $Z$ , kommt außerdem die Zunahme von relativistischen und quantenelektrodynamischen Effekten in steigendem Ausmaß hinzu. Zudem stellen die speziellen Voraussetzungen des Photoionisationsprozesses weitere Anforderungen an die Theorie. Diese muss sowohl gebundene wie auch freie Elektronenzustände behandeln, und das Photonenfeld im Anfangszustand und dessen „Verschwinden“ im Endzustand in die Betrachtung mit einfließen lassen [1]. So lange es allerdings keine experimentellen Vergleichsdaten gibt, lässt sich nicht sagen, welches theoretische Modell den Photoionisationsprozess am genauesten beschreibt. Durch die Durchführung solcher Experimente können also Effekte verschiedener physikalischer Mechanismen auf den Photoionisationswirkungsquerschnitt untersucht werden und die unterschiedlichen theoretischen Modelle getestet werden.

Vor allem die Fülle an theoretischen Modellen und die große Anzahl der bisher durchgeführten Rechnungen stehen im starken Gegensatz zu dem, was auf der experimentellen Seite der Physik bisher im Bereich der Photoionisation möglich war. Grund dafür ist die experimentelle Herausforderung hochgeladene Ionen in ausreichender Menge und Dichte herzustellen und diese geeigneten Quellen elektromagnetischer Strahlung im UV- und Röntgenbereich auszusetzen. Dieses Ungleichgewicht lässt sich jedoch mit der hier präsentierten Methode zur Ionenherstellung in Verbindung mit, Photonen im keV-Bereich in Zukunft ausgleichen. Die bisher verwendeten Methoden zur Untersuchung des Photoionisationsprozesses werden im Anschluss vorgestellt. Die wesentliche Erweiterung der zugänglichen Systeme durch das hier vorgestellte experimentelle Verfahren wird dabei ersichtlich werden.

## 1.2 Photoionen in natürlichen Plasmen

### Auf der Erde

Photoionisation spielt eine tragende Rolle in der Natur, nicht nur in astrophysikalischen Umgebungen sondern auch auf der Erde, wobei hier vor allem neutrale Atome und Moleküle, sowie Ionen in niedrigen Ladungszuständen photoionisiert werden. Ein großer Teil der Ionen im äußeren Erdatmosphärenbereich wird durch solare Photonen erzeugt. Die oberen Schichten der Atmosphäre absorbieren jeweils unterschiedliche Anteile der UV- und Röntgenstrahlung der Sonne und bilden zusammen die sogenannte Ionosphäre. Der höchste Ionisierungsgrad findet sich in der äußersten Schicht (in einer Höhe von 220 km bis 400 km), in der extreme ultraviolette Strahlung (EUV) absorbiert wird und es somit zu einer Elektronendichte von bis zu  $10^6$  Elektronen pro  $\text{cm}^3$  kommen kann. Bei den photoionisierten Atomen handelt es sich hauptsächlich um atomaren Stickstoff und Sauerstoff oder deren molekulare Verbindungen [2].

### In der Astronomie

Die atomare Materie liegt in den Umgebungen, mit denen sich die Astrophysik beschäftigt, hauptsächlich in ionisierter Form vor. Im Gegensatz zur Lage auf der Erde kommt es bei vielen astrophysikalischen verdünnten Plasmen auch zur Photoionisation von hochgeladenen Ionen. Denn dort sind die grundlegenden Voraussetzungen für Photoionisation weit verbreitet. Erstens gibt es eine große Anzahl von Quellen ionisierender Strahlung, sowie wenig Abschirmung vor dieser Strahlung, und zweitens liegt Materie in hohen Ionisationszuständen vor. Als Beispiele für Orte mit photoionisierter Materie sind die Atmosphären von heißen Sternen, planetarische Nebel, H II Regionen, kataklysmische Veränderliche, Röntgendoppelsterne, aktive galaktische Kerne, Akkretionsscheiben von schwarzen Löchern, Jets oder intergalaktisches Medium zu nennen [2].

Das Verstehen der Absorptions- und Emissionsspektren solcher Objekte liefert eine Vielzahl an Informationen über physikalische Zustände, chemische Zusammensetzungen und das ionisierende Strahlungsfeld. Wegen der Absorptionseigenschaften der Erdatmosphäre ist man in diesen Photonenenergiebereichen an Satellitenmissionen gebunden. Vor allem durch Weltraumobservatorien ist es in jüngster Zeit erstmals gelungen Spektren im VUV- und Röntgenbereich aufzunehmen und zu un-

tersuchen. Das Verständnis dieser Spektren und der daraus folgende Rückschluss auf astronomische Prozesse ist allerdings durch lückenhaftes und quantitativ ungenaues Verständnis der Photoionisation begrenzt.

### 1.3 Photoionen in künstlich erzeugte Plasmen

Das Plasma als Form von Materie, die bei steigenden Temperaturen zu den drei klassischen Aggregatzuständen als vierter hinzukommt, bezeichnet ein (teilweise) ionisiertes Gas. Im Allgemeinen handelt es sich um ein quasineutrales Gemisch aus neutralen und geladenen Teilchen. Manchmal ist die Quasineutralität jedoch nicht erfüllt [3]. Unser Verständnis von Plasmen basiert auf zwei Grundlagen: die Untersuchung der mikroskopischen Vorgänge der Wechselwirkungen von Atomen, Ionen, Elektronen und Photonen, die als „Plasmadiagnostik“ bezeichnet wird, und das Studium der makroskopischen Dynamik der ionisierten Materie und der darin eingeschlossenen elektromagnetischen Felder, die in der Magnetohydrodynamik modelliert werden. Für eine fundierte Plasmadiagnostik und Modellierung ist die Wechselwirkung von Photonen und Ionen von besonderer Bedeutung.

Plasmen spielen in den bisher erwähnten natürlichen Umgebungen eine grundlegende Rolle. Bei künstlich erzeugten Plasmen, spielen Fusionsplasmen eine zentrale Rolle, die in sogenannten Fusionsreaktoren (zum Beispiel Tokamaks) im Hinblick auf kommerzielle Energiegewinnung entwickelt werden. Desweiteren gibt es eine Vielzahl von Entladungsplasmen, sowie Plasmen, die durch Lasereinwirkung entstehen und für die Fusionsforschung wie auch für Untersuchungen von Materie bei hohen Temperaturen genutzt werden können [2].

### 1.4 Vorangegangene Experimente

Die Photoionisation benötigt entsprechende Strahlungsquellen, so dass der Fortschritt in diesem Bereich der Physik an deren Entwicklung gebunden ist. Vor allem für das Studium von hochgeladenen Ionen werden hohe Photonenflüsse und hohe -energien benötigt, da stark gebundene Elektronen bei rapide abnehmend Absorptionswirkungsquerschnitten ionisiert werden müssen. Der experimentelle Vorstoß in den Bereich hochgeladener Ionen geht also mit dem Errichten von, mit Undulatoren ausgestatteten, Speicherringen (die sogenannte dritte Generation von Synchrotron-

strahlungsquellen) sowie von freien Elektronenlasern (die vierte Generation) einher. Unterschiede bei den experimentell angewandten Verfahren liegen in der Ionenquelle, dem Ort an dem die Photoionisation stattfindet und der Nachweisart dieser Reaktion (Absorptionsspektroskopie oder der direkte Nachweis der Photoionen).

## Absorptionszelle

Die Absorptionszelle ist eine experimentelle Methode für vorrangig neutrale, gasförmige Atome und Moleküle, in der die Photoionisation durch die Absorption der ionisierende Strahlung bestimmt wird. Im einfachsten Fall handelt es sich um eine Zelle der Länge  $L$ , in der Gase oder Dämpfe untersucht werden können. Es ist für die Bestimmung absoluter Wirkungsquerschnitte nicht notwendig den absoluten Photonenfluss zu kennen, denn es reicht die Intensitätsabschwächung, also das Verhältnis der Intensitäten vor ( $I_0(\lambda)$ ) und nach ( $I(\lambda)$ ) der Absorption,  $\frac{I}{I_0}$  zu messen.

$$I(\lambda) = I_0(\lambda) \cdot e^{-N_0 \cdot L \cdot \sigma_\lambda} \quad (1.1)$$

Die Gasdichte  $N_0$  folgt direkt aus dem Druck und der Temperatur der Gaszelle [2]. Zusätzlich ist es möglich die Atome in der Gaszelle mittels intensiver Laser anzuregen oder durch Multiphotonenprozesse im ionisierten Zustand zu präparieren, um danach die Photoionisation von Ionen zu messen. Problematisch daran ist, dass kein reines Photoionisationstarget hergestellt werden kann, sondern dieses immer aus einer Ansammlung verschiedener Ionisations- und Anregungszustände besteht.

## Ionisationskammer

Bei dieser experimentellen Technik werden die Photoionen von Gasen direkt nachgewiesen [2]. Sie besteht aus einer Kammer, in der Plattenpaare ein elektrisches Feld hervorrufen. Es wird der Ionenstrom gemessen und daraus der Wirkungsquerschnitt für Photoionisation ermittelt. In dem Fall, dass einer einzelnen Platte (die aufgrund ihrer Ladung die Ionen abstößt) zwei Kollektorplatten im Abstand  $l$  voneinander gegenüberstehen, ergibt sich aus der Ionendichte  $n_I$  den Ionenströmen,  $J_1$  und  $J_2$ , die an diesen beiden Platten gemessen werden:

$$\frac{J_1}{J_2} = \exp n_I \cdot \sigma(\lambda) \cdot l \quad (1.2)$$

## Dual Laser Plasma Technique

Bei der sogenannten „Dual Laser Plasma Technique“ werden zwei (verschiedene) Plasmen durch Laser erzeugt und folgendermaßen genutzt. Das erste Plasma wird durch den Beschuss eines Targets, mittels eines hochenergetischen Lasers erzeugt. Es emittiert, im Falle eines Targets mit hoher Atomzahl, ein Spektrum im VUV- und EUV-Bereich (Extreme ultraviolette Strahlung), welches sich für Absorptionsexperimente eignet. Das zweite Plasma wird durch einen Laser erzeugt und stellt ein, die Strahlung absorbierendes, atomares oder ionisches Medium dar [4]. Diese Technik erlaubt Photoabsorptions- und auch Photoionisationsexperimente außerhalb von Speicherringen.

## Überlagerte Strahlen (Merged-Beam Technique)

Diese Methode stellt die anspruchsvollste und bisher genaueste Möglichkeit dar Photoionisation von Ionen zu untersuchen. Die Mehrzahl von absoluten Wirkungsquerschnitten für die Photoionisation von einfach und mehrfach geladenen Ionen wurde bisher damit bestimmt. Sie basiert auf zwei kollinearen Strahlen, ein Strahl von Ionen wird mit einem VUV-Photonenstrahl (Vakuum-Ultraviolette Strahlung) zum Überlapp gebracht und wurde ursprünglich für Stoßionisation durch Elektronen verwendet [5]. Die erste Anwendung im Bereich der Photoionisation fand 1986 durch Lyon et al. statt [6]. Jedoch das volle Leistungsvermögen dieser Technik konnte erst ausgeschöpft werden, seit es Synchrotronstrahlung aus Undulatoren gibt. Der Vorteil der Merged-Beam Technik liegt in ihrer weit gefächerten Anwendbarkeit, da Ionenstrahlen beliebiger Elemente und Sequenzen (isoelektronisch, isonuklear, isoionisch) von Ionisationszuständen erzeugt werden können. Zu höheren Ladungszuständen nimmt die Teilchendichte im Ionenstrahl jedoch auf Grund der geringer werdenden Ausbeuten der benötigten Ionenquellen deutlich ab, sodass diese Methode nicht für allzu hohe Ladungszustände geeignet ist.

Ein weiterer Vorteil dieser Methode ist es, dass alle Größen quantitativ erfasst werden können, was die Ermittlung absoluter Wirkungsquerschnitte mit einer Genauigkeit von 10% bis 20% gestattet. Ein wichtiger Nachteil dieser Methode ist, dass oft metastabile Zustände im Ionenstrahl vorhanden sind. Dass der Anteil dieser Zustände an der gesamten Ionenzahl meist unbekannt ist, reduziert die Genauigkeit mit der der absolute Wirkungsquerschnitt bestimmt werden kann.

Der Aufbau des Merged-Beam Experiments setzt sich aus einer Ionenquelle, aus der

ein Ionenstrahl extrahiert wird, und einer Strahlungsquelle zusammen. Die Ionenquelle ist meist austauschbar und ihr Art bedingt die Ionensorte, die untersucht werden kann. So stehen zum Beispiel für einfach (und zweifach) geladene Zustände Plasmaquellen, oder Elektron-Zyklotronresonanz Ionenquellen (EZR-Quelle) für mehrfach geladene Ionen zur Verfügung. Die Wechselwirkung der beiden Strahlen findet in einer zylindrischen Elektrode statt. Durch ein angelegtes Potential werden die dort erzeugten Ionen energetisch markiert. Die Abmessungen der Elektrode ergeben eine definierte Wechselwirkungslänge.

Die absoluten Wirkungsquerschnitte der Photoionisation ergeben sich dann aus

$$\sigma = S \times \frac{e^2 \eta v}{I J \Omega \int_0^L \frac{dz}{\Delta x \Delta y F(z)}} . \quad (1.3)$$

Dabei werden folgende Parameter benötigt: der Ionenstrom  $I$ , die Intensität des Photonenstroms  $J$ , die Querschnitte von Ionen- und Photonenstrahl  $\Delta x \Delta y F(z)$ , die Geschwindigkeit der Anfangsionen  $v$ , das Photoionisationssignal  $S$ , die Effizienz des Teilchendetektors  $\eta$  sowie die Länge  $L$  des Wechselwirkungsgebietes und der sogenannten Formfaktor  $F$  welcher den Überlapp beider Strahlen charakterisiert. Die Anwendbarkeit dieser Methode nimmt, abgesehen von den bereits erwähnten Faktoren, mit der steigenden Ladung von Ionen ab, da der Wirkungsquerschnitt für Photoionisation mit dieser abfällt. Somit ist der Bereich hochgeladener Ionen derzeit für diese Methode nicht zugänglich [2].

## 1.5 Schwerpunkt dieser Arbeit

Das Ziel dieses, hier vorgestellten, Experiments ist es Ionen in hohen Ladungszuständen zu erzeugen und deren Wechselwirkung mit Photonen zu untersuchen. Wie bereits erwähnt sind Messungen mit überlagernden Strahlen bei hochgeladenen Ionen bisher, auf Grund der geringen Ionenstrahldichte, mit Ladungszuständen bis maximal  $q = 7+$  gelungen. Die EZR-Quellen sind durchaus imstande Ionen in noch höheren Ladungszuständen zu produzieren, allerdings ist die Ausbeute zu gering, um die benötigte Strahldichte zu erreichen. Es stellt sich die Frage, ob man innerhalb solcher Quellen ausreichende Ionendichten finden kann, so dass diese dort untersucht werden könnten. Leider gelingt dies nicht, und zwar erstens wegen des relativ großen Plasmavolumens solcher Quellen, was niedrige Dichten bewirkt, und

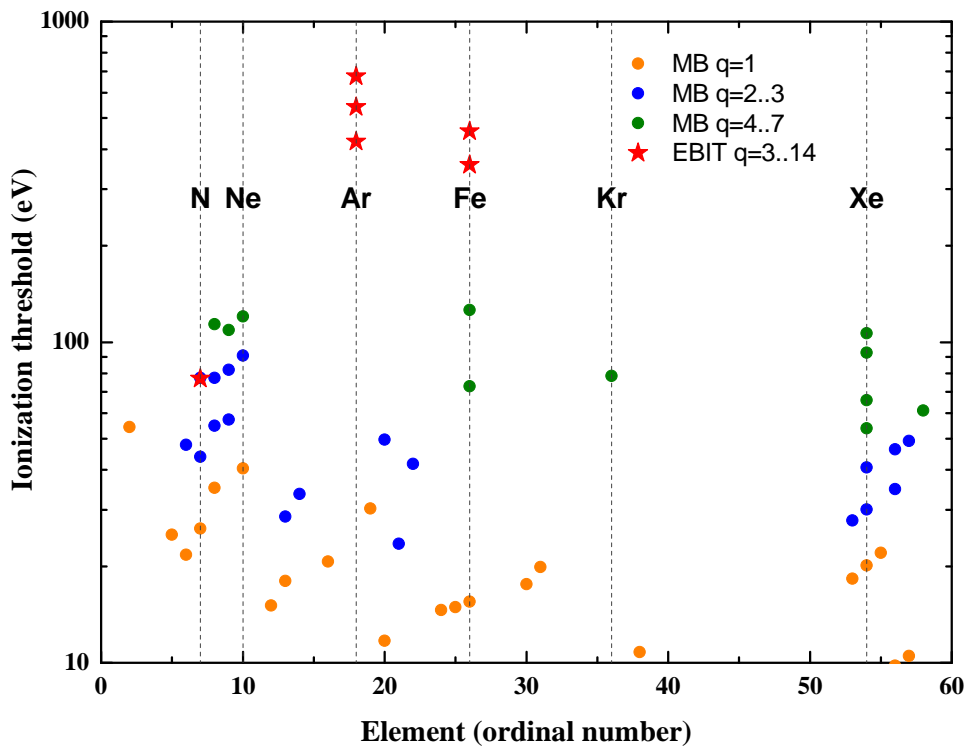


Abbildung 1.1: Graphische Darstellung eines repräsentativen Auszuges von Ionen, die in den letzten Jahren mit der MB Methode vermessen wurden im Vergleich zu den vorliegenden Untersuchungen (rote Sterne) [7].

zweitens weil dort verschiedene Ladungszustände in einer, dem thermischen Gleichgewichte nahen, Verteilung vorliegen. Letzteres erschwert eine Unterscheidung der Photoionen von den im Plasma bereits vorhandenen Ionen.

Hier bringt das Prinzip der EBIT (engl. Electron Beam Ion Trap) entscheidende Vorteile. Einerseits stellt sie eine hohe Ionendichte in einem räumlich eng begrenzten Fallenbereich zur Verfügung, und andererseits sind die höchstens zu erreichenden Ionisationszustände durch die frei wählbare Elektronenstrahlenergie leicht festzulegen. Eine weitere Erhöhung des Ionisationszustandes durch Photoionisation wird dadurch deutlich detektierbar.

Die hier verwendeten FLASH-EBIT (engl. Freie-Elektronen-Laser in Hamburg) ist trotz ihres komplexen Aufbaus transportabel. Mit ihr gibt es erstmals die Möglichkeit hochgeladene Ionen in nahezu beliebigen Ladungszuständen mit hohen Dichten an modernen Photonenquellen zu erzeugen und als Untersuchungsobjekt zur Verfügung zu stellen. Die experimentelle Methode, die dieser Arbeit zugrunde liegt, soll im drit-



ten Kapitel besprochen werden.

Die Theorie der Atomphysik schafft die Basis für das Interesse an hochgeladenen und schweren Ionen. Denn es hängen, wie im theoretischen Teil dieser Arbeit noch näher erläutert wird, besonders interessante und theoretisch schwer zu erfassende Effekte (die Abweichungen von der grundlegenden Atomhüllenstruktur beschreiben) nicht nur vom Ladungszustand sondern auch von der Kernladungszahl ab. Das heißt die Effekte werden umso stärker je höher die Kernladungszahl ist. Somit ist es von Interesse nicht nur hohe Ladungszustände im Allgemeinen, sondern diese auch bei schwereren Elementen zu erzeugen. Dadurch können die genauen Stärken vorkommender Effekte vermessen und anschließend mit den theoretischen Modellen verglichen werden.

Den Schwerpunkt auf Argon zu legen hat in Hinsicht auf die Astrophysik den Grund, dass es unter den häufigsten Elementen im Universum zu finden ist. Somit unterstützt ein vollständiges Verständnis der atomaren Struktur von Argon das Verständnis von Spektren, und daher auch von Vorgängen, in der Astrophysik. Außerdem ist die neonartige Konfiguration von Argon besonders interessant, weil es ein System mit abgeschlossenen Schalen ist. Für den Theoretiker hat es einen speziellen Reiz, weil es das einfachste edelgasartige System mit mehr als einer Schale darstellt. Den Fortschritt, den die Photoionisationsmessungen mit der FLASH-EBIT im Vergleich zu anderen Verfahren innerhalb eines Jahres gebracht hat kann man deutlich auf Abbildung 1.1 erkennen. Im Zuge der Strahlzeiten 2008 und 2009 gelang es, angefangen von  $N^{3+}$  bei 80 eV über  $Ar^{8+}$  bei etwa 420 eV bis hin zum  $Fe^{14+}$  mit Photonenenergien über 1 keV hinaus Photoionisation zu realisieren. Diese Ergebnisse zeigen das zukunftsweisende Potential dieser experimentellen Methode auf.



# Kapitel 2

## Physikalische Grundlagen

Zentraler Teil des Experiments ist eine Elektronenstrahl-Ionenfalle (EBIT), in der hochgeladene Ionen durch die Wechselwirkung eines intensiven, fokussierten Elektronenstrahls mit Atomen erzeugt und gespeichert werden. Der Elektronenstrahl hoher Dichte treibt Prozesse wie Stoßionisation und -anregung sowie Photorekombination an.

Dieses Kapitel beschäftigt sich nun mit der Theorie, die notwendig ist, um die experimentellen Vorgänge zu verstehen, die im Laufe dieser Arbeit vorgestellt werden. Da es in dieser Arbeit um Photoionisation in der FLASH-EBIT geht, wird auf die theoretische Beschreibung allgemein vorkommender Prozesse aber auch auf Besonderheiten, die im Experiment auftauchen oder zu erwarten sind, eingegangen. Mit „Besonderheiten“ sind vor allem Prozesse gemeint, die über die einfache Photoionisation eines Ions im Grundzustand hinausgehen. Außerdem werden theoretische Modelle beschrieben, die sich mit der Berechnung von Wirkungsquerschnitten und auch dem Verständnis des Mehrteilchenproblems „Photoionisation“ beschäftigen. Zuletzt folgt eine kurze Behandlung der Linienformen von Wirkungsquerschnitten in Abhängigkeit von der Photonenergie.

Die hier dargestellten theoretischen Überlegungen im Bereich der Photoionisation gelten in weiten Bereichen sowohl für Atome als auch für Ionen, auch wenn in dieser Arbeit die Beschreibung oft nur für letztere erfolgt.

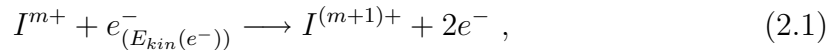
## 2.1 Prozesse innerhalb der FLASH-EBIT

In der EBIT kommt es zu Wechselwirkungen zwischen Elektronen, Atomen und Ionen. Zuerst wird in diesem Abschnitt auf die möglichen Reaktionen des Elektronenstrahls mit Atomen und Ionen und im folgenden dann auf Wechselwirkungen der Ionen und Atomen unter sich, eingegangen.

### 2.1.1 Wechselwirkung von Elektronenstrahl, Atomen und Ionen

Durch den Elektronenstrahl einer EBIT kommt es nicht nur zur Stoßionisation von Atomen und Ionen, sondern auch zu anderen vorstellbaren Prozesse zwischen Elektronen und Ionen. Es kann zu Elektronenstoß-Ionisation (EI), Bremsstrahlung (BS) und Elektronenstoßanregung der Schalelektronen (EA) kommen. Außerdem bestehen die Voraussetzungen für resonanten Elektroneneinfang, also dielektronische und trielektronische Rekombination (DR und TR), sowie für den nicht-resonanten Prozess der Radiative Rekombination (RR).

Die Elektronenstoßionisation erzeugt die Ionen in der EBIT und lässt sich folgendermaßen beschreiben:



wobei  $I^{m+}$  ein Ion im Ladungszustand  $q = m+$  bezeichnet und  $e^-$  ein freies Elektron. Der Wirkungsquerschnitt dieser Wechselwirkung steigt, ab dem Punkt an dem die Ionisationsschwelle erreicht ist, zunächst mit der Energie der stoßenden Elektronen an und nimmt ab dem circa dreifachen Wert der Schwelle wieder ab. Der Wirkungsquerschnitt für Elektronenenergien nahe der Ionisationsschwelle ergibt sich nach der Lotz-Formel vereinfacht zu

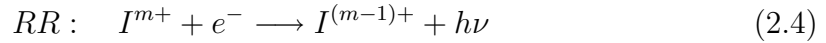
$$\sigma_{EI}(E_{kin}(e^-) = E_I) \propto \frac{E_{kin}(e^-)}{E_I} - 1 \quad (2.2)$$

wohingegen der Wirkungsquerschnitt bei Energien weiter oberhalb der Schwelle folgendes Verhalten zeigt

$$\sigma_{EI}(E_{kin}(e^-) \gg E_I) \propto \frac{\ln E_{kin}(e^-)}{E_{kin}(e^-)} \quad (2.3)$$

Der Ionisation wirken nun Photorekombinationsprozesse und Ladungsaustausch entgegen.

Die radiative Rekombination ist der Umkehrprozess der Photoionisation.



Die Energie des emittierten Photons  $h\nu$  setzt sich bei der RR aus der kinetischen Energie des eingefangenen Elektrons  $E_{kin}(e^-)$  sowie der Bindungsenergie, des im Endzustand eingenommenen elektronischen Zustandes  $E_B$  zusammen (vergleiche Abbildung 2.1). Die dielektrische Rekombination entspricht einem rückwärtsab-

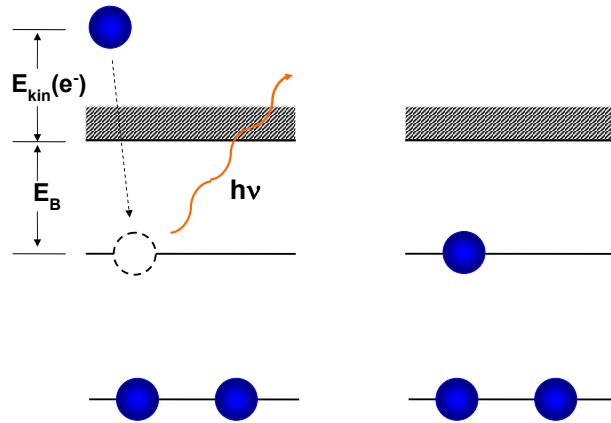
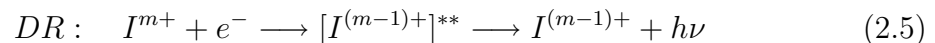


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der Radiativen Rekombination (RR)

laufendem Auger-Prozess.



Bei dem Einfang eines Elektrons kommt es im ersten Schritt zur Besetzung eines angeregten, kurzlebigen Zwischenzustandes. Dieser zerfällt unter Emission eines Photons (siehe dazu Abbildung 2.2) wodurch der Prozess der DR abgeschlossen wird. Ein Konkurrenzprozess dazu ist der strahlungslose Zerfall des angeregten Zwischenzustandes, der einer resonanten Streuung des einfallenden Elektrons entspricht. Unter bestimmten Umständen kann es beim Elektroneneinfang zur gleichzeitigen Anregungen von mehreren Elektronen kommen und einer darauf folgenden radiativen Relaxation des angeregten Zwischenzustandes [8]. Wie schon erwähnt unterliegen diese Prozesse Resonanzbedingungen, die für die DR erfüllt sind wenn die Summe

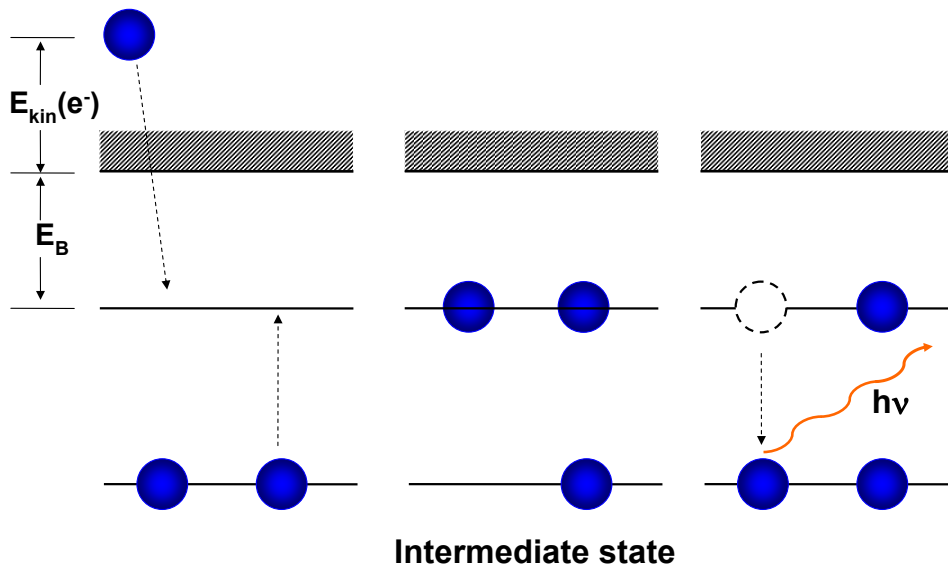


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung der dielektronischen Rekombination (DR). Ein Elektron (blau) wird in die Atomhülle eingefangen und regt mit der Summe aus seiner kinetischen Energie  $E_{kin}(e^-)$  und der Bindungsenergie  $E_B$  ein Elektron aus der Hülle an. Der angeregte Zustand zerfällt durch Emission eines Photons (orange).

aus kinetischer Energie des Elektrons und seiner freiwerdenden Bindungsenergie dem Energieunterschied der beiden Schalen entspricht, zwischen denen das anzuregende Elektron den Übergang vollzieht.

Für die Messung der Photoionisation ist noch ein weiterer Prozess von Bedeutung, die Elektronenstoßanregung (EA). Bei diesem Prozess kommt es zu einer Anregung der Schalenelektronen durch Übertrag der entsprechenden Energie. Diese wird durch die Elektronen aus dem Elektronenstrahl mit ihrer kinetischen Energie zur Verfügung gestellt. Abhängig von dem Wirkungsquerschnitt dieser Anregung und der mittleren Lebensdauer des angeregten Zustandes kann eine zweite Stoßanregung das Niveau mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit zur Ionisation führen. Das Photoionisationssignal kann dadurch eine unerwünschte Beimischung, ausgehend von metastabilen Zuständen, aufweisen, welche verschobene Resonanz- und Schwellenenergien besitzen.

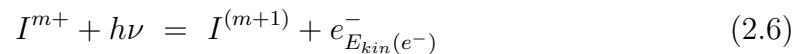
### 2.1.2 Andere Prozesse

Ohne Elektronenbeteiligung kann es in der Falle außerdem noch zu Stößen zwischen Ionen untereinander oder Atomen und Ionen kommen. Da die kinetische Energie der

Ionen (bedingt durch ihre Temperatur) meist nicht für weitere Anregungsprozesse ausreicht handelt es sich bei der Wechselwirkung zwischen Ionen in der Regel nur um elastische Coulombstreuung. Atom-Ion-Stöße hingegen können zum Austausch von mindestens einem Elektron, und somit zu unerwünschten Änderungen der Ionenladungszustände, führen. Deshalb werden sie durch Reduktion des Restgasdruckes in der EBIT minimiert.

## 2.2 Photoionisation

Werden Atome oder Ionen mit Licht genügend hoher Energie bestrahlt, so ist es möglich, durch Absorption von Photonen, Energie auf deren gebundene Elektronen zu übertragen und ein Hüllenelektron herauszulösen. Für diesen Prozess muss das Photon eine Mindestenergie aufbringen, die sogenannte Ionisierungsenergie. Der Prozess, bei dem ein  $m$ -fach positiv geladenes Ion ein Photon der Energie  $h\nu$  absorbiert und ein  $(m + 1)$ -fach geladenes Ion erzeugt wird, sowie ein Elektron  $e^-$  das Atom mit einer kinetischen Energie  $E_{kin}(e^-)$  verlassen kann, lässt sich folgendermaßen darstellen.



Die Photoionisation von Ionen lässt sich im Rahmen der nichtrelativistischen Theo-

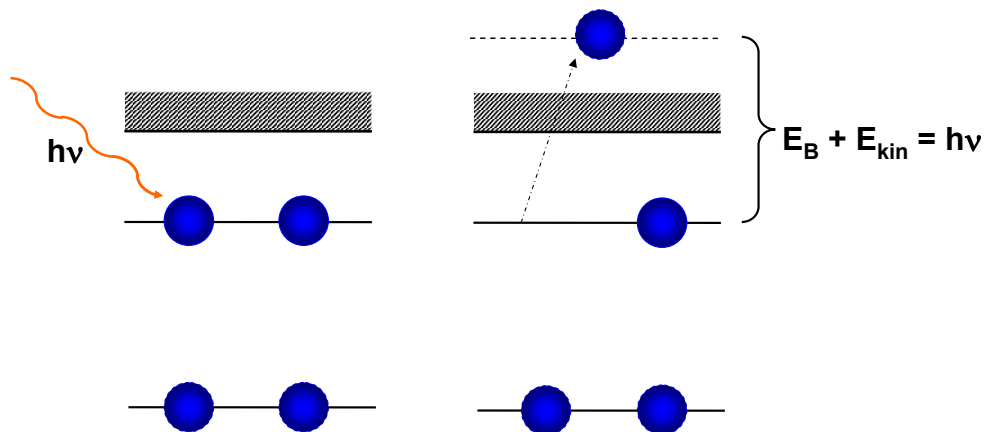


Abbildung 2.3: Schematische Darstellung der Photoionisation.

rie durch die, für die Quantenmechanik grundlegende Gleichung, die Schrödingergleichung, beschreiben. Diese stellt das allgemeine Gesetz für die zeitliche Entwicklung

eines quantenmechanischen Systems dar.

$$i\hbar \frac{d\Psi(t)}{dt} = \hat{H}\Psi(t) \quad (2.7)$$

Die folgende mathematische Beschreibung wird sich weitestgehend am Vorgehen in [9] orientieren. Der Hamiltonoperator  $\hat{H}$  charakterisiert das System, also den Verband aus Kern und Hüllenelektronen (das Ion) und beschreibt seine Freiheitsgrade. Er besitzt als „ionischer Hamiltonoperator“  $\hat{H}_{Ion}$  ein Spektrum von Eigenwerten  $E_i$  und die zugehörigen Eigenzustände  $\Psi_{E_i}$  sind Lösungen der stationären Schrödingergleichung. Die Eigenzustände des Ions (das heißt die Energieniveaus für die Hüllenelektronen) lassen sich bei Übergängen zwischen ihnen, unter Emission oder Absorption von elektromagnetischer Strahlung, beobachten. Solche Übergänge sind durch die Wechselwirkung der Freiheitsgrade des Ions mit den Freiheitsgraden des Elektromagnetischen Feldes bedingt. Das heißt, der Hamiltonoperator  $\hat{H}_{Ion}$  des Ions bleibt nicht immer in einem seiner Eigenzustände. Ein Hamiltonoperator der nun auch elektromagnetische Übergänge (und im weiteren Verlauf der Theorie die Absorption eines Photons, die zur Ionisation eines Ions führt) beschreiben soll muss nicht nur das Ion sondern auch das elektromagnetische Feld und die Wechselwirkung zwischen Ion und Feld beschreiben. Dies lässt sich durch einen Hamiltonoperator berücksichtigen, der einen Beitrag des Ions und einen des Feldes enthält.

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_{Ion} + \hat{H}_F \quad (2.8)$$

wobei

$$\hat{H}_{Ion} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2\mu} + \hat{V} \quad (2.9)$$

und

$$\hat{H}_F = \sum_{\lambda} \hbar\omega_{\lambda} \hat{b}_{\lambda}^{\dagger} \hat{b}_{\lambda} \quad (2.10)$$

Bei den Operatoren  $\hat{b}_{\lambda}^{\dagger}$  und  $\hat{b}_{\lambda}$  handelt es sich um die Photonen-Erzeugungs- beziehungsweise Photonen-Vernichtungsoperatoren und  $\omega_{\lambda} = c |\vec{k}_{\lambda}|$  ist die Kreisfrequenz mit dem Wellenvektor  $\vec{k}_{\lambda}$  des elektromagnetischen Feldes. Die Eigenzustände des „ionischen Hamiltonoperators“ sind nun nicht mehr Eigenzustände des Hamiltonoperators  $\hat{H}_0$  der das vollständige System beschreibt. Die Übergänge zwischen Eigenzuständen lassen sich allgemein durch die zeitabhängige Störungstheorie be-



schreiben. Dabei wird die Wechselwirkung mit dem elektromagnetischen Feld in Form eines zusätzlichen Operators, der eine Störung beschreibt, zum wechselwirkungsfreien Operator hinzuaddiert. Diese, nicht unbedingt zeitabhängige Störung, führt nun zu Übergängen zwischen den Eigenzuständen des nicht gestörten Hamiltonoperators. Der Wechselwirkungsoperator ergibt sich in der Dipolnäherung zu

$$\hat{W} = L^{-\frac{3}{2}} \frac{e}{\mu c} \sum_{i=1}^N \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\lambda}}} \vec{\pi}_{\lambda} \hat{p}_i (\hat{b}_{\lambda} + \hat{b}_{\lambda}^{\dagger}) \quad (2.11)$$

mit der Kantenlänge  $L$  des Würfels, für den die Dichte der Photonenzustände gegebener Polarisation  $\vec{\pi}_{\lambda}$  bestimmt wird um die Anwendung Fermi's Goldener Regel auf elektromagnetische Felder sicherzustellen [9].

Aus dem allgemeinen Ansatz für einen, aus ungestörtem Hamiltonoperator  $\hat{H}_0$  und Wechselwirkung  $\hat{W}$  zusammengesetztem, Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W} \quad (2.12)$$

folgen mit den (orthonormierten) Eigenzuständen  $\Phi_n$  (des Operators  $\hat{H}_0$ ) und der Eigenwertgleichung

$$\hat{H}_0 \Phi_n = E_n \Phi_n \quad (2.13)$$

die zeitabhängigen Wellenfuntionen

$$\Psi(t) = \sum_n c_n(t) \Phi_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \quad (2.14)$$

Aus den Koeffizienten  $c(t)$  erhält man, mittels der Übergangsamplitude in den Endzustand, die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit von Zustand  $\Phi_a$  (zur Zeit  $t = 0$ ) in den Zustand  $\Phi_e$

$$W_{a \rightarrow e} = \frac{2\pi}{\hbar} |W_{ea}|^2 \delta(E_e - E_a) \quad (2.15)$$

und daraus, mit der Zustandsdichte der Endzustände  $\rho(E_e)$ , Fermi's Goldene Regel

$$W_{a \rightarrow e} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Phi_e | \hat{W} | \Phi_a \rangle|^2 \rho(E_e = E_a) \quad (2.16)$$

Dabei ist zu berücksichtigen, dass nur Übergänge erlaubt sind, die die Energie erhalten und dass es sich um eine kontinuierliche Verteilung der Endzustände handelt (das Elektron geht durch die Photoionisation in das Kontinuum über) .

Diese Regel gibt, in erster Ordnung der zeitabhängigen Störungstheorie, die Wahrscheinlichkeit (pro Zeiteinheit) für Übergänge an, die durch einen zeitunabhängigen Störoperator hervorgerufen werden. Sie zeigt, dass die Übergangswahrscheinlichkeit vor allem vom Überlappintegral der beiden beteiligten Wellenfunktionen für Anfangs- und Endzustand sowie der Energiedifferenz der beiden Zustände abhängt.

Die bisher besprochene Theorie beschreibt die experimentellen Beobachtungen allerdings nur unzureichend. Es müssen noch weitere Überlegungen zu relativistischen, quantenelektrodynamischen und Kopplungseffekten hinzugezogen werden. Relativistische Effekte werden in der Dirac-Gleichung für ein Eielektronensystem von Anfang an berücksichtigt. Oder sie werden in die Schrödinger Gleichung miteinbezogen indem entsprechende Korrekturterme zum bisher verwendeten Hamiltonoperator hinzuaddiert werden. Bei der Dirac'schen Formulierung einer Bewegungsgleichung wurde, im Sinne der speziellen Relativitätstheorie, von Anfang an Raum und Zeit in der Höhe ihrer Ableitung gleich behandelt. Für ein freies Teilchen ergibt sich folgender Hamiltonoperator

$$\hat{H}_{Dir} = c\vec{\alpha}\vec{p} + \beta m_e c^2 \quad (2.17)$$

mit der Matrix  $\beta$  und der Vektormatrix  $\vec{\alpha}$ , die durch die Pauli'schen Spinmatrizen ausgedrückt werden.

Der dominierende relativistische Effekt ergibt sich aus der Tatsache, dass das Elektron bei seiner Bewegung um den Kern eine relativistische Massenzunahme erfährt. Das heißt, dass seine Gesamtenergie sich signifikant von seiner Ruheenergie unterscheidet, und diesem Umstand durch die relativistische Formulierung der Gesamtenergie Rechnung getragen werden muss.

$$E_{ges} = c\sqrt{m_e^2 c^2 + p^2} - m_e c + E_{pot} \quad (2.18)$$

Dieser Ausdruck kann mit  $p^2 \ll 2m_e^2 c^2$  entwickelt werden, und man erhält

$$E = \left( \frac{p^2}{2m_e} + E_{pot} \right) - \frac{p^4}{8m_e^3 c^2} \quad (2.19)$$

Der letzte Term ist der relativistische Korrekturterm  $\Delta E_r$  der kinetischen Energie. Seine Abhängigkeit von der Kernladungszahl und den Quantenzahlen wird deutlich durch

$$\Delta E_r = \frac{E_{nr} Z^2 \alpha^2}{n} \left( \frac{3}{4n} - \frac{1}{l + 1/2} \right) \quad (2.20)$$

wobei  $l$  die Drehimpulsquantenzahl darstellt. Die Größe der relativistischen Korrektur steigt also mit dem Quadrat der Kernladungszahl und hebt die Energieentartung der Zustände  $(n, l)$  auf. In der Schrödingergleichung ist der Hamiltonoperator aufgrund der relativistischen Rechnung durch

$$\hat{H}_r = -\frac{p^4}{8m_e^3 c^2} \quad (2.21)$$

zu erweitern.

Desweiteren ist auch eine Korrektur der potentiellen Energie notwendig. Dies geschieht über den sogenannten Darwin-Term. Er führt allerdings nur zu einer Korrektur in dem Fall  $l = 0$ , das heißt nur für  $s$ -Orbitale, also für Elektronen mit einer signifikanten Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Kern. Dieser Term berücksichtigt, dass in nichtrelativistischer Näherung das Elektron, wenn es sich am Kernort aufhält, nicht mehr das Coulompotential, sondern das Kernpotential (Potential innerhalb einer homogen geladenen Kugel) sieht. Somit ergibt sich eine Positionsabweichung des Elektrons, die durch

$$\hat{H}_D = \frac{\hbar^2}{8m_e^2 c^2} \Delta V = \frac{\pi \hbar Z e^2}{2m_e^2 c^2} \cdot \delta^{(3)}(x) , \quad (2.22)$$

berücksichtigt wird ( $\delta^{(3)}(x)$  ist die Delta-Funktion in drei Dimensionen).

Für Drehimpulsquantenzahlen  $l \geq 0$  gibt es noch weitere Effekte, die in die Korrektur des Hamiltonoperators mit einbezogen werden müssen. Dabei handelt es sich um den Effekt der Spin-Bahnkopplung, der nicht nur zu einer Verschiebung von Energieniveaus sondern auch zu einer Aufspaltung dieser in Abhängigkeit vom Gesamtdrehimpuls  $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$  führt.

Die Wechselwirkung des Bahndrehimpulses eines Hüllenelektrons mit seinem eigenen Spin lässt sich halbklassisch folgendermaßen betrachten. Im Ruhesystem des Elektrons bewegt sich der geladene Kern um das Elektron. Er stellt bei seinem Umlauf einen Kreisstrom dar und erzeugt am Aufenthaltsort des Elektrons ein magnetisches Feld. Das magnetische Moment des Elektrons, der Spin  $\vec{s}$ , koppelt nun

an das äußere Magnetfeld und richtet sich in diesem aus. Der Spin hat dabei nur zwei Einstellungsmöglichkeiten, parallel und antiparallel zum magnetischen Feld. Diese zwei Einstellungsmöglichkeiten sind energieabhängig und führen somit zu einer Aufspaltung der Energieniveaus und einer Verschiebung dieser, die stark von der Kernladungszahl abhängt

$$E_{l,s} \propto \frac{Z^4}{n^3 l(l+1)} \quad (2.23)$$

Als Korrekturterm zum Hamiltonoperator findet sich

$$\hat{H}_{l,s} = -\frac{Ze^2}{2m_e^2 c^2 r^3} \hat{l} \hat{s} \quad (2.24)$$

Für Mehrelektronen-Systeme ist die Wechselwirkung der Elektronen untereinander größer als die Wechselwirkung einzelner Elektronenspins  $\vec{s}$  mit ihrem Bahndrehimpuls  $\vec{l}$ . Das heißt die Einzelelektronen-Drehimpulse  $\vec{l}_i$  und -Spins  $\vec{s}_i$  koppeln erst untereinander, bevor der Gesamtbahndrehimpuls  $\vec{L}$  und der Gesamtspin  $\vec{S}$  miteinander zum Gesamtdrehimpuls  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$  koppeln. Mit  $\vec{L} = \sum_i \vec{l}_i$  und  $\vec{S} = \sum_i \vec{s}_i$  ergeben sich der Gesamtbahndrehimpuls und der Gesamtspin aller Elektronen in der Atomhülle.

Eine Berücksichtigung der Wechselwirkung zwischen Atom oder Ion mit dem Strahlungsfeld führt zu einer quantenelektrodynamischen Korrektur der Energieniveaus um die sogenannte Lamb-Verschiebung. Hierbei werden Effekte wie Selbstenergie, Vakuumpolarisation, (Strahlungs-) Rückstoßkorrekturen sowie weitere Effekte höherer Ordnung berücksichtigt. Abhängig von dem räumlichen Aufenthaltsort des Elektrons, also von seinem Abstand zum Kern, erfolgt nun eine Verschiebung der Energieniveaus. Diese Wechselwirkung führt zu einer Aufspaltung der bisher entarteten Niveaus  $S_{1/2}$  und  $P_{1/2}$ . Die mittlere Korrektur beläuft sich auf

$$\langle E_{pot} \rangle = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \left\langle \frac{1}{r + \delta r} \right\rangle \quad (2.25)$$

Für atomare oder ionische System mit mehr als einem Elektron müssen zusätzlich zu den Wechselwirkungen der einzelnen Elektronen für sich auch noch die Wechselwirkungen zwischen den Elektronen berücksichtigt werden, und ein Vielteilchenproblem ist zu lösen. Die verschiedenen Methoden für die Lösung der Vielteilchenprobleme werden im späteren Verlauf kurz erläutert.

## Wirkungsquerschnitte

Der Wirkungsquerschnitt gibt ein Maß für die Reaktionshäufigkeit zwischen einem einfallenden Teilchen und einem weiteren Teilchen an. In der klassischen Mechanik folgt er aus der räumlichen Ausdehnung der Teilchen. Aus ihm folgt, dass eine Wechselwirkung zwischen den Teilchen (zum Beispiel kugelförmig mit Radien  $r_1$  und  $r_2$ ) stattfindet wenn sie sich berühren. Somit ergibt sich der Wirkungsquerschnitt zu einer kreisförmigen Fläche  $\sigma = \pi(r_1 + r_2)^2$  mit dem Radius  $(r_1 + r_2)$ . Die in der Kernphysik typischerweise verwendete Einheit für den Wirkungsquerschnitt ist das Barn  $b = 10^{-28}m^2$ .

In der Quantenmechanik wird das, in z-Richtung, einlaufende Teilchen durch eine Welle beschrieben, zum Beispiel in der Form einer ebenen Welle  $\Psi = e^{ikz}$ . Das auslaufende Teilchen wird in Form der Summe über die auslaufende ebene Welle und einen Streuanteil in Form einer Kugelwelle dargestellt. Die Zahl der gestreuten Teilchen folgt aus der Interferenz dieser beiden Wellenanteile [10].

Desweiteren sind der differentielle und der integrale Wirkungsquerschnitt voneinander zu unterscheiden. Der differentielle Wirkungsquerschnitt  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  gibt die Zahl der Teilchen an, die in den Raumwinkel  $d\Omega$  gestreut werden und hat die Einheit Barn pro Steradian. Der integrale Wirkungsquerschnitt ist das Integral des differentiellen Wirkungsquerschnitts über alle Raumwinkel. Dieser hat die Einheit einer Fläche und wird in Barn angegeben.

Im Gegensatz zu der Anregung mit Photonen, bei der nur diskrete Energiewerte im Absorptionsspektrum auftauchen, handelt es sich bei der Photoionisation um eine (über die Energie) kontinuierliche Absorption der Photonen. Diese kontinuierliche Absorption tritt aber erst ab der Ionisationskante auf, das heißt ab der kleinsten Energie die notwendig ist, um dem Ion ein Hüllenelektron zu entwinden. Im vorliegenden Fall interessiert die Absorption von Photonen durch Ionen aus einem monoenergetischen Photonenstrahl. Die entscheidende physikalische Größe ist dann der Wirkungsquerschnitt für die Absorption eines Photons. Dieser Beschreibt die Wahrscheinlichkeit der Absorption eines Photons durch das Ion, das heißt die Wahrscheinlichkeit für das Ablaufen des Prozesses „Photoionisation“, und hängt von der Energie des Photons und der Art des Ions (oder allgemein der Art des Targets) ab. Im Fall der Photoionisation besteht die Endzustandsfunktion des Ions (das ein Elektron weniger hat) aus einer  $(N - 1)$ -Elektronen-Wellenfunktion für die restlichen, gebundenen Elektronen des Ions und der Kontinuumswellenfunktion für das

auslaufende Elektron. Mit Fermi's Goldener Regel folgt der Wirkungsquerschnitt für Photoionisation

$$\sigma_{ph}(E) = 4\pi^2 \frac{e^2}{\hbar c} \hbar\omega_\lambda |\vec{\pi}_\lambda \vec{r}_{ea}|^2, \quad (2.26)$$

der aufgrund der Normierung der Endzustände die Dimension einer Fläche hat [9]. Dieser Wirkungsquerschnitt wird oft mit der Kramer-Formel abgeschätzt

$$\sigma_i^{ph}(n) = \frac{64\pi a_0^2 \alpha}{3\sqrt{3}n^2} \left( \frac{|E_0|}{|E_0| + E_e} \right)^3, \quad E_0 = R_y \frac{Z^2}{n^2}, \quad (2.27)$$

wobei  $\alpha$  die Feinstruktur Konstante,  $a_0$  der Bohr'sche Radius und der Rydberg-Energie  $R_y$ . Die Formel beinhaltet außerdem die Ladung des Ions  $Z$ , die Photonenenergie  $\hbar\omega$  ( $E_e = \hbar\omega - E_0$ ) und die Hauptquantenzahl  $n$  [11].

### 2.2.1 Theoretische Modelle

Theoretische Modelle, die nun die genauen Wirkungsquerschnitte für die Photoionisation bestimmter Ionen beschreiben, gehen weit über diese grundlegenden theoretischen Überlegungen, die hier bisher beschrieben wurden, hinaus. Es müssen nicht nur relativistische Effekte und QED-Effekte, sondern auch die Wechselwirkung der Elektronen untereinander berücksichtigt werden. Es muss also rechnerisch ein Mehr-Körper-Problem gelöst werden. Generell gibt es aber schon bei mehr als einem Elektron in der atomaren oder ionischen Hülle keine analytische Lösung mehr für das Problem. Somit ist es nur durch Näherungsverfahren möglich die Energieniveaus zu bestimmen. Ausgehend von verschiedenen Punkten haben sich unterschiedliche Näherungsverfahren, die ihre Ergebnisse durch Variationsansätze oder störungstheoretische Ansätze erhalten, entwickelt.

#### Multikonfigurations-Dirac-Fock-Verfahren MCDF

Die Multikonfigurations-Hartree-Fock-Methode (MCHF) beruht auf dem Variationsprinzip. Sie geht von Einteilchenwellenfunktionen aus und ermöglicht es Energien und Wellenfunktionen von Mehrteilchen-Problemen näherungsweise zu bestimmen. Die Variation erfolgt nach der Methode des Ritz'schen Variationsprinzips. Für das Aufstellen der Hartree-Fock-Gleichung wird die Wellenfunktion als Slaterdeterminante (eine antisymmetrisierte Produktwellenfunktion aus Einelektronen-Wellenfunktionen) angesetzt. Bei dem MCHF-Verfahren besteht die Wellenfunktion aus

einer Summe von Slaterdeterminanten, um auch Korrelationseffekte und im weiteren Verlauf der Rechnungen die Konfigurationswechselwirkungen zu erfassen. Bei diesem Verfahren wird unter Variation der Koeffizienten (aus der Summe über die Slaterdeterminanten) und der Einteilchenzustände in den Slaterdeterminanten der Zustand gesucht, für den die Energie minimal wird. Dieses Verfahren ist allerdings eine nichtrelativistische Herangehensweise an das Problem. Um auch relativistische Effekte mit einzubeziehen wird eine Eielektronenwellenfunktion nach der Dirac-Theorie aufgestellt und in das MCHF Verfahren integriert. Dies führt auf das Multikonfigurations-Dirac-Fock-Verfahren (MCDF). Für eine tiefer gehende Behandlung der Rechnungen sei auf [9] verwiesen.

### Störungstheoretische Methoden

Eine weitere Methode, um Mehrkörperprobleme zu lösen sind die sogenannten perturbativen Methoden. Bei diesen handelt es sich zum Beispiel um die „Relativistic-Many-Body-Perturbation-Theorie“ (RMBPT). Hierbei werden Wechselwirkungen zwischen Elektronen und radiative Korrekturen als Störung behandelt. Als weitere Methode sei noch die „Bound State QED“ (BSQED) genannt. Sie kann unabhängig von der schwere des Elements dafür aber eher für Systeme mit wenigen Elektronen angewendet werden. Bei dieser Methode werden die Wechselwirkungen zwischen den Elektronen durch Photonenaustausch (QED) beschrieben [12].

#### 2.2.2 Autoionisation

Im Folgenden geht es um weitere Sorten angeregter Ionen. Bei dieser Art sind mindestens zwei Hüllenelektronen oder ein Elektron aus einer inneren Schale angeregt. Diese Zustände können unter Emission von Photonen oder strahlungslos zerfallen. Hier soll nur der strahlungslose Zerfall, die sogenannte Autoionisation, besprochen werden bei dem ein, um eine Stufe höher, ionisiertes Ion zurück bleibt (Abbildung 2.4).

Zu der Erzeugung solcher „autoionisationsfähigen“ Zustände kommt es, wenn mindestens zwei Elektronen oder ein Innerschalenelektron durch Absorption der Synchrotronstrahlung bei ausreichend hoher Energie angeregt werden. Die Autoionisation findet nur statt, wenn die Gesamtenergie des angeregten Zustandes oberhalb der Ionisationsenergie liegt. Beim strahlungslosen Zerfall geht eines der Elektronen in einen energetisch niedrigeren Zustand über und transferiert, aufgrund der

Korrelation zwischen den Elektronen, seine Energie auf das zweite Elektron. Dies hat nun genug Energie um das Ion zu verlassen [8]. Der vorübergehende angeregte Zustand, der durch Absorption des Photons entsteht und oberhalb der Ionisationsschwelle liegt stellt einen diskreten Zustand dar, der ins Kontinuum eingebettet ist [13]. Oberhalb der Photoionisationsschwelle fällt der Wirkungsquerschnitt für den

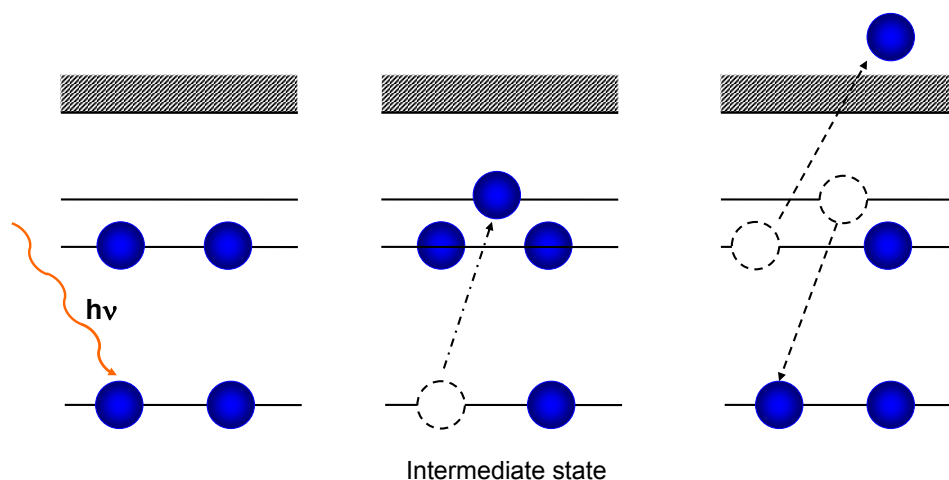


Abbildung 2.4: Schematischer Ablauf der Autoionisation, für den Fall der einfachen Anregung eines Innerschalenelektrons. Durch Absorption eines Photons (orange) wird ein vorübergehend angeregter Zustand erzeugt (intermediate state). Dieser relaxiert unter Emission eines Elektrons.

direkten Prozess monoton ab. Allerdings tauchen während des Abfalls an Stellen bestimmter Energiewerte signifikante Resonanzen im Wirkungsquerschnitt auf. Diese Maxima im Wirkungsquerschnitt sind Hinweise auf einen resonanten Prozess und haben ihren Ursprung in der Tatsache, dass es bei höheren Photonenergien möglich ist Elektronen mit höheren Bindungsenergien in den Prozess der Photoionisation mit einzubeziehen. Das heißt es werden nun auch Elektronen aus tieferen Schalen mit einbezogen und die, oben besprochene, Autoionisation überlagert das kontinuierliche Spektrum der Photoionisation. Bekannterweise kann es bei dem parallelen Ablauf von zwei möglichen physikalischen Prozessen zu der Interferenz der beiden Prozesse kommen. Im Fall der direkten Photoionisation oberhalb der Schwelle und der Autoionisation ist der Anfangszustand ein Ion und ein Photon bestimmter Energie. Der Endzustand ist ebenfalls bei beiden Prozessen gleich und besteht aus einem Ion mit einer erhöhten Ladung und einem entkommenen Hüllenelektron mit einer bestimmten kinetischen Energie.

Die Interferenz der beiden Prozesse macht sich in der Linienform der Resonanzen



im Wirkungsquerschnitt (in Abhängigkeit von der Energie) bemerkbar. Sie wurde im speziellen Fall der Autoionisation von U. Fano studiert und durch das Fanoprofil beschrieben. Der Verlauf des Wirkungsquerschnitts im Bereich der Autoionisationsresonanz ergibt sich, nach Fano und Cooper, zu

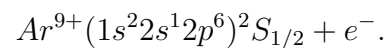
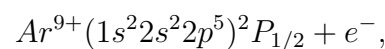
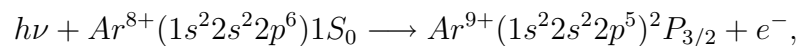
$$\sigma(E) = \sigma_a \frac{(\epsilon + q)^2}{1 + \epsilon^2} + \sigma_b \quad (2.28)$$

mit der reduzierten Energie  $\epsilon = \frac{\Delta E}{(\Gamma/2)} = \frac{(E-E_r)}{\Gamma/2}$  in Einheiten der halben Linienbreite  $\Gamma/2$  der Resonanz. Sowie mit den beiden Absorptionswirkungsquerschnitten  $\sigma_a$  für die Absorption durch den angeregten Zustand und  $\sigma_b$  für die Untergrundabsorption durch direkte Anregung ins Kontinuum [8].  $E_r$  gibt die energetische Lage der Resonanz an. Die genauere Linienform soll in einem späteren Abschnitt erläutert werden.

### 2.2.3 Theorie der $\text{Ar}^{8+}$ -Photoionisation

Die Vorliegende Arbeit bezieht sich auf die Messdaten, welche 2008 und 2009 bei Strahlzeiten der FLASH-EBIT am Elektronenspeicherring BESSY II aufgenommen wurden. Unter anderem wurde, in der Strahlzeit 2009, das Ion  $\text{Ar}^{8+}$  (achtfach geladenes Argon) photoionisiert. Diese Daten werden im letzten Kapitel ausführlich besprochen, jedoch sollen erste theoretische Überlegungen schon hier erfolgen.

Bei dem Ion  $\text{Ar}^{8+}$  handelt es sich um ein neonartiges System, die einfachste Edelgasstruktur mit mehreren Schalen. Im Grundzustand sind die ersten beiden Schalen vollständig gefüllt, so dass sich die Elektronenkonfiguration  $1s^2 2s^2 2p^6$  ergibt. Der Prozess der Photoionisation aus dem Grundzustand führt zum Herauslösen eines Elektrons und dem Entstehen des  $\text{Ar}^{9+}$ -Ions. Für den Endzustand dieser Reaktion gibt es drei verschiedene Möglichkeiten [14] und der Ionisationsverlauf lässt sich folgendermaßen darstellen



Für die theoretische Beschreibung der Photoionisation von  $\text{Ar}^{8+}$ , mit der die experimentellen Daten im Laufe dieser Arbeit verglichen werden, wurden der Breit-Pauli-Hamiltonian in der R-Matrix-Methode verwendet und mit der QB-Methode kombiniert [14]. Unter dem Breit-Pauli-Hamiltonian versteht man den Energieoperator für ein Elektron in einem elektrischen oder magnetischen Feld.

Die R-Matrix-Methode wurde eigentlich entwickelt um Probleme in der Kernphysik zu lösen, ist aber auf unterschiedliche Probleme anwendbar. Das Problem wird bei dieser Methode räumlich in zwei Bereiche aufgeteilt und somit auf zwei einzelne Probleme vereinfacht, die nun zu lösen sind. Es entsteht ein Problem für große Abstände und ein schwereres, aber lösbares für kleine Abstände (bei denen aufgrund der Quantennatur zum Beispiel kein Unterschied mehr zwischen ununterscheidbaren Teilchen gefunden werden kann). Über die R-Matrix werden diese Regionen dann wieder miteinander verknüpft. Die Matrix beinhaltet die Information für den Übergang von der einen in die andere Region. Somit kann nun auch das Problem der Photoionisation, bei der ein Lichtteilchen in den inneren Bereich eintritt und ein Elektron den inneren Bereich verlässt, gelöst werden. Die QB-Methode definiert Matrizen  $Q$  und  $B$  in Form von asymptotischen Lösungen [15].

Die rechnerische Anwendung der R-Matrix-Methode findet in [14] folgendermaßen statt. Ein Bereich mit Radius  $a$  um den Massenmittelpunkt des Systems wird so gelegt, dass er das Atom (den „ $N$ -Elektronenkern“) einschließt. Befindet sich das photoionisierte Elektron noch in diesem Bereich, so ist eine Mehr-Körper-Schrödinger-Gleichung zu lösen. Befindet sich das Elektron außerhalb des Bereichs, so kann jede Wechselwirkung zwischen dem photoionisierten und den Elektronen des Atoms vernachlässigt werden, und es ist nur noch ein Zweikörperproblem zu lösen. Als R-Matrix Radius wird in der Theorie ein Wert von 3,5 a.u. und eine Anzahl von 20 Kontinuumsorbitalen (diese repräsentieren die Bewegung des photoionisierten Elektrons) verwendet.

Weitere Rechnungen für die Photoionisation wurden von einem der sogenannten „Opacity-Projekte“, „TOPbase“, ausgeführt. Dabei werden nichtrelativistischen Rechnungen mit dem „close-coupling“-Näherungsverfahren und der R-Matrix-Methode durchgeführt.

## 2.3 Photoionisation angeregter Ionen (metastabile Zustände)

Im Allgemeinen wird in der Physik ein angeregter Zustand dadurch charakterisiert, dass er eine Energie hat, die höher ist als die niedrigst mögliche Energie des Systems (Grundzustand). Im vorliegenden Fall handelt es sich um Ionen, deren Hüllenelektronen sich nicht in der energetisch niedrigsten Anordnung befinden. Physikalische Systeme, auch angeregte Atome und Ionen, streben immer den energetisch niedrigsten Zustand an. Somit ist die Lebensdauer solcher Zustände begrenzt, kann aber zwischen Zeiträumen von weit unter einer Sekunde bis hin zu Jahrtausenden variieren. Die Übergangswahrscheinlichkeit und somit die mittlere Lebensdauer hängt von Auswahlregeln, dem Energieunterschied, der beteiligten Niveaus und der äußeren Umgebung in der sich das Atom befindet (zum Beispiel vom Druck) ab. Ein angeregter Zustand mit besonders langer Lebensdauer, wird auch „metastabiler Zustand“ genannt.

Die Zeitabhängigkeit der Besetzungsdichte angeregter Zustände hängt von der Übergangswahrscheinlichkeit in tiefer liegende Niveaus durch Abgabe eines Photons oder durch strahlungslose Relaxation (zum Beispiel durch inelastische Stöße) ab. Letzterer Prozess wird allerdings in der EBIT unterdrückt, da sie ein dünnes Ionen-gas mit (bei ausgeschaltetem Ionenstrahl) sehr niedriger Stoßrate zur Verfügung stellt. Die Besetzungsdichte eines angeregten Zustandes sinkt somit exponentiell in Abhängigkeit von der Zeit. Mit der Summe,  $A_i$ , über alle Wahrscheinlichkeiten pro Zeit für erlaubte Übergänge in alle möglichen tieferen Energieniveaus.

$$N_i(t) = N_i(0)e^{-A_i t} \quad (2.29)$$

Die mittlere Lebensdauer  $\tau = \frac{1}{A_i}$  des angeregten Zustandes bestimmt durch die Heißenberg'sche Unschärferelation

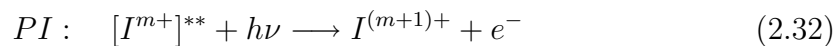
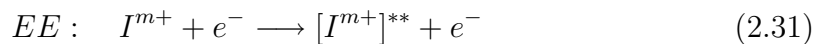
$$\Delta E \tau \geq \hbar \quad (2.30)$$

die natürlichen Energiebreite  $\Delta E$  des oberen Niveaus beziehungsweise der Übergangsenergie, und somit die Wellenlänge der spektralen Linie.

## Bedeutung für das Experiment

In der FLASH-EBIT kommt es nicht nur zur Produktion von Ionen im Grundzustand sondern parallel zum Ionisationsprozesses auch zu der Entstehung von angeregten Ionenzuständen. Die Entstehung der angeregten Ionen in der FLASH-EBIT lässt sich auf inelastische Stöße zwischen den Elektronen des Elektronenstrahls (Informationen zur EBIT finden sich im folgenden Kapitel) und den Ionen zurückführen. Dabei geben die Elektronenstrahl-Elektronen im Verlauf des Stoßes nur einen Teil ihrer kinetischen Energie ab, nämlich genau die jene, die notwendig ist um das Hüllenelektron eines Ions auf ein höheres Energieniveau zu heben. Die Anregungsenergien liegen im Bereich von einigen eV bis einigen 100 eV.

Der ablaufende Prozess bei der Ionanregung durch inelastischen Elektronenstoß (EA) und der folgenden Photoionisation (PI) des angeregten Ions lässt sich folgendermaßen beschreiben



Im Experiment liefern die metastabilen Zustände nur signifikante Beiträge, wenn ihre Lebensdauer lang genug ist. Das heißt das angeregte Ion muss mindestens so lange existieren, dass es eine Wahrscheinlichkeit gibt, um mit einem Photon des Synchrotronstrahls zu wechselwirken. In den Spektren der Ionenrate in Abhängigkeit von der Photonenenergie treten diese metastabilen Ionen als Photoionisationsresonanzen vor der eigentlichen Photoionisationsschwelle auf, liefern aber auch noch oberhalb der Schwelle Beiträge. Das heißt in Abhängigkeit von dem Maß ihrer Anregung, auf welches Niveau ein äußeres Hüllenelektron also schon angehoben worden ist, ist weniger Energie notwendig um das Elektron aus dem Ion zu lösen. Somit ist also ein Photon mit geringerer Energie als der Photoionisationsschwellenenergie fähig das Elektron herauszulösen und Photoionisationsstrukturen unterhalb der eigentlichen Schwelle für Photoionisation aus dem Grundzustand ein eindeutiger Hinweis auf das Vorhandensein von Ionen in metastabilen Zuständen in der Falle.

## 2.4 Linienformen der Resonanzen

Wie allgemein bekannt ist weisen Peaks in einem diskreten Spektrum nicht die Form einer Delta-Funktion auf. Es gibt Linienbreiten und -formen die umgebungsabhängig sind. Die grundlegende Linienbreite, die natürliche Linienbreite, entsteht ohne äußere Einflüsse und resultiert aus der Heißenberg'schen Unschärferelation  $\Delta E \Delta t \geq \hbar$  [13]. Das normierte Intensitätsprofil einer Linie um die Resonanzfrequenz  $\omega_0$

$$g_\omega(\omega) = \frac{\gamma/2\pi}{(\omega - \omega_0)^2 + (\gamma/2)^2} \quad (2.33)$$

wird Lorentzprofil genannt, mit der natürlichen Linienbreite  $\gamma$ . Lebensdauer nicht metastabiler angeregter Zustände in der Atomhülle liegen im Bereich von  $10^{-8}$  Sekunden, aus der eine Linienbreite im Bereich von  $\mu\text{eV}$  folgt.

Bewegen sich Atome oder Ionen allerdings durch thermische Anregung, so kommt es zu einer Verbreiterung der Linie durch den Dopplereffekt aufgrund der Frequenzverschiebung der Mittelfrequenz durch die Atomgeschwindigkeit  $\vec{v}$ . Mit Berücksichtigung der Maxwell'schen Geschwindigkeitsverteilung und aller drei Raumrichtungen ergibt sich eine Frequenzverschiebung hin zu größeren und zu kleineren Energien. Die Dopplerverbreiterung einer unendlich schmalen spektralen Linie der Frequenz  $\omega_0$  lässt sich durch eine Gaußfunktion darstellen.

$$I(\omega) = I(\omega_0) \cdot e^{-[c(\omega - \omega_0)/(0,6\delta\omega_D)]^2} \quad (2.34)$$

Hier ist die Halbwertsbreite durch  $\delta\omega_D$ , die Dopplerbreite, gegeben.

In der Regel überwiegt die Dopplerverbreiterung gegenüber der natürlichen Linienbreite bei weitem, das heißt das Linienprofil lässt sich mit einer Gauß'schen Funktion gut darstellen. Wenn aber die natürliche Linienbreite und die Dopplerbreite in etwa die gleiche Größenordnung haben, ergibt sich für das Linienprofil eine Form, die durch die Faltung beider Funktionen gegeben ist, das sogenannte Voigt-Profil

$$I(\omega) = C \int_0^\infty \frac{\exp(-c^2(\omega - \omega')^2/(\omega'^2 v_w^2))}{(\omega - \omega')^2 + (\gamma/2)^2} d\omega' \quad (2.35)$$

mit  $C = \gamma I_0 N_i c / (2\pi^{3/2} \omega_0 v_w)$  [16].

Eine weitere Linienverbreiterung ist durch die Stoßverbreiterung möglich. Dabei werden in den Atomen durch Stöße angeregte Energieniveaus abgeregt. Ihre Lebenszeit wird somit, abhängig vom Druck, künstlich verkürzt und ihr Energieunschärfe (und

damit die Linienbreite) vergrößert.

Zusätzlich gibt es aber auch Linienformen, die von der Möglichkeit abhängen, dass zwei Prozesse parallel ablaufen und interferieren. Dies ist auf die quantenmechanisch Kopplung zwischen diskreten Energiezuständen und Kontinuumszuständen zurückzuführen und kann in Atomen, Ionen, Molekülen oder auch in Festkörpern auftreten. Dazu müssen der Anfangs- und der Endzustand bei beiden Prozessen gleich sein, so dass nicht unterschieden werden kann, welcher Prozess abgelaufen ist. Im Fall der Autoionisation handelt es sich bei den Kopplungspartnern um den quasigebundenen Zustand der zwei angeregten Elektronen im Ion und dem Kontinuumszustand des ionisierten Elektrons. Die dabei auftretende charakteristische Veränderung des Wirkungsquerschnitts an der Stelle der Resonanz wird durch die Beutler-Fano-Funktion beschrieben:

$$F(q; \epsilon) = \frac{(q + \epsilon)^2}{1 + \epsilon^2} \quad (2.36)$$

Hierbei ist  $\epsilon = \frac{E-E_0}{\Gamma/2}$ , mit der Resonanzenergie  $E_0$  und der Linienbreite  $\Gamma$ , und  $q$  der Fanoparameter (oder Formparameter) und steht für das Verhältnis

$$q = -\frac{D_1^2}{D_2 R_{12}} \quad (2.37)$$

der quadratischen Übergangsamplitude  $D_1$  zum gebundenen Zustand sowie dem Produkt aus der Übergangsamplitude ins Kontinuum  $D_2$  und der Kopplung  $R_{12}$  zwischen beiden Zuständen. Im Fall, dass beide Übergangsmomente für die verschiedenen Pfade ein Elektron aus dem Grundzustand ins Kontinuum zu heben die gleichen Amplituden haben aber entgegengesetzte Phasen, kommt es zu destruktiver Interferenz und der Wirkungsquerschnitt ist Null. Das heißt beide Beiträge heben sich im Fall  $q = -\epsilon$  gegenseitig auf. Die Fano-Resonanzkurve ist auf einer Seite, der Seite auf der die Nullstelle liegt, steiler. Welche Seite das ist, hängt vom Vorzeichen des Form-Parameters  $q$  ab. Das Kurvenmaximum lässt sich, mit einer Höhe von  $1 + q^2$ , bei  $\epsilon = \frac{1}{q}$  finden. Für größer werdende  $\epsilon$  gehen die Werte der Beutler-Fano-Funktion gegen 1 und man erhält den Wirkungsquerschnitt, den man ohne Interferenz mit einer Autoionisation erwarten würde.

Die Linienbreite  $\Delta E = \frac{1}{\tau}$  (FWHM, engl. Full Width at half Maximum) wird durch die Lebensdauer  $\tau$  des doppelt angeregten Zustandes bestimmt. Diese Lebenszeit wird häufig durch den Prozess der Autoionisation bestimmt, da dieser eine höhere

Wahrscheinlichkeit, im Vergleich zur radiativen Stabilisierung des angeregten Zustandes, hat. Die Dominanz der Autoionisation über die radiative Stabilisierung ist aber von der Kernladungszahl und dem Ladungszustand des Ions abhängig. Die typische Lebensdauer (für Atome) liegt im Bereich von  $\tau = 10^{-12} - 10^{-14} \text{ s}$ . Abhängig vom  $q$ -Wert wird das Fano-Profil experimentell oft am Ort der Autoionisation durch die Dopplerverbreiterung überdeckt. Erst bei hoher Messgenauigkeit im Experiment tritt die eigentliche Linienform zutage.

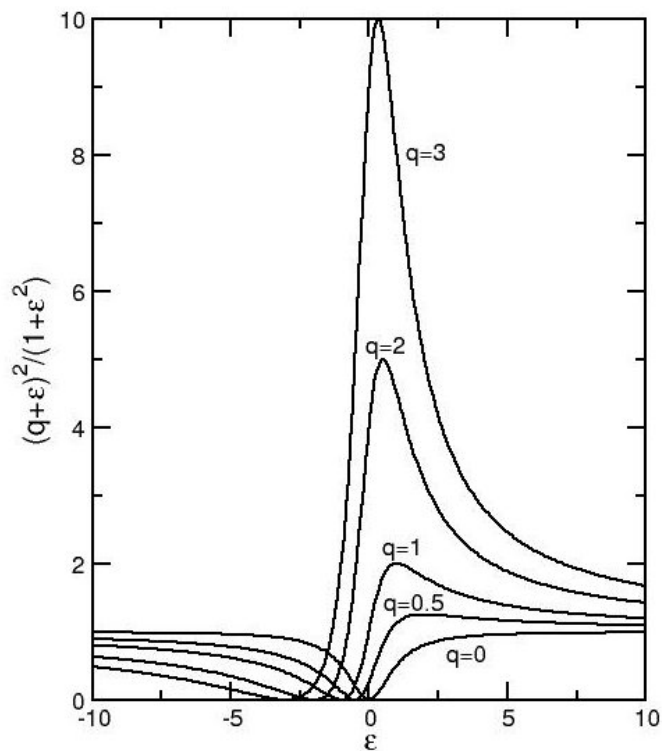


Abbildung 2.5: Verlauf der Fanofunktion für verschieden Formfaktoren  $q$  [17]

## 2.5 Theorie der elektrostatischen Ionenoptik

Ionen lassen sich wie Lichtstrahlen, die beim Durchgang durch transparente Materialien an der Oberfläche gebrochen und somit abgelenkt werden, auf ihrem Weg führen und abbilden. Allerdings übernehmen dabei elektrostatische Felder die Aufgabe des transparenten Materials. Diese elektrostatischen Felder werden üblicherweise von rotationssymmetrischen Elektroden, die eine zylindrische Bohrung haben, hervorgerufen.

Der Einsatz elektrostatischer Linsen wurde wohl erstmals 1930 von Brüche im Zuge ihrer Anwendung auf Elektronen vorgeschlagen [18]. Obwohl die Verwendung elektrostatischer Linsen ihren Ursprung und Fortschritt der Anwendung auf Elektronen zu verdanken hat, sind solche Linsen doch auch für schwerere Teilchen, wie Ionen, geeignet. Um Ionen zu lenken oder ihren Verlauf für Abbildungen vorzubereiten bieten sich elektrostatische Linsen an, da sie nämlich im Fall von Ionen effektiver als magnetische Linsen arbeiten und ihr Verhalten unabhängig von der Teilchenmasse ist [19]. Mit ausgefeilten Linsensegmenten ist es nicht nur möglich die Ionen zu lenken sondern auch Abbildungsfehler, die sich zum Beispiel durch das Vorhandensein einer ausgedehnten Quelle ergeben, teilweise zu beheben.

Bis in den 70er Jahren mit Hilfe von Computern der Potentialverlauf eines Linsensembles numerisch bestimmt werden konnte, wurde der Effekt elektrostatischer Linsen nur experimentell, zum Beispiel mittels eines „elektrolytischen Troges“ ermittelt. Heutzutage gestatten Programme wie SIMION, den Verlauf der Potentiallinien und die Bahnen der Ionen zu simuliert. Dazu nutzen solche Programme unter anderem die Finite-Differenzen-Methode (FDM) bei der das zu berechnende Gebiet in bis zu eine Million Gitterpunkte eingeteilt wird und die Differentialgleichung, durch Umwandeln der Ableitungen an den Gitterpunkten in Differenzen, numerisch bestimmt wird.

Die Beschreibung der Bewegung geladener Teilchen in einem elektrostatischen Feld ergibt sich allgemein durch die Bahngleichung oder durch die relativistische Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt} \left\{ \frac{m\vec{v}}{\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{\frac{1}{2}}} \right\} = e \left( \vec{E} + \vec{v} \times \vec{B} \right) \quad (2.38)$$

mit der Ruhemasse  $m$  und der Ladung  $e$  des Teilchens.

Das elektrostatische Feld  $\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi$  verläuft in der Richtung der Flächennormalen der Äquipotentiallinien. Für die Behandlung der Bewegungsgleichung in dem Feld einer zylindrischen Elektrode lässt sich die Symmetrie des Problems ausnutzen. Der Linseneinfluß in einem radialsymmetrischen Feld beruht auf der radialen Komponente des elektrischen Feldes  $\vec{E}_r$ . In Achsennähe der Linse kann es durch die  $z$ -Komponente des Potentials beschrieben werden  $\vec{E}_r = \frac{-r(d^2\Phi/d^2x)_{(z)}}{2}$ . Gleichzeitig ändert sich aber die Geschwindigkeit der Teilchen in  $z$ -Richtung aufgrund der beschleunigenden oder abbremsenden Komponente des elektrostatischen Feldes. In der paraxialen Näherung (das heißt es werden kleine Werte von  $r$  und  $\frac{dr}{dt}$  angenommen)



ergibt sich die Bahngleichung zu

$$\frac{d^2r}{dt^2} + \frac{\gamma}{2} \frac{(d\Phi/dx)}{\Phi^*} \frac{dr}{dt} + \frac{\gamma}{4} \frac{(d^2\Phi/d^2x)}{\Phi^*} r = 0 \quad (2.39)$$

mit  $\gamma_{(z)} = 1 + 2\epsilon\Phi_{(z)}$ ,  $\epsilon = \frac{|e|\hbar}{2mc^2}$  und  $\Phi^*$  bezeichnet das relativistisch korrigierte Potential  $\Phi^* = \Phi_{(z)}^* = \Phi_{(z)}(1 + \epsilon\Phi_{(z)})$ . Das Vorzeichen und der Nullpunkt des Potentials (Eichung)  $\Phi_{(z)}$  sind so gewählt, dass  $|e|\Phi^*$  der kinetischen Energie des Teilchens entspricht. Da die Masse des Teilchens nur in  $\epsilon$  auftaucht ist leicht zu ersehen, dass die Trajektorie nur schwach von der Teilchenmasse abhängt. Somit kann für Ionen immer mit der nichtrelativistischen Näherung der Bahngleichung gearbeitet werden, das heißt es gilt  $\epsilon = 0$ ,  $\gamma = 1$ . Unter anderem impliziert Gleichung 2.39, dass sich für nichtrelativistische Strahlen bei Änderung aller Spannungen, inklusive der Extraktions- und der Teilchenenergie, um den gleichen Faktor nichts an den optischen Eigenschaften ändert. Ausführlichere Information zu der Theorie finden sich in [19].



# Kapitel 3

## Experiment

Dieser Abschnitt beschäftigt sich mit den Anforderungen an einen Aufbau der die Messung von Photoionisation hochgeladener Ionen erlaubt. Der, für diese Diplomarbeit, verwendete Aufbau am Berliner Elektronenspeicherring BESSY II wird im Detail beschrieben.

### 3.1 Anforderungen und Konzept

Um die Photoionisation an hochgeladenen Ionen zu untersuchen ergeben sich folgende experimentelle Anforderungen: erstens müssen hochgeladene Ionen eines geforderten Elements und Ladungszustandes hergestellt und gespeichert werden. Zweitens sind sie zu photoionisieren und drittens müssen sie extrahiert werden können um sie schließlich zu detektieren.

Der Aufbau zerfällt somit in drei Teile. Die erste Komponente, die FLASH-EBIT, erzeugt Ionen eines gewünschten Elements, speichert sie und stellt eine Targetdichte bereit, die Photoionisation ermöglicht. Die zweite Komponente – der Elektronenspeicherring BESSY II – liefert die Photonen eines bestimmten Energiebereichs mit denen photoionisiert werden kann. Das dritte Element des experimentellen Aufbaus, das Extraktionsstrahlrohr der FLASH-EBIT, bewerkstelligt die Extraktion der Ionen verschiedener Ladungszustände und erlaubt Nachweis, Abbildung und Unterscheidung der Ionen. Eine Übersicht über diesen Aufbau, wie er in den Messkampagnen 2008 und 2009 verwendet wurde, ist in Abbildung 3.1 dargestellt.

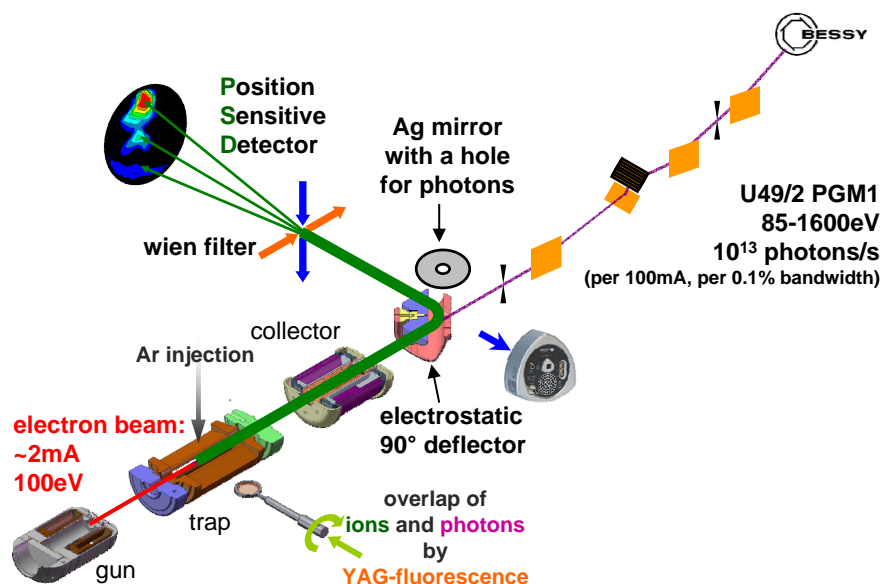


Abbildung 3.1: Schematischer Aufbau der Photoionisationsmessung mit der FLASH-EBIT, der Ionenextraktions- und Detektionsvorrichtung, und dem Monochromator U49/2 PGM1 der Photonquelle (BESSY II) (Quelle [20] verändert).

## 3.2 Photonenquelle BESSY II

### 3.2.1 Messplätze

Als Photonenquelle ist insbesondere für Photoionisationsexperimente die Synchrotronstrahlung eines Elektronenspeicherrings zweckmäßig. Der Vorteil dieser Strahlung gegenüber anderen Lichtquellen, wie Röntgenröhren oder Entladungslampen, liegt in dem intensiven Fluss, der exzellenten Energieauflösung und des leicht durchstimmbaren Wellenlängenbereichs. Deshalb wurde das, dieser Arbeit zugrunde liegende, Photoionisationsexperiment am Elektronenspeicherring BESSY II (Berliner Elektronenspeicherring-Gesellschaft für Synchrotronstrahlung, Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie) durchgeführt. Dieser Elektronenspeicherring ist eine Synchrotronstrahlungsquelle der dritten Generation bei dem die Strahlung unter anderem auch in sogenannten IDs (engl. Insertion Device) - Undulatoren und Wiggler - erzeugt wird.

Wenn relativistische, Elektronen in Speicherringen durch Sektormagneten auf eine Kreisbahn gelenkt werden oder in periodischen magnetischen Strukturen (Undulatoren und Wiggler) abgelenkt werden, emittieren sie tangential zu ihrer Bewegungsrichtung Strahlung. Im einfachsten Fall verläuft das Magnetfeld in vertikaler Richtung entlang der Elektronenbahn sinusförmig. Die Elektronen erfahren durch das magnetische Feld eine Ablenkung, woraus ihre horizontalen, sinusförmigen Elektronenbahn resultieren. Die Elektronenbewegung kann durch den sogenannten Ablenkparameter charakterisiert werden.

$$K = \frac{eB_0\lambda_u}{2\pi mc} = 0,934\lambda_u[cm]B_0[T] \quad (3.1)$$

$\lambda_u$  steht hier für die magnetische Periode des Undulators und  $B_0$  für den maximalen Magnetfeldwert. Bei Undulatoren ist  $K \leq 1$  und die Strahlung aus verschiedenen Perioden, die in Laufrichtung der Elektronen emittiert wird, interferiert kohärent. Die von den Elektronen abgestrahlte Energie in  $keV$  ergibt sich zu

$$\varepsilon_1[keV] = 0,950 \frac{E^2[GeV]}{(1 + K^2/2)\lambda_u[cm]} \quad (3.2)$$

An allgemeinen Spezifikationen der Anlage sind zu nennen: eine Elektronenenergie von 2 GeV, ein Elektronenstrom bis 300 mA, eine typische Strahllebensdauer von 8 Stunden (im Multi-Bunch-Modus) und Photonenergien von 10 eV bis 30 keV [21]. BESSY II stellt drei verschiedene Betriebsmodi zur Verfügung – den „*multi bunch hybrid modus*“, den „*single bunch modus*“ und den „*low-alpha multi bunch hybrid modus*“, deren Eigenschaften in Tabelle 3.1 verglichen werden. Für das, in dieser Arbeit vorgestellte, Experiment wurde der *Multi-Bunch*-Betrieb (Standard-Modus des Speicherrings) genutzt. Die Photonen vom VUV- bis zum Röntgenbereich lieferten für unsere Experimente die, mit Undulatoren ausgestatteten, Strahlrohre U49/2-PGM1 und U125/2-SGM1. Das Strahlrohr U49/2-PGM1 wurde unter den Bedingungen konstruiert einen sehr hohen Fluss mit hoher Brillianz am Probenort zu erzeugen und diese Bedingungen über einen großen Bereich von Photonenergien bei hohem Auflösungsvermögen der Photonenergie beizubehalten. Das Design dieses Strahlrohres basiert auf einem Monochromator mit parallelgerichteten Gittern, PGM (*plane grating monochromator*), wohingegen das Design der U125/2-SGM auf einem SGM (engl. *spherical grating monochromator*) basiert. Der hohe Fluss wird beim PGM erreicht, indem die Gitter des Monochromators während der

Tabelle 3.1: Vergleich der drei Betriebsmodi, die der Elektronenspeicherring BESSY II zur Verfügung stellt [21].

	Multi Bunch	Single Bunch	Low Alpha
$E_{kin}(e^-)$	1,7 GeV	1,7 GeV	1,7 GeV
maximaler Ringstrom	300 mA	20 mA	40 mA
maximale Lebensdauer	8 h	2 h	16 h
Anzahl $e^-$ -Pakete	320 bis 400 + ein Einzelnes	1	320 bis 400 + ein Einzelnes
mögliche Anwendung	Pump-Probe- Experimente	zeitaufgelöste Experimente	zeitaufgelöste Experimente

Photonenergie-Scans „*on-blaze*“ gefahren werden. Beim Blazewinkel stimmen die Winkel der Beugung in erster Ordnung und die Normalreflexion auf die vordere Fläche der Gitterstriche überein, wodurch sich ein Maximum der Beugungseffizienz ergibt. Um die Blazebedingung bei einem großen Wellenlängenbereich erfüllen zu können, müssen sowohl Einfallswinkel als auch Ausfallswinkel simultan verändert werden. Dies geschieht durch Kopplung der Gitterdrehung mit der Rotation eines zusätzlichen Spiegels. Während dieser *on-blaze* Scans des PGMs bleibt das spektrale Auflösungsvermögen innerhalb des Photonenbereichs von 80 eV bis 2000 eV konstant [23]. Dafür stehen zwei Blazegitter, mit einem Blazewinkel von  $0,8^\circ$ , zur Verfügung. Der Strahlverlauf hinter dem Undulator U49/2 (84 Perioden mit 49 mm Periodenlänge) ist in Abbildung 3.2 dargestellt. Als erstes optisches Element findet der Photonenstrahl den horizontal ablenkenden toroidalen Spiegel  $M_1$  vor. Dieser Spiegel kollimiert die Synchrotronstrahlung in vertikale und horizontale Richtung. Danach wird der Strahl vom Planarspiegel  $M_2$  reflektiert und am Gitter G gebeugt. Im weiteren Verlauf fokussiert der zylindrische Spiegel  $M_3$  den Strahl vertikal auf den Ausgangsschlitz. Schlußendlich refokussiert der Spiegel  $M_4$  das Bild des Ausgangsschlitzes vertikal und praktisch vergrößerungsfrei (1,8:1,2) sowie horizontal mit einer Verkleinerung von 17:1,2. Daraus folgt der relativ kleine Fokus von  $70 \mu\text{m} \times 20 \mu\text{m}$  FWHM (hor.  $\times$  vert.) am Probenort [22]. Bei unserem Experiment befand sich das Ionentarget etwa 100 mm hinter dem eigentlichen Fokus, so dass der Photonenstrahlquerschnitt dort bereits etwas größer ist.

Die Energieauflösung am Probenort hängt nicht nur vom verwendeten Gitter sondern auch vom sogenannten  $c_{ff}$ -Wert ab. Nicht alle Ein- und Ausfallswinkel,  $\alpha$  und

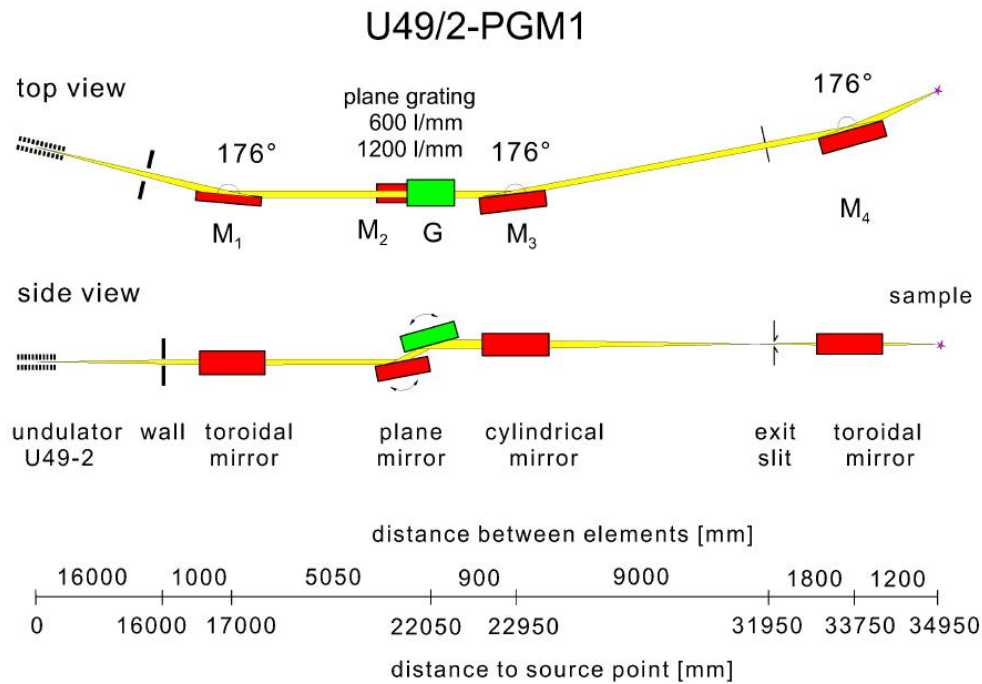


Abbildung 3.2: Photonenstrahlverlauf an dem U49/2-PGM1 Strahlrohr. In der Mitte befindet sich der planare Gittermonochromator. Bei den optischen Elementen handelt es sich um Gitter (G) und Spiegel (M) [22]. An diesem Strahlrohr wurden 2009 Photoionisationsexperimente mit der FLASH-EBIT, von unter anderem  $\text{Ar}^{8+}$  durchgeführt.

$\beta$ , sind für den Planar-Spiegel-Monochromator möglich. Dies führt zu einer Einschränkung der erlaubten Werte der Fix-Fokus Konstante  $c_{ff} = \frac{\cos \beta}{\cos \alpha}$ . Allerdings erlaubt das Verändern dieser Konstante die Verwendung des Monochromators auf verschiedene Betriebsarten. Zum Beispiel in einem Modus mit hoher Auflösung, mit hohem Fluss, in der ersten Ordnung ( $c_{ff} = 1$ ) sowie weiteren Moden, wobei auf [24] verwiesen sei.

### 3.2.2 Photonenenergie und Kalibration

Der Aufbau der Beamline U49/2-PGM1 beinhaltet eine mit Absorptionzellen ausgestattete Kammer, die es ermöglicht die Photonenenergieskala durch Absorptionsmessung an verschiedenen Gasen zu kalibrieren. Hierfür sind hohe Drücke in einer Gaszelle erforderlich um eine signifikante Abnahme des starken Photonenstrahls zu erreichen. Abhängig davon in welchem Bereich die Energieskala kalibriert werden soll wird ein anderes Gas verwendet. Um den Bereich bis 1 keV Photonenenergie ab-

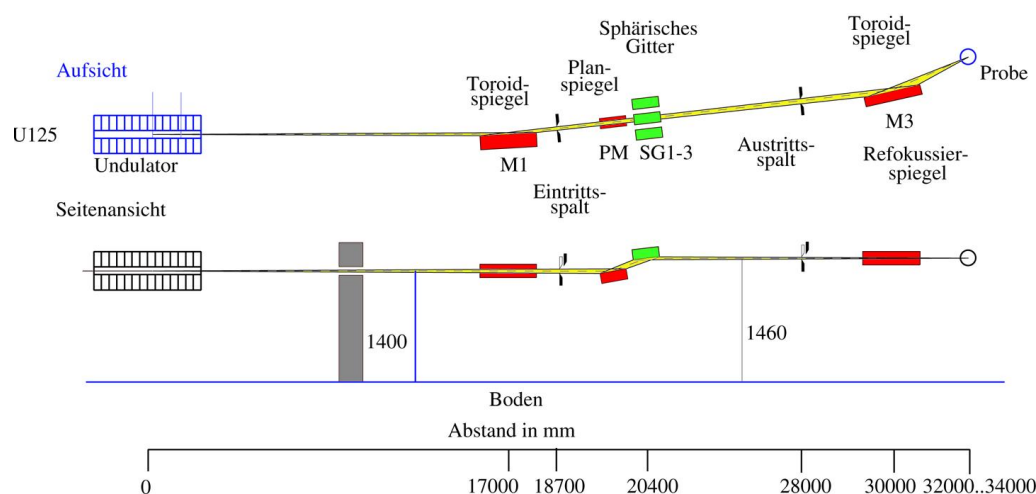


Abbildung 3.3: Photonenstrahlverlauf des Strahlrohres U125/2-SGM1, das für die Messkampagne bei BESSY II im Jahre 2008 genutzt wurde, bei der  $N^{3+}$  photoionisiert wurde [21].

zudecken wurde das Strahlrohr für die, teilweise in dieser Arbeit besprochenen, Photoionisationsmessungen der FLASH-EBIT Strahlzeit 2009 mit Stickstoff bei 400 eV und mit Neon bei 860 eV kalibriert.

### 3.3 FLASH-EBIT

Die EBIT ist eine Weiterentwicklung der EBIS (engl. Electron Beam Ion Source) [25]. Sie kann Ionen in höheren Ionisationszustände erzeugen und über einen längeren Zeitraum speichern. Sie wurde erstmals 1986 am LLNL (Lawrence Livermore National Laboratory) durch Levine et al. erfolgreich getestet [26]. Beide Geräte funktionieren nach dem gleichen Grundprinzip. Es wird ein intensiver Elektronenstrahl verwendet, der durch Stoßionisation sequentiell den Ladungszustand der Ionen erhöht. Der Hauptunterschied zwischen EBIS und EBIT bestand darin, dass Ionen nicht mehr nur erzeugt sondern auch über einen längeren Zeitraum gespeichert werden können, und dass letztere, durch ihre Konstruktion, spektroskopische Beobachtungen im Bereich der Fallenelektrode gestattet.

Die vorliegende Diplomarbeit wurde an der FLASH-EBIT durchgeführt. Eine Beschreibung im Detail findet sich in [27]. Die FLASH-EBIT wurde am Max-Planck-Institut für Kernphysik entwickelt, erlangte 2005 ihre Betriebsfähigkeit und ist bisher die einzige transportable und im Anschluß an den Transport nach wenigen Tagen messbereite EBIT. Sie hat eine ungefähre Länge von 2,5 m, eine Breite von



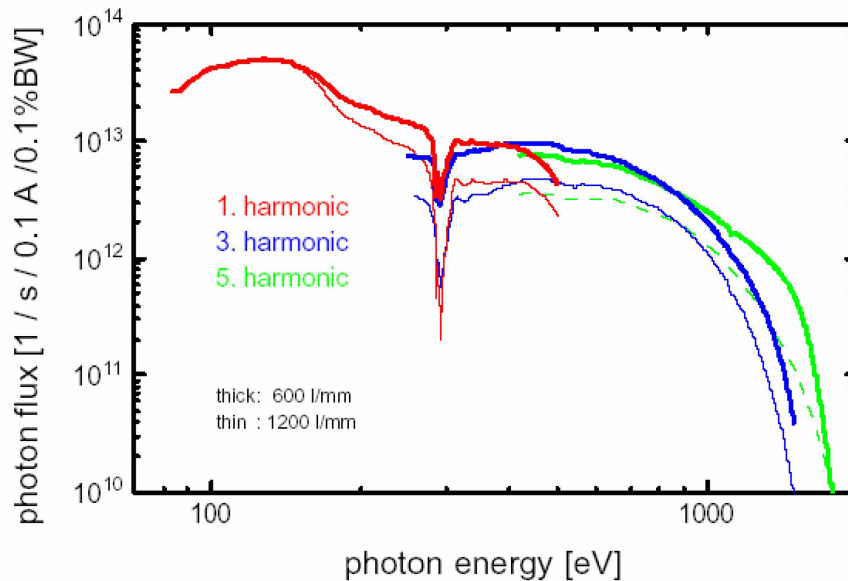


Abbildung 3.4: Spektraler Fluß des Strahlrohres U49/2-PGM1 für beide Gitter. Es wurde im gekoppelten Modus ( $c_{ff} = 2,25$ ) über die erste, dritte und fünfte Harmonische gefahren. Die Messung wurde mit einem Ausgangsschlitz von  $150\mu\text{m}$  durchgeführt [23]

1 m, und ein Gewicht von 1,5 t (ohne Extraktions-Strahlrohr). Somit eröffnet sie die Möglichkeit die Ionen für physikalische Experimente an verschiedene Orte zu bringen, im vorliegenden Fall an den Elektronenspeicherring BESSY II, der gewünschte experimentelle Parameter anbietet. Im Zuge dieser Reisen zum freien Elektronenlaser, FLASH (Hamburg), und zum Elektronenspeicherring, BESSY II (Berlin), sowie einigen Experimenten an ihrem Heimatort wurden bisher vor allem Experimente im Bereich der Ionenspektroskopie durchgeführt. Nähere Informationen dazu finden sich zum Beispiel in [27], [28].

2008 kam es erstmals zu einer Erweiterung der EBIT-Konstruktion um ein Bauelement, das die Ionenextraktion und somit die direkte Untersuchung der EBIT-Ionen gestattet. Erste Extraktionsexperimente - Photoionisation von  $\text{N}^{3+}$  - wurden mit Erfolg 2008 am Elektronenspeicherring BESSY II durchgeführt [29]. Diese Messungen haben im Zeitrahmen dieser Diplomarbeit stattgefunden und werden, zusammen mit den Resultaten der Strahlzeit im Jahr 2009, hier besprochen.

Tabelle 3.2: Vergleich der beiden Strahlrohre U49/2-PGM1 und U125/2-SGM. Diese wurden jeweils 2008 und 2009 für Messkampagnen der FLASH-EBIT genutzt.

Eigenschaften	U49/2-PGM1	U125/2-SGM
Undulator	U49/2	U125/2
Energiebereich	85 – 1600 eV	29 – 180 eV
Monochromator	PGM ( <i>plane grating mono-chromator</i> )	SGM ( <i>spherical grating mono-chromator</i> )
Perioden/ Pole	84n	32n
Periodenlänge	49,4 mm	125,0 mm
Minimales Gap	16,0 mm	15,7 mm
Gitter	300 und 1200 $\frac{\text{Linien}}{\text{mm}}$	700, 1666 und 2500 $\frac{\text{Linien}}{\text{mm}}$
Photonenfluss	$5 \cdot 10^{13} \frac{\text{Photonen}}{\text{s}}$	$10^{13} \frac{\text{Photonen}}{\text{s}}$
Bandbreite	1%	1%

### 3.3.1 Prinzip der EBIT

Der Aufbau der EBIT lässt sich in den Entstehungsort des Elektronenstrahls (die Elektronenkanone), den Erzeugungs- und Speicherort der Ionen (die Fallenregion), die gleichzeitig auch für die Zugänglichkeit von Spektroskopie verantwortlich ist, und das Ende des Elektronenstrahls (den Kollektor), aufteilen. Der prinzipielle Aufbau lässt sich anhand von Abbildung 3.5 nachvollziehen

### 3.3.2 Elektronenkanone

Die Elektronenkanone erzeugt, unterstützt durch elektrostatische und magnetische Elemente, den Elektronenstrahl. Es wurde eine konkave Kathodenform verwendet („Pierce-Geometrie“) mit einem Durchmesser von 3 mm und einem Krümmungsradius von 12 mm. Als Beschichtung wird Bariumoxid verwendet, das in eine poröse Wolfram-Matrix eingelagert ist, und eine Austrittsarbeit von etwa 2 eV aufweist. Die Elektronen verlassen die Kathode, die auf einem negativen Potential von -50 V bis -2000 V gegenüber Erde liegt, durch Heizen bei Temperaturen von  $T_K = 1300 - 1500 K$ . Mit Hilfe der Fokuselektrode, die auf positive Potentiale gegenüber der Kathode gelegt wird, werden die Elektronen abgesaugt, durch die Anode weiter beschleunigt und bis an die Felder folgender elektrostatischer Elemente (Drifttubes) geführt. Damit ist es möglich Ströme von einigen hundert mA zu erzeugen, wobei

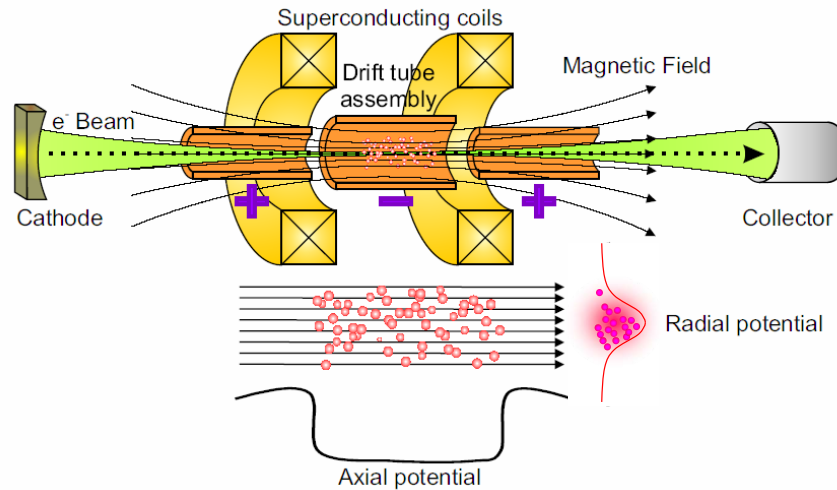


Abbildung 3.5: Produktionsprinzip der Ionen in einer EBIT. Die Ionen (rosa) werden vom Elektronenstrahl (grün) ionisiert und in einem axialen und radialen elektrostatischen Potentialtopf gefangenen. Das Feld in radialer Richtung wird vom Elektronenstrahl erzeugt, der, durch ein Magnetfeld komprimiert, eine dichte negative Raumladung darstellt. Die Fallenelektrode und die zwei Nachbarelektroden (orange) erzeugen das axiale Fallenpotential.

im Rahmen der Photoionisationsexperimente bereits einige mA Elektronenstrom genühten um die notwendige Ionenrate zu erzeugen.

Um den Elektronenstrahl in seinem weiteren Verlauf durch ein äußeres Magnetfeld optimal zu bündeln, ist es laut der theoretischen Überlegungen von Herrmann [30] notwendig, dass das äußere Magnetfeld  $B_c$  am Entstehungsort des Elektronenstrahls, das heißt im Bereich der Kathode, minimal ist (vergleiche Formel 3.1). Um also diesen Voraussetzungen so nahe wie möglich zu kommen komplettieren die zwei Spulen, Bucking-Spule und Trim-Spule, den Aufbau der Elektronenkanone. Sie sorgen für einen Ausgleich des Fallenmagnetfeldes am Ort der Kathode. Dabei sind sie zueinander gleich, aber zum Magnetfeld der EBIT entgegengesetzt gepolt.

### 3.3.3 Falle und Umgebung

Im Bereich der Falle findet die „eigentliche Physik“ statt. Die Ionen werden in dieser Region durch Elektronenstoßionisation erzeugt. Der ständige Beschuß der injizierten

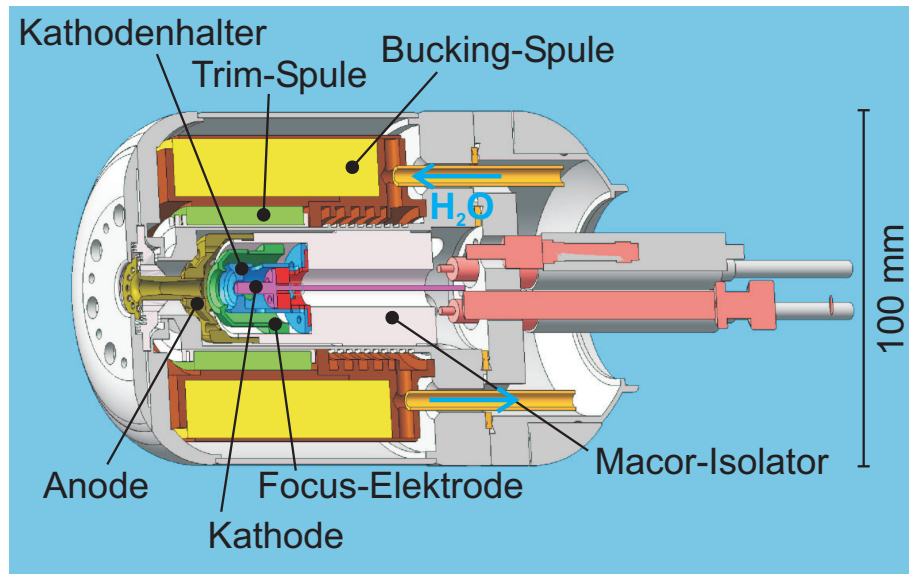


Abbildung 3.6: Schnittansicht der Elektronenkanone [27]

Atome durch einen energetisch festgelegten Elektronenstrahl führt hierbei zu einer graduellen Erhöhung des Ladungszustandes. Der letztendlich erreichte Ladungszustand der zu erzeugenden Ionen hängt klarerweise von der Energie des Elektronenstrahls, das heißt von der Energie die ein Stoßelektron maximal abgeben kann, ab. Die kinetische Energie der Elektronen wird durch den Potentialunterschied zwischen der Kathode und der Ionenfalle bestimmt und um das Raumladungspotential des Elektronenstrahls korrigiert. In der Fallenregion wird der Elektronenstrahl durch ein Magnetfeld von bis zu 6 T auf einen Durchmesser von nur  $50 \mu\text{m}$  komprimiert. Das hierfür verantwortliche Magnetfeld erzeugt ein supraleitendes Helmholtzspulenpaar aus dem Supraleiter  $Nb_3Sn$ , dessen Sprungtemperatur bei 17 K liegt. Im Gegensatz zu anderen EBITs, die teilweise mit Flüssighelium gekühlten betrieben werden (beziehungsweise nicht unbedingt supraleitend betrieben werden müssen, vergleiche [31]), reduziert der Aufbau mit kryogenisch gekühlten und supraleitenden Spulen der FLASH-EBIT den Aufwand für den Betrieb. Zusätzlich zu den Spulen ist auch die Fallenregion auf etwa 5 K gekühlt, um Wechselwirkungen mit dem Restgas durch kryogenisches Pumpen so gut wie möglich zu unterdrücken. Die Ionen werden in dieser Region der FLASH-EBIT durch Elektronenstoßionisation erzeugt. Der ständige Beschuß der injizierten Atome durch einen energetisch festgelegten Elektronenstrahl führt hierbei zu einer graduellen Erhöhung des Ladungszustandes. Der letztendlich erreichte Ladungszustand der zu erzeugenden Ionen hängt klarerweise

von der Energie des Elektronenstrahls, das heißt von der Energie die ein Stoßelektron maximal abgeben kann, ab. Die kinetische Energie der Elektronen wird durch den Potentialunterschied zwischen der Kathode und der Ionenfalle bestimmt und um die Raumladung des Elektronenstrahls korrigiert.

Die Ionenfalle an sich besteht aus 9 zylindersymmetrischen Elektroden (Ringelektroden), welche gegeneinander isoliert sind und auf verschiedene Spannungen von bis zu einigen kV gebracht werden können, beziehungsweise gemeinsam auf einige kV gegenüber Masse gelegt werden können. Die mittlere, sogenannte Fallenelektrode weist radiale Sichtschlitze auf, die für spektrometrische Messungen verwendet werden. Die beiden Nachbarelektroden sorgen mit ihrer Spannung für einen Potentialtrog, welcher die Ionen in axialer Richtung einfängt. In radialer Richtung werden sie weitestgehend schon alleine von der hohen negativen Linienladung des Elektronenstrahls am Entkommen gehindert (vergleiche Abbildung 3.5). Somit ergibt sich, vorgegeben durch die Länge der Fallenelektrode eine Länge der Ionenwolke von etwa 50 mm [27]. Die zusätzlichen Elektroden werden für die optimale Strahlführung des Elektronenstrahls (was vor allem bei kleinen kinetischen Energien der Elektronen also niedrigen Kathodenspannungen im Bereich von wenigen hundert Volt notwendig ist) verwendet oder können eine größere Falllänge realisieren.

Wie schon erwähnt, wird die FLASH-EBIT neben der Produktion von Ionen auch genutzt um diese direkt in der Falle spektroskopisch zu untersuchen. Dafür sind zur Zeit an zwei der sieben Sichtzugänge zur Falle zwei Spektrometer mit verschiedenen Messbereichen angebracht. Für das Studium von Photonen ab einer Energie von etwa 1 keV steht ein sogenannter IGLET Germanium Detektor (engl. *intrinsic germanium low energy type*) zur Verfügung. Für den Photonenwellenlängenbereich von 5 nm bis 25 nm wird ein, eigens für die FLASH-EBIT konstruiertes, VUV-Spektrometer eingesetzt. Es bildet mittels eines *flat field* Gitters das, von den Ionen emittierte Spektrum, auf eine CCD-Kamera ab (für mehr Informationen sei auf [28] verwiesen). An einem weiteren optischen Zugang zur Fallenregion ist es möglich mittels MCPs die Fluoreszenz von den gespeicherten Ionen im EUV-Bereich zu detektieren. Die restlichen Sichtzugänge sind mit dem Gasinjektor, einer Drucksonde, einer Turbomolekularpumpe und einem beweglichen YAG-Kristall für die Bestimmung der Position des Elektronenstrahls versehen.

### 3.3.4 Kollektor

Vom Kollektor wird nicht nur gefordert die Elektronen aufzusammeln, sondern auch gleichzeitig erzeugte Ionen und Photonen aus einer Photonenquelle, in jeweils entgegengesetzte Richtung, passieren zu lassen. Diese zwei, gleichzeitig zu bewältigenden, Probleme geben das Design des Kollektors in Form eines Rohres vor. Er wird auf einem circa 2 kV positiverem Potential als die Elektronenkanone gehalten (das heißt, auf Erdpotential), so dass die Elektronen von der letzten Driftröhre an abgebremst und mit relativ wenig kinetischer Energie eingesammelt werden. Auf diese Weise wird die notwendige Kühlungsleistung reduziert, die ohne Abbremsung der Elektronen viel höher wäre. Das Auftreten von Bremsstrahlung wird auch stark unterdrückt. Der gesamte Kollektoraufbau besteht aus diversen Elektroden (vergleiche Abbildung 3.7): das Back-Shield, den Extraktor, den Suppressor und das Front-Shield. Der Extraktor wird auf einem negativeren Potential als die Kathode betrieben, was dazu führt, dass die Elektronen im Kollektor umkehren und die Innenseite des Rohres treffen. Die Kollektorspule erzeugt ein Magnetfeld um das noch vorhandene Magnetfeld der EBIT-Spulen zu kompensieren. Durch diese Kompensation kommt es zur Aufweitung des Elektronenstrahls, der somit keine thermischen Schäden mehr an den Kollektorelektroden verursachen kann.

### 3.3.5 Der Elektronenstrahl

Die hauptsächliche Bedingung an den Wegbereiter für alle folgenden physikalischen Prozesse, den Elektronenstrahl, ist eine hohe Stromdichte. Das heißt ausgehend von einer gegebenen Stromstärke wird die Stromdichte durch magnetische Strahlkompression erhöht und die Erzeugung sowie Speicherung von hochgeladenen Ionen begünstigt. Der daraus resultierende Strahlradius in dem sich etwa 80% der Elektronen befinden ergibt sich laut [32], basierend auf der Theorie von Herrmann [30], zu

$$r_h = r_b \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1 + 4 \left( \frac{8kT r_c^2}{m\eta^2 r_b^4 B^2} + \frac{B_c^2 r_c^4}{B^2 r_b^4} \right)}} \quad (3.3)$$

Im Gegensatz zur Formulierung des Elektronenstrahlradius nach Brillouin

$$r_b = \sqrt{\frac{2m_e I_e}{\pi \epsilon_0 v_e e B^2}} \quad (3.4)$$

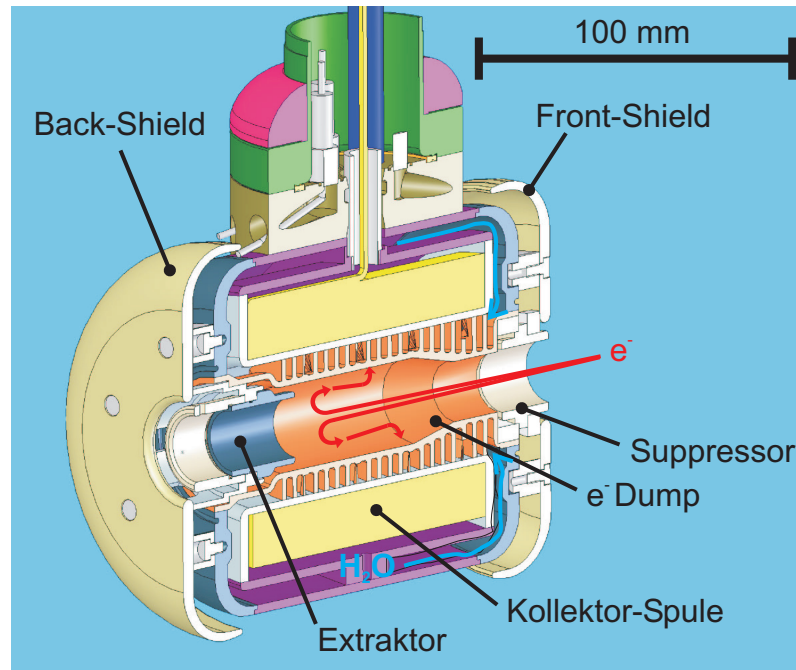


Abbildung 3.7: Kollektor in axialer Schnittansicht. Das negativere Potential des Extraktors im Vergleich zu dem der Kathode sorgt dafür dass die Elektronen zur Umkehr gezwungen werden und auf die Innenseite des Kollektors treffen[27]

geht in die Formel nach Hermann als Überlegungen mit ein, dass das Strömen der Elektronen nicht mehr als laminar betrachtet werden kann. Zusätzlich spielen die Temperatur der Elektronen  $T_e$ , das Magnetfeld an ihrem Entstehungsort  $B_c$  und der Kathodenradius  $r_c$  eine Rolle. Die Kompression des Elektronengases durch das Magnetfeld führt zu einer Erhöhung der Temperatur, die wiederum eine durchschnittliche kinetische Energie und einen entsprechenden minimalen Radius des Strahls bedingt.

Aufgrund der Größe des Elektronenstrahlstroms gewinnen Raumladungseffekte an Bedeutung. Das Raumladungspotential des Elektronenstrahls ist proportional zum Elektronenstrom  $I_e$  und fällt ab einem Radius, der größer ist als der des Elektronenstrahls, logarithmisch mit der radialen Entfernung ab. Es führt in erster Linie dazu, dass sich positiv geladene Ionen in der Raumladungszone ansammeln. Dabei gleichen sie einen Teil der negativen Raumladung durch ihre eigene positive Raumladung aus. Darüber hinaus gibt es aber noch den weiteren Effekt, dass die Raumladung das Potential, das im Bereich der Driftröhren durch die an ihnen angelegten Spannungen herrschen soll, geändert wird. Es tritt also ein zusätzliches negatives Potential auf, welches hinzuaddiert werden muss, um das tatsächliche Fallenpotential und die ki-

netische Energie, die die Elektronen somit erhalten, zu bestimmen. Dieses Potential der Raumladung lässt sich im Zentrum der Falle als

$$V_{RL}[V] = \frac{30I_e[A]}{\sqrt{1 - \left(\frac{E_{kin}(e^-)[keV]}{511} + 1\right)^{-2}}} \left( \ln \left( \frac{r_h}{r_{DR}} \right)^2 - 1 \right) \quad (3.5)$$

schreiben, mit dem Driftröhrenradius  $r_{DR}$ . Durch einen Kompensationsfaktor  $F$  wird der ausgleichende Effekt der positiven Ionen berücksichtigt, indem das Verhältnis der eingeschlossenen negativen Ladungen  $n_e$  zu den positiven Ladungen  $n_p$  mit einbezogen wird.

$$F = \frac{\sum_q n_q q}{n_e} . \quad (3.6)$$

Somit folgt für die effektive Raumladung, um die die Gesamtenergie des Elektronenstrahls korrigiert werden muss zu

$$V_{RL}^{eff} = V_{RL}(1 - f) . \quad (3.7)$$

### 3.3.6 Strahldiagnostik in der FLASH-EBIT

Um zu gewährleisten, dass der Elektronenstrahl (und damit auch die Ionenwolke) maximal mit dem Photonenstrahl überlappt, ist es notwendig den Ort beider Strahlen zu bestimmen. Dies ist mit einem Medium, das Elektronen und Photonen „sichtbar macht“, in Kombination mit einer Kamera möglich. In die Fallenregion der FLASH-EBIT kann ein YAG-Kristall (YAG ist die Abkürzung für Yttrium-Aluminium-Granat,  $Y_3Al_5O_{12}$ ) eingebracht werden. Er zeigt beim Auftreffen von energiereichen Elektronen oder Photonen durch Szintillation deren Auftreffort an. Die vom YAG-Kristall emittierte Strahlung wird mittels einer Spiegelkonstruktion um  $90^\circ$  reflektiert und auf eine Kamera fokussiert. Die Spiegelkonstruktion befindet sich hinter dem Kollektor und besteht aus einem Aufsatz an der elektrostatischen Ablenkeinheit, der nur bei Bedarf in den Strahlengang eingeführt wird. Um Platz zu sparen kann entweder der Spiegel oder die elektrostatische Ablenkeinheit im Strahlengang eingebracht werden, so dass die Prüfung des Überlapps beider Strahlen und die Extraktion von Ionen nicht gleichzeitig durchgeführt werden können. Die Photonen vom Elektronenspeicherring können den Spiegel durch eine Öffnung in seiner Mitte passieren. Die, in Richtung des Elektronenstrahls um  $90^\circ$  nach rechts abgelenkte Szintillationsstrahlung wird durch ein Vakuumfenster auf einer verstärkenden



EM-CCD-Kamera (engl. Electron Multiplication Charged Coupled Device) abgebildet.

### 3.4 Extraktions-Strahlrohr

Ionen werden an sich schon seit langem aus EBITs extrahiert, die ja auf dem Prinzip der EBIS - einer Ionenquelle - gründen. Allerdings wurde dies bisher nur bei stationären Aufbauten getan, bei denen Komponenten zum Steuern und Fokussieren der Ionen auf fast beliebige Weise konstruiert werden können, ohne dabei Rücksicht auf Platz oder Gewicht nehmen zu müssen.

Die FLASH-EBIT wurde 2008 um diverse Bauteile erweitert. Es wurden, wie bereits erwähnt, ein YAG-Kristall und ein Spiegel eingebaut, um den Photonenstrahlüberlapp mit dem Elektronenstrahl herstellen zu können. Zusätzlich wurde eine elektrostatische Ablenkeinheit eingebaut (mehr Detail dazu folgen nächsten Abschnitt), die es gestattet Ionen zu extrahieren, wobei sie nach der Extraktion zuerst nur auf einen YAG-Kristall gelenkt wurden um sie dort durch Fluoreszenz nachzuweisen. Mit einer weiteren Hinzunahme von ionenoptischen Elementen, einem Wienfilter und einem positionsempfindlichen Detektor wurde es möglich die Ionen vor der Detektion nach Geschwindigkeiten zu sortieren und ladungs- bzw. massenabhängig darzustellen [7]. Die Notwendigkeit verschiedener ionenoptischer Elemente, die hier beschrieben werden, ergibt sich aus dem einfachen Sachverhalt, dass die Ionen eines Strahls sich gegenseitig abstoßen. Auf längeren Flugbahnen würde der Ionenstrahl sich ungehindert aufblähen, und eine präzise Abbildung oder die Unterscheidung von Ionen mit verschiedenen Eigenschaften wäre dann nicht mehr zu realisieren. Deshalb ist es unerlässlich den Ionenstrahl auf seinem Weg zum Detektor nicht nur zu lenken sondern auch mit ionenoptischen Elementen zusammenzuhalten und zu refokussieren.

Das Besondere an der hier verwendeten Strahlrohr-Konstruktion ist es, dass es durch sie möglich ist, Ionen aus besonders niedrigen Potentialen von nur wenigen hundert Volt zu extrahieren. Wie schon erwähnt hängt die kinetische Energie der Elektronen von Kathoden- und Driftröhrenspannung ab. Somit können die Driftröhren insgesamt nur auf niedrige Spannungen (wenige hundert eV) gelegt werden wenn man im Experiment mit der Elektronenstrahlenergie unterhalb der Ionisationsschwelle bleiben will. Aus diesem Sachverhalt folgt die niedrige Extraktionsspannung. Sie setzt sich als Gesamtspannung aus der Spannung, die an das gesamte Driftröhrenensemble

angelegt ist, und der Spannung die zusätzlich an der mittleren Fallenelektrode angelegt ist, zusammen. Die kinetische Energie der Ionen mit Ladung  $q_{Ion}$ , den Spannungen auf der Fallenelektrode  $U_{Falle}$  und auf der gesamten Fallenkonstruktion  $U_{DT}$  ist dann

$$E_{kin} = (U_{Falle} + U_{DT})q_{Ion} \quad (3.8)$$

Das heißt, die Summe der verschiedenen Spannungen auf den Driftröhren ergibt die Extraktionsspannung  $U_{Falle} + U_{DT} = U_{Extr}$ .

### 3.4.1 Aufbau der Ionenoptik

Die elektrostatischen Linsen und alle weiteren Teile dieses Strahlrohres sind derart angeordnet, dass zwischen diesen Elementen der Ionenstrahl nur eine möglichst kurze Strecke zurückzulegen hat. Dies minimiert den Einfluß des Magnetfeldes der FLASH-EBIT, dessen Randfelder sich für eine optimale Fokussierung und Abbildung der Ionen als schädlich erwiesen haben. Die Störungen durch das magnetische Feld sind nach der elektrostatischen Ablenkeinheit nicht leicht auszugleichen und werden deshalb durch eine magnetische Abschirmung der gesamte Extraktions-Beamline aus  $\mu$ -Metall und Transformatorblech, am Ort des Ionenstrahlverlaufs, minimiert.

Abbildung 3.8 zeigt eine (nummerierte) schematische Übersicht über alle ionenoptische Elemente im Vakuum, die sich zwischen Kollektor und dem Wienfilter befinden. Die Extraktion der Ionen beginnt direkt hinter dem Kollektor der EBIT. Hier fokussieren und steuern eine elektrostatische Ringelektrode und eine Einzellinse (in Form einer sogenannten Sikler Linse) die Ionen, die in ihrem weiteren Verlauf in die  $90^\circ$ -Ablenkeinheit eintreten. Bei der Elektrode vor der Sikler Linse handelt es sich um eine Eintrittsblende (1) („*Entrance Plate*“), die auf negative Spannung gelegt ist. Darauf folgen die drei Elektrodensegmente der Einzellinse, deren erster Teil, der Eintrittsring (2) („*Entrance Ring*“), auf positive Spannung gelegt wird. Die „Sikler Linse“ (3) wird mit negativer Spannung betrieben; das letzte Segment der Linse ist dabei geerdet. Dieser Ionenoptikabschnitt hat die Aufgabe, die Ionen, die aus der Fallenregion heraus beschleunigt durch den Kollektor treten, möglichst mittig in die Ablenkeinheit einzufädeln. Die elektrostatische Ablenkeinheit erfordert einen Fokuspunkt kurz vor ihrer Eintrittsöffnung, um Ionen optimal um  $90^\circ$  abzulenken. Deshalb werden die Ionen nicht nur in deren Öffnung gelenkt (zu dieser Möglichkeit bei der Verwendung einer Siklerlinse in einem späteren Abschnitt mehr), sondern auch vor ihrem Eintritt fokussiert. Die nächste Station des Ionenstrahls ist die Ablenkein-

heit (4) selbst. Sie ist aus Platzgründen besonders kompakt konstruiert und sorgt dafür, dass die Ionen auf kurzmöglichster Strecke elektrostatisch um einen Winkel von  $90^\circ$  abgelenkt werden. Durch ihre Geometrie fokussiert dieses Element doppelt und bei richtiger Wahl des Ortes des Eingangsfokus wird dieser auf der Austrittsseite simultan vertikal und horizontal wiederfokussiert. Diese Einheit besteht aus zwei Elektroden, dem Innenzylinder IZ (4, grün, geerdet), mit Ein- und Ausgangsöffnung von etwa 8 mm, und dem Außenzylinder AZ (4, rot, auf positiver Spannung). Die Spannung die dabei an den Außenzylinder der Ablenkeinheit angelegt werden muss ist von der Beschleunigungsspannung, die die Ionen erfahren abhängig. Sie entspricht sowohl gemäß der Simulationen, als auch der Erfahrung 60% bis 70% des Extraktionspotentials. Nach der Ablenkeinheit tritt ein weitestgehend monoenergetischer Strahl aus Ionen in ein um  $90^\circ$  zur Hauptachse der EBIT angeordnetes Strahlrohr. Dabei schließen sich eine zweiteilige Elektrode, eine Sikler-Linse, zwei Schlitzblenden, ein Wienfilter und zuletzt ein positionsempfindlicher Detektor an. An den ersten beiden Elektroden, dem Eingangsring „PIO Entrance“ (5) und der Linse „PIO Lens“ (6) (PIO steht für „*Post Ion Optic*“) liegen in der genannten Reihenfolge negative und positive Spannungen an.

Der darauf folgende Bauteil, bestehend aus einer Einzellinse (7) und zwei Blenden (8), vor dem Wienfilter, wurde im Rahmen dieser Arbeit (er wird deshalb gesondert im folgenden Abschnitt beschrieben) konstruiert um die Ionen zentriert und kollimiert in den Wienfilter zu lenken. Der anschließende Wienfilter spaltet den Ionenstrahl nach dem bekannten Prinzip von gekreuztem magnetischen und elektrischem Feld, entsprechend dem Ladungs- zu Masseverhältnisse  $\frac{q}{m}$  der Ionen, in einem Fächer von mehreren Ionenstrahlen auf. Diese „sortierten“ Ionen werden auf der letzten Station, dem Detektor, an unterschiedlichen Orten abgebildet und gezählt.

### 3.4.2 Ionenoptik vor dem Wienfilter

Um die Auflösung des Wienfilters bestmöglichst zu nutzen ist es eine wichtige Voraussetzung, dass die Ionen parallel und in der Mitte des Filters eintreten, denn hier sind das elektrische und das magnetische Feld besonders homogen und können daher bestens von der Theorie beschrieben werden. Dies war in den bisherigen Vorversuchen nicht immer der Fall gewesen, denn die elektrostatische Ablenkeinheit führt schon in der Theorie, trotz Doppelfokussierung, zu astigmatischen Abbildungsfehlern und in der Realität aufgrund der kompakten Ausführung sowie der magnetischen

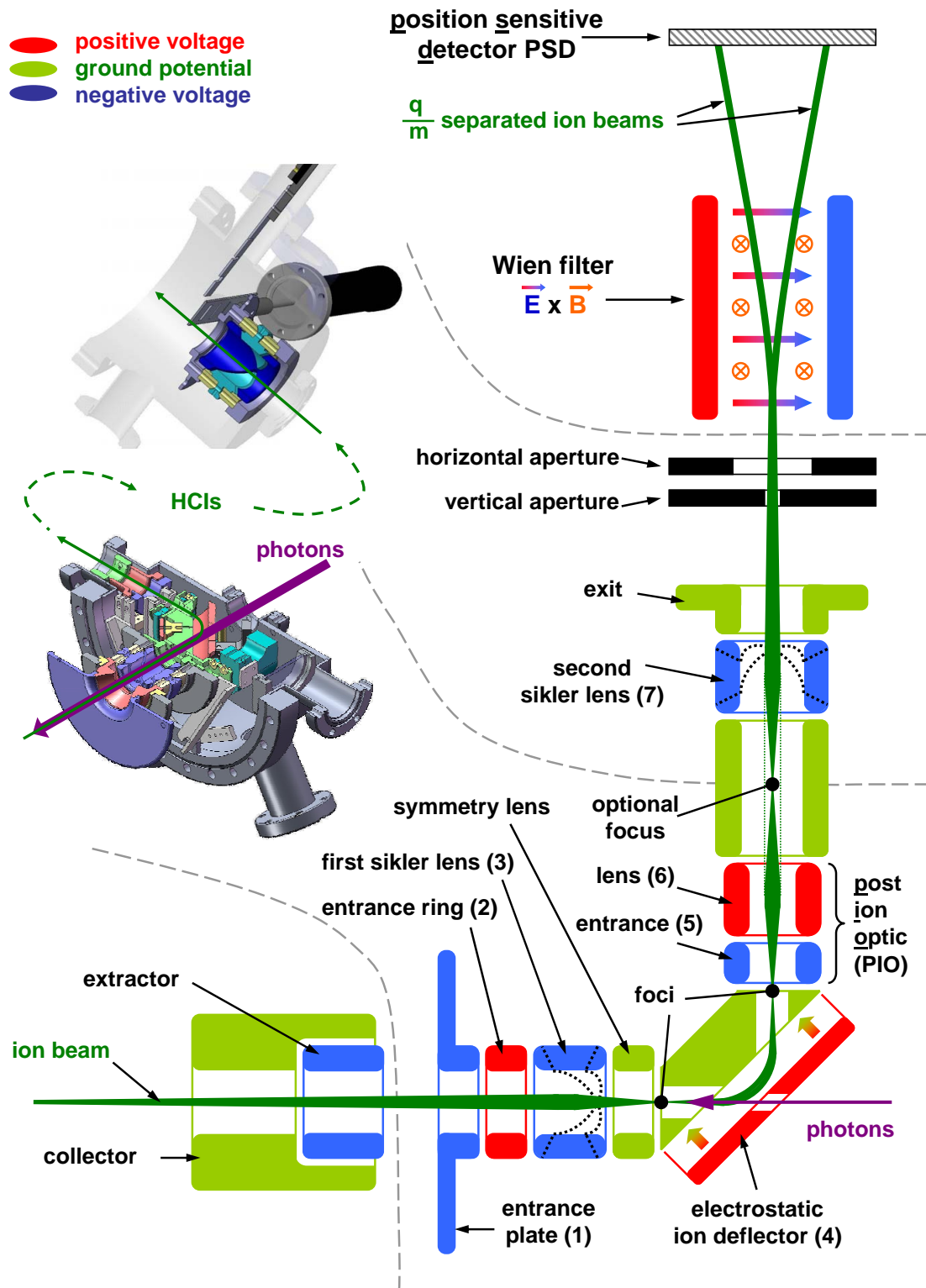


Abbildung 3.8: Schema- und Konstruktionsansicht der Ionenoptik zwischen Kollektor und Wienfilter [7]. Die Ionen (dunkelgrün) kommen vom Kollektor, treten durch ionenoptische Elemente, durchlaufen kollinear zum Photonenstrahl (violett) die elektrostatischen Ablenkeinheit und im Folgenden die PIO-Linse sowie die Siklerlinse und zwei Blenden in Richtung Wienfilter. Dieser separiert die Ionen nach spezifischen Ladungen, bevor sie auf dem Detektor (PSD) auftreffen. Die Ionenoptik um die elektrostatische Ablenkeinheit ist in [20] entwickelt worden.

EBIT-Streifelder zu abbildungsverzerrenden Effekten. Die hinter der elektrostatischen Ablenkeinheit resultierenden Ionenbahnen wurden dann beim Eintritt in den Wienfilter (der Eingang besteht aus einer Blende mit einem Loch dessen Durchmesser 16 mm beträgt) so ungünstig abgelenkt, dass die Fokussierung auf dem Detektor deutliche Mängel aufwies. Deshalb wurde nun auf die bekannten steuernden und fokussierenden Eigenschaften einer neuartigen Einzellinse (entwickelt von G. Sikler und nach ihrem Erfinder benannt) zurückgegriffen, deren mittleres Segment mit zwei Schnitten, vergleiche Abbildung 3.9 in vier Elektroden aufgeteilt ist (Sikler Linse).

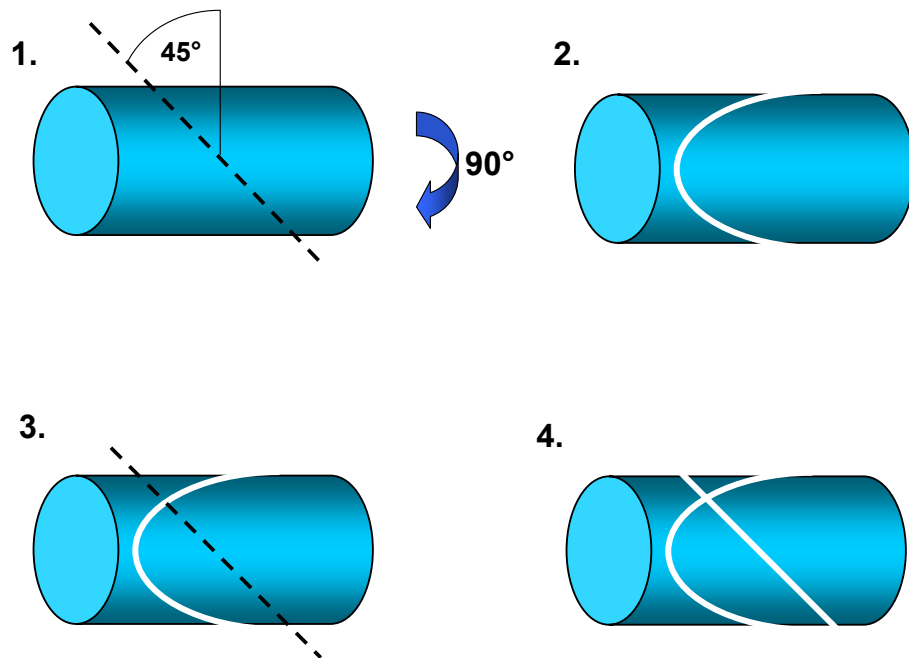


Abbildung 3.9: Prinzip der Herstellung einer Sikler Linse. Ein geeignetes Rohr wird in einem  $45^\circ$ -Winkel zur z-Achse durchgeschnitten (schwarz-gestrichelte Linie) (1.) und dann  $90^\circ$  um die z-Achse (bei zylindersymmetrischer Betrachtung) gedreht (2.). Es erfolgt ein zweiter Schnitt im  $45^\circ$  Winkel (schwarz-gestrichelte Linie) (3.), so dass letztendlich vier Teile entstehen (4.).

Der gesamte radialsymmetrische Linsenaufbau besteht in der Theorie aus drei Rohren, an denen verschiedene Spannungen angelegt sind. Im hier verwendeten Aufbau besteht das erste Rohrsegment („Sikler Entrance“) aus dem Stück Vakuumkammerwand, das der Linse vorgelagert ist. Es ist genauso wie das letzte Rohrsegment („Sikler-Exit“) geerdet. Das mittlere Linsensegment besteht aus einem Rohr mit

einem Durchmesser von 36 mm, einer Länge von 60 mm, das durch zwei Schnitte jeweils in einem axialen Winkel von  $45^\circ$  und mit einem radialen Winkel von  $90^\circ$  gegeneinander in vier Elektroden aufgeteilt wurden. Diese Prozedur ist in Abbildung 3.9 dargestellt, in der gleichzeitig die Lage der Schnitte zueinander verdeutlicht wird. Diese vier Teile können einzeln auf verschiedene negative Spannungen von bis zu 6 kV gelegt werden. Durch zwei Isolationsringe sind die vier Segmente von der Kammer und vom letzten Elektrodensegment isoliert. Dieses Endstück, die Ausgangselektrode der Linse, gestattet es mittels Gewindestangen die gesamte Linsenkonstruktion in der Vakuumkammer zu befestigen, um diese zentrisch und parallel zur Achse vor den rechteckigen Eingang des Wienfilters auszurichten (Abbildung 3.10). Zwischen Wienfilter und der beschriebenen Linsenkonstruktion befinden sich noch zwei, senkrecht zueinander angeordnete, geerdete Schlitzblenden. Jede der Blenden hat drei verschieden große, rechteckige Schlitze mit einer Höhe von jeweils 6 mm, 3 mm und 1,5 mm. Je nach Bedarf können diese Blenden durch Linearmanipulatoren zwischen Linse und Wienfilter positioniert und die Schlitze mit verschiedenen Höhen miteinander kombiniert werden. Auf diese Weise ist es möglich nur gewisse Strahlrichtungen durchzulassen und somit schlecht gebündelte Untergrundionen auszusortieren bevor der Ionenstrahl in den Wienfilter eintritt. Diese elektrostatische Kollimierung des Ionenstrahls vor seinem Eintritt in den Wienfilter hat dazu geführt, dass die Auflösung auf dem Detektor erheblich verbessert wurde und der Untergrund durch unfokussierte Ionen verringert wurde. Bei der Messkampagne 2009 am BESSY reichte die Auflösung durchaus, um zwei Isotope von gleichgeladenen Eisenionen (aufgrund der Massenvariation in  $\frac{q}{m}$ , vergleiche hierzu den Abschnitt „Wienfilter“) auf dem Detektor gut zu separieren. Unter herkömmlichen Bedingungen stellt dies keine Herausforderung dar, jedoch wurden hier, wie bereits erwähnt, hochgeladene Ionen bei sehr niedrigen Energien ( $E_{kin} = q_{Ion} \cdot 300V$ ), im Streufeld eines (6 T) supraleitenden Magneten und nach elektrostatischer Ablenkung mit einem Biegeradius von nur 20 mm extrahiert und zum positionsempfindlichen Detektor geführt.

### Siklerlinse/Einzellinse

Eine elektrostatische Einzellinse besteht in der Regel aus drei zylindrischen Elektroden, die in Serie entlang einer Achse angeordnet sind, wobei meist an die mittlere Elektrode eine Spannung angelegt wird während die erste und die letzte auf dem gleichen Potential wie die Vakuumkammerwände liegen. Auf diese Weise entstehen

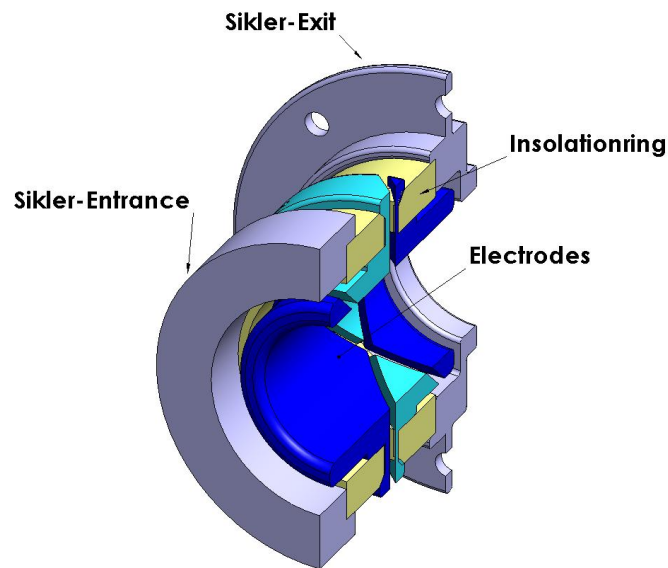


Abbildung 3.10: Schnittansicht der Einzellinse vor dem Wienfilter. Die jeweils gegenüberliegenden Elektrodensegmente sind in gleicher Farbe (jeweils blau oder türkis) gekennzeichnet. Die Isolatorringe (gelb) trennen die vier, auf Hochspannung gelegten, mittleren Linsensegmente von dem geerdeten Eingang sowie vom ebenfalls geerdeten Ausgangselement (grau)

keine, durch unsymmetrische Geometrie der Vakuumkammer, störenden Feldgradienten im Außenbereich der Linse. Gleichzeitig herrscht zwischen der äußeren und der mittleren Elektrode ein wohldefiniertes, durch die Zylindersymmetrie dieser Elemente vorgegebenes, elektrostatisches Feld. Sie stellt eine Kombination aus Sammel- und Zerstreulinse dar. Das heißt, sie ist in der Lage durch ihre gekrümmten Potentiallinien einen Ionenstrahl beim Durchlauf, abhängig vom Wert der angelegten Spannung, zu fokussieren oder zu defokussieren. Hierbei ändert sich während des Durchgangs die Geschwindigkeit der durchlaufenden Ionen. Dabei bilden die Äquipotentialflächen eine mit einer optischen Linse etwa vergleichbare Oberfläche. Im Gegensatz zur optischen Linse kann die Brechkraft bei der Einzellinse, durch Variation der Spannung, verändert werden. Die in diesem Aufbau verwendeten Einzellinsen werden beide im Beschleunigungsmodus betrieben. Das heißt die Ionen werden beim Durchlauf durch das elektrische Feld nicht nur abgelenkt sondern auch kurz beschleunigt. Dieser Modus entsteht wenn bei einer Einzellinse für positiv geladene Ionen die mittlere Elektrode auf einem negativeren Potential als die äußeren betrieben wird. Dadurch sehen die Ionen auf ihrem Weg durch die Linse eine „Potentialmulde“, die zur erwähnten Geschwindigkeitserhöhung führt.

Wie bei optischen Linsen kommt es auch hier zum Auftreten von Abbildungsfeh-

lern. Sphärische Bildfehler treten auf wenn der Ionenstrahl im Vergleich zur freien Öffnung der Linse einen zu großen Durchmesser aufweist. Der Grund dafür ist die deutlich schwächere Krümmung der Potentiallinien wenn sich die Ionenbahnen von der optischen Achse entfernen. Chromatische Bildfehler entstehen wenn Ionen mit verschiedener Energie in die Linse eintreten (Dieser Fehler ist im hier vorliegenden Fall allerdings unterdrückt, da beim Experiment der Bereich der Ionenenergien durch die elektrostatische Ablenkeinheit recht eingegrenzt ist). Zusätzlich zu diesen allgemeinen Eigenschaften der Einzellinse bietet die Ausführung als Siklerlinse weitere Vorteile. Sie hat im Vergleich zu anderen elektrostatischen Linsen verminderte Abbildungsfehler und ist, im Hinblick auf ihre Funktionen, kompakt im Vergleich zu einer äquivalenten Anordnung von ionenoptischen Standardelementen konstruiert. Ein weiterer Effekt resultiert aus dem Superpositionsprinzip elektrostatischer Felder angewandt auf die viergeteilte mittlere Elektrode. Beim Durchlauf durch die Linsensegmente sehen die Ionen jeweils links, rechts, oben und unten eine Teilelektrode (Abbildung 3.10). An die gesamte viergeteilte Elektrode ist eine Fokusspannung angelegt. Wenn jeweils zwei gegenüberliegenden Elektroden zusätzlich eine Spannungsänderung mit je anderen Vorzeichen erhalten, lassen sich die Ionen in zwei Dimensionen senkrecht zu ihrer Bewegungsrichtung ablenken. Für die benötigte Spannungen gilt

$$\frac{U_{oben} + U_{unten}}{2} = \frac{U_{links} + U_{rechts}}{2} = U_{Fokus} \quad (3.9)$$

Wenn die Elektroden in entsprechenden Spannungsverhältnissen betrieben werden, lassen sich zusätzlich zu den Funktionen des Fokussierens und Steuerns auch noch Abbildungsfehler der vorgelagerten elektrostatischen Linsen, wie zum Beispiel Astigmatismus, zum Teil korrigieren.

### Wienfilter

Für alle Teilchen unabhängig von der Masse und der Ladung arbeitet diese Anordnung als ein Geschwindigkeitsfilter, da nur die Teilchen, die die Bedingung  $v = \frac{|\vec{E}|}{|\vec{B}|}$  erfüllen, den Filter auf einer geraden Bahn verlassen. Im Fall des Experiments, auf das sich diese Arbeit bezieht, handelt es sich aber um Teilchen unterschiedlicher Ladung (abhängig davon ob ein Ion photoionisiert wurde oder nicht) die den Filter passieren und sortiert werden sollen. Denn, um die Photoionisation zu untersuchen, wird eine Selektion der Ionen an Hand ihrer spezifischen Ladung  $\frac{q}{m}$  benötigt.



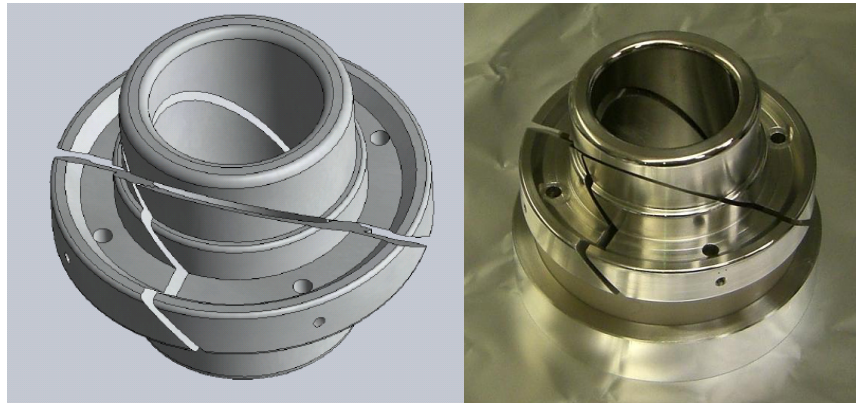


Abbildung 3.11: Konstruktionsansicht und gefertigtes Teil der Siklerlinse vor dem Wienfilter

Darüber hinaus sollen Ionen mit anderer Masse als die der gewünschten Sorte und diese, die zum Teil aus dem Restgas stammen, vom Hauptstrahl separiert werden. Diese Möglichkeit lässt sich physikalisch folgendermaßen erklären. Für ein geladenes Teilchen in einem äußeren Feld das gleichzeitig einen magnetischen und einen elektrischen Anteil besitzt gilt das vollständige Lorentz-Kraft-Gesetz

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (3.10)$$

Da hier alle Vektoren im Idealfall senkrecht aufeinander stehen, lässt sich die Schreibweise in der folgenden Darstellung vereinfachen. Die Geschwindigkeit der Ionen ergibt sich aus dem Potential von dem sie stammen  $U$ , ihrer Masse  $m$  und ihrer Ladung  $q$  aus

$$E_{kin}(Ion) = q_{Ion}U_{Extr} = \frac{1}{2}mv^2 \quad (3.11)$$

Daraus folgt

$$v = \sqrt{\frac{2q_{Ion}U_{Extr}}{m}} \quad (3.12)$$

. Zusammen mit der Überlegung, dass die Gesamtkraft der Felder auf die geladenen Teilchen Null ist wenn diese den Wienfilter ohne Ablenkung passieren ergibt sich.

$$\frac{q}{m} = \frac{E^2}{2UB^2} \quad (3.13)$$

Das Magnetfeld wird nun im Experiment konstant gehalten, da es auf Grund von magnetischen Effekten (Remanenz) schlechter reproduzierbar ist, während das elek-

trische Feld zur Identifizierung durchgestimmt wird. Auf diese Weise ändert sich die spezifische Ladung, die die Durchflugbedingung durch den Wienfilter erfüllt und somit auf der Mitte des Detektors zu sehen ist. Die spezifische Ladung ist als das Verhältnis der Ladung  $q$  eines Teilchens zu seiner Masse  $m$  definiert [17]. Sie dient dazu die Eigenschaften und das Verhalten in Feldern von Elementarteilchen, Atomkernen oder auch Ionen zu beschreiben.

Bei statischem Magnet- und elektrischem Feld erscheinen auf dem Detektor Ionen verschiedener  $\frac{q}{m}$ -Verhältnisse in getrennten Regionen auf dem Detektorbild. Während der Photoionisationsmessung werden in dieser statischen Anordnung das Anfangsion und das Photoion auf dem Detektor nachgewiesen. Diese gleichzeitige Detektion beider Ionensorten ist für die Normierung der Photonenausbeute von Bedeutung. Eine ausführlichere Beschreibung dieser Vorgänge findet sich im experimentellen Abschnitt dieser Arbeit.

### 3.4.3 Positionsempfindlicher Detektor

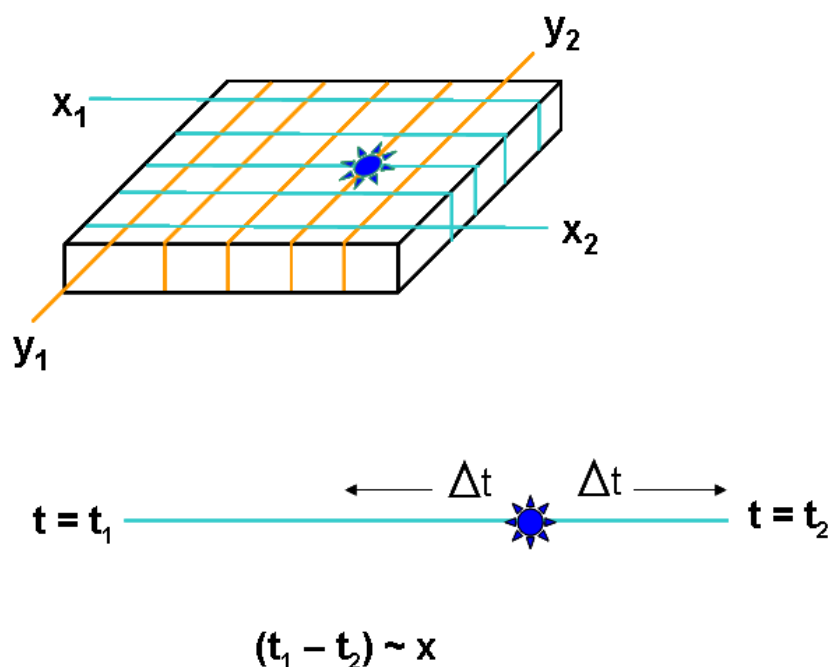


Abbildung 3.12: Funktionsprinzip der Delay-Line-Anode des Detektors. Die nach Verstärkung durch das MCP erzeugten Elektronenpulse (blau) rufen auf den zwei, senkrecht zueinander und voneinander isoliert, aufgewickelten Drähten ein Spannungssignal hervor, dessen Laufzeit ( $\Delta t$ ) Informationen über die x- und y-Koordinaten des Auftreffortes gibt.

Bei dem Positionsempfindlichen Detektor „Röntdek DLD40“ handelt es sich um eine Kombination einer Delay-Line-Anode und einem MCP (engl. Micro-Channel-Plate). Diese Verknüpfung der Bauteile führt zu einer zweidimensionalen Registrierung der Auftrefforte sowie zur Zeitmessung bei der Detektion von geladenen Teilchen oder Photonen bis zu recht hohen Zählraten. Der Durchmesser, der zur Abbildung zur Verfügung steht, beläuft sich auf 40 mm. Der Detektor hat eine örtliche Auflösung von etwa 0,1 mm, eine zeitliche Auflösung die Ionenzählraten, bis in den MHz-Bereich erlaubt und eine Totzeit von 20 ns.

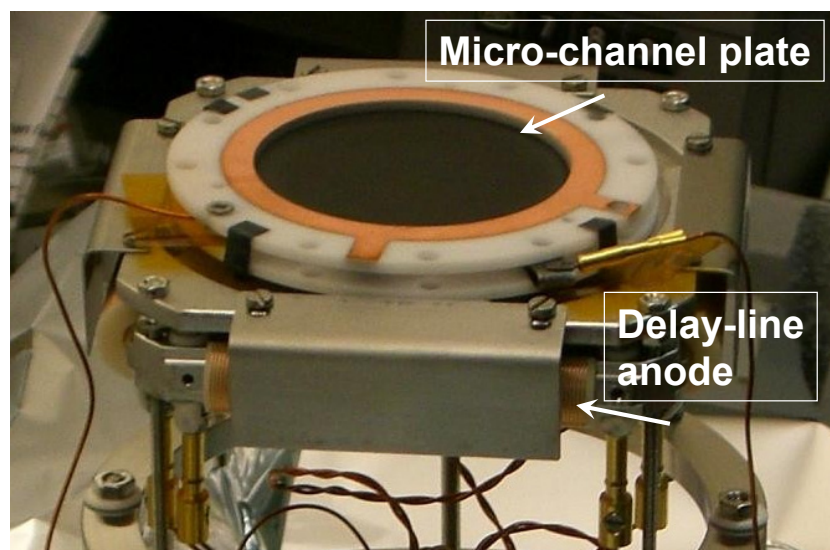


Abbildung 3.13: Foto des Positionsempfindlichen Detektors. Zu erkennen ist die obere der beiden Micro-Channel-Plates, darunter befindet sich ein zweites. Von der Delay-Line-Anode ist der Rand, um den der Draht gewickelt ist und das mit einer Blechabschirmung zum Teil abgedeckt ist, zu erkennen.

Bei dem MCP-Teil des Detektors handelt es sich um ein Micro-Channel-Plate Paar. Diese MCPs sind 1,5 mm dicke Halbleiterplatten die von feinen Kanälen mit einem Durchmesser von etwa  $25 \mu\text{m}$  durchsetzt sind. Sie sind jeweils in eine andere Richtung aber mit einem Winkel von  $7^\circ$  gegen die Plattennormale verkippt (Chevron-Konfiguration). Die einfallenden Ionen lösen nun aus den Kanalwänden Elektronen heraus, welche im weiteren Verlauf durch den jeweiligen Kanal vervielfacht werden. Die längs der Kanäle anliegende Spannung im Bereich von 2400 V sorgt dafür, dass es bei dieser Chevronanordnung zu einer Sekundärelektronenvervielfachung von bis zu  $10^7$  kommt. Um Information über den Ort des auftreffenden Ions zu erhalten

schließt sich an das MCP die Delay-Line-Anode an. Diese besteht aus zwei Drahtpaaren, die senkrecht zueinander und isoliert voneinander spiralförmig über einen rechteckigen Rahmen gewickelt sind. Die auftreffenden Elektronen sorgen für Spannungssignale, die an beiden Enden der Anodendrähte ausgelesen werden. Aus den Laufzeitdifferenzen in x- und y-Richtung ergibt sich dann die Ortsinformation [33]. Der Aufbau dieser Anode ist in Abbildung 3.12 dargestellt.

# Kapitel 4

## Auswertung und Ergebnisse

Dieses Kapitel widmet sich den Datenaufnahmeschemata wie sie während der zwei Strahlzeiten (13.05. - 23.07.2008 und 27.01. - 08.04.2009) am Elektronenspeicherung BESSY II (welche in die Zeit dieser Diplomarbeit fielen) im Einsatz waren. Hier wird zwischen der Ionenidentifikation im Rahmen der Messvorbereitung und der eigentlichen Photoionisationsmessung unterschieden. Letztere lässt sich wiederum in eine gepulste und eine kontinuierliche Variante unterteilen. Desweiteren wird die Analyse der Daten aus den Strahlzeiten erläutert und es werden deren Ergebnisse diskutiert und mit der Theorie verglichen.

Aufgrund der zeitlichen Nähe von Experiment und Ende der Diplomarbeit sind die hier vorgestellten Ergebnisse für achtfach geladenes Argon vorläufiger Natur. Es handelt sich dabei um den Teil der Daten, welche während der Messung zu Kontrollzwecken direkt verarbeitet wurden. Diese Daten enthalten nicht immer den vollen zeitlichen Umfang des aufgenommenen Datensatzes und sind insbesondere hinsichtlich der Behandlung des Untergrundes, die eine aufwändigere statistische Modellierung bedarf, noch nicht von der Qualität, die nach einer solchen Analyse möglich wäre. Eine eingehendere Datenanalyse hat bereits begonnen und wird voraussichtlich genauere und gegebenenfalls geringfügig abweichende Ergebnisse liefern.

### 4.1 Datenaufnahme

Um die Photoionisation zu messen werden die, durch Stoß- und durch Photoionisation erzeugten, Ionen direkt auf einem positionsempfindlichen Detektor nachgewiesen. Dabei werden sie gepulst ( $N^{3+}$ ) oder kontinuierlich ( $Ar^{8+}$ ) extrahiert, je nach dem,

ob die Photonenergie unter oder über dem niedrigsten verwendbaren Extraktionspotential liegt. Ihre Raten auf dem Detektor werden, je nach Messverfahren, in Abhängigkeit von verschiedenen Parametern (elektrisches Feld des Wienfilters oder Photonenergie) gemessen, um Informationen über die spezifische Ladung oder die Photoionisationsrate zu erhalten.

Für die Datenaufnahme sind zwei verschiedene Verfahren notwendig. Das erste, die Ionenidentifikation, liefert eine Übersicht über die, in der FLASH-EBIT, erzeugten Ionen. Damit ist es möglich Ionen mit unterschiedlichen spezifischen Ladungen ( $\frac{q}{m}$ ) voneinander zu unterscheiden, ihre Abbildung auf dem Detektor zu optimieren und sie im Vergleich mit theoretischen Überlegungen eindeutig zu identifizieren. Ist dies abgeschlossen, so werden die nun optimierten Parameter der ionenoptischen Elemente und die passenden Wienfilter-Einstellungen ( $\frac{q}{m}$ -Bereich) für die gesuchten Ionen gewählt, um dann mit dem zweiten messtechnischen Verfahren Ergebnisse zur Photoionisation zu erhalten. Das heißt, es werden im günstigsten Fall vom Detektor nur die Raten des zu photoionisierenden Anfangsion und die des Photoions aufgenommen. In der Realität treffen allerdings auf dem Detektor meistens auch andere Ionen mit  $\frac{q}{m}$ -Verhältnissen nahe bei den interessanten Raten auf, weshalb eine präzise Identifikation unerlässlich ist.

Die Ionenraten werden in Abhängigkeit der schrittweise abgetasteten Photonenenergie gemessen. Dazu wird eine, zu der jeweils eingestellten Photonenenergie proportionale, analoge Spannung vom Monochromator des BESSY II Strahlrohrs an das Datenaufnahmesystem gesendet. Der eingestellte Photonenenergiebereich wird typischerweise linear auf einen Spannungsbereich von 0,5 V bis 8,5 V abgebildet. Zusätzlich werden bei den Messungen immer auch Parameter des Elektronenspeicherrings aufgenommen, in erster Linie der photoelektrische Strom am letzten Refokussierspiegel, welcher vom absoluten Photonenfluss am Probenort abhängt.

Die Verarbeitung von Signalen aus den verschiedenen ADCs oder Netzgeräten geschieht mit dem sogenannten MPA-3 System (engl. Multiparameter Multichannel Analyzer) der Familie Fast COMTEC. Die dabei verwendeten ADCs (engl. Analog-to-Digital-Converter), Modell T7071, können beispielsweise als TDCs (engl. Time-to-Digital Converter), im Falle der Signale der Delaylineanode des Detektors, auch als SVA (engl. Sampling Voltage Analyzer) betrieben werden. Für Details sei auf das Handbuch zum MPA3 System verwiesen. Von diesem Datenverarbeitungssystem werden die Dateninformationen über Ionenraten und -positionen am Detektor, die gewünschten Spannungswerte des Wienfilters und Daten vom Elektronenspei-

cherring BESSY II eingelesen und verarbeitet. Gleichzeitig kann der Verlauf der Messdaten auf einzelnen oder kombinierten Spektren am Computerbildschirm verfolgt werden.

Im Wesentlichen wird jedes, auf dem Detektor auftreffende, Ion registriert und mitsamt der anderen Parameter zum Zeitpunkt der Detektion als Einzelereignis („event“) digital gespeichert. Eine sequentielle Liste dieser Ereignisse wird automatisch angelegt. Typische Raten sind hierbei einige  $10^4$  Ereignisse pro Sekunde, in manchen Fällen deutlich mehr. Diese Listen erfordern eine zeitaufwändige, eingangs bereits erwähnte, Nachbearbeitung, die allerdings eine bessere Unterdrückung des Untergrundes verspricht. Simultan werden die Orte des Auftreffens der Ionen am Detektor und die jeweils eingestellte Wellenlänge in Matrizen gespeichert, deren Projektion als Funktion der Photonenenergie eine sofortige Verfolgung der Photoionisation erlauben, wenn auch mit nur geringer Abschwächung des Untergrundsignals. Nur solche Datensätze standen zur Zeit der Verfassung dieser Arbeit zur Verfügung.

#### 4.1.1 Detektion der Ionen

Aus der FLASH-EBIT werden Ionen verschiedener Ladungszustände des injizierten Elements und des Restgases durch den Kollektor extrahiert und von der elektrostatischen  $90^\circ$ -Ablenkeinheit in das Extraktionsstrahlrohr geführt. Diese Ionen werden, wie im vorangegangenen Kapitel erläutert, im Wienfilter sortiert. Für alle Ionen, die vom gleichen Potential extrahiert wurden, gilt unabhängig davon um welches Element es sich handelt, dass sie in Ionenstrahlen mit gleichem  $\frac{q}{m}$ -Verhältnis aufgeteilt werden. Diese Strahlen treffen jeweils in verschiedenen, idealerweise kreisförmigen Regionen übereinander auf dem Detektor auf. Im Falle eines waagrechten magnetischen und senkrechten elektrischen Felds, wie bei diesem Experiment, und abhängig von deren Polung sinkt oder steigt der Wert der spezifischen Ladung nach oben oder nach unten auf dem Detektor.

Da seine Detektionsfläche im Verhältnis zur räumlichen Aufspaltung der verschiedenen Ionenstrahlen klein ist, können nicht alle  $\frac{q}{m}$ -Verhältnisse gleichzeitig auf dem Detektor abgebildet werden. Die  $\frac{q}{m}$ -Akzeptanz hängt in erster Linie vom Magnetfeld, dass für die Auflösung maßgebend ist, und von der Masse des untersuchten Elements ab. Bei typischen Einstellungen während der hier präsentierten Messungen waren vier Ladungszustände gleichzeitig zu sehen. Diese Angabe bezieht sich allerdings auf statisch eingestellte Extraktionsparameter (vor allem ein statisches elektrisches

Feld des Wienfilters) und ein recht niedriges Extraktionspotential. Bei höheren Extraktionspotentialen ist die ionenoptische Führung des Ionenstrahls effektiver und es kommt zur Abbildung von besser definierten  $\frac{q}{m}$ -Regionen auf dem Detektor (vergleiche Abbildung 4.1), was es wiederum möglich macht, die  $\frac{q}{m}$ -Akzeptanz durch Wahl des Magnetfeldes zu erhöhen.

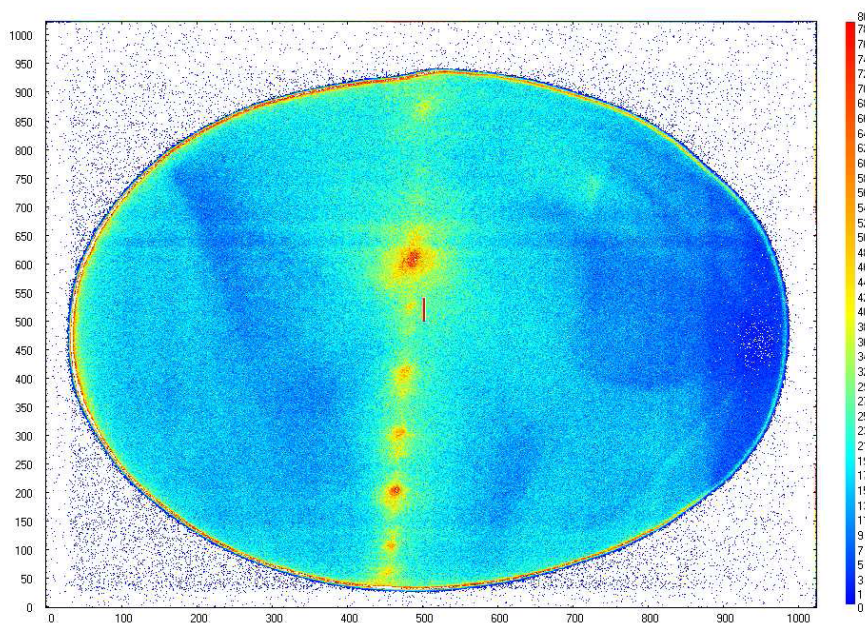


Abbildung 4.1: Beispielhafte Abbildung einer Ionenrate auf dem Detektor für hohe Extraktionsspannungen im Bereich um 1 kV. Die Regionen entsprechen verschiedenen spezifischen Ladungen vom Element Krypton und Restgas.

Vor der Identifikation dieser Regionen, ist es notwendig die Ionenstrahlen zu optimieren. Dies geschieht durch Variation der Spannungen an den diversen ionenoptischen Elementen und durch Reduktion des Untergrundes beim Einsatz der Blenden vor dem Wienfilter. Theoretischen Überlegungen und Simulationen zu Folge sollte ein Fokuspunkt zentral vor der elektrostatischen Ablenkeinheit eingestellt werden, um die beste Ablenkeffizienz zu erhalten. Daraus ergeben sich dann die weiteren Fokuspunkte im Verlauf des Ionenstrahls. Ob man dieses Ziel lediglich durch die iterative Maximierung der Zählrate erreicht hat, kann mangels stichhaltiger Diagnosemöglichkeiten bloß gemutmaßt werden. Neben der Rate ist auch die Gestalt der Ionenabbildung als Optimierungskriterium zu berücksichtigen, da eine experimentelle Verbreiterung der Ionensorten die praktisch erreichbare Auflösung gegenüber der theoretischen deutlich verschlechtert.



### 4.1.2 Identifikation der Ionen: „ $\frac{q}{m}$ -Abtastung“

Wie bereits besprochen, müssen die extrahierten Ionen zuerst untereinander identifiziert werden. Zur Unterscheidung werden alle potentiell vorhandenen  $\frac{q}{m}$ -Verhältnisse in den Identifikationsprozess mit einbezogen, um eine verlässliche Zuordnung der spezifischen Ladungen zu den jeweiligen Ionenregionen zu erhalten. Da die Rate der photoionisierten Ionen meist zu gering dafür ist, wird nur mit, durch Elektronenstoß-Ionisation erzeugten, Ionen aus der EBIT gearbeitet. Das heißt, die Spannungen auf Kathode und Driftröhren werden so eingestellt, dass die Elektronenenergie ausreicht, nicht nur das Anfangsion zu erzeugen, wie während der Photoionisationsmessung, sondern auch das Photoion.

Die Ionen werden nun extrahiert, auf dem Detektor nachgewiesen und ihre relativen Abstände untersucht. Nach dem abgeschlossenen Optimierungsprozess bleiben alle Parameter der Extraktion, bis auf das elektrische Feld des Wienfilters, auf ihrem Wert.

Für die Abtastung des  $\frac{q}{m}$ -Verhältnisses wird das elektrische Feld nun durchgestimmt. Auf das Kondensatorplattenpaar des Wienfilters kann maximal eine Potentialdifferenz von 600 V angelegt werden, also an jede der beiden Platten eine Spannung von  $\pm 300$  V. Somit erfüllt sich sequentiell für jedes  $\frac{q}{m}$ -Verhältnis die Durchflugbedingung des Wienfilters:

$$\frac{q}{m} = \frac{|E|^2}{|B|^2 \cdot 2 \cdot U_{Extr}} \quad (4.1)$$

Um den Prozess des Durchstimmens mitzuverfolgen, werden die y-Positionen auftreffender Ionen gegen den Wert der, an den Wienfilter angelegten, Spannung aufgetragen. Wenn ein Ion nicht mehr die Durchflugbedingung für ein waagrechtes Passieren des Wienfilter erfüllt, trifft es an einer veränderten y-Position auf dem Detektor auf, während die x-Position unverändert bleibt. Das MPA-3-Programm digitalisiert die Werte der Positionen und der Wienfilter-Spannung in eine einstellbare Anzahl von Kanälen. Die Kalibrierung dieser Daten wird im Folgenden näher erläutert. Bei dieser Art von Datenaufnahme entsteht ein zweidimensionales Histogramm, welches für die Identifikation der Ionen besonders hilfreich ist. Abbildung 4.2 zeigt die graphische Darstellung einer typischen  $\frac{q}{m}$ -Abtastung, wie sie die Software des MPA3-Systems erzeugt.

Von dieser zweidimensionalen Abtastungsdarstellung ist für die Ionenidentifikation nur der relative Abstand auf der Abszisse zwischen den einzelnen  $\frac{q}{m}$ -Regionen von Bedeutung, welches einer Spannungsdifferenz entspricht. Für die Analyse der Da-

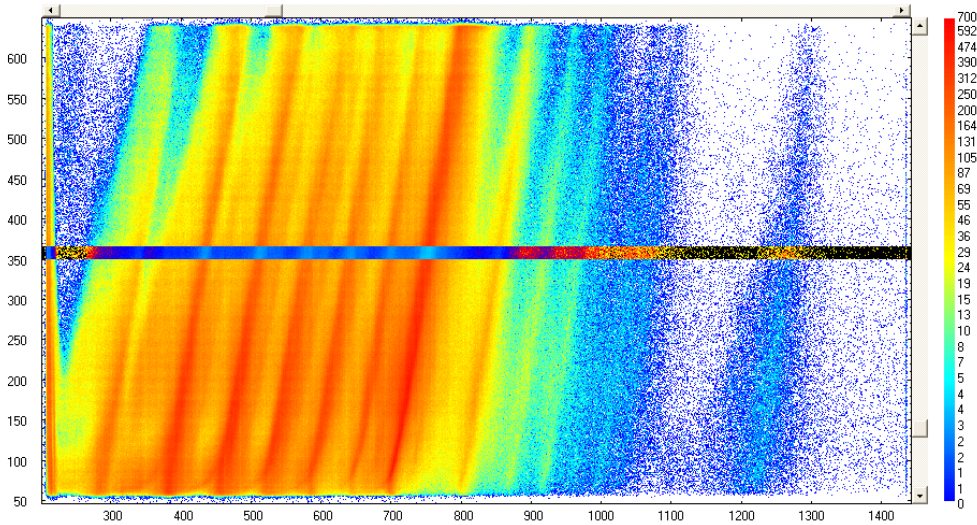


Abbildung 4.2: Graphische Darstellung der Ionenrate, die sich bei der Abtastung des elektrischen Wienfilterfeldes ergibt. Auf der Ordinate ist die y-Koordinate des Auftreffortes bei einem bestimmten Ioneneignis dargestellt. Auf der Abszisse wird der jeweilige Wert der, an dem Wienfilter anliegenden, Spannung aufgetragen.

ten wird die Projektion, eines Ausschnitts dieser Darstellung, bei einem bestimmten Wertebereich der Ordinate (y-Koordinate des Detektors) auf die Abszisse verwendet. Ein möglicher Ausschnitt ist in Abbildung 4.2 anders farblich markiert und führt nach seiner Projektion auf die x-Achse zu einem Intensitätsverlauf wie in Abbildung 4.3.

Aus

$$\sqrt{\frac{q}{m}} = \frac{|E|}{|B| \cdot \sqrt{2} \cdot U_{Extr}} \quad (4.2)$$

folgt, dass die x-Achse nicht nur proportional zum elektrischen Feld des Wienfilters, sondern auch proportional zu der Wurzel aus  $\frac{q}{m}$  ist. Die x-Achse dieser Projektion wird, unter Zuhilfenahme eines identifizierten Peaks, linear gestreckt und auch verschoben, so dass sie dann direkt proportional zu  $\frac{q}{m}$  wird. Die Streckung, im Fall des identifizierten  $\frac{q}{m} = \frac{1}{4}$ -Peaks, erfolgt mit

$$\frac{q}{m} = \left( (ch_i - ch_{1/4}) \cdot f_{id} + \sqrt{\frac{1}{4}} \right)^2 \quad (4.3)$$

Hierbei steht „ $ch_i$ “ für die durchlaufende Kanalzahl, während „ $ch_{1/4}$ “ für die Kanalzahl des  $\frac{q}{m} = \frac{1}{4}$ -Peaks steht. Ist  $ch_i = ch_{1/4}$ , so sieht man an Gleichung 4.3 sofort, dass  $\frac{q}{m} = \frac{1}{4}$  gilt. Auf diese Weise wird die Identifizierung an diesem Peak referen-

ziert. Mit der Konstante  $f_{id}$  sind nun weitere Streckungen um diesen Punkt möglich. Ihr Quadrat ist umgekehrt proportional zur Extraktionsspannung und zum Quadrat vom Magnetfeld des Wienfilters. Es gilt

$$U_{Extr} \cdot B^2 \cdot f_{id}^2 = \textit{konstant} . \quad (4.4)$$

Selbst bei dem ausgezeichneten Vakuum, das in einer kryogenischen EBIT erreicht

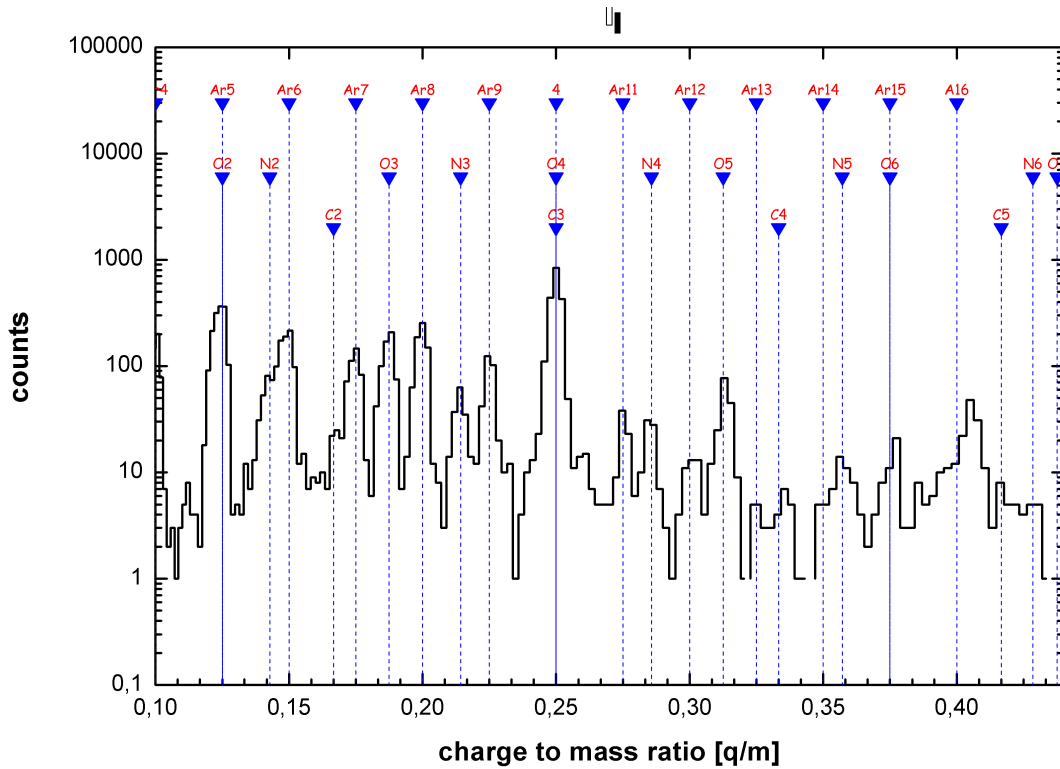


Abbildung 4.3: Intensitätsverlauf der Ionenrate, aufgetragen gegen das  $\frac{q}{m}$ -Verhältnis. Als Bereich wurde ein Ausschnitt aus dem oberen Detektorbereich gewählt, da hier die Auflösung besser war. Die Ionen wurden aus einem Potential von 1100 eV extrahiert. Die vier kennzeichnet den  $\frac{q}{m} = \frac{1}{4}$ -Peak. Dieser Peak wurde als Referenz gewählt und mit seiner Position bei Kanal 237 identifiziert. Mit  $\left( (i - 237) \cdot 0,0022 + \sqrt{\frac{1}{4}} \right)^2$  wurde die x-Achse kalibriert. Die senkrechten Linien (blau) geben die theoretischen Positionen der  $\frac{q}{m}$ -Verhältnisse an, die gut mit dem Experiment übereinstimmen.

wird (in der Größenordnung von  $10^{-12}$  mbar bis  $10^{-14}$  mbar) sind noch genügend Restgasatome, neben dem injizierten Element, vorhanden, so dass ausreichende Ströme solcher Ionen extrahiert werden können. Man beobachtet daher auch Ionen von N, O, C, H, He sowie von Ba und W (diese letzten zwei Elemente durch Verdampfung aus der Kathode).

Das Vorhandensein von Elementen verschiedener Masse und unterschiedlicher Ladung führt in manchen Fällen zu Koinzidenzen bei spezifischen Werten der Ionenladung. Bei solchen Peaks kann also nicht direkt zwischen den diversen Elementen unterschieden werden. In der Graphik 4.2 ist dies bei der spezifischen Ladung 0,25 gut zu erkennen. Dieses Verhältnis ergab sich bei dieser Messung für dreifach geladenen Kohlenstoff  $\left(\frac{q}{m}\right)_C = \frac{3}{12} = \frac{1}{4} = 0,25$ , für vierfach geladenen Sauerstoff  $\left(\frac{q}{m}\right)_O = \frac{4}{16} = \frac{1}{4} = 0,25$  und für zehnfach geladenes Argon  $\left(\frac{q}{m}\right)_{Ar} = \frac{10}{40} = \frac{1}{4} = 0,25$ . Je nach Wert der Energie, die in der FLASH-EBIT für die Elektronenstoßionisation zur Verfügung steht, können während der  $\frac{q}{m}$ -Abtastungen die entsprechenden Ladungszustände der Restgasionen auftauchen. Für die ersten Ansätze der Identifikation ist der Peak, für den  $\frac{q}{m} = \frac{1}{4}$  gilt, von Bedeutung, da dieser Peak praktisch immer gut zu lokalisieren ist. Die Peaks mit den  $\frac{q}{m}$ -Verhältnissen  $\frac{1}{2}$  ( $H_2^+$  sowie  $He^{2+}$ ) und  $\frac{1}{1}$  (Protonen) sind auch immer vorhanden. Der  $\frac{q}{m} = \frac{1}{4}$ -Peak ist daher am besten für die erste Referenzierung der Kalibration geeignet, da die in dieser Arbeit untersuchten Ionen sehr nahe bei diesem Verhältnis liegen. Die beiden weiteren prominenten  $\frac{q}{m}$ -Verhältnisse  $\frac{1}{2}$  und 1 können aber dennoch auch als grobe Anhaltspunkte für die, zu erwartenden Lagen der weiteren  $\frac{q}{m}$ -Verhältnisse dienen. Dennoch lassen sich beim Überstreichen weiter  $\frac{q}{m}$ -Bereiche gewisse Abweichungen von den idealen theoretischen Zusammenhängen feststellen, die in erster Linie auf unterschiedliche Potentiale am Entstehungsort der Ionen zurückzuführen sind.

Nach abgeschlossener Identifikation wird ein elektrisches Feld festgestellt, auf dem der Wienfilter im Verlauf der Photoionisationsmessung konstant gehalten wird. Bei diesem Wert sind dann sowohl das Signal vom Anfangsion als auch die Region in der das Photoion erwartet wird, auf dem Detektor genau bekannt. Dieses Verfahren soll nun anhand eines Beispiels weiter veranschaulicht werden.

Für das Identifizieren der Argonionen wurde die EBIT auf folgende Parameter eingestellt: An der Kathode lag eine Spannung von 60 V an, das Driftröhrenensemble wurden auf ein Potential von 250V angehoben. Die axiale Falle ergab sich indem die Fallendriftröhre auf 103 eV sowie die linke und rechte Nachbarelektroden jeweils auf 150 V und 103 V gelegt wurden. Daraus ergeben sich eine Elektronenenergie von 413 eV (ohne Korrektur durch das Raumladungspotential) und ein Extraktionspotential von 353 V für die Ionen. Das elektrische Feld des Wienfilters wurde im Bereich von 30 V bis 150 V abgetastet. Zur Identifikation wurde der Peak des  $Ar^{8+}$ -Ions verwendet. Aus den EBIT-Einstellungen ist ersichtlich, dass  $Ar^{9+}$  durch Elektronenstoßionisation nicht erzeugt werden kann, da die Elektronen im Fallenbe-

reich eine kinetische Energie von 413 eV haben, welche unter dem theoretischen Ionisationspotential von neunfach geladenem Argon, bei etwa 422,8 eV [34], liegt. Die Zählrate von  $\text{Ar}^{8+}$  ist signifikant größer als die des Untergrundes. Der  $\text{Ar}^{8+}$ -Peak wurde mit bei Kanalzahl 755 identifiziert. Somit ergaben sich die Positionen der restlichen  $\frac{q}{m}$ -Verhältnisse mit der Kalibration der x-Achse aus

$$x = \frac{q}{m} = \left( (i - 755) \cdot 0,00054 + \sqrt{\frac{8}{40}} \right)^2 \quad (4.5)$$

Das identifizierte Massenspektrum ist auf Abbildung 4.4 wiedergegeben.

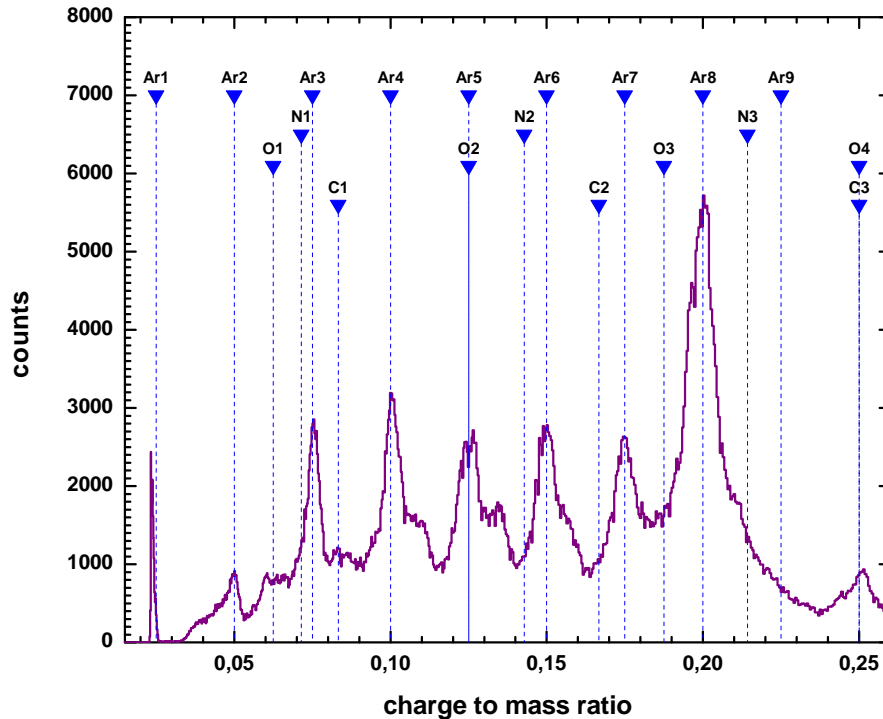


Abbildung 4.4: Zählrate von aus der EBIT extrahierten Argonionen gegen ihr Ladung-zu-Masse-Verhältnis. Identifizierte Ionen sind (blau) gekennzeichnet. Die Verhältnisse der Zählraten entsprechen den eingestellten EBIT-Parametern.

## 4.2 Photoionisation in der EBIT

Für die Messung ist es essentiell, dass der Ladungszustand, der durch Photoionisation entstehen soll, nicht von der EBIT in nennenswerter Ausbeute erzeugt wird. Das

heißt die Energie, die in der EBIT für Elektronenstoßionisation zur Verfügung steht, wird während der Messung immer unter der Ionisationsschwelle  $E_{IS} = h\nu$  gehalten

$$E_{kin}(e^-) = q \cdot (U_{Kath} + U_{Falle} + U_{DT}) \leq E_{IS} \quad (4.6)$$

### 4.2.1 Photoionisation von $N^{3+}$

Da die Photoionisationsschwelle von  $N^{3+}$  bereits bei 77 eV liegt, musste für die Photoionisation von dreifach geladenem Stickstoff ein zyklischer Extraktionsmodus für die Ionen aus der FLASH-EBIT gewählt werden. Die Photoionisation von  $N^{3+}$  stellt eine extreme Herausforderung für die Photoionisationsmessungen dar. Da die Kathode bereits für den Betrieb etwa 60 V negative Spannung benötigt bleiben nur wenige Volt für die Driftröhrenspannung übrig, mit denen dort ein Fallenpotential erzeugt werden kann.

Das bedeutet aber für die Extraktion, dass die Ionen von einem sehr niedrigen Potential kämen, also eine niedrige kinetische Energie hätten. Diese Bedingung macht einen effizienten Ionentransport praktisch unmöglich. Somit ist es notwendig das Fallenpotential zu erhöhen, ohne dass dabei durch den Elektronenstrahl mit höherer Energie ionisiert wird. Der Elektronenstrahl muss also vor dieser Potentialerhöhung abgeschaltet werden. Die Ionen bleiben auch ohne die Raumladung des Elektronenstrahls im sogenannten magnetischen Fallenmodus gefangen [29]. Daraus ergibt sich die Notwendigkeit eines gepulsten Modus für die Extraktion, der zyklische Einstellungen für verschiedene EBIT- und Extraktionsparameter erfordert.

Die zyklische Messung wurde nun mit einer Zyklusdauer von 6 Sekunden, bei einer Elektronenstrahlenergie von 50 eV und einer Extraktionsenergie von  $E_{Extr} = q \cdot 400 V$  durchgeführt. Der Zyklus lässt sich in vier Phasen einteilen (vergleiche Abbildung 4.5), während derer sich die Parameteränderung abspielt. Nach jedem Zyklus wurde die Photonenenergie um einen Schritt angehoben.

In der ersten Phase werden die  $N^{3+}$ -Ionen durch Stoßionisation in der EBIT, bei einem Elektronenstrahlstrom von 2 mA, erzeugt. Die Kathode hat dabei eine Spannung von 50 eV und die Fallenelektrode liegt auf Erdpotential. Die Elektronenstrahlenergie beträgt daher weniger als 50 eV, da das Raumladungspotential des Elektronenstrahls eine kleine Verringerung dieser Energie bewirkt. In der zweiten Phase, nach 3,5 Sekunden, wird der Elektronenstrahl abgeschaltet, so dass die Ionen nur noch durch das Magnetfeld und durch die beiden Nachbarelektroden der Falle in

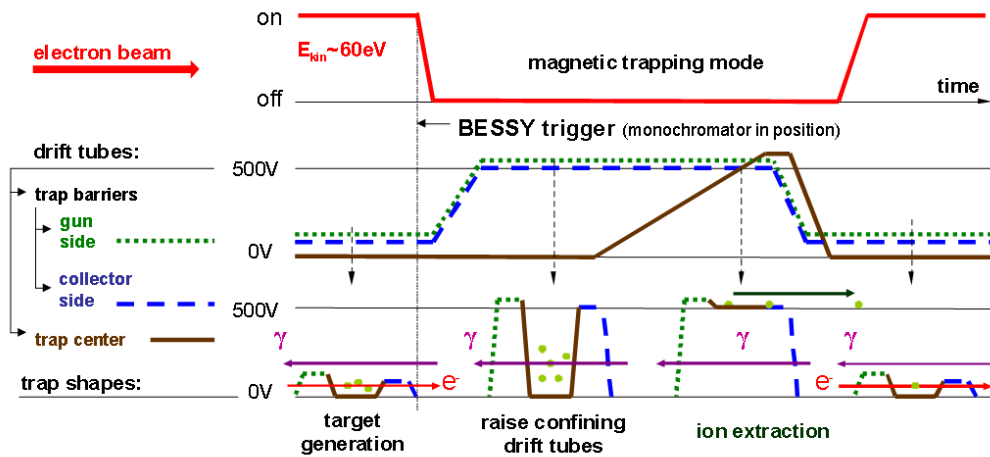


Abbildung 4.5: Schematische Darstellung des zyklischen Photoionisationsmodus, der für die Photoionisation von  $N^{3+}$  verwendet wurde. Zeitlicher Verlauf der Spannungen an der Fallen und deren Nachbar Elektroden sowie das An- und Ausschalten des Elektronenstrahls. Der Aufenthaltsort der Ionen (grüne Punkte) in den vier Phasen des Zyklus wird angedeutet [29].

der EBIT festgehalten werden. Während der 0,5 Sekunden dieser Phase werden die Ionen weiterhin durch den Photonenstrahl ionisiert. Die äußeren Fallenelektroden werden auf höhere Potentiale gelegt, um ein axiales Entkommen der Ionen zu unterbinden. Innerhalb des folgenden Abschnitts wird nun die Spannung der mittleren Fallenelektrode langsam angehoben, so dass die Ionen die Barriere der äußeren Fallenelektrode in Richtung der Extraktion überwinden können. Die Ionen werden, nachdem sie auf das Potential dieser Elektrode angehoben worden sind, die Falle verlassen und in Richtung Extraktion beschleunigt. In der vierten Phase haben alle Ionen die Falle verlassen und die Driftröhren werden auf ihre anfänglichen Spannungswerte zurückgesetzt. Der Elektronenstrahl kann nun wieder angeschaltet werden und der Zyklus von neuem beginnen. Nachteile dieses Verfahrens sind die relativ geringe Zählstatistik der Einzelpulse und die Fluktuationen des Ionenertrags zwischen den Zyklen, die sorgfältige Normierung erfordern (vergleiche [29]).

Die Photoionisation fand mit Photonen im Energiebereich 68 eV bis 84 eV statt. In diesem Bereich wurde die Ionisationsschwelle bei etwa 77,23 eV sichtbar. Außerdem wurden unterhalb der Schwelle Resonanzen gemessen, die auf metastabile  $N^{3+}$ -Ionen zurückzuführen sind. Zusätzlich zur Ionisation vom Grundzustand aus wurden auch mehrere Autoionisationsresonanzen mit Fanoprofilen bei höheren Energien identifiziert. In Abbildung 4.6 sind diese Daten dargestellt. Die erste Serie von Resonanzen

2p-np rührt von der Photoionisation des metastabilen Zustandes  $^3P_0$  her. Eine erste Schwelle bei 69 eV wird durch die direkte Photoionisation solcher langlebigen Zustände verursacht. Die zweiten Serien 2p-nd und 2p-ns werden vom Grundzustand  $^1S_0$  ionisiert. Die Schwelle bei 77 eV ist deutlich sichtbar. In Abbildung 4.7

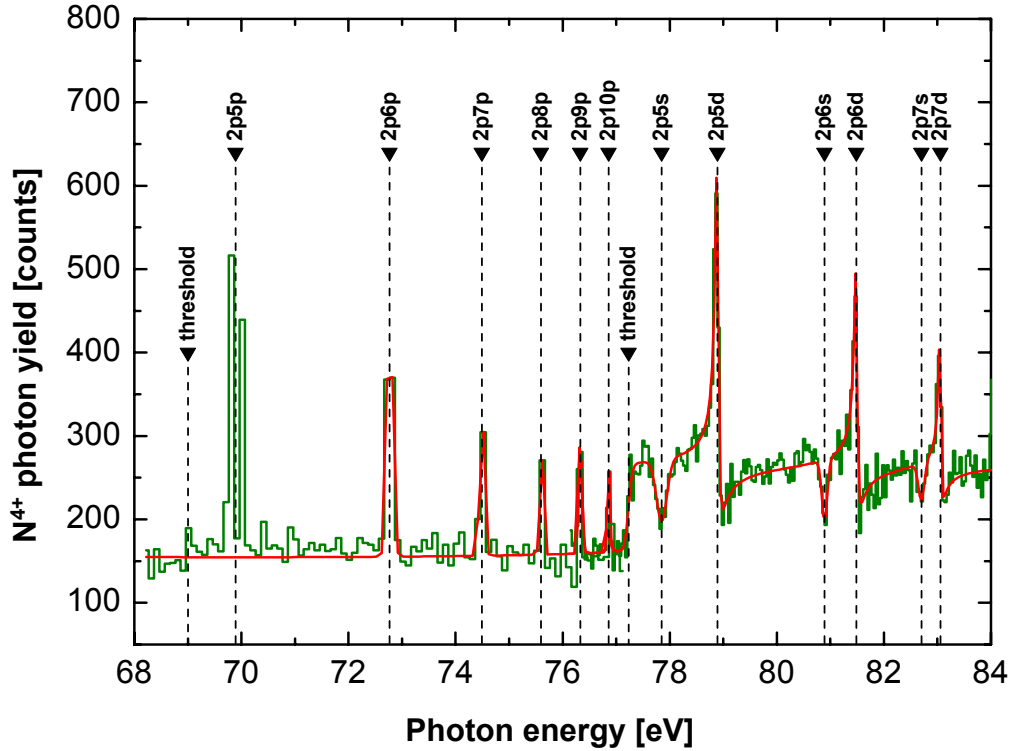


Abbildung 4.6: Photoionisationsrate von  $N^{4+}$  in Abhängigkeit von der Photonenergie [29].

wird die Feinstruktur der  $2p5p$  Resonanz des metastabilen Zustandes  $1s^22s2p^3P_0$  im Bereich um 69,8 eV aufgelöst.

#### 4.2.2 Vergleich der $N^{3+}$ -Daten mit Experiment und Theorie

Für die Photoionisation von dreifach geladenem Stickstoff werden die Daten, in Tabelle 4.1 mit eigenen Rechnungen sowie mit theoretischen Werten aus TOPbase, NIST, und mit Ergebnissen aus Merged-Beam Experiment verglichen. Die Positionen der Resonanzen wurden auch hier mit Fano- und Gaußprofilen angepasst. Der Vergleich zeigt für die gemessenen Positionen von Resonanzen und Schwellen eine gute Übereinstimmung mit anderen Experimenten, sowie mit der Theorie.



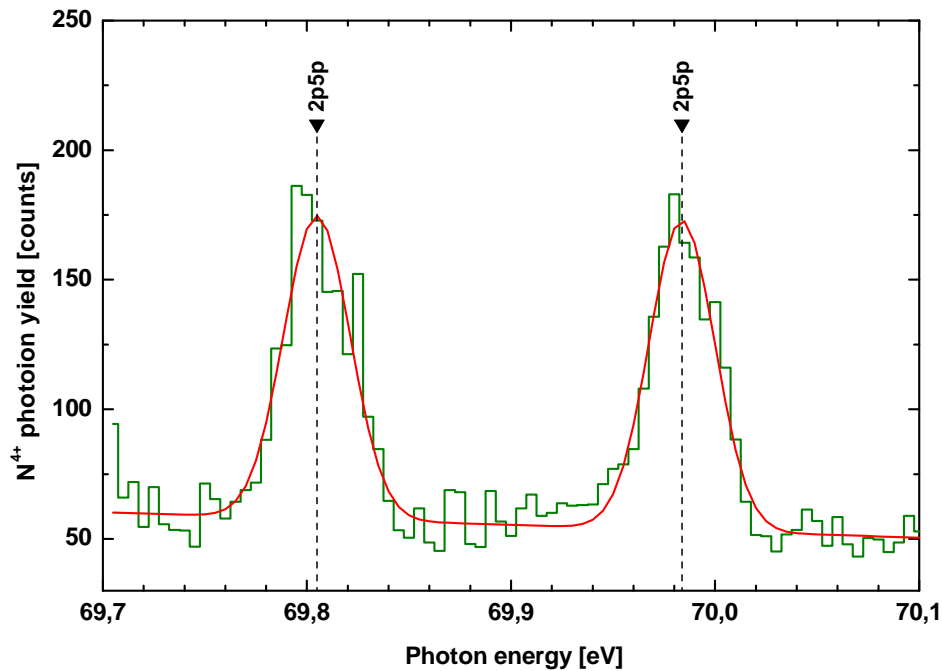


Abbildung 4.7: Feinstruktur der  $2s5p$ -Resonanz des metastabilen Zustandes.

### 4.2.3 Photoionisation von $\text{Ar}^{8+}$

Die Photoionisation von achtfach geladenem Argon wurde während der Strahlzeit 2009 am BESSY II durchgeführt. Dabei wurde der Grundzustand von  $\text{Ar}^{8+}$  ( $1s^2 2s^2 2p^6$ )  $^1S_0$  mit Photonen im Bereich von 400 eV bis 500 eV photoionisiert. Es ist erstmals in einem Experiment gelungen in diesem Energiebereich die Kante der direkten Photoionisation eines hochgeladenen Ions sowie Resonanzen autoionisierender Zustände zu untersuchen.

Für die Messung wurde, im Gegensatz zur Photoionisation von Stickstoff, ein kontinuierlicher Extraktionsmodus gewählt. In diesem Modus ist der Elektronenstrahl ohne Unterbrechung eingeschaltet und an den Driftröhren liegen konstante Spannungen an. Die Energie, die dem Elektronenstrahl zur Elektronenstoßionisation zur Verfügung steht ist gerade so hoch, dass noch  $\text{Ar}^{8+}$ -Ionen aber noch keine  $\text{Ar}^{9+}$ -Ionen erzeugt werden. Die Spannung an der Kathode betrug während der verschiedenen Messungen etwa 100 V. An die drei mittleren Driftröhren wurden Spannungen von 128 V, 129 V und 102 V angelegt. Alle Driftröhren wurden zusätzlich auf 197 V angehoben, sodass die Ionen aus einem Potential von etwa 326 eV (ohne Korrektur mit der Raumladung) extrahiert wurden. Die nominelle Elektronenstrahlenergie

Tabelle 4.1: Photoionisationskanten und Anregungsenergien der autoionisierenden Resonanzen von  $N^{3+}$ -Ionen. (Experiment) verglichen mit *merged-beam* Ergebnissen (MB), theoretischen Vorhersagen von Harman (MCDF), TOPbase (TO), und Daten aus NIST (NI).

Zustand	Experiment [eV]	MB, exp. [eV]	MCDF	TO	NI
$2s$ MS	69,0(2)	69,13	68,85	68,97	-
$2p5p$	69,89(8)	69,85(5)	69,99	69,782	69,906
$2p6p$	72,77(5)	72,75(5)	72,90	72,670	72,790
$2p7p$	74,49(5)	74,45(5)	74,61	74,388	74,503
$2p8p$	75,60(5)	75,59(5)	75,72	75,492	75,621
$2p9p$	76,33(5)	76,31(5)	76,47	76,244	76,364
$2p10p$	76,86(5)	76,85(5)	77,17	76,778	78,881
$2s$ GS	77,23(5)	-	77,18	77,47	-
$2p5s$	77,85(2)	77,72(5)	77,73	77,93	77,930
$2p5d$	78,89(2)	78,88(5)	78,83	78,40	78,912
$2p6s$	80,89(3)	-	80,71	80,81	-
$2p6d$	81,49(2)	81,49(5)	81,41	81,18	81,506
$2p7s$	82,70(3)	-	82,54	82,63	-
$2p7d$	83,06(2)	-	82,98	82,84	83,080

(426 eV), vermindert durch das Raumladungspotential, reichte gerade nicht aus, um  $Ar^{9+}$  direkt zu erzeugen.

Aus der Übersichtsmessung über die Photoionisationsschwelle und die Resonanzen) lassen sich die Anregungsenergien dieser charakteristischen Strukturen bestimmen. Für die Übersicht wurde die Photonenenergie etwa 4 Stunden im Bereich von 400 eV bis 500 eV abgetastet. Weitere Messungen konzentrierten sich vor allem auf die erste Resonanz hinter der Schwelle ( $2s5p$ ), die bei verschiedenen Breiten des Monochromatorspaltes (von  $15 \mu\text{m}$  bis  $500 \mu\text{m}$ ) und mit verschiedenen Schrittweiten (von 5 meV bis 500 meV) abgetastet wurde.

### 4.3 Datenanalyse (Argon)

Im Folgenden wird nun die Vorgehensweise in der Datenbearbeitung ausgeführt. Es wird auf die Kalibration der Photonenenergie, deren Korrektur sowie die Analyse der Resonanzen eingegangen. Außerdem werden die theoretischen Werte für Resonanzen

zen und die Photoionisationsschwelle zusammengetragen. Anschließend werden die Ergebnisse der Photoionisation von Stickstoff und Argon besprochen um sie letztendlich mit der Theorie zu vergleichen. Für die graphischen Darstellungen der experimentellen Photoionenausbeute in Abhängigkeit von der Photonenenergie wurde die Rate der  $\text{Ar}^{9+}$ -Ionen auf die Rate der  $\text{Ar}^{8+}$ -Ionen normiert. Eine Übersichtsmessung mit Identifikation der Kante und der Resonanzen ist in Abbildung 4.8 dargestellt.

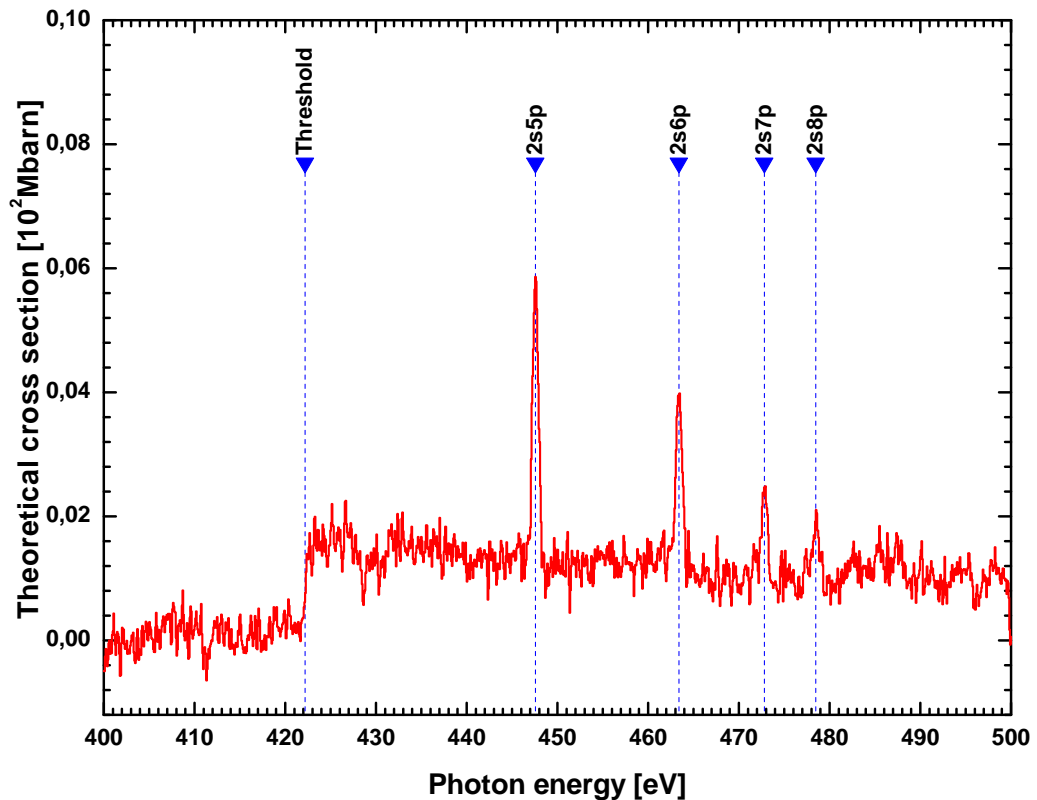


Abbildung 4.8: Übersichtsmessung: Experimentelle Photoionenrate in Abhängigkeit von der Photonenenergie (rot). Die Positionen der Kante und der Resonanzen sind (blau) identifiziert.

### 4.3.1 Kalibration und Korrektur der Photonenergie

Um die experimentellen Positionen von Resonanzen und Schwellen mit der Theorie vergleichen zu können, ist es notwendig die gemessene Photonenenergie zu kalibrieren. Für den hier untersuchten Energiebereich wurde Neutralgasabsorption mit molekularem Stickstoff verwendet. Diese nachträglich durchgeführte Kalibration führte zu einer positiven Korrektur der Photonenenergieskala um 0,07 eV.

Eine weitere Korrektur ergibt sich bei der Analyse einzelner Resonanzpositionen in Abhängigkeit von der Schrittweite mit der die Energie abgetastet wird. Die Ursache dieser Verschiebung ist eine geringfügige Zeitverschiebung zwischen dem Photoionisationszyklus und der Speicherung des Photonenenergiewertes. Während der Monochromator bereits die nächste Photonenenergie anfährt werden die Ionenraten weiterhin der zuletzt eingestellten Energie zugeschrieben, da die Monochromatorsteuerung erst einen neuen Wert angibt, wenn die angesteuerte Position erreicht wurde, und den vorherigen Wert so lange beibehält. Dies führt zu einer schrittweitenabhängigen Verschiebung der Peakpositionen. Zwei Effekte addieren sich dabei. Zu größeren Schrittweiten werden Abweichungen der beigemischten Photonenenergien stärker und zusätzlich auch die Zeitdauer dieser ungewollten Beimischung erhöht. Außerdem gibt es auch noch eine prinzipielle, statistische Zeitverzögerung zwischen dem Entstehen des Photoions und dessen Detektion. Ohne konkrete Messung, welche einen schnellen Photonenshutter benötigt hätte, lassen sich keine zuverlässigen Aussagen über diese Verzögerung machen. Mit einer, im folgenden erklärten, Korrektur wird aber auch diesem Effekt teilweise Rechnung getragen. Sie wurde bestimmt indem die Anregungsenergie der ersten autoionisierenden Resonanz hinter der Schwelle ( $2s5p$ ) bei verschiedenen Schrittweiten ermittelt wurde. In der graphischen Darstellung der gemessenen Energie gegen die Schrittweite der Abtastung lässt sich eine Gerade an die ermittelten Werte anpassen, vergleiche Abbildung 4.9. Somit lässt sich die Anregungsenergie der Resonanzen im Grenzfall unendlich kleiner Schrittweite durch lineare Regression ermitteln. Folgende Abhängigkeit wurde bei der ersten Resonanz gefunden

$$E_{2s5p} = (447,61 + 0,79 \cdot \Delta E_{SW}) eV \quad (4.7)$$

Aus dieser Geradengleichung ergibt sich die korrigierte Anregungsenergie der ersten Resonanz als Schnittpunkt mit der y-Achse, zu  $E_{2s5p}(SW = 0) = (447,61 \pm 0,01(stat)) eV$ . Die Steigung der Gleichung 4.7 führt zum allgemeinen Korrekturfaktor der gemessenen Photonenenergien für verschiedene Schrittweiten der Abtastung. Zusammen mit der Kalibrationskorrektur und deren Unsicherheit ergibt sich eine Gesamtkorrektur von

$$E_{korr}^{\gamma} = [E_{exp}^{\gamma} + (0,07 \pm 0,1(syst)) - (0,79 \pm 0,1(stat)) \cdot \Delta E_{SW}] eV . \quad (4.8)$$

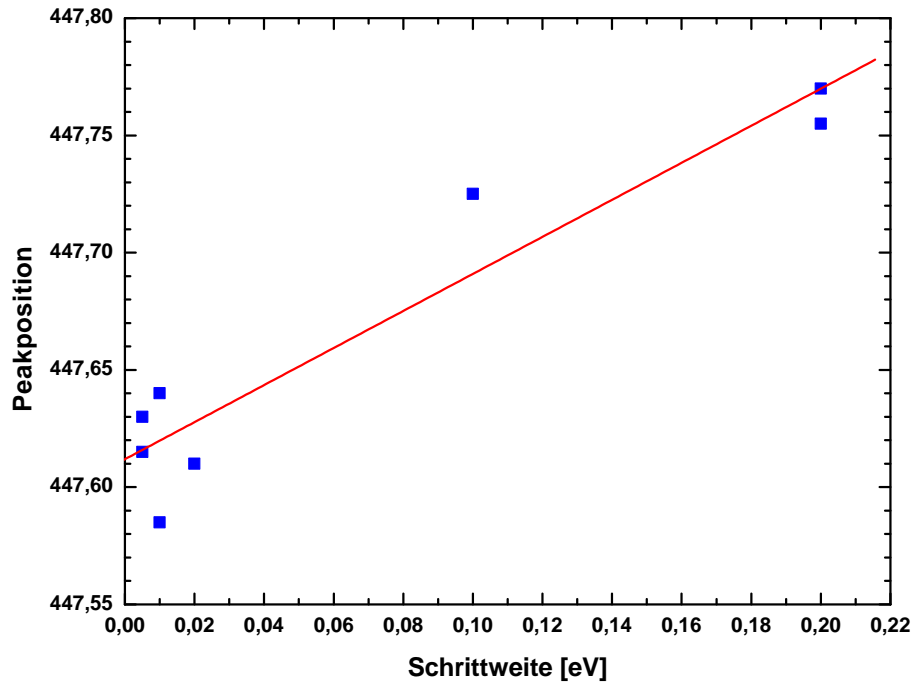


Abbildung 4.9: Positionen der ersten Resonanz in Abhängigkeit der Schrittweite, bei der diese abgetastet wurde.

Bei kleiner werdender Schrittweite und Monochromatorspalt steigt die Auflösung derart, dass die Linienformen der Resonanzen genauer identifiziert werden können. Asymmetrische Linienformen werden deutlich und es genügt nicht mehr die experimentellen Daten nur mit einer Gauß-Funktion anzupassen. Der theoretische Verlauf der Ionenausbeute in Abhängigkeit der Photonenenergie entspricht bei den autoionisierenden Resonanzen einem Fanoprofil und wird erst sichtbar wenn man sich durch steigende Auflösung der natürlichen Linienbreite dieser Resonanzen nähert. Dieses theoretische Profil erscheint in der Messung immer mit der apparativen Auflösung, die praktisch immer als Gaußfunktion angenähert werden kann, gefalteten. Allgemein lässt sich die Faltung  $M(E)$  als

$$M(E) = \int G(\varepsilon)F(\varepsilon - E)d\varepsilon \quad (4.9)$$

schreiben, wobei  $G$  für eine normierte Gaußfunktion variabler Breite (passend zur Auflösung der entsprechenden Messung) und  $F$  für die Fanofunktion steht (Details

zu diesem Linienprofil siehe Kapitel 2.4). Leider lässt sich die gefaltete Funktion nicht analytisch in einer, für die Kurvenanpassung nutzbare Form, darstellen. Um dennoch die Fanoparameter und die natürliche Linienbreite bestimmen zu können, werden Testfaltungen vorgenommen und mit den Daten verglichen. An die Resonanzen hinter der Schwelle wurden händisch Faltungen einer Fanofunktion mit einer Gaußfunktion angepasst. Die Parameter der Gaußfunktion ändern sich in Abhängigkeit von der Schrittweite und der Spaltbreite. Die Parameter der Fanofunktion werden für die gleiche Resonanz und Messungen mit verschiedenen Schrittweiten möglichst ähnlich gewählt. Mit dieser neuen Faltungsfunktion wird eine gute Übereinstimmung zwischen angeglicherer und gemessener Linienform erreicht. Die Breite der Gaußfunktion mit der gefaltet wird unterliegt dem Fehler der durch rechnerische und optische Beurteilung von der Abweichung zwischen Anpassungsfunktion und Messwerten abgeschätzt wird.

### 4.3.2 Die $2s5p$ -Resonanz

Die Bestimmung der Kurvenparameter des kombinierten Fano- und Gaußprofils soll beispielhaft anhand der ersten Resonanz für  $\text{Ar}^{8+}$  nach dem Schwellwert ( $2s5p$ ) vorgestellt werden. Die Anpassung ist graphisch in Abbildung 4.10 verdeutlicht. In dieser Graphik werden die experimentellen Daten der ersten Resonanz mit zwei, mit unterschiedlichen Parametern angesetzten, Faltungen verglichen. Das zugrunde liegende Fanoprofil wird auch dargestellt. Die Resonanz wurde hier bei einer Monochromatorspaltbreite von  $50 \mu\text{m}$  im Bereich von  $447,36 \text{ eV}$  bis  $447,16 \text{ eV}$  bei einer Schrittweite von  $10 \text{ meV}$  abgetastet. Das Profil der Fanofunktion wird durch die Faltung geglättet, so dass das resultierende Profil verbreitert und dessen Maximum gesenkt wird. Die Abbildung zeigt zwei verschieden farbigen Kurven, die an die Daten angepasst wurden. Die Faltung mit der breiteren Gaußfunktion beschreibt zwar noch gut die Breite und die Form des experimentellen Intensitätsverlaufs, hat aber ein allzu niedriges Maximum. Durch Senken der Gaußbreite von  $2\sigma = 0,07 \text{ eV}$  auf  $2\sigma = 0,06 \text{ eV}$  wird auch der Kurvenverlauf um das Maximum optimal beschrieben. Die  $2s5p$ -Resonanz wurde bei kleineren Spaltbreiten in Bereichen von wenigen eV um ihre Position untersucht. In Abbildung 4.11 sind drei Messungen und ihre dazu angepassten Verläufe dargestellt. Für abnehmende Spaltbreite ist zu erkennen, dass das Fanoprofil immer mehr hervortritt. In Tabelle 4.2 wurden die für diesen und andere Datensätze ermittelten Parameter der Gauß- und der Fanofunktion der an-

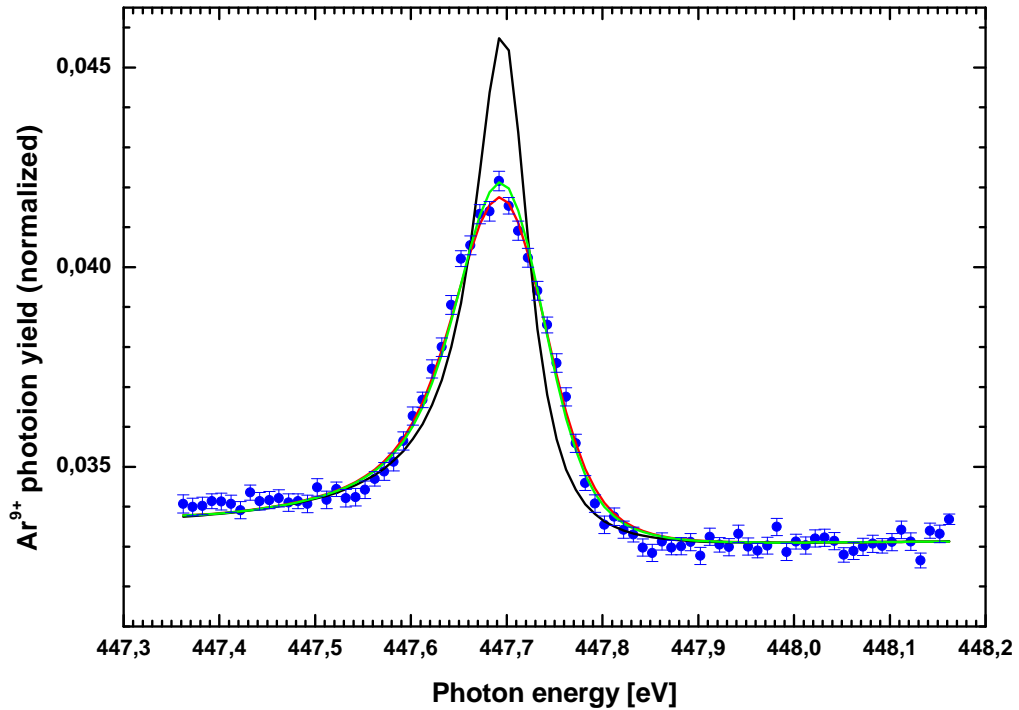


Abbildung 4.10: Experimentelle Daten (blaue Punkte mit Fehlerbalken) werden mit der Faltungsfunktion (rot: Gaußbreite  $2\sigma = 0,06 \text{ eV}$ ; grün: Gaußbreite  $2\sigma = 0,07 \text{ eV}$ ) und der Fanofunktion (schwarz) verglichen.

gepassten Faltungen zusammengetragen. Aus diesen Werten und vorangegangenen Überlegungen lässt sich eine Annäherung an die natürliche Linienform der  $2s5p$ -Resonanz vornehmen. Diese führt auf ein Fanoprofil der Form

$$F(E) = \frac{(q + (E - E_0)/(0,5 \cdot \Gamma))^2}{1 + ((E - E_0)/(0,5 \cdot \Gamma))^2} \quad (4.10)$$

Die ermittelte Resonanzenergie ist  $E_0 = (447,61 + 0,07 \pm 0,1) \text{ eV}$ . Die Linienbreite  $\Gamma \approx 0,07 \text{ eV}$  und der  $q$ -Wert  $q \approx -8$  wurden durch die oben erklärte iterative Anpassungsprozedur ermittelt.

Für die Breite der Gaußfunktion (des Apparateprofils) als Funktion der Spaltbreite  $B$  ergibt sich aus Abbildung 4.12 ein linearer Zusammenhang.

$$\delta_B = 1,42 \frac{\text{meV}}{\mu\text{m}} \pm 0,04 \frac{\text{meV}}{\mu\text{m}} \quad (4.11)$$

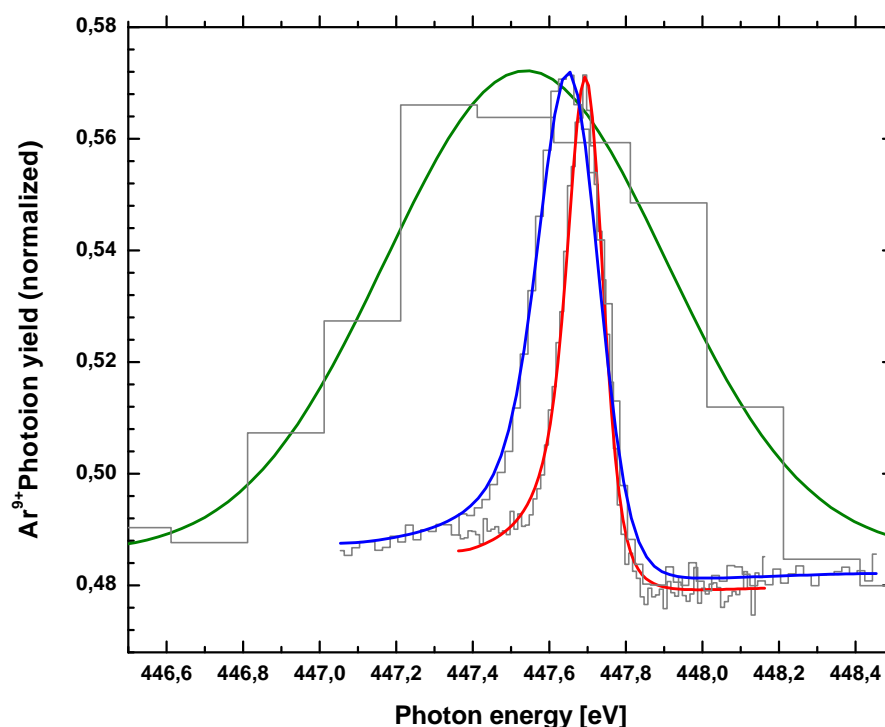


Abbildung 4.11: Graphische Darstellung dreier Photoionenausbeuten in Abhängigkeit von der Photonenergie und ihrer angepassten Linienformen. Die Weite des Monochromatorschlitzes sinkt von  $500 \mu\text{m}$  (grün, Gaußfunktion angepasst) über  $100 \mu\text{m}$  (blau, Faltungsfunktion angepasst) bis  $50 \mu\text{m}$  (rot, Faltungsfunktion angepasst). Mit diesem Sinken steigt die Auflösung und das natürliche Linienprofil, die Fanofunktion, ist erkennbar. Gleichzeitig sinkt die Breite der Gaußfunktion, die angepasst wird oder mit der gefaltet wird.

Diese, experimentell bestimmte, Dispersion lässt sich mit den Spezifikationen des Monochromators U49/2-PGM1, an dem das Experiment durchgeführt wurde, vergleichen. Dazu ist in Graphik 4.13 bei der Energie der ersten Resonanz für die rote Gerade ( $c = 2,25$ ) die Dispersion abzulesen. Es ergibt sich ein Wert im Bereich von  $1,4 \frac{\text{meV}}{\mu\text{m}}$  mit einer Ableseungenauigkeit von  $\pm 0,1 \frac{\text{meV}}{\mu\text{m}}$ . Die klare Übereinstimmung beider Werte bestätigt die Zuverlässigkeit der  $2\sigma$ -Werte, die für die Faltung in der Anpassungsprozedur verwendet wurden.

### 4.3.3 Übersichtsmessung

Eine Abtastung des Photoionensignals im Bereich von  $400 \text{ eV}$  bis  $500 \text{ eV}$  bei einer Schrittweite von  $0,2 \text{ eV}$  ist in Abbildung 4.14 dargestellt. Sie zeigt die Schwelle des Photoionisationsprozesses und im darüberliegenden Energiebereich bis zu 5 Reso-



Tabelle 4.2: Ermittelte Werte für die Anregungsenergie  $E_0$ , natürliche Linienbreite  $\Gamma$  und Fanoparameter  $q$  der  $2s5p$ -Resonanz. Die Schrittweite der Abtastung  $\Delta E_{SW}$ , die Breite der Gaußfunktion  $2\sigma$ , die das Apparateprofil wiedergibt werden auch angegeben.

Spalt $\mu\text{m}$	$\Delta E_{SW}$	Anpassung	$E_0[\text{eV}]$	$2\sigma[\text{eV}]$	$\Gamma[\text{eV}]$	$q$
500	0,2	Gauß	$447,6\pm 0,1$	$0,75\pm 0,08$	-	-
100	0,02	Faltung	$447,7\pm 0,1$	$0,123\pm 0,001$	0,07	-8,2
50	0,01	Faltung	$447,7\pm 0,1$	$0,0600\pm 0,0004$	0,07	-8
1000	0,2	Faltung	$447,68\pm 0,1$	$1,39\pm 0,12$	0,06	-8
50	0,01	Faltung	$447,64\pm 0,1$	$0,0693\pm 0,0004$	0,07	-7,9
15	0,01	Faltung	$447,70\pm 0,1$	$0,0292\pm 0,0001$	0,06	-8,5
15	0,01	Faltung	$447,68\pm 0,1$	$0,0292\pm 0,0001$	0,08	-7,8
250	0,1	Faltung	$447,87\pm 0,1$	$0,40\pm 0,02$	0,07	-8

nanzen. Die gesammte Energieachse wurde, basierend auf unsere Kalibration, korrigiert.

Um die Position der Schwelle zu bestimmen, wird ihr Verlauf mit einer Boltzmann-Funktion angepasst.

$$B(E) = A_1 + \frac{A_2}{1 + \exp\left(\frac{E-E_0}{dx}\right)} \quad (4.12)$$

Als Schwellenenergie ergibt sich nach der oben beschriebenen Korrektur  $E_0 = (422, 20 \pm 0, 15)$  eV. Die Resonanzen hinter der Schwelle wurden, aufgrund der geringen Auflösung, die bei dieser Übersichtsabtastung erreicht wurde, mit Gaußfunktionen angepasst.

$$G(E) = E_a + \frac{A}{2\sigma\sqrt{\pi/2}} \cdot \exp\left(-2\left(\frac{E-E_0}{2\sigma}\right)^2\right) \quad (4.13)$$

Um die experimentellen Daten mit der Theorie vergleichen zu können, wurde außerdem anhand der Höhe der Schwelle die normierte Photoionenausbeute in den entsprechenden Wirkungsquerschnitt umgerechnet. Die genauen Werte der Positionen und Wirkungsquerschnitte der Resonanzen finden sich im Vergleich mit der Theorie in Tabelle 4.3. Der theoretische, in Abbildung 4.14 schwarz dargestellte, Verlauf des Photoionisationswirkungsquerschnittes wurde für Abbildung 4.14 aus der Datenbank TOPbase [35] extrahiert. Für den Vergleich mit der Messung wird die theoretische Vorhersage mit einer „Apparatefunktion“ gefaltet. Dafür wurde eine

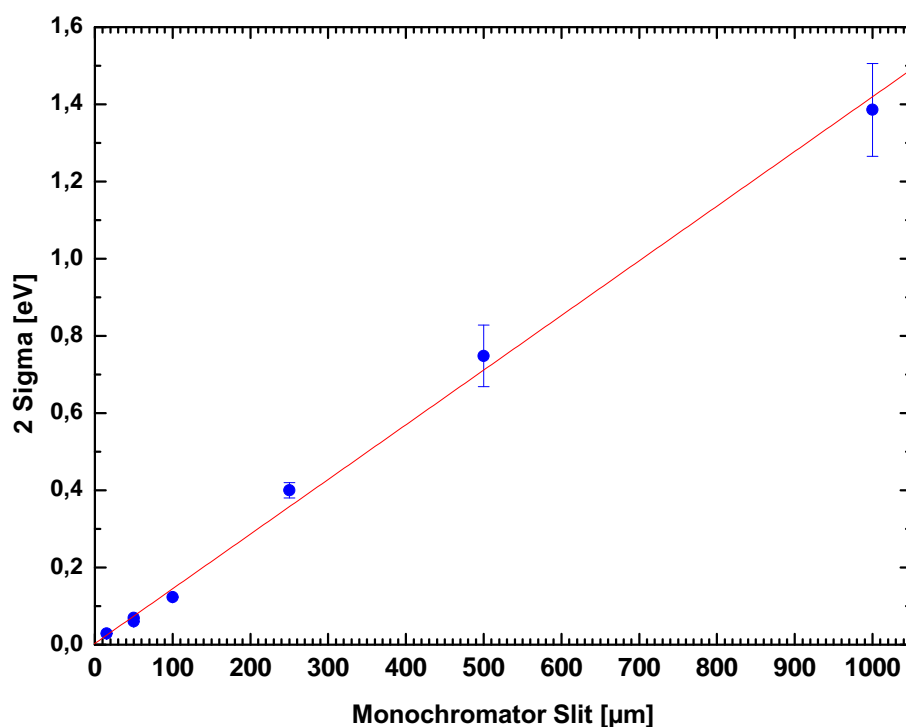


Abbildung 4.12: Graphisch dargestellte Abhängigkeit der Breite der Gaußfunktion (aus der Faltung für die Anpassung an die experimentellen Daten) vom Monochromatorschlitz.

Gaußfunktion der Breite  $w = 10 \text{ eV}$  gewählt, die der beobachteten Breite entspricht. Der Wirkungsquerschnitt dieser Faltung wurde an der Stelle der Kante der Höhe des experimentellen Photoionenertrages gleichgesetzt. Aus diesem Verhältnis ließen sich die Wirkungsquerschnitte der Resonanzen bestimmen.

## 4.4 Diskussion der Ergebnisse

Zuletzt sollen nun die experimentell bestimmten Lagen der Photoionisationsschwelle und -Resonanzen von  $\text{Ar}^{8+}$  aufgelistet werden, um sie mit der Theorie zu vergleichen und Abweichungen hervorzuheben.

### 4.4.1 Vergleich der $\text{Ar}^{8+}$ -Photoionisation mit der Theorie

Die experimentellen Werte der Photoionisationsschwelle und der autoionisierenden Resonanzen, die sich bei der Photoionisation von achtfach geladenem Argon erge-

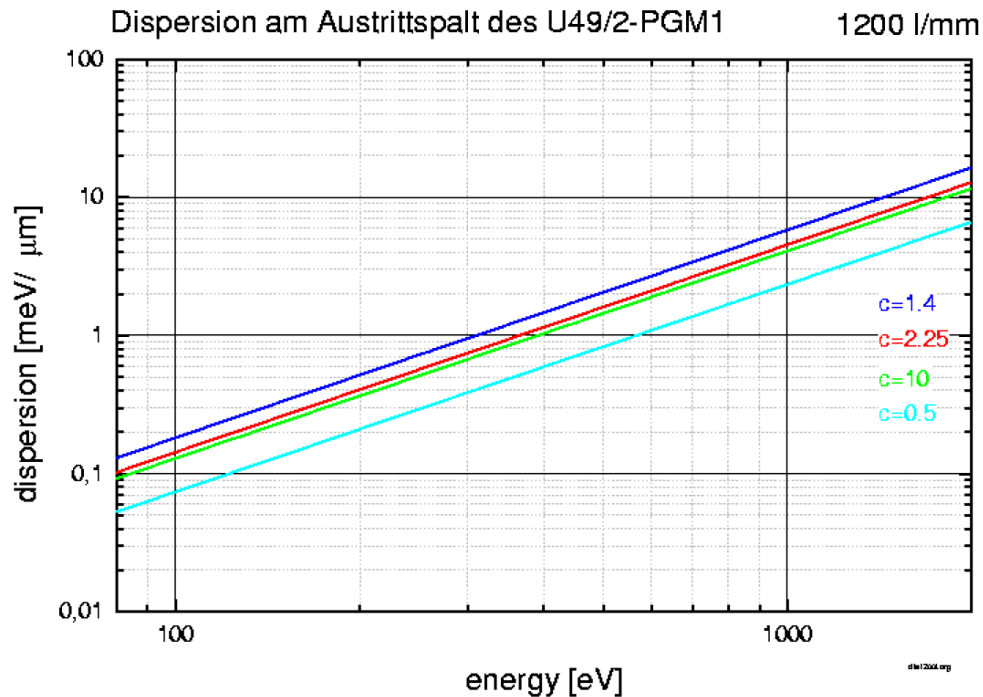


Abbildung 4.13: Theoretische Dispersionskurve des Strahlrohres, an dem die Messungen für Argon 2009 stattfanden. Die, für diese Messungen, relevante Kurve ist die rote mit einem  $c$ -Wert von 2,25 [21].

ben, sind graphisch in Abbildung 4.14 und in Tabelle 4.3 dargestellt. Sie können mit den theoretischen Vorhersagen aus TOPbase und Veröffentlichungen zu Rechnungen über neonartiges Argon verglichen werden. Mit anderen Experimenten sind diese Ergebnisse allerdings nicht vergleichbar, da bisher keine Möglichkeiten bestanden die Photoionisation von hochgeladenen Ionen mit derart hohen Ionisationspotentialen im Labor zu untersuchen.

Einige Abweichungen fallen bereits auf den ersten Blick, beim Vergleich des Wirkungsquerschnittsverlaufs nach TOPbase (Abbildung 4.14, schwarze Linie) mit den hier vorgestellten experimentellen Daten, auf. An der Position der Schwelle, die bei 422,20 eV lokalisiert wurde, zeigt die Theorie, nach TOPbase, eine Resonanz, die experimentell nicht nachgewiesen konnte. Die Positionen der autoionisierenden Resonanzen hinter der Schwelle und ihre Breiten stimmen, bei den Messungen mit niedriger Auflösung innerhalb der Fehlerbalken, mit dem Experiment überein. Allerdings zeigen die theoretischen Wirkungsquerschnitte enorme Abweichungen vom Experiment. Die Wirkungsquerschnitte der ersten, dritten und vierten Resonanz

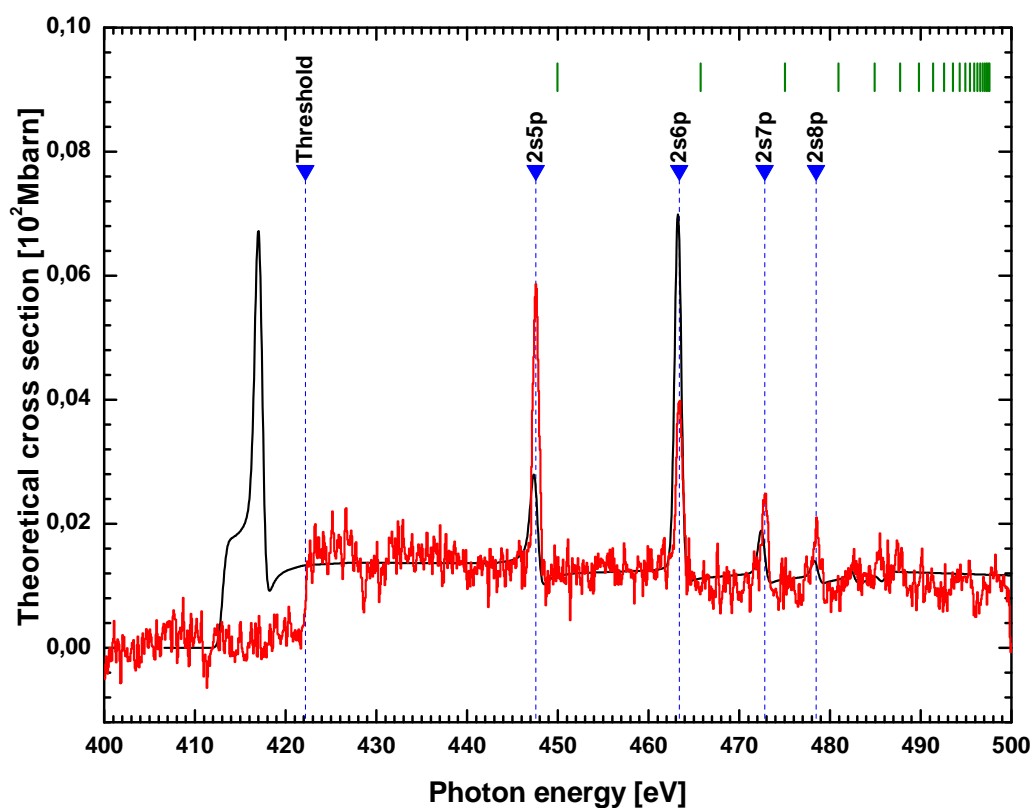


Abbildung 4.14: Vergleich der experimentellen Photoionenrate in Abhängigkeit von der Energie (rot) mit theoretischen Vorhersagen aus TOPbase (schwarz) und aus [14] (grün). Die angepassten Positionen der Schwelle und der Resonanzen wurden mit ihrer Bezeichnung eingezeichnet (blaue, senkrechte Linien).

werden jeweils zu klein vorausgesagt. Bei der zweiten Resonanz liegt TOPbase, wiederum zu hoch.

Der Vergleich mit theoretischen Rechnungen nach [14] fällt noch schlechter aus. Die energetischen Resonanzpositionen in dieser theoretischen Veröffentlichung sind nur relativ zu einer Photoionisationsschwelle aus dem Grundzustand angegeben. Bei dem Bezug dieser relativen Angaben auf die, im Experiment bestimmte, Lage der Kante zeigen sich bei allen Resonanzen Abweichungen. Es ist in Abbildung 4.14 und Tabelle 4.3 zu erkennen, dass diese Rechnungen nach der QB-Methode die Resonanzen in allen Fällen bei zu großen Energien angibt.

Die Ionisationsschwelle von achtfach geladenem Argon wurde in Veröffentlichungen durch verschiedene theoretische Modelle berechnet. Diese Rechnungen (in Tabelle 4.3 dargestellt) stützten sich auf relativistische Perturbations Theorie [36], die

Tabelle 4.3: Experimentell bestimmte Photoionisationsschwelle und Anregungsenergie der Resonanzen im Vergleich mit theoretischen Werten aus [14] (QB-Methode), deren relative Angaben auf das experimentell bestimmte Ionisationspotential bezogen wurden. Auflistung der, in dieser Arbeit ermittelten, Wirkungsquerschnitte (aus der, mit einem Apparateprofil gefalteten Theorie nach TOPbase). Vergleich der Ionisationsschwelle mit weiteren theoretischen Methoden: Pertubations-Methode (PT) [36], Weakest-Bound-Electron-Pertubations-Methode (WBE) [37] und relativistische Multikonfigurations Dirac-Fock Methode (DF)[38]

Zustand	WQ[Mbarn]	Experiment [eV]	QB [eV]	PT [eV]	WBE [eV]	DF [eV]
$2p^6$	1,4	422,20±0,15	-	422,42	422,59	422,45
$2s5p$	6,0	447,7±0,1	449,96	-	-	-
$2s6p$	4,2	463,61±0,14	465,75	-	-	-
$2s7p$	2,8	472,82±0,15	475,02	-	-	-
$2s8p$	2,3	478,48±0,16	480,92	-	-	-

Nutzung eines effektiven Ein-Elektronen Hamiltonian im Rahmen der WBEPM (Weakest-Bound-Electron-Pertubations-Methode) [37] und der Multikonfigurations-Dirac-Fock-Näherung [38]. Alle gerechneten Photoionisationsschwellen liegen, im Vergleich mit dem experimentellen Wert, zu hoch und außerhalb dessen Fehlergrenzen. Die Werte, die mittels PT [36] und DF [38] vorhergesagt werden, liegen etwa 0,25 eV zu hoch, oder  $1,5\sigma$  vom Experiment. deutlicher ist die 0,4 eV ( $2\sigma$ ) Abweichung die der WBE-Wert [37] aufweist. Dieses Verfahren scheint nicht geeignet zu sein, um die Ionisationspotentiale hochgeladener Ionen zu bestimmen.

#### 4.4.2 Weiterentwicklung der Datenauswertung

Die Auswertung der Daten zur Photoionisation von  $\text{Ar}^{8+}$  zeigte zwar gute Ergebnisse, aber um die Qualität zu erhöhen gibt es noch verschiedene Verbesserungsmöglichkeiten. Die grundlegende Problematik der bisherigen Datenauswertung liegt darin, dass zum einen Regionen auf dem Detektor nach optischen Kriterien ausgewählt wurden und darüber hinaus trotz offensichtlicher Verschiebungen während der Messung über diese Zeit nicht verändert wurden. Dies führt zum Verlust von Photoionenzählrate, da Photoionen außerhalb der gewählten Regionen nur als Untergrund detektiert werden. Um die Datenanalyse zu optimieren kann der genaue Verlauf der Ionensignale in Abhängigkeit von der Zeit untersucht werden. Dieses Verfahren der zeitabhängigen Datenbearbeitung ist nachträglich durchzuführen, in-

dem teils softwaregestützt, teils händisch die Datensätze bewertet und bearbeitet werden.

Für die genaue Bestimmung der Photoionenrate ist es zweckmäßig die ausgewählte Photoionenregion auf dem Detektor über den Verlauf der Zeit zu korrigieren, da diese sich, zum Beispiel durch statische Aufladungen der Ionenoptik, verschieben kann. Um dies zu erreichen, lassen sich die Ereignisse über den eingestellten Energiebereich in zeitlich geordnete Pakete zusammenlegen und für jedes Paket, wenn nötig, die Gebiete korrigieren, in denen das Photoionensignal auf dem Detektor nachzuweisen ist. Darüber hinaus ist es von Vorteil den zeitlichen Verlauf der Signalrate auf kurzfristige Einbrüche, die auf die Stabilität der EBIT zurückzuführen sind, zu untersuchen und die Ereignisse, die in Perioden starker Schwankung registriert wurden gegebenenfalls zu verwerfen.

Die erwähnten Regionen auf dem Detektor wurden für die Auswertungen in dieser Arbeit nach optischem Ermessen in Gebieten mit hohen Ionenzählraten und möglichst niedrigem Untergrundsignal ausgesucht. Für eine bessere Erfassung der vollständigen Photoionenzahl ist es günstiger die Detektorfläche in ein Raster von rechteckigen Regionen einzuteilen. Dieses Netz ist, je nach Bedarf, feinmaschiger zu wählen und gestattet, mit der entsprechenden Auswertungssoftware eine objektivere Beurteilung des Signal-zu-Rauschen Verhältnisses in den einzelnen Regionen. Somit könnte man anhand von statistischen Methoden eindeutige Anstiege der Photoionenrate (in Abhängigkeit von der Photonenenergie) finden und die Bereiche des Rasters auswählen, die sich später zu einem Gesamtbereich addieren lassen. Die Kombination beider Methoden würde dazu führen, dass die, nach Paketen und Einzelregionen ausgewerteten, Detektordaten schlussendlich wieder über die Zeit integriert und anschließend normiert, untersucht werden.

Zusätzlich wäre es dadurch möglich den Fehler, der durch den Fahrweg des Monochromators und der dabei entstehenden Zeitverschiebung entsteht von vornherein zu korrigieren. In dieser Arbeit wurde der Effekt untersucht, den dies auf die Lage der Resonanzen hat. Mit der, jetzt im Test befindlichen, Software ließen sich die Positionen im Nachhinein korrigieren und Bewegung des Monochromators in zeitlichem Zusammenhang mit der Datenaufnahme aufzulösen. Somit könnten Daten aussortiert werden, die das verfälschte Energiesignal erhalten haben und zu einer Verschiebung der eigentlich Resonanzenergie führen.

# Kapitel 5

## Zusammenfassung

Ziel dieser Arbeit war es, die im Rahmen von neuartigen Messungen der Photoionisation hochgeladener Ionen verwendete Ionenoptik zu verbessern. Eine kompakte Steuerungslinse wurde dazu entwickelt und in die verwendete Apparatur integriert. Mit der so erweiterten Aufbau war es möglich, Photoionisation hochgeladener Ionen in einem bisher nicht erreichbaren Gebiet von Ionisationszuständen mit ausgezeichneter Auflösung durchzuführen. Aus den für  $\text{N}^{3+}$ ,  $\text{Ar}^{8+,10+,12+}$  und  $\text{Fe}^{12+,14+}$  gewonnenen Daten wurde speziell die Datensätze der  $\text{N}^{3+}$  sowie des neonartigen  $\text{Ar}^{8+}$  analysiert und mit der Theorie verglichen.

Die Extraktion der Ionen aus der FLASH-EBIT fand bei Experimenten unter erschwerten Bedingungen statt, da die Ionen aus niedrigen Potentialen extrahiert und dabei auf kürzesten Strecken abgelenkt sowie nach  $\frac{q}{m}$ -Verhältnissen sortiert werden müssen. Der Extraktionsaufbau befindet sich im Randmagnetfeld der FLASH-EBIT, was eine ausgleichende ionenoptische Führung erforderte, um die Abbildung der Ionen auf dem Detektor zu optimieren. Dies wurde dadurch realisiert, dass als Ergänzung zu schon vorhandenen ionenoptischen Elementen eine spezielle, kompakte elektrostatische Linse, nach der Idee von G. Sikler mit einem viergeteilten mittleren Segment konstruiert wurde. Diese Ausführung ermöglicht es die Ionen nicht nur zu fokussieren, sondern auch in zwei Dimensionen zu steuern. Der Linse wurden noch zwei Blenden hinzugefügt, die durch verschiedene Kombinationen ihrer Öffnungen genutzt werden können, um den Ionenuntergrund auf dem Detektor weiter zu minimieren. Durch das Zusammenspiel von Linse und Blenden ist es gelungen die Ionen als gut kollimierten Strahl in den Wienfilter zu lenken, so dass ihre Abbildung auf dem Detektor erheblich verbessert wurde, wodurch das  $\frac{q}{m}$ -Auflösungsvermögen im

Vergleich zu den ersten Messungen ( $N^{3+}$ ) zu erhöhen.

Mit dem verbesserten Extraktionsaufbau wurde, während einer Strahlzeit am Elektronenspeicherring BESSY II im Februar 2009, unter anderem die Photoionisation der  $Ar^{8+}$ -Ionen erfolgreich vermessen. Dabei wurde die Ionisationsschwelle sowie die folgenden autoionisierenden Resonanzen untersucht. Ein Vergleich dieser Anregungsenergien mit verschiedenen theoretischen Vorhersagen ließ sich ziehen, wobei signifikante Abweichungen schon in Bezug auf die Ionisationsschwelle festgestellt wurden. Die Gegenüberstellung der Resonanzen ergab mit einer der zur Verfügung stehenden Rechnungen bei niedrig aufgelösten Daten Übereinstimmungen innerhalb der Fehlerbalken, jedoch deutliche Abweichungen in den relativen Wirkungsquerschnittsverhältnissen zwischen den einzelnen Resonanzen. Aufgrund der guten Auflösung war es außerdem möglich die natürliche Linienform der ersten Resonanz, die den Verlauf einer Fanofunktion zeigt, genauer zu untersuchen und deren Parameter, den Formparameter  $q \approx -8,03$  und die Linienbreite  $\Gamma \approx 0,07$  eV, zu bestimmen.

Über die Photoionisation von Argon im Bereich von 400 eV hinaus wurde daher ein nennenswerter Beitrag zu dieser neuen Methode für die experimentelle Untersuchung der Photoionisation, die in der laufenden Doktorarbeit von M. C. Simon entwickelt wurde und deren grundlegendes Prinzip bereits in dieser Arbeit vorgestellt wird, geleistet. Die Grenze der Photonenenergie von 1 keV, die für die K-Schale der leichten Elemente und für die L-Schale der mittelschweren maßgeblich ist, wurde während der Strahlzeit 2009 durch die Photoionisation von  $Fe^{14+}$  überschritten [39]. Die hier ausgewerteten Daten gestatten zum ersten Mal die Überprüfung theoretischer Vorhersagen in einem, für die Astrophysiker, sehr bedeutenden Photonenenergiebereich. Astrophysikalische Beobachtungen werden von der demonstrierten Genauigkeit der Bestimmung von Absorptionslinien, die eine Korrektur theoretischer Modelle, und daher zuverlässigere Identifikation der absorbierenden Spezies ermöglichen. Weitere Fortschritte werden Experimente an Photonenquellen bringen, die, wie zum Beispiel dem LCLS (Linac Coherent Light Source) in Stanford, Photonen von bis zu einigen keV mit hoher Brillianz zu Verfügung stellen können.



# Literaturverzeichnis

- [1] J. T. Costello H. S. Chakraborty, A. Gray. Anomalous Behaviour of the Near-Threshold Photoionization Cross Sections of the Neon isoelectronic Sequence: A Combined Experimental and Theoretical Study. *Physical Review Letters*, 83:2151 – 2153, 1999.
- [2] L. Kjeldsen. *Absolute Photoionization Cross Sections: Measurements and Applications*. PhD thesis, Faculty of Science, University of Aarhus, 2006.
- [3] D. Meschede. *Gerthsen Physik*. Springer, 2004.
- [4] J-P. Mosnier E. T. Kennedy, J. T. Costello. VUV/EUV Ionising Radiation and Atoms and Ions: Dual Laser Plasma investigations. *Radiation Physics and Chemistry*, 70:291 – 321, 2004.
- [5] K. Dolder B. Peart, I. C. Lyon. Measurements of Cross Sections for the Ionization of Ba<sup>+</sup> By Energy Resolved Electrons. *J. Phys. B*, 6, 1973.
- [6] J. B. West I. C. Lyon, B. Peart. Measurements of absolute cross sections for the photoionization of Ba<sup>+</sup> ions. *J. Phys. B: At. Mol. Phys*, 19, 1986.
- [7] Martin C. Simon. Persönliche Mitteilung.
- [8] W. Demtröder. *Atoms, Molekules and Photons*. Springer, 2006.
- [9] H. Friedrich. *Theoretische Atomphysik*. Springer, 1990.
- [10] T. Nattermann. Quantenmechanik. Skript zur Vorlesung, 2001.
- [11] A. J. González Martínez. *Quantum interference in the dielectronic recombination of heavy highly charged ions*. PhD thesis, Universität Heidelberg & Max-Planck-Institut für Kernphysik, 2005.

- 
- [12] G. Brenner. *Quantenelektrodynamische Einflüsse auf die Lebensdauer metastabiler Zustände*. PhD thesis, Universität Heidelberg & Max-Planck-Institut für Kernphysik, 2007.
- [13] C. J. Joachain B. H. Brandsen. *Physics of Atoms and Molecules*. Prentice Hall, 2003.
- [14] Zun-Xian Xie Liang Liang, Zhou Chao. The study of photoionization of neon-like Ar IX. *Optic Communications*, 282:558 – 561, 2009.
- [15] J. Pelan L. Quigley, K Berrington. The QB program. *Computer Physics Communication*, 114:225–235, 1998.
- [16] Demtröder. *Laserspektroskopie*. Springer, 2000.
- [17] [www.wikipedia.de](http://www.wikipedia.de).
- [18] E. Brüche. *Strahlen langsamer Elektronen und ihre technische Anwendung*. Julius Springer Verlag, 1930.
- [19] Jon Orloff, editor. *Charged Particle Optics*. CRC Press, 1997.
- [20] Martin C. Simon. Frühjahrstagung der Deutsch Physikalischen Gesellschaft. In *Photoionization of Highly Charged Ions in an Electron Beam Ion*, 2009.
- [21] <http://www.bessy.de>.
- [22] W.Gudat K. J. S. Sawhney, F. Senf. PGM beamline with constant energy resolution mode for U49-2 undulator at BESSY II. *Nucl. Instr. & Meth. A* 467-468, pages 466–469, 2001.
- [23] F. Siewert R. Follath, J. S. Schmidt. Commissioning of the U49/2-PGM1 beamline. *AIP Conference Proceedings. SYNCHROTRON RADIATION INSTRUMENTATION: Eighth International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation*, 705:348–351, 2004.
- [24] F. Senf R. Follath. New plane-grating monochromators for third generation synchrotron radiation light sources. *Nucl. Instr. & Meth. A* 390, pages 388–394, 1997.

- [25] V. A. Alpert E. D. Donets, V. I. Ilyushchenko. Proceedings of the first international conference on ion sources (saclay, frankreich). page p. 635, 1969.
- [26] M. A. Levine et al. *Nuclear Instruments & Methods In Physics Research B*, 43:p. 431, 1989.
- [27] Sascha W. Epp. *Röntgen-Laserspektroskopie hochgeladener Ionen in einer EBIT am Freie-Elektronen-Laser FLASH*. PhD thesis, Universität Heidelberg & Max-Planck-Institut für Kernphysik, 2007.
- [28] Thomas Baumann. Entwicklung eines gitterspektrometers zur untersuchung vakuumultravioletter strahlung von hochgeladenen ionen. Master's thesis, Universität Heidelberg & Max-Planck-Institut für Kernphysik, 2008.
- [29] M. C. Simon et al. Photoionization Of Ions Stored In An Electron Beam Ion Trap By Synchrotron Radiation. *Physical Review Letters*, 2009, submitted.
- [30] G. Herrmann. Optical Theory of Thermal Velocity Effects in Cylindrical Electron Beams. *Journal of Applied Physics*, 29:133, 1958.
- [31] F. Grossmann G. Zschornack, S. Landgraf. X-ray spectroscopy of Be- to He-like germanium. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 235:160 – 164, 2005.
- [32] Fred J. Currell, editor. *The Physics of Multiply and Highly Charged Ions*. Kluwer Academic, 2003.
- [33] MCP delay line detector manual.
- [34] *National Institute of Standards and Technology (NIST)*. <http://www.nist.gov/index.html>.
- [35] *The Opacity Project, TOPbase*. <http://cdsweb.u-strasbg.fr/topbase/topbase.html>.
- [36] A. V. Glushkov E. P. Ivanova. Theoretical investigation of spectra of multicharged ions of f-like and ne-like isoelectronic sequences. *J. Quant. spectrosc. Radiat. Transfer*, 36:127 – 145, 1986.
- [37] Tao Wang Neng Wu Zheng, Tao Zhou. Ground-state atomic ionization energies for  $Z = 2-18$  and up to 18 eelectrons. *Physical Review A*, 65, 2002.

- [38] P. Quinet E. Biémont, Y. Frémat. Ionization Potentials of Atoms and Ions from Lithium to Tin ( $Z=50$ ). *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 71:117 – 146, 1999.
- [39] Martin C. Simon. *Titel unbekannt*. PhD thesis, Universität Heidelberg & Max-Planck-Institut für Kernphysik, 2010.

# Danksagung

Zum Schluß möchte ich mich bei allen bedanken, die mich durch die Zeit der Diplomarbeit begleitet und unterstützt haben.

Herrn Professor Joachim Ullrich möchte ich für die Aufnahme in seine Arbeitsgruppe am Max-Planck-Institut für Kernphysik in Heidelberg, in deren Umfeld diese Arbeit durchgeführt wurde, danken.

Ein besonderes Dankeschön geht an meinen Betreuer, den Leiter der EBIT-Gruppe José R. Crespo López-Urrutia, der zuverlässig bei Fragen und Problemen immer zur Stelle war und mir oft und gerne aufgezeigt hat, wo der Hase in der Experimentalphysik im Pfeffer liegt.

Ein zweiter Chef sorgt zwar immer für Verwirrung, aber dennoch möchte ich meinem betreuenden Doktoranden, Martin C. Simon, vergewissern, dass er seinen Job ziemlich gut gemacht hat, um nicht zu sagen super. Ich durfte in all den geduldigen Erklärungen, Gesprächen und Strahlzeiten viel von ihm über Physik (auf österreichisch) lernen und hatte einen zuverlässigen und tapferen Ansprechpartner, der nicht für jeden Diplomanden selbstverständlich ist. Danke auch für das Korrekturlesen dieser Arbeit und die vielen kleinen Unterstützungen bei Bildern oder Formulierungen.

Das nächste Dankeschön geht an alle Gruppenmitglieder mit denen die zwei Strahlzeiten in Berlin, während dieser Diplomarbeit, um einige lustige, lehrreiche, unterhaltsame und abenteuerliche Stunden aufgewertet wurden. Hier sind zu nennen: Sascha W. Epp, Thomas Baumann, Rainer Ginzel, Benjamin L. Schmitt und Christian Beilmann. Wobei Rainer und Thomas auch für die unzähligen Hilfeinsätze außerhalb der Strahlzeiten und dem Benjamin für die unerschrockenen Englischlehrgänge zu danken ist.

Aber auch im Institut hat mich die restliche EBIT-Gruppe, um genau zu sein Katharina Kubicek, Volkhard Mäckel, Renee Klawitter, Sven Bernitt, Stuart Higgins, bei jedem Problem unterstützt und bei all meinen Fragen zuverlässig vorwärts ge-

bracht. Deshalb einen lieben Dank an die EBIT-Gruppe im Ganzen, vor allem auch für das tolle Arbeitsklima und den Kuchen.

Zuletzt ist noch einigen Leuten außerhalb des Instituts zu Danken. An dieser Stelle sind Christian U., sowie Julia und Sabrina, zu nennen. Ohne euch hätten das Physikstudium, vor allem die Zeiten der Prüfungen, und die Nachmittage im Freibad mit dem Physikbuch unter dem Kopf (statt Vorlesung) nur halb so viel Spaß gemacht. Natürlich möchte ich auch ganz herzlich meiner ganzen Familie, allen voran meinen Eltern und meiner Schwester für die tatkräftige Unterstützung, trotz großer Entfernung, danken.

# Erklärung

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

Heidelberg, den 28.05.2009