

Inaugural-Dissertation

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

vorgelegt von
Dipl.-Phys. Sascha W. Epp
aus Heidelberg

Tag der mündlichen Prüfung: 18.07.2007

**Röntgen–Laserspektroskopie
hochgeladener Ionen in einer EBIT am
Freie–Elektronen–Laser FLASH**

**Gutachter: PD Dr. José R. Crespo López-Urrutia
PD Maarten F. M. DeKieviet, PhD.**

Zusammenfassung:

Im Rahmen dieser Arbeit konnte erstmalig die resonante Laserspektroskopie, die präziseste Spektroskopietechnik in Physik und Chemie, in den Spektralbereich weicher Röntgenstrahlung erweitert werden. Unter Verwendung hoch brillanter Strahlung von FLASH (engl. *free electron laser in Hamburg*) gelang die Vermessung des $2^2S_{1/2}-2^2P_{1/2}$ Grundzustandsübergangs in Li-artigem Fe^{23+} mit einer relativen Unsicherheit von 20 ppm (engl. *parts-per-million*) durch direkte resonante Anregung bei etwa 48.6 eV. Die erforderlichen Ionen wurden dabei mittels der in dieser Arbeit aufgebauten Tesla-EBIT (engl. *electron beam ion trap*) produziert, einer neuartigen, kryogenen EBIT, die insbesondere auf die Bedürfnisse der Laserspektroskopie zugeschnitten ist. Die bei diesem Pionierexperiment erzielte Genauigkeit bezüglich der Größe der Aufspaltung dieses Zustands ist zwar noch vergleichbar derer der genauesten konventionellen Messungen, jedoch weist die neue Methode weit in die Zukunft: Die künftig erreichbaren Betriebsparameter bei FLASH und des in Planung befindlichen XFEL werden Messungen der Übergangsenergien im VUV- und Röntgenbereich mit tausendfacher bisheriger Präzision ermöglichen, was beispiellose neue Einblicke in die grundlegenden Aspekte der QED und Atomstrukturphysik in starken Feldern verspricht.

Neben den laserspektroskopischen Untersuchungen wurde auch präzise konventionelle Gitterspektroskopie betrieben und dabei verschiedene Grundzustandsübergänge in Be- und Li-artigem Eisen vermessen. Unter anderem gelang es, die $2^2S_{1/2}-2^2P_{1/2}$ Übergangsenergie in Fe^{23+} mit einer in diesem Spektralbereich unerreichten Genauigkeit von nur 8 ppm zu ermitteln.

Abstract:

The method of laser spectroscopy, widely applied in physics and chemistry, has been extended into the soft x-ray region for the first time within this thesis. By using ultrabright light from FLASH (free electron laser in Hamburg) the $2^2S_{1/2}-2^2P_{1/2}$ transition in Li-like Fe^{23+} ions was measured by direct resonant excitation from the ground state at roughly 48.6 eV. The ions were trapped and produced in the Tesla-EBIT (electron beam ion trap), a novel cryogenic EBIT specifically designed and built up for that purpose within this thesis. This proof-of-principle experiment achieved a relative statistical accuracy on the 20 parts-per-million level for the transition energy comparable to the best conventional measurements reported so far. Exploiting all possibilities offered by FLASH and the upcoming XFEL this method promises a further gain in accuracy up to three orders of magnitude, leading to unprecedented insights into basic aspects of QED and atomic structure theory in strong fields.

In addition to laser spectroscopic studies conventional high precision measurements by grating spectroscopy were performed on ground state transitions in Be- and Li-like iron ions. For the $2^2S_{1/2}-2^2P_{1/2}$ transition in Fe^{23+} for example a so far unmatched precision in the soft x-ray regime of 8 parts-per-million in wavelength was achieved.

Abkürzungen & Symbole

Abkürzungen

| | |
|-------|---|
| ADC | engl. <i>Analogue–Digital–Converter</i> |
| ALS | engl. <i>Advanced Light Source</i> |
| BESSY | Berliner Elektronenspeicherring–Gesellschaft für Synchrotronstrahlung |
| CCD | engl. <i>Charged Coupled Device</i> |
| DESY | Deutsches Elektronen Synchrotron |
| DR | dielektronische Rekombination |
| EBIS | engl. <i>Electron Beam Ion Source</i> |
| EBIT | engl. <i>Electron Beam Ion Trap</i> |
| EE | Elektronenstoßanregung |
| EI | Elektronenstoßionisation |
| EOS | engl. <i>Equation Of State</i> |
| ESA | engl. <i>European Space Agency</i> |
| ET | Elektronentransfer in Ion-Atom Stößen |
| EUV | extremes Ultraviolett |
| FEL | Freie–Elektronen Laser |
| FLASH | Freie–Elektronen Laser in Hamburg |
| HCI | engl. <i>Highly Charged Ion</i> |
| HHG | engl. <i>High Harmonic Generation</i> |
| IES | iso–elektronische Sequenz |
| LCLS | engl. <i>Linac Coherent Light Source</i> |

| | |
|------|---|
| MBPT | engl. <i>Many-Body-Perturbation-Theory</i> |
| MCDF | engl. <i>Multi-Configuration-Dirac-Fock</i> |
| MCHF | engl. <i>Multi-Configuration-Hartree-Fock</i> |
| MCP | engl. <i>Micro-Channel-Plate</i> |
| NASA | engl. <i>National Aeronautics and Space Administration</i> |
| NIST | engl. <i>National Institute of Standards and Technology</i> |
| OFHC | engl. <i>oxygen free high conductive</i> |
| PHA | Pulshöhen-ADC |
| ppm | 10^{-6} (engl. <u>p</u> arts <u>p</u> er <u>m</u> illion) |
| QED | Quantenelektrodynamik |
| RMS | engl. <i>Root Mean Square</i> |
| RR | radiative Rekombination |
| RTE | resonanter Transfer und Anregung |
| SASE | engl. <i>Self Amplified Spontaneous Emission</i> |
| SE | Selbstenergie |
| SVA | engl. <i>Sampling-Voltage-Analyzer</i> |
| TDC | engl. <i>Time-to-Digital-Converter</i> |
| UV | Ultraviolett |
| VP | Vakuumpolarisation |
| VUV | Vakuumultraviolett |
| WDM | engl. <i>Warm Dense Matter</i> |
| XFEL | engl. <i>X-Ray Free-Electron-Laser</i> |

Symbole

| | |
|--------------|----------------------------------|
| α | Feinstrukturkonstante |
| \mathbf{H} | Hamilton-Operator |
| δ | spektrale Auflösung $E/\Delta E$ |
| ϵ_0 | Dielektrizitätskonstante |

| | |
|-----------------------|--|
| i | $\sqrt{-1}$ |
| λ | Wellenlänge |
| μ_B | Bohr'sches Magneton |
| μ_{red} | reduzierte Masse |
| ρ | Ladungsdichte |
| ρ_z | Linienladungsdichte |
| \vec{B}, \mathbf{B} | mag. Flussdichte |
| \vec{L}, \mathbf{L} | q.m. Drehimpuls |
| \vec{S}, \mathbf{S} | q.m. Spin |
| a_0 | Bohr'scher Radius |
| d_H | Durchmesser des Elektronenstrahls nach Herrmann |
| E | Energie |
| e | Elementarladung |
| E_{kin} | kinetische Energie |
| E_{rel} | relativistische Gesamtenergie |
| g_J | gyromagnetisches Verhältnis des Gesamtdrehimpulses |
| g_L | gyromagnetisches Verhältnis des Drehimpuls |
| g_S | gyromagnetisches Verhältnis des Spins |
| j | q.m. Gesamtdrehimpulsquantenzahl |
| k_B | Boltzmannkonstante |
| l | q.m. Bahndrehimpulsquantenzahl |
| m_0 | Ruhemasse des Elektrons |
| m_e | Masse des Elektrons |
| M_K | Kernmasse |
| m_P | Masse des Protons |
| R_y | Rydbergkonstante |
| s | q.m. Spinquantenzahl |
| Z | Kernladungszahl |

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Einleitung | 1 |
| 2 | Über die Quantenstruktur hochgeladener Wenig-Elektronen Ionen | 9 |
| 2.1 | Schrödinger, Dirac, Lamb und das Wasserstoffatom | 9 |
| 2.2 | Beiträge zur Bindungsenergie in hochgeladenen Wenig-Elektronen Ionen . . | 14 |
| 2.2.1 | Betrachtungen zur Quantenelektrodynamik | 14 |
| 2.2.2 | Lamb- <i>Shift</i> und QED in hochgeladenen H-artigen Ionen | 16 |
| 2.2.3 | Lamb- <i>Shift</i> und QED in hochgeladenen Li-artigen Ionen | 20 |
| 2.2.4 | Lamb- <i>Shift</i> und QED in hochgeladenen Mehr-Elektronen Ionen . . . | 25 |
| 3 | Eine kryogene EBIT neuster Generation | 29 |
| 3.1 | EBIT Grundlagen | 30 |
| 3.1.1 | Die Ionenwolke und ihre Wechselwirkung mit dem Elektronenstrahl | 31 |
| 3.1.1.1 | Die Bewegungsgleichung eines Ions | 34 |
| 3.1.1.2 | Die Stoßprozesse | 34 |
| 3.1.1.3 | Die Ladungszustandsbilanz | 40 |
| 3.2 | Die Tesla-EBIT | 41 |
| 3.2.1 | Die Magnetkammer | 43 |
| 3.2.1.1 | Der supraleitende Magnet und die Fallenkonstruktion . . . | 43 |
| 3.2.1.2 | Detektoren und Peripherie der Magnetkammer | 46 |
| 3.2.2 | Die Elektronenkanone und die Eigenschaften des Strahls | 54 |
| 3.2.2.1 | Die Kanone | 54 |
| 3.2.2.2 | Der Elektronenstrahl | 55 |
| 3.2.2.3 | Die Felder der Falle | 58 |
| 3.2.2.4 | Energieverteilung des Elektronenstrahls | 60 |
| 3.2.3 | Der Kollektor | 60 |
| 3.2.4 | Tesla-EBIT und andere EBITs | 61 |
| 4 | Gitterspektroskopie an hochgeladenem Eisen | 63 |
| 4.1 | Einleitung | 63 |
| 4.2 | Durchführung | 64 |
| 4.2.1 | Eigenschaften der ausgewählten Aufnahmen | 66 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 4.3 | Identifikation der Spektrallinien | 67 |
| 4.3.1 | Das Dispersionspolynom | 68 |
| 4.3.2 | Die Bestimmung der Linienschwerpunkte | 68 |
| 4.3.2.1 | Die Kalibrationslinien | 72 |
| 4.3.2.2 | Die Messlinien | 73 |
| 4.3.3 | Aufstellung des Dispersionspolynoms | 73 |
| 4.3.4 | Bestimmung der Wellenlängen der Messlinien | 77 |
| 4.3.4.1 | Die Spektrallinien A und A' | 78 |
| 4.3.4.2 | Die Spektrallinie B | 78 |
| 4.3.4.3 | Die Spektrallinie C | 80 |
| 4.3.4.4 | Die Spektrallinie D | 80 |
| 4.4 | Die Auflösung des Spektrometers und Obergrenze des Elektronenstrahl- durchmessers | 80 |
| 5 | Resonante Röntgen-Laserspektroskopie von Li-artigem Fe²³⁺ mittels FLASH | 83 |
| 5.1 | Der Freie-Elektronen-Laser FLASH | 83 |
| 5.2 | Das Experiment | 96 |
| 5.2.1 | Experimenteller Aufbau | 96 |
| 5.2.2 | Durchführung | 97 |
| 5.2.2.1 | Bereitstellung eines Targets aus Fe ²³⁺ Ionen | 98 |
| 5.2.2.2 | Justage und Überlapp mit FLASH | 102 |
| 5.2.2.3 | Theoretische und experimentelle Betrachtung der Fluores- zenz | 103 |
| 5.2.2.4 | Datenaufnahme | 111 |
| 5.2.2.5 | Störquellen von Fluoreszenz ähnlicher Strahlung | 115 |
| 5.2.3 | Die Messungen | 115 |
| 5.2.3.1 | Streulicht durch Reflexe an Oberflächen in der Falle | 116 |
| 5.2.3.2 | Monochromator-Scan unter Streulicht | 119 |
| 5.2.3.3 | Erste Fluoreszenz von Fe ²³⁺ Ionen | 120 |
| 5.2.3.4 | Umbau auf „Datenaufnahmeschema 2“ | 124 |
| 5.2.3.5 | Fluoreszenz von Fe ²³⁺ Ionen in 1. Ordnung des Monochro- mators | 126 |
| 5.3 | Möglichkeiten der Spektroskopie von HClIs mittels Synchrotron-Quellen . . | 134 |
| 5.3.1 | Die Pulsstruktur | 136 |
| 5.3.2 | Maßnahmen zur Verbesserung des Signal-Rausch-Verhältnisses . . . | 138 |
| 6 | Diskussion der Ergebnisse | 145 |
| 6.1 | Resonante Laserfluoreszenzspektroskopie an Li-artigen Fe ²³⁺ | 145 |
| 6.2 | Konventionelle Spektroskopie des Li-artigen Eisens | 147 |
| 6.3 | Konventionelle Spektroskopie des Be-artigen Eisens | 150 |

| | |
|---------------------------------------|------------|
| 7 Zusammenfassung und Ausblick | 153 |
| Literaturverzeichnis | 159 |

Kapitel 1

Einleitung

„Wissenschaft ist wie Sex. Manchmal kommt etwas Sinnvolles dabei raus, das ist aber nicht der Grund, warum wir es tun.“ Richard P. Feynman

Der Weltraum, bei einer mittleren Dichte von weniger als 10^{-25} kg/m³, ist dennoch durchsetzt von einer unvorstellbaren Menge sichtbarer, baryonischer Materie, welche wiederum nahezu gänzlich in ionisierter Form vorliegt [1]. Höchst ionisierte Atome, sprich Atome mit nur noch wenigen verbliebenen, tief gebundenen Elektronen oder gar nackte Kerne, spielen dabei eine entscheidende Rolle für die Beschreibungen des Kosmos. Diese hochgeladenen Ionen, ferner synonym als HCIs (engl. *Highly Charged Ion*) bezeichnet, stehen im Mittelpunkt der vorliegenden Arbeit.

Die Erforschung von HCIs als dominante Konstituenten in kosmischen Objekten wie Sternen, Supernovae oder aktiven galaktischen Kernen ist recht jung, was schlicht in der hohen Absorption im weichen Röntgenbereich unserer Atmosphäre begründet liegt, und somit in jenem Wellenlängenbereich, in welchem HCIs bevorzugt emittieren. Heuer wird jedoch ein enormer Aufwand betrieben, um diese schwer zugängliche Strahlung, auch von den entferntesten kosmischen Objekten, in zuvor nie erreichter Genauigkeit zu messen, wie jüngste Satellitenmissionen von Röntgenteleskopen wie XMM der ESA (engl. *European Space Agency*) oder Chandra der NASA (engl. *National Aeronautics and Space Administration*) zeigen. Den ersten großen Auftritt auf kosmischer Bühne hatten HCIs als Lösungskonzept bei der Klärung eines von P. Swings 1939 aufgeworfenen Phänomens bezüglich des koronalen Sonnenspektrums. Wohl leicht verzweifelt notierte dieser [2](franz.): *„Ein großes Problem der astronomischen Spektroskopie sind die Spektren der Emissionslinien in der Korona der Sonne“*. Gelöst wurde dieses Rätsel 1942 von Edlén [3] durch Identifizierung dieser Linien als dipolverbotene Übergänge in hochgeladenem Eisen, Nickel und Kalzium. Das kosmisch häufige und äußerst aktive, hochgeladene Eisen wird in dieser Arbeit der Untersuchungsgegenstand sein. Abb.1 zeigt die relative Häufigkeit der Elemente in der Sonne. Kein Element mit $Z > 10$ ist mit so vielen Massenanteilen vorhanden wie Eisen. Im Rahmen des internationalen IRON Projekts [4] wird versucht, die Physik der verschiedenen Ladungszustände innerhalb der Sonne, wie Übergangsenergien, Anregungsraten, Lebensdauern etc., zu erforschen. Die bei dieser Arbeit eingesetzte Elektronenstrahl-Ionenfalle

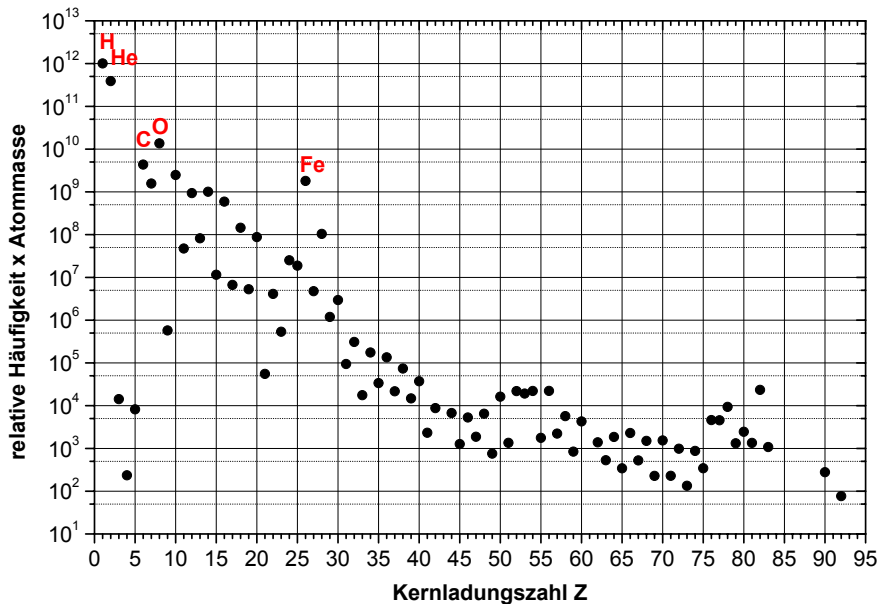


Abbildung 1.1: Relative Häufigkeit mal Atommasse der Elemente in der Photosphäre und Korona der Sonne. Die relative Häufigkeit von H ist zu 10^{12} definiert (Quelle: [5]).

(EBIT, engl. *Electron Beam Ion Trap*) erlaubt es, Ionen unter Bedingungen von Millionen Grad, wie sie auch im Sternenfeuer vorherrschen, auf der Erde zu untersuchen.

Das Verständnis um die elektromagnetischen Spektren der HCIs ist nicht nur zur Interpretation kosmischer Vorgänge elementar, sondern auch von höchstem Interesse für die Physik irdischer Plasmen. Dies gilt sowohl in der Fusionsforschung, wo unter anderem Linien Titan-artiger Ionen zur Temperaturmessung eingesetzt werden [6], als auch beispielsweise bei der Erforschung der „Equation Of State (EOS) of Warm Dense Matter (WDM)“ [7]. Letztere sind Aggregatzustände, die sich sowohl der Beschreibung über die Zustandsgleichungen eines Festkörpers (obwohl sie dessen Dichte besitzen), als auch der eines Plasmas (obwohl dessen Temperatur), entziehen. Dies ist also ein Zustand, der an der Grenzlinie zwischen Festkörper- und Plasmaphysik liegt. Zur Erforschung der Struktur sollen unter anderem Röntgen-FELs (Freie-Elektronen-Laser) eingesetzt werden, auf die weiter unten zurückgekommen wird.

Diese Arbeit versucht einen experimentellen Beitrag zu einem weiteren Aspekt der Physik hochgeladener Ionen zu leisten [6, 8], nämlich in ihrer Eigenschaft als ideale Studienobjekte zur Verifizierung der Kenntnisse der Atomstrukturphysik. HCIs stehen für eine Klasse von atomaren Systemen einfachster Struktur, bei denen viele atomphysikalische Größen extreme Werte annehmen können. Zum besseren Verständnis muss der Begriff der iso-elektronischen Sequenz (IES) eingeführt werden. So findet man in der Welt der HCIs beispielsweise die wasserstoffartige (H-artige), He-artige, Li-artige usw. IES, die jeweils atomare Ionen mit genau einem, genau zwei oder genau drei Elektronen zusammenfassen. Der variierende Parameter innerhalb einer Sequenz ist hierbei die Kernladungszahl Z , al-

so praktisch das Element selbst. Im H-artigen Fall erstreckt sich die IES vom neutralen Wasserstoff ($Z=1$) bzw. H-artigen Helium bis hin zum schwersten stabilen Element, dem H-artigen Uran ($Z=92$).

Startet man nun mit einem neutralen Wasserstoffatom und gäbe man in einem Gedankenexperiment dem Kern immer mehr Protonen — man bewegt sich damit entlang der IES gen Uran — so könnte man beobachten, wie der Radius der Elektronenbahn etwa mit $1/Z$ abnimmt. Die Stärke des Coulomb-Potentials in dem sich das Elektron im Mittel bewegt wächst dementsprechend mit Z^2 , da selbiges direkt linear im Parameter Z ist. Dieser Skalierung im Parameter Z führt dazu, dass physikalische Effekte, die sich bei neutralen Atomen der Messung durch ihre kleinen Beiträge entziehen, in HCIs zu einer detektierbaren Größe anwachsen. So versuchen verschiedene Vorhaben z.B. die Z^5 -Skalierung des Z-Boson-Austauschs im Rahmen der Paritätsverletzung auszunutzen [9]. Von vergleichbarer Tragweite sind Experimente und Vorhaben zur präzisen Bestimmung der Elektronenmasse [10] oder zum Nachweis von etwaigen Drifts fundamentaler Konstanten in der Zeit [11,12]. Die Linienbreite von Interkombinationslinien in HCIs skaliert gar mit Z^{10} . Da die Lebensdauer des angeregten Niveaus dem reziproken Verhalten unterliegt, wird es nun möglich, dass diese Interkombinationslinien im Spektrum der Sonnenkorona als dominante Linien messbar sind.

Das Wort *Skalierung* könnte irriger Weise zum Schluss führen, es handle sich beim Übergang von einem neutralen Atom zu einem HCI entlang der IES um eine bloße Minituarisierung der Elektronen-Wellenfunktion. Vielmehr begibt man sich jedoch in das faszinierende Gebiet gebundener Systeme in den stärkst möglichen, stationären elektromagnetischen Feldern. In H-artigem Uran ist das 1s Elektron einem mittleren Feld von etwa 10^{18} V/m ausgesetzt. Der semiklassische Bohrradius fällt hierbei unter die Compton-Wellenlänge des Elektrons und man befindet sich in einem Bereich in dem Quantenfluktuationen, in anderen Worten die nicht triviale Struktur des Quantenvakuums, signifikanten Einfluss auf die Wechselwirkung des Elektrons mit dem Feld erlangen. Eine *ab initio* Beschreibung der Atomstruktur kann daher nur noch im Rahmen einer Quantenfeldtheorie, wie der QED (Quantenelektrodynamik), gegeben werden. Die Entwicklung entsprechender Theorien in diesem extremen Umfeld eines hochgeladenen Ions ist äußerst anspruchsvoll (z.B. [13]). Daraus kann jedoch ein tiefes physikalisches Verständnis entstehen, was insbesondere auch für die Beschreibung neutraler Systeme gilt.

Einen starken Einfluss auf die Theorie der Atomstruktur hatte zweifelsfrei die Entdeckung der Lamb-*Shift* in atomaren Wasserstoff 1947 durch Lamb und Retherford [14]. Wie hinlänglich bekannt, konnten die beiden Forscher eine Aufhebung der l -Entartung zwischen dem $2S_{1/2}$ und $2P_{1/2}$ Zustand nachweisen und deren Aufspaltung zu $E = 4.38 \times 10^{-6}$ eV bestimmen. Jenes Experiment und dessen Deutung [15] kann als einer der Meilensteine auf dem Weg zur Formulierung der QED betrachtet werden [16].

Heute steht die QED für die am genauesten verifizierte Theorie der gesamten Physik. Dies gilt sowohl für die QED ungebundener Zustände, wie die Berechnung des g-Faktors des freien Elektrons zeigt [17], als auch für die hier im Fokus stehende QED gebundener Zustände, eindrucksvoll bestätigt auf 1.8×10^{-14} relative Genauigkeit für das 1S-2S Intervall

in atomarem Wasserstoff [18, 19].

Tests der Voraussagen der QED, und damit letztendlich auch des Standard Modells, mit obiger hoher relativer Genauigkeit konnten jedoch nur bei den leichtesten atomaren Systemen (wie Wasserstoff) durchgeführt werden. Dies ist zwei Gründen geschuldet: Von theoretischer Seite bedingt die Berechnung der Lamb-*Shift* tief gebundener Elektronen, wie in HCIs vorliegend, andersartige Methoden als in leichten Systemen [20]. Dort wird gemeinhin eine störungstheoretische Behandlung anhand einer Entwicklung im Kopplungsparameter $Z\alpha \ll 1$, dem Produkt aus Kernladungszahl und der Feinstrukturkonstante α , durchgeführt¹, der auf Grund seiner kleinen Größe für rasche Konvergenz sorgt. In HCIs gilt für den Kopplungsparameter zwischen Elektron und dem externen Feld des Nukleus $Z\alpha \lesssim 1$, und eine explizite, rigorose Berechnung in allen Ordnungen der Kopplung ist erforderlich [13]. Zum anderen gibt es von experimenteller Seite nur ein Verfahren mit welchem sich Genauigkeiten genannter Güte bei der Vermessung von Energieniveaus realisieren lassen — die Laserspektroskopie [21, 22]. Auch in Disziplinen außerhalb der Physik hat dieses in unzähligen Varianten eingesetzte Verfahren zu revolutionären Ergebnissen geführt. Das immense Potential dieser Technik lässt sich jedoch nur in einem eingeschränkten Spektralbereich ausschöpfen. Unsäglicherweise liegen die gebundenen Übergänge in HCIs typischerweise zwischen 20 und 100 000 eV, erstrecken sich also vom harten VUV (Vakuumultraviolett) bis tief in den Röntgenbereich, und damit außerhalb des für Laser zugänglichen Bereichs. Eine Ausnahme bilden hier Feinstrukturübergänge eher leichter Ionen und Hyperfeinstrukturübergänge hochgeladener Ionen, die den Bereich des Infraroten bis hin ins UV (Ultraviolett) überspannen und somit sehr wohl laserspektroskopisch untersucht werden können [23, 24].

Der nach Kenntnis des Autors energetisch höchst liegende Übergang, der bis dato durch resonante Laserspektroskopie vermessen wurde, ist der $1^1S - 2^1P$ Übergang in neutralem Helium mit $E = 21.2$ eV, und zwar über mehrfache Frequenzverdopplung und Zwei-Photonen-Absorption [25]. In einem ionisierten Atom wurde resonante Laserspektroskopie bis zu $E = 5.1$ eV Übergangsenergie durchgeführt [26].

Die Spektroskopie der Strahlung von HCIs [27, 28] ist daher, bis auf genannte Ausnahmen, eine Spektroskopie mittels konventioneller, dispersiver optischer Instrumente, wie Gitter- oder Kristallspektrometer [29, Kap. 4], oder dissipativer Verfahren mittels Halbleiterdetektoren und Kalorimeter. Die am genauesten vermessenen Übergänge in HCIs mit $Z > 20$ weisen eine relative Genauigkeit von $\Delta E/E \approx 20$ ppm auf und liegen damit viele Größenordnungen von der mittels Laserspektroskopie erreichten Genauigkeit in neutralen Atomen entfernt [18].

Ungemein wünschenswert wäre eine Erweiterung der Laserspektroskopie hin zu kürzeren Wellenlängen, um damit auch Zugang zu physikalisch grundlegenden Übergängen in HCIs zu bekommen. Wie die Historie zeigt, erhofft man sich dabei wohl zurecht eine bedeutende Steigerung der Auflösung gegenüber den erwähnten 20 ppm Genauigkeit. Neben anderen [30], erscheinen zwei Technologien besonders aussichtsreich laserartiges Licht hin-

¹Zum Erreichen ultimativer (experimenteller) Genauigkeit muss sogar bei leichten Atomen ein modifiziertes Verfahren angewandt werden.

reichend kurzer Wellenlänge zur Verfügung zu stellen: Die Generation hoher Harmonischer mittels ultra-kurzer Laserpulse in Wechselwirkung mit Edelgasen (HHG [31]) und das Prinzip des Freie-Elektronen-Lasers (FEL [32]).

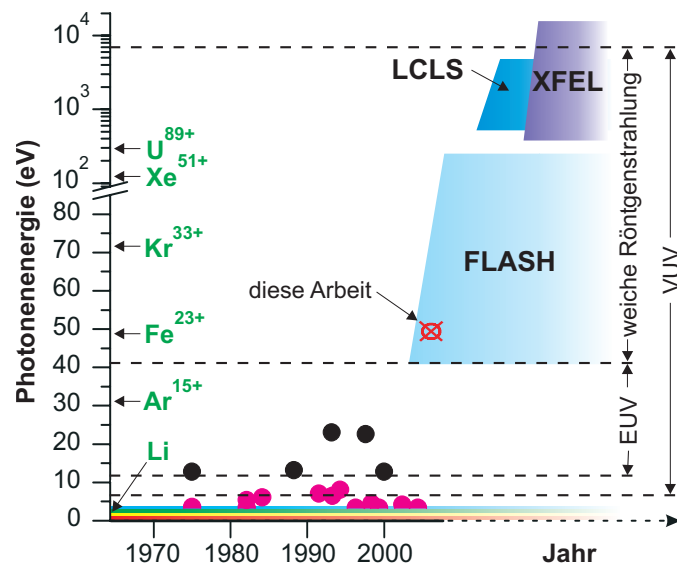


Abbildung 1.2: Der Laserspektroskopie zugängliche Übergangsenergien in der zeitlichen Entwicklung. Mit der neuen Generation von FELs, FLASH (Freie-Elektronen Laser in Hamburg), LCLS (engl. *Linac Coherent Light Source*) und XFEL (engl. *X-Ray Free-Electron-Laser*) wird die Laserspektroskopie zu völlig neuen Frequenzbereichen hin geöffnet, gerade Übergänge in HCIs lassen sich dadurch erschließen. In dieser Arbeit konnte bei Spektroskopie um 48.6 eV Übergangsenergie die Laserspektroskopie von mehrfach- und hochgeladenen Ionen (rote Datenpunkte [33]) in puncto Energiedifferenz des Übergangs um eine Größenordnung erweitert werden. Die schwarzen Datenpunkte [34] repräsentieren typische Messungen in neutralen Atomen. In Grün sind die $1s^2 2s^2 S_{1/2} - 1s^2 2p^2 P_{1/2}$ Übergangsenergien für einige Atome der Li-artigen iso-elektronischen Sequenz gegeben. Die Einteilung der Spektralbereiche (rechts) folgt [30, 35].

Am DESY in Hamburg ist es im Rahmen dieser Arbeit [36] erstmals gelungen, durch „Symbiose“ des ersten FELs für weiche Röntgenstrahlen, kurz *FLASH* [37], mit einer speziell für diesen Einsatz konstruierten EBIT, einen inneratomaren Ein-Elektronen-Übergang in einem HCI im weichen Röntgenbereich, bei 48.6 eV, durch resonante Ein-Photonen Laserspektroskopie zu untersuchen.

FLASH ist der erste Realisierung einer Reihe von geplanten Röntgen-FELs, wie LCLS [38] (ab 2009) in Stanford und XFEL [39] (ab 2013) in Hamburg, die, mittels des hier vorgestellten Verfahrens, potentiell eine große Klasse von Übergängen in HCIs nun der Laserspektroskopie zugänglich machen werden. In Abb. 1.2 ist der von diesen „Lichtquellen der 4. Generation“ überdeckte Photonenenergiebereich veranschaulicht, darüber hinaus findet eine repräsentative Auswahl bisheriger laserspektroskopischer Messungen besonders energetischer Übergänge in Atomen und mehrfach geladenen Ionen Darstellung. Jener der Laserspektroskopie zugängliche Wellenlängenbereich wird vermöge der Röntgen-FELs um ein Vielfaches ausgedehnt werden.

In vorliegender Arbeit wurde der erstmalig in Sonneneruptionen [40] gemessene Grund-

zustandsübergang (Abb. 1.3) $1s^2 2s \ ^2S_{1/2} - 1s^2 2p \ ^2P_{1/2}$, kurz $2 \ ^2S_{1/2} - 2 \ ^2P_{1/2}$, in Li-artigen Fe^{23+} spektroskopiert. Selbstverständlich skalieren auch hier die Energien des Übergangs entlang der IES von neutralem Li bis zu U^{89+} . Eine Auswahl von Elementen ist in Abb. 1.2 (grün, links) dargestellt. Die Übergangsenergie des überwiegenden Teils der Elemente liegt bezüglich dieses Übergangs innerhalb der Spezifikationen von FLASH.

Unstrittig bilden die H-artigen Atome die einfachsten Systeme der Atomphysik. Ihnen entstammt auch die Definition der *Lamb-Shift*, also die Energiedifferenz $2 \ ^2S_{1/2} - 2 \ ^2P_{1/2}$ (Abb. 1.3 (a)), deren Ursache in QED-Effekten gründet. Ein ursächlicher Ansatz für Un-

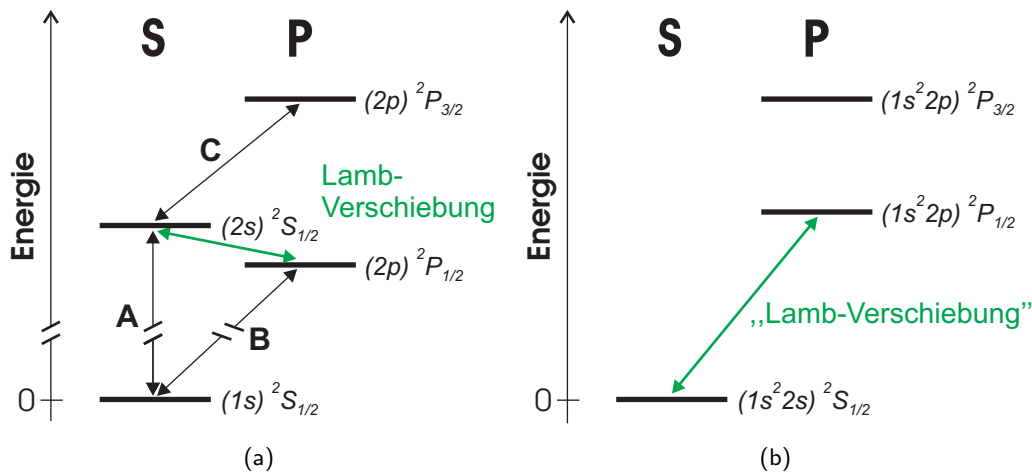


Abbildung 1.3: Schematisches Termschema des (a) H-artigen und (b) Li-artigen Atoms mit Grundzustand und den niedrigsten angeregten Niveaus (nicht maßstabsgetreu).

tersuchungen der QED in starken Feldern wäre damit sicherlich mit der direkten Untersuchung der *Lamb-Shift* in H-artigen HCIs gegeben. Sowohl direkte Messungen des $2 \ ^2S_{1/2} - 2 \ ^2P_{1/2}$ Übergangs [41–44], als auch indirekte Messungen² [23, 45–47] über den $2 \ ^2S_{1/2} - 2 \ ^2P_{3/2}$ Übergang (C in Abb. 1.3 (a)) wurden durchgeführt, allerdings nur für vergleichsweise leichte HCIs. Die obere Grenze markiert Ar^{17+} ($Z = 18$) [44], bei einer relativen Genauigkeit von *nur*³ noch 10000 ppm. Der absolute Betrag der *Lamb-Shift* $2 \ ^2S_{1/2} - 2 \ ^2P_{1/2}$ wächst in 1. Näherung proportional Z^4 von 4.37 μeV bei H, über 0.16 eV bei Ar^{17+} , bis hin zu 75.3 eV bei U^{91+} [8]. Ein Problem für Messungen mit höheren Z dieser Art liegt wohl in der Voraussetzung der Existenz eines metastabilen Zustandes $^2S_{1/2}$, der am wahrscheinlichsten über E1E1- oder M1-Übergänge in den Grundzustand zerfällt. Beträgt die Lebensdauer des $^2S_{1/2}$ -Niveaus bei Wasserstoff noch 0.12 s, so beläuft sich diese bereits bei Ar^{17+} auf nur noch 3.6 ns und schrumpft entsprechend Z^{-11} für den M1 Kanal weiter. Damit wird die Präparation einer ausreichenden Menge von Ionen im Ausgangszustand $^2S_{1/2}$ zu einem immer schwierigeren Unterfangen.

Was Lamb und Retherford zum Zeitpunkt ihrer Messung nicht wussten ist, dass die ent-

²Aus der sehr exakt realisierbaren Berechnung von $2P_{1/2} - 2P_{3/2}$ folgt durch Subtraktion die *Lamb-Shift*.

³Bei Wasserstoff erreicht man mit vergleichbaren experimentellen Techniken 1 ppm.

deckte Verschiebung keine isolierte Eigenschaft des ${}^2S_{1/2}$ Niveaus ist, sondern dass vielmehr die dieser Aufhebung der Entartung der $n = 2$ Zustände zu Grunde liegenden „Effekte der QED“ mehr oder minder Einfluss auf alle Zustände (S, P, D, \dots) zu allen $n = 1..k$ haben [Kap. 2]. So kommt man zwangsläufig zu einer Erweiterung des Begriffs *Lamb-Shift*, nämlich als eine individuelle Verschiebung eines jeden isolierten Niveaus ($1s, 2s, 2p, \dots$) eines H-artigen Ions. Den Referenzpunkt dieser Verschiebung bilden die Niveaus wie sie entsprechend der Diracgleichung [48, Kap. 2] vorausgesagt werden. Simple Subtraktion des tatsächlich messbaren Energieniveaus von der vorausgesagten Lage nach Dirac liefert damit, bis auf Effekte von dritter Seite (Kap. 2), die QED-Anteile eines jeden Niveaus. Messungen der $1s$ *Lamb-Shift* in H-artigen HCIs mit verschiedenem Z , bis hinauf zu den schwersten Elementen wie U^{91+} [49, 50], liefern einen bedeutenden Beitrag zu Tests der QED in starken Feldern.

Mit einem Leuchtelektron in einer S -Schale besitzen die Li-artigen Systeme ein ganz ähnliches Termschema wie die H-artigen Ionen (Abb. 1.3 (b)). Es fällt allerdings sofort auf, dass hier das ${}^2S_{1/2}$ Niveau nicht etwa schwächer gebunden ist als das ${}^2P_{1/2}$ Niveau, sondern ganz im Gegenteil den Grundzustand bildet. Ob mit oder ohne QED-Beiträge sind die Niveaus in alkalischen Atomen, insbesondere Lithium, bekanntlich nicht l -entartet, was auf eine Abweichung vom Coulombpotential durch Abschirmeffekte zurückgeführt werden kann. Der größte Teil der Übergangsenergie ${}^2S_{1/2} - {}^2P_{1/2}$ in Li-artigen Ionen fußt daher nicht auf Beiträgen der QED, sondern ist einfacheren Ursprungs. Die Bezeichnung dieses Übergangs als eine *Lamb-Shift* im ursprünglichsten Sinne ist daher nicht ganz zutreffend, aber weithin im Gebrauch. Der ${}^2S_{1/2} - {}^2P_{1/2}$ Übergang in Li-artigen Ionen ist einer der QED-sensitivsten Übergänge in der Atomphysik, mit bis zu 15% relativem QED Anteil an den 280 eV Übergangsenergie im U^{89+} (Abb. 1.2). Im Gegensatz zu H-artigen Systemen leiden diese nicht unter der Tatsache, dass die zwar absolut kleineren *Lamb-Shifts* der isolierten Niveaus — die größten Verschiebungen einzelner Niveaus findet man in H-artigen Ionen — in energetischen Lyman-Übergängen in den Grundzustand $n = 2, 3, \dots \rightarrow n = 1$ zwischen den Schalen quasi „untergehen“⁴. Dies macht die Li-artigen Ionen derzeit zu den genauesten vermessenen und potentiell höchst geeigneten Testobjekten [51, 52] der QED in starken Feldern. Was dem Experiment hilft, verlangt andererseits der Theorie mehr ab, denn die Anzahl der Elektronen erhöht sich von H-artig nach Li-artig um zwei. Durch die Wechselwirkung der Elektronen untereinander wird die theoretische Beschreibung erschwert, andererseits bietet dies aber auch die Möglichkeit die Theorie um genau diese Wechselwirkung zu erweitern.

Beim Sprung von H-artigen nach Li-artigen Ionen wurden die He-artigen Systeme [53] übergegangen. Natürlich verschieben auch hier QED-Beiträge die Energieniveaus. Zweifelsfrei beinhaltet eine rigorose Betrachtung der QED in starken Feldern auch diese Systeme [54]. Die Wechselwirkung der Elektronen ist hier jedoch komplexer, da das Leuchtelektron im Gegensatz zu Li-artigen Ionen nicht in einer sonst leeren Schale sitzt und nur

⁴Intra-Schalenübergängen wie $n=2 \rightarrow n=2$ mit hohen relativen QED-Beiträgen, da kleineren Übergangsenergien, verursachen bereits oben erwähnte exp. Probleme.

schwach der geschlossenen K -Schale wechselwirkt, sondern aus einer vollständig gefüllten Schale $1s^2$ heraus angeregt wird. Auch hier sind die relativen QED Anteile eines Übergangs wesentlich kleiner als in Li-artigen Systemen, da die Übergangsenergien in den Grundzustand wie bei H-artigen Ionen groß sind ($n = 2, 3, \dots \rightarrow n = 1$).

Die Komplexität der Elektronenwechselwirkung untereinander wird natürlich zunehmen, sobald man zu höheren Mehr-Elektronensystemen übergeht.

Diese Arbeit ist folgendermaßen strukturiert:

Kapitel 2 greift die letzten Gedanken wieder auf und gibt Einblick in die Beiträge der QED zur Atomstruktur der HCIs.

Kapitel 3 widmet sich dem keinesfalls trivialen Problem der Erzeugung von HCIs und deren Präparation als geeignete Untersuchungsobjekte. Zentraler Punkt ist hier die im Rahmen dieser Arbeit aufgebaute und eingesetzte kryogene EBIT.

Bevor in *Kapitel 5* die Laserspektroskopie an Fe^{23+} am FLASH in Hamburg ausgeführt wird, berichtet *Kapitel 4* über zusätzlich durchgeführte konventionelle Spektroskopie von HCIs, produziert und gespeichert in der EBIT. Auch hier liegt das zentrale Anliegen in der Spektroskopie der „Lamb-Shift“ in Li-artigen Fe^{23+} , die mittels eines Gitterspektrometers vermessen wurde.

Kapitel 6 setzt die in den vorherigen zwei Kapiteln gewonnenen Erkenntnisse sowohl mit anderen experimentellen Ergebnissen als auch mit theoretischen Vorhersagen in Zusammenhang, bevor die Arbeit mit einer Zusammenfassung und einem Ausblick in *Kapitel 7* schließt.

Kapitel 2

Über die Quantenstruktur hochgeladener Wenig–Elektronen Ionen

Nach einer kurzen Einleitung liegt in diesem Theoriekapitel der Fokus auf den Einflüssen der QED auf die Energieniveaus in Wenig–Elektronen Ionen. Im Zuge dessen wird das H-artige Ion diskutiert, das als einfachstes Ion auch hier die Grundlage bildet. Dann wird schwerpunktmäßig auf die QED–Effekte in lithiumartigen Ionen eingegangen. Den Abschluss bildet eine knappe Betrachtung berylliumartiger Systeme.

2.1 Schrödinger, Dirac, Lamb und das Wasserstoffatom

Die Formulierung der Quantenmechanik gilt als einer der Meilensteine oder gar Anfang der modernen Physik in zahlreichen ihrer Teildisziplinen, im Besonderen auch der Atom– und Molekülphysik. Kaum eine Zeit hat die Namen von Physikern so nachhaltig ins Gedächtnis geprägt, wie diese Gründerzeit. Einer davon ist Erwin Schrödinger, der durch Formulierung der nach ihm benannten Gleichung [55] (Gl. (2.1)) eine der exponiertesten Stellungen in der Entwicklung der Quantentheorie einnimmt:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(\vec{x}, t)\rangle = \mathbf{H}(\vec{x}, t) |\psi(\vec{x}, t)\rangle \quad (2.1)$$

beschreibt die zeitliche Entwicklung einer Wellenfunktion $|\psi(t)\rangle$ unter dem Einfluss des Hamilton–Operators $\mathbf{H}(\vec{x}, t)$.

Für nicht explizit zeitabhängige Hamilton–Operatoren lässt sich die bekannte zeitunabhängige Version von Gl. (2.1) angeben:

$$\mathbf{H}(\vec{x})\Psi(\vec{x}) = E\Psi(\vec{x}), \text{ wobei } |\psi(\vec{x}, t)\rangle = \Psi(\vec{x}) \exp(-i\omega t). \quad (2.2)$$

Das stationäre Zweikörperproblem, z.B. Kern und Elektron, lässt sich mittels Gl. (2.2) im Coulombpotential

$$V_C(r) = -\frac{Ze}{r}$$

in sphärischen Koordinaten und Separation von Winkel- und Radialanteil

$$\Psi(\vec{x}) = \frac{R(r)}{r} \times \Omega(\theta, \phi)$$

für $R(r)$ über folgende Eigenwertgleichung lösen (z.B. [56]):

$$\mathbf{H}R_{n,l} = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu_{\text{red}}} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu_{\text{red}} r^2} - V_C(r) \right] R_{n,l} = E_{n,l} R_{n,l}(r), \quad \mu_{\text{red}} = \frac{m_e M_K}{m_e + M_K}. \quad (2.3)$$

Hierbei stellt μ_{red} die reduzierte Masse dar und l die Drehimpulsquantenzahl. Es gilt $M_K = m_P$ und $Z = 1$ im Falle von Wasserstoff.

Man findet folgende Energieeigenwerte:

$$E_{n,l} = E_n = -\frac{1}{2} \mu_{\text{red}} c^2 \frac{(\alpha Z)^2}{n^2}. \quad (2.4)$$

In dieser quantenmechanischen Lösung hängt der Energieeigenwert nur von der Hauptquantenzahl n ab und im Besonderen nicht vom Bahndrehimpuls \vec{L} . Dies ist Konsequenz des $1/r$ Verlaufs des Coulombpotentials; sobald das Potential leichte funktionale Abweichungen von diesem Verlauf aufweist, verliert sich auch die Unabhängigkeit vom Drehimpuls. Bekannte Beispiele sind die Spektren der Alkaliatome, bei denen eine volle K-Schale den Kern gegenüber dem Leuchtelektron teilweise abschirmt, wodurch das Gesamtpotential seine exakte $1/r$ -Abhängigkeit verliert [57].

Die Schrödingergleichung Gl. (2.1) enthält eine erste Ableitung nach der Zeit und eine zweite Ableitung nach dem Ort (Impulsoperator in $\mathbf{H}(\vec{x}, t)$) und misst somit Zeit- und Raumkoordinaten unterschiedliche Bedeutung bei. Sie verletzt so die Symmetrieanforderungen der speziellen Relativitätstheorie und erhält sich nicht unter der Lorentztransformation. Dennoch ist es möglich, am Beispiel des Wasserstoffatoms relativistische Korrekturen zu dessen Bindungsenergie einzuführen. Ausgangspunkt ist hier eine Entwicklung des Impulses \mathbf{P} im Hamilton-Operator [58]:

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{P}^2}{2\mu_{\text{red}}} - V_C(r), \quad \text{mit} \quad \frac{\mathbf{P}^2}{2\mu_{\text{red}}} = \underbrace{\frac{\mathbf{P}_e^2}{2m_e} + \frac{\mathbf{P}_K^2}{2M_K}}_{\Pi}, \quad (2.5)$$

Π aus Gl. (2.5) ist dabei zu ersetzen durch einen relativistischen Ausdruck für den Elektronenimpuls:

$$\begin{aligned} \Pi &= \sqrt{\mathbf{P}_e^2 c^2 + m_0^2 c^4} + \frac{\mathbf{P}_K^2}{2M_K} \approx m_0 c^2 + \frac{\mathbf{P}_e^2}{2m_0} + \frac{\mathbf{P}_K^2}{2M_K} - \frac{\mathbf{P}_e^4}{8m_0^3 c^2} \\ &\approx m_0 c^2 + \frac{\mathbf{P}^2}{2\mu_{\text{red}}} - \underbrace{\frac{\mathbf{P}_e^4}{8\mu_{\text{red}}^3 c^2}}_{\mathbf{H}_T}, \end{aligned}$$

mit der Ruhemasse m_0 des Elektrons und der relativistischen Korrektur \mathbf{H}_T . Eine weitere relativistische Korrektur, neben \mathbf{H}_T , ist durch die Berücksichtigung des Elektronenspins

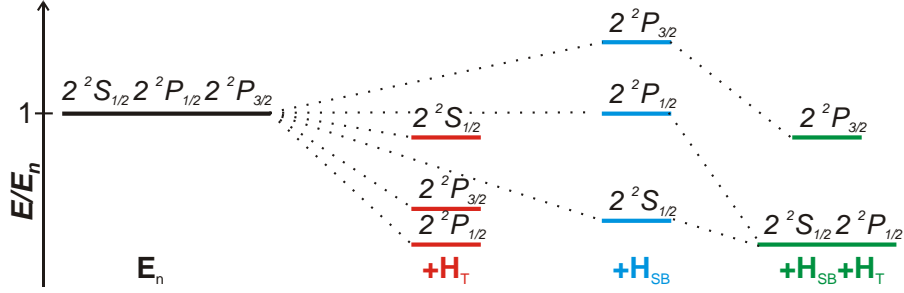


Abbildung 2.1: Qualitative Auswirkung der relativistischen Korrekturen H_T (rot) und H_{SB} (blau) auf die Energieniveaus E_n für $n=2$.

S gegeben, die auf die bekannte Spin-Bahn-Kopplung¹ H_{SB} führt [56]:

$$H_{SB} = \frac{Ze^2}{2\mu_{\text{red}}c^2r^3} \mathbf{L} \mathbf{S}. \quad (2.6)$$

Die Korrektur ΔE_{SB} dieser beiden Operatoren zur Bindungsenergie kann bei Anwendung von 1. Ordnung Störungstheorie berechnet werden zu:

$$\begin{aligned} \Delta E_{SB}^{(1)} &= \langle \Psi_{n,l,m}(\vec{x}) | H_T | \Psi_{n,l,m}(\vec{x}) \rangle + \langle \Psi_{n,l,m}(\vec{x}) | H_{SB} | \Psi_{n,l,m}(\vec{x}) \rangle \\ &= -\mu_{\text{red}}c^2 \frac{(\alpha Z)^4}{2n^3} \left(\frac{1}{J+1/2} - \frac{3}{4n} \right), \quad J = l \pm 1/2. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Damit hängen die Energieniveaus nicht mehr nur von der Hauptquantenzahl n ab, sondern explizit auch von der Quantenzahl J des Gesamtdrehimpulses. Die relativistischen Korrekturen verschieben die Energien tendenziell nach unten, hin zu tieferen gebundenen Zuständen. Abb. 2.1 zeigt das qualitative Verhalten für die $n = 2$ Zustände im Wasserstoffatom. Entscheidend ist, dass unter den betrachteten relativistischen Korrekturen die Zustände $2^2S_{1/2}$ und $2^2P_{1/2}$ energetisch identisch sind, obwohl sie sowohl bezüglich H_{SB} , als auch H_T alleine, energetisch verschieden sind.

Häufig wird auch ein als Darwin-Term bekannter Beitrag H_D (z.B. [58]) zu den relativistischen Korrekturen niedrigster Ordnung gezählt. Dieser ergibt sich jedoch nicht im Rahmen obiger Betrachtung aus der Schrödingergleichung, sondern kann nur aus der im Folgenden diskutierten Diracgleichung extrahiert werden. In einem Coulombpotential liefert der Darwin-Term nur für s -Zustände Beiträge. Streng genommen gilt die Korrektur der Spin-Bahn-Kopplung gemäß Gl. 2.7 entsprechend der Herleitung nur für $l > 0$ und damit nicht für s -Zustände. Interessanterweise ergibt aber Einsetzen von $l = 0$ in Gl. 2.7 exakt den Beitrag des Darwin-Terms, so dass die in Abb. 2.1 dargestellten Korrekturen in der Summe das korrekte relativistische Ergebnis niedrigster Ordnung liefern.

Die tatsächliche und vollständige Erweiterung der Schrödingergleichung auf eine Lorentz-invariante Form gelang Dirac 1928 [48]. Sein relativistischer Hamilton-Operator des freien

¹Wobei die nichtrelativistische Quantenmechanik Schwierigkeiten mit einem Faktor 1/2 hat, dem relativistischen Thomas-Faktor, der an dieser Stelle nachträglich eingeführt werden muss.

Teilchens, der die Ableitungen nach dem Ort, und damit den Impuls \mathbf{p} , nur noch linear enthält, ist von der Form [59]:

$$\mathbf{H}_D = c\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p} + \beta m_0 c^2, \quad (2.8)$$

womit folgende Diracgleichung angegeben werden kann:

$$\mathbf{H}_D|\Psi(\vec{x}, t)\rangle = i\hbar \frac{\partial|\Psi(\vec{x}, t)\rangle}{\partial t}. \quad (2.9)$$

$\boldsymbol{\alpha}$ und β sind von der Form:

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_x \\ \alpha_y \\ \alpha_z \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

$$\alpha_x = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma}_x \\ \boldsymbol{\sigma}_x & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_y = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma}_y \\ \boldsymbol{\sigma}_y & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_z = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma}_z \\ \boldsymbol{\sigma}_z & 0 \end{pmatrix}.$$

Hierbei stehen die $\boldsymbol{\sigma}_{x,y,z}$ jeweils für die bekannten 2×2 Pauli-Matrizen, was die α_i zu 4×4 Matrizen macht. Die Lösungen der Diracgleichung sind vierzeilige Spinoren

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}.$$

Führt man analog zu Gl. (2.1) stationäre Lösungen ein, so folgt für das im Coulombpotential gebundene Elektron die zeitunabhängige Gleichung

$$(c\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p} + \beta m_0 c^2 + V_C(\vec{x}))|\Psi_{t0}\rangle = E|\Psi_{t0}\rangle. \quad (2.11)$$

Tatsächlich widerspricht das Konzept eines Teilchens in einem statischen Potential V_C gerade dem Grundgedanken der speziellen Relativitätstheorie, da ein Bezugssystem ausgezeichnet wird. Es ist im Rahmen dieser relativistischen Theorie nicht möglich, eine reduzierte Masse einzuführen, da dies einer Zerlegung in eine Relativbewegung und eine Schwerpunktsbewegung äquivalent wäre und abermals ein Bezugssystem auszeichnet. Die Bewegung des Kerns stellt damit bereits die erste Korrektur zur Dirac-Theorie dar, der es gilt zu gegebener Zeit Rechnung zu tragen. Im Moment ist es gerechtfertigt, solange die Energie des Elektrons klein gegen die Ruhemasse des Kerns ist, von einem statischen Potential auszugehen. Der Lösungsweg von Gl. (2.11) bezüglich der Radialgleichung führt auf ein System zweier gekoppelter, gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung. Für $0 < E < m_0 c^2$ wird in [59] für die Eigenwerte der Radialgleichung angegeben:

$$E_{n,j} = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 + \frac{(\alpha Z)^2}{(n-\eta_j)^2}}}, \quad \eta_j = j + 1/2 - \sqrt{(j + 1/2)^2 - (\alpha Z)^2}, \quad (2.12)$$

wobei $j = |l - 1/2|, \dots, (l + s)$, $Z < 137$.

j, s, l sind die Quantenzahlen des Gesamtdrehimpulses, Spins und Bahndrehimpulses. Was im interessanten Falle von $Z > 137$ geschieht, bei dem gebundene Zustände, zumindest theoretisch, in das negative Eigenwertkontinuum der Diracgleichung eintauchen können, wird in [60] diskutiert. Gl. (2.12) weist wie Gl. (2.7) Zuständen gleicher Gesamtdrehimpulsquantenzahl j gleiche Energie zu. Vergleichbar Abb. 2.1 wird auch hier den Zuständen $2^2S_{1/2}$ und $2^2P_{1/2}$ gleiche Bindungsenergie zugeordnet. Eine Entwicklung von Gl. (2.12) nach Potenzen von αZ zeigt unmittelbare die Verwandtschaft zu Gl. (2.7):

$$E_{n,j} = m_0c^2 \left[1 - \frac{(\alpha Z)^2}{2n^2} - \frac{(\alpha Z)^4}{2n^3} \left(\frac{1}{J + 1/2} - \frac{3}{4n} \right) + \dots \right], \quad (2.13)$$

dem ersten Term entspricht gerade die Ruheenergie des Elektrons, der zweite Term ist identisch zu Gl. (2.4) ($\mu_{\text{red}} = m_0$) und der dritte stellt die Feinstrukturaufspaltung nach Gl. (2.7) selbst dar.

Zusammengefasst erfahren nach Dirac alle Energieniveaus eine Absenkung zu tiefer gebundenen Zuständen. Bei gegebenem n ist diese Absenkung für $j = 1/2$ am größten und bei maximalem $j = n - 1/2$ am kleinsten (Abb. 2.1).

1947 kommunizieren W. Lamb und R. Retherford [15] ein für die Theorie der Spektren der Atomstruktur elementar wichtiges Ergebnis. Durch Quenchen von Wasserstoffatomen im angeregten, metastabilen $2^2S_{1/2}$ Zustand mittels induzieren von Mikrowellenübergängen in die $2^2P_{1/2}$ und $2^2P_{3/2}$ Zustände, welche sich rasch über Dipolübergänge in den Grundzustand abbauen, zeigten sie, dass im Rahmen ihrer Messgenauigkeit² der $2^2S_{1/2}$ Zustand um signifikante 1000(100) MHz höher liegt als der $2^2P_{1/2}$ Zustand. Die beiden Forscher notierten aber auch, dass sie im Rahmen ihrer Auflösung keine Diskrepanz für den Abstand $2^2P_{1/2} - 2^2P_{3/2}$ zur Dirac-Theorie feststellen können. Auch unter Einschluss von Korrekturen wie der Hyperfeinwechselwirkung, Effekten der Kernaussdehnung und Kernbewegung konnten die Dirac'schen Vorhersagen keine zufriedenstellende Erklärung liefern. Seit 1935 waren die Überlegungen zur Vakuumpolarisation durch Uehling bekannt [61], der Effekt aber auch zu klein und vor allem mit verkehrtem Vorzeichen. Bethe gelang es im gleichen Jahr wie Lambs Experiment, die Probleme der Divergenz bei der Berechnung der Selbstenergie des Elektrons zu umgehen und kam zu einem Resultat von 1040 MHz für die Verschiebung des $2^2S_{1/2}$ Zustandes. Das dabei genutzte Konzept von Kramers Massenrenormalisierung als auch die beiden Grundbausteine der QED, Selbstenergie und Vakuumpolarisation, waren damit in den Fokus gerückt.

Die als erstes experimentell bestimmte Differenz $\Delta E(2^2S_{1/2} - 2^2P_{3/2})$ wird im ursprünglichen Sinne als *Lamb-Shift* bezeichnet. Der Begriff erfuhr jedoch schnell eine Erweiterung, wie im nächsten Abschnitt geschildert wird.

²Was in einer ganzen Serie von Messungen durch Lamb et al. bis auf eine Auflösung von 100 kHz gebracht wurde.

2.2 Beiträge zur Bindungsenergie in hochgeladenen Wenig-Elektronen Ionen

Das System aus Elektronen und Kern (keine Kernanregung) ist vollständig durch Angabe einer Gesamtbindungsenergie für die Elektronen bezüglich der inneren Energie charakterisiert. Also der Energie, die aufzubringen ist, um alle Elektronen des Atoms bei einem sonst leeren Universum ins Unendliche zu bringen. Im nichtrelativistischen Hamilton-Operator ergibt sich z.B. folgende Struktur unter Summieren über alle i Elektronen:

$$\mathbf{H} = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2\mu_{\text{red}}} + \mathbf{H}_V + \mathbf{H}_W.$$

\mathbf{H}_V trägt allen elektrostatischen Wechselwirkungen zwischen den Elektronen, sowie dem Kern und den Elektronen untereinander Rechnung, dabei kann auch bereits eine ausgedehnte Ladungsverteilung des Kerns angenommen werden. \mathbf{H}_W beschreibt die Wechselwirkung der Bahndrehimpulse der Elektronen untereinander. In einer relativistischen Theorie treten vor allem auch Wechselwirkungen der Spins der Elektronen untereinander, mit dem Kernspin und mit den Bahndrehimpulsen hinzu.

In vielen Fällen bezieht sich die Bindungsenergie lediglich auf die Bindungsenergie eines Elektrons, des Leuchtelektrons. Die *Lamb-Shift* in ihrem theoretischen Sprachgebrauch bezieht sich dann auf die Verschiebung der einzelnen isolierten Niveaus dieses Leuchtelektrons im Atom. Sie steht für die Summe aller Kern- und QED-Korrekturen zur Dirac-Bindungsenergie des Niveaus im Falle eines Punktkerns ohne Ausdehnung [62]. Einzige Ausnahme stellt die Kernrückstoß-Korrektur dar, obwohl eine rigorose relativistische Behandlung dieses Effekts nur im Rahmen der QED formuliert werden kann [52]. Begründung ist, bringt man sie in klassischer Form in die Dirac-Theorie ein, so verschiebt diese $2S$ und $2P$ gleich und trägt zur „klassischen“ *Lamb-Shift* $\Delta E(2^2S_{1/2}-2^2P_{1/2})$ nicht bei. Da die *Lamb-Shift* jedes einzelne Niveau individuell verschiebt, kann durch das Vermessen von Übergängen zwischen gebundenen Niveaus zunächst nur die Summe der Korrekturen zu beiden Niveaus erschlossen werden.

2.2.1 Betrachtungen zur Quantenelektrodynamik

Nach den Beiträgen von Uehling, Bethe und Kramer entwickelten Dyson, Feynman, Schwinger und Tomaga einen strikten quantenelektrodynamischen Formalismus. Unendlichkeiten, die lange Zeit für Schwierigkeiten gesorgt hatten, wurden durch die Technik der Renormierung handhabbar, die sich vor allem auf die Elektronenladung und -masse bezieht. Rechnungen der QED basieren auf einer Entwicklung in der Feinstrukturkonstante α , als Repräsentant der involvierten virtuellen Photonen. Die individuellen Summanden dieser Störungsreihe können gewöhnlich als Feynman-Diagramme dargestellt werden. Die beiden einfachsten Feynman-Diagramme sind in Abb. 2.2 (a) dargestellt; ihr Beitrag ist von Ordnung $\mathcal{O}(\alpha)$ und entspricht genau einem Photonpropagator (Wellenlinie) mit zwei Knoten ($\sqrt{\alpha} \times \sqrt{\alpha}$). Die Doppellinie symbolisiert die Bewegung eines Elektrons im externen Feld

2.2. Beiträge zur Bindungsenergie in hochgeladenen Wenig-Elektronen Ionen

eines Kerns. Die Zeitachse der Feynman-Diagramme läuft von unten nach oben, bei dem Elektron handelt es sich selbstverständlich um ein reales Teilchen.

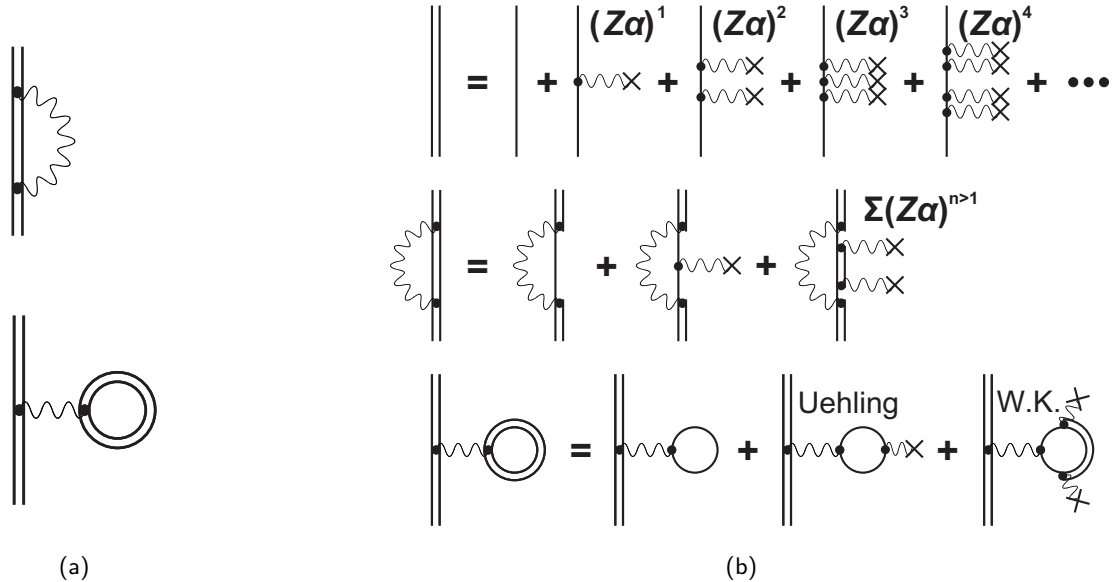


Abbildung 2.2: Feynman-Diagramme der Ordnung $\mathcal{O}(\alpha)$, (a)(oben) Selbstenergie und (a)(unten) Vakuumpolarisation. Doppellinien stehen für Wellenfunktionen und Propagatoren im externen Feld eines Kerns, eine einfache Linie für das freie Elektron. Die Feynman-Diagramme verstehen sich in der Lorentz-invarianten Feynman-Eichung. (b) Entwicklung in Potenzen $(Z\alpha)$, der Photonpropagator mit einem \times am Ende steht für den virtuellen Photonenaustausch mit dem Kern. Bei Selbstenergie und Vakuumpolarisation [20] steht der letzte Summand für die Summe aller Terme der Ordnung größer $\mathcal{O}((Z\alpha)^1)$ und kann entsprechend der Doppellinie weiterentwickelt werden.

Abb. 2.2 (a)(oben) zeigt den Prozess der Selbstenergie (SE) in niedrigster Ordnung. Bei diesem Prozess wird ein Photon von einem Elektron im Kernfeld emittiert und auch wieder absorbiert. Abb. 2.2 (b)(unten) steht für die niedrigste Ordnung der Vakuumpolarisation (VP). Dabei generiert ein virtuelles Photon eine Wechselwirkung mit einem virtuellen Elektron-Positron-Paar. Dieses Paar bewegt sich entsprechend der Doppellinie ebenfalls im externen Feld eines Kerns.

Der Kopplungsparameter mit dem externen Feld des Kerns ist mit $Z\alpha$ ($\approx v/c$) gegeben. Traditionell verfährt man mit QED-Korrekturen so, dass neben der Entwicklung in α eine weitere, in Potenzen dieses Kopplungsparameters $Z\alpha$ hinzutritt. Für leichte Ionen ist Z klein und $Z\alpha \ll 1$ — die Reihe konvergiert schnell. Für mittlere und schwere hochgeladene Ionen konvergiert die Entwicklung in $Z\alpha$ nur langsam, und viele Terme müssen berücksichtigt werden. Daher sind bei hochgeladenen Ionen Konzepte von Nöten, die zwar den rigorosen Einschluss aller Ordnungen $Z\alpha$ beinhalten, jedoch ohne Expansion auskommen [20]. Abb. 2.2 (b) zeigt die $Z\alpha$ Expansion der 3 einfachsten Feynman-Diagramme der QED gebundener Systeme.

2.2.2 Lamb-Shift und QED in hochgeladenen H-artigen Ionen

Nachfolgend gelte folgende Konvention: Die Bindungsenergie eines Elektrons in einem gebundenen Niveau ist negativ. Je höher der Betrag umso tiefer ist dieses Elektron gebunden. Positive Korrekturen zu einem Niveau schieben dieses in Richtung Kontinuum, also machen die Bindung schwächer.

Selbstenergie in Ordnung $\mathcal{O}(\alpha)$: Die Selbstenergie des Elektrons in niedrigster Ordnung ist die dominierende QED-Korrektur zur Diracenergie der Niveaus im H-artigen Ion. Auf Grund der recht kleinen Elektronenmasse, stellt diese Emission mit anschließender Absorption eines Photons eine entsprechend große Störung dar. Die genaueste, vollständige Berechnung der Korrektur durch die Selbstenergie in Ordnung $\mathcal{O}(\alpha)$ ist in [63] gegeben. Sie gehorcht der Darstellung [63]:

$$\Delta E_{\text{SE}} = \frac{\alpha (Z\alpha)^4}{\pi n^3} \Delta F(Z\alpha, R) m_0 c^2, \quad (2.14)$$

wobei $\Delta F(Z\alpha, R)$ eine dimensionslose Funktion darstellt, die von $Z\alpha$ und vom Kernradius R abhängt. Vielfach wird die einfachste nukleare Korrektur, nämlich eine nicht punktförmige Ladungsverteilung, direkt als Potential in die QED Berechnung inkorporiert. Neben dem Radius spielt die Dichtefunktion der Ladung im Kern eine Rolle. Gängig ist die Annahme einer gleichmäßig geladenen Kugel. Abb. 2.3 zeigt die Verschiebung der Niveaus $1S$, $2S$ und $2P_{1/2}$ durch die Selbstenergie. Der Beitrag der Korrektur nimmt entsprechend Gl. (2.14) mit zunehmenden n ab.

Vakuumpolarisation in Ordnung $\mathcal{O}(\alpha)$: Die Vakuumpolarisation stellt die betragsmäßig zweitgrößte Korrektur dar. Im Gegensatz zur Selbstenergie führt sie in ihrer Wirkung zur stärkeren Bindung des Elektrons. Betrachtet man sich die Entwicklung nach $Z\alpha$ gemäß Abb. 2.2 (b)(unten) so leistet der erste Summand der Entwicklung keine Korrektur³. Der folgende Term erster Ordnung ist die als Uehling-Potential [61] bekannte Korrektur. Der endliche Rest⁴ der Entwicklung ist als Wichmann-Kroll Beitrag (WK) bekannt und dem Betrage nach grob mindestens eine Größenordnung kleiner als der Uehling-Teil. Die Berechnung des Uehling-Potentials bereitet den Theoretikern keinerlei Probleme. Der WK-Teil stellt in dieser Hinsicht eine größere Herausforderung dar. In [65] wird eine identische Gleichung zu (2.14) für den WK-Teil in hochgeladenen H-artigen Ionen mit $30 < Z < 100$ angegeben. Die Werte für $F(Z\alpha, R)$ sind entsprechend zu ersetzen. Abb. 2.4 zeigt Uehling- und WK-Beitrag für einige Z und verschiedene Niveaus.

Strahlungskorrekturen der Ordnung $\mathcal{O}(\alpha^2)$: Die Strahlungskorrekturen der Ordnung $\mathcal{O}(\alpha^2)$, also mit genau zwei Photonpropagatoren, sind in Abb. 2.5 dargestellt. In (a) finden sich die Selbstenergie zur Ordnung $\mathcal{O}(\alpha^2)$ (SESE), in (b) die Vakuumpolarisation

³Gemäß dem Furry-Bild leisten nur ungerade Entwicklungsterme in $Z\alpha$ Beiträge [20].

⁴von unendlich vielen Termen in der $Z\alpha$ -Entwicklung.

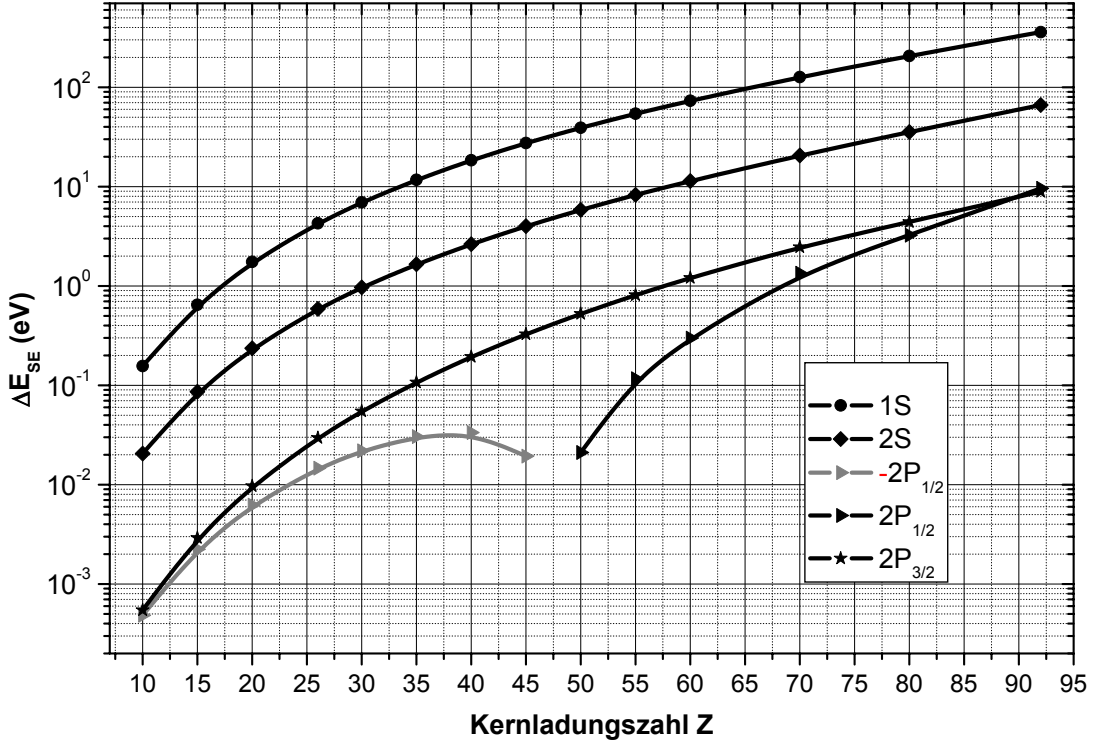


Abbildung 2.3: Selbstenergie (Punktkern) der Ordnung $\mathcal{O}(\alpha)$ und in allen Ordnungen $Z\alpha$ für die 4 niedrigsten, isolierten Niveaus in H-artigen Ionen. Die Werte sind aus [64] und interpoliert. Zu beachten ist, dass die Korrektur des $2P_{1/2}$ -Zustands im Bereich von $Z \approx 48$ das Vorzeichen wechselt.

(VPVP) und in (c) finden sich Mischungen dieser beiden fundamentalen Effekte zur Ordnung $\mathcal{O}(\alpha^2)$ (SEVP).

Initialisiert durch die berühmte Messung von $2^2S_{1/2} - 2^2P_{1/2}$ in Li-artigem Uran durch Schweppe [67], begann Anfang der neunziger Jahre die theoretische Auswertung dieser Diagramme. Jedoch gibt es auch heute noch keine vollständige Auswertung in allen Ordnungen $Z\alpha$ [68]. Der Hauptbeitrag zur Korrektur kommt durch die Selbstenergie-Diagramme Abb. 2.5 (a). Deren Berechnung findet sich in allen Ordnungen $Z\alpha$ in [68, 69]. Bisher konnten das rechte Diagramm in Abb. 2.5 (b), sowie die beiden letzten Diagramme in (c) nicht expansionslos evaluiert werden. Deren Beiträge werden nur in der dominierenden Uehling-Näherung berechnet [69]. Für den durch Abb. 2.5 (a) repräsentierten Teil (SESE) lässt sich angeben:

$$\Delta E_{\text{SESE}} = \frac{\alpha^2 (Z\alpha)^4}{\pi^2 n^3} \Delta F_{\text{SESE}}(Z\alpha, R) m_e c^2, \quad (2.15)$$

wobei man den zusätzlichen Faktor α im Vergleich zu (2.14) beachte. Wiederum steckt die Kunst natürlich in der Berechnung von $\Delta F_{\text{SESE}}(Z\alpha, R)$. Verschiedene Beiträge der Ordnung $\mathcal{O}(\alpha^2)$ finden sich dargestellt in Abb. 2.6.

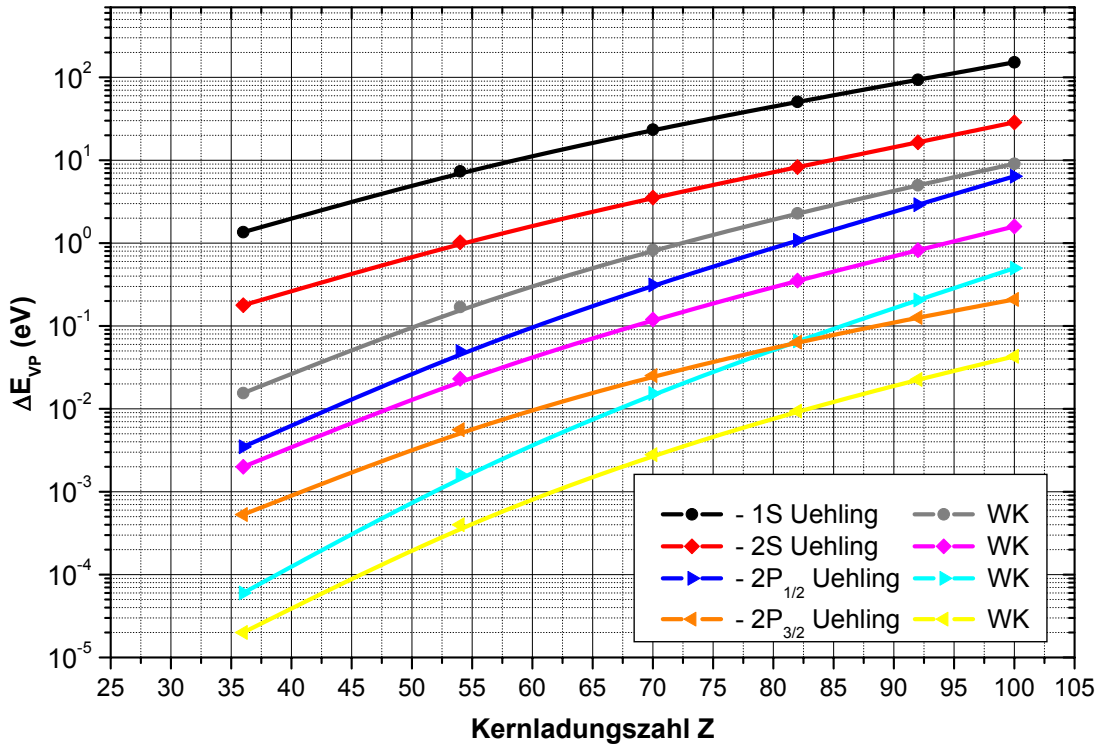


Abbildung 2.4: Vakuumpolarisation (homogen geladener Kern) der Ordnung $\mathcal{O}(\alpha)$, aufgeteilt in Uehling- und Wichmann-Kroll-Beitrag, für die 4 niedrigsten, isolierten Niveaus in H-artigen Ionen. Die eingetragenen Werte sind aus [66] und interpoliert. Zu beachten ist der eigentlich negative Beitrag des Uehling-Potentials.

Korrekturen kernphysikalischer Art: Diese Korrekturen stellen derzeit eine entscheidende Barriere dar, bis zu der die QED getestet werden kann. Man ist dabei auf physikalische Modelle angewiesen, die nicht Teil der QED sind. Aus anderer Sicht kann man, falls man den Aussagen der QED glaubt, damit Kerneffekte untersuchen. Bei den angesprochenen Effekten handelt es sich um:

- Den Übergang vom Punktkern zum ausgedehnten Kern.
- Den relativistischen Rückstoßeffekt (reduzierte Masse).
- Die Polarisierung des Kerns.

Die Einflüsse des ausgedehnten Kerns werden häufig direkt ins Potential mit aufgenommen, das bei der Berechnung obiger Effekte verwendet wird. Die Ausdehnung des Kerns stellt damit eine Korrektur da, die praktisch für jede der QED Korrekturen separat berechnet werden muss. Die einfachste Korrektur ist natürlich die zur Diracenergie selbst [71, 72]. Der Berechnung muss ein Kernmodell zu Grunde liegen, in das etwa experimentell bestimmte Kernradien und die Ladungsverteilung innerhalb dieses Radius eingehen. Gerade für Ionen mit sehr hohem Z ist die genaue Kenntnis dieser Korrektur wichtig. In diesem

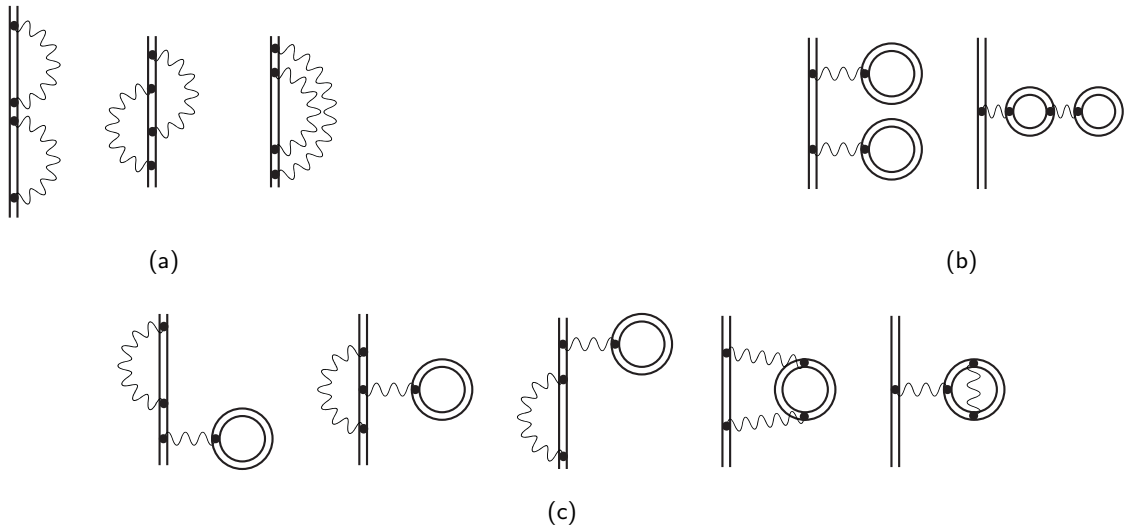


Abbildung 2.5: Feynman-Diagramme der Strahlungskorrekturen zur Ordnung $\mathcal{O}(\alpha^2)$, (a) Selbstenergie (SE-SE), (b) Vakuumpolarisation (VPVP) und (c) gemischte Diagramme (SEVP). Der größte Beitrag zur Korrektur wird durch die Diagramme in (a) geleistet.

Bereich spielen dann bereits höhere Multipolmomente der Ladungsverteilung eine Rolle. Die Ladungsverteilung wird meist als homogen über die Kugel oder aber als homogen, aber ausschließlich lokalisiert in der Kernschale, angenommen [63]. Die Korrektur zum Punktkern in Anbetracht einer homogenen Ladungsverteilung ist in Abb. 2.7 (schwarz, rot, blau) dargestellt [68, 73, 74].

Stellte die Einführung einer reduzierten Masse in klassischen Betrachtungsweisen ein sehr geringes Problem dar, ist deren Einführung in einer voll relativistischen Theorie nur über die QED möglich. Eine Berechnung des Beitrags des relativistischen Rückstoßes in allen Ordnungen $Z\alpha$ und $\mathcal{O}(m_e/M_K)$ findet sich in [75]. Die Rückstoßkorrektur für das $1S$ Niveau ist in Abb. 2.7 (grau) dargestellt, im Vorgriff findet sich in grüner Farbe die Korrektur bezüglich der Übergangsenergie $2^2S_{1/2}-2^2P_{1/2}$ in Li-artigen Systemen dargestellt [74]. Die Polarisation des Kerns meint Anregungen des selbigen. Kernniveaus, die niedrig genug liegen, um angeregt zu werden, finden sich meist nur bei sehr schweren und deformierten Kernen. Berechnungen für Actinide, Blei und Uran finden sich in [76, 77]. Die Größenordnung des Effekts liegt im Bereich des Rückstoßeffects. Die Polarisierungseffekte des Kerns stellen das Limit dar, bis zu dem die QED in hochgeladenen Ionen getestet werden kann [52], nicht zuletzt, weil zur Beschreibung phänomenologische Modelle der nuklearen Anregung angewendet werden müssen.

Zur Diskussion von Einflüssen der QED-Korrekturen auf Systeme mit mehr als nur einem Elektron wäre ein offensichtlicher Schritt der Übergang zu den heliumartigen Systemen mit ihren zwei Elektronen. Die He-artigen Ionen sollen hier jedoch keine explizite Darstellung finden. Im Fokus stehen die Li-artigen Ionen. Für das Verständnis deren Energieniveaus

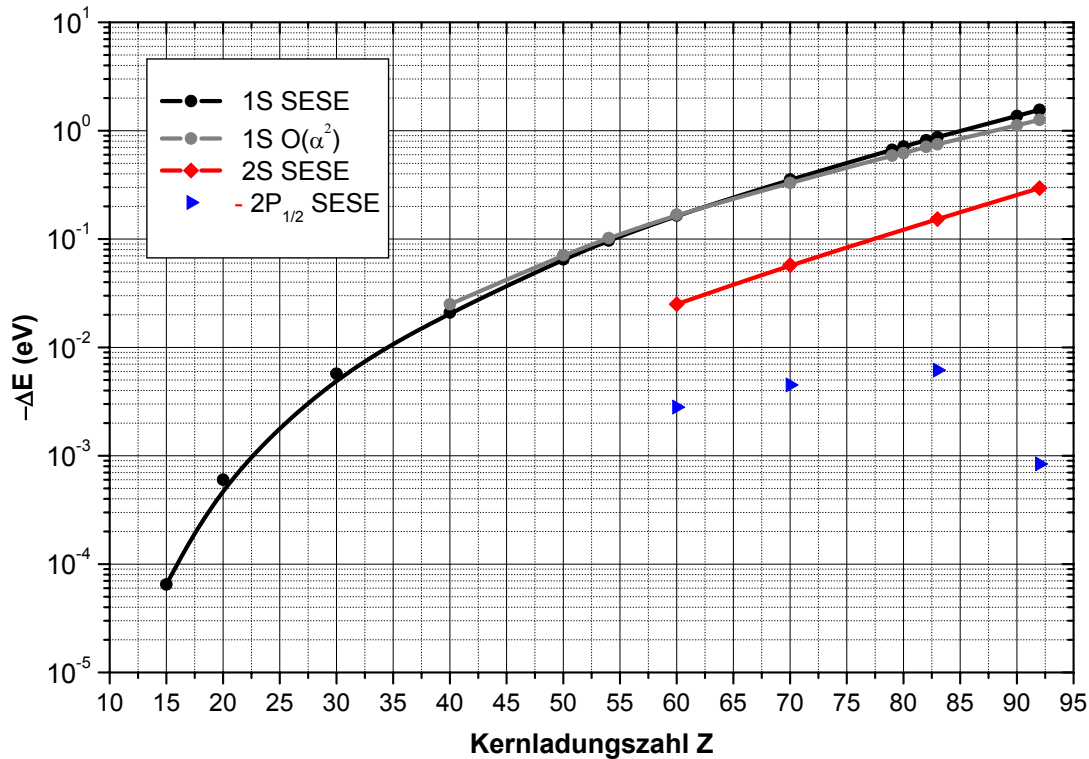


Abbildung 2.6: Dargestellt sind QED-Korrekturen (negativ) der Ordnung $\mathcal{O}(\alpha^2)$ gegenüber der Kernladung. Für den $1S$ -Zustand ist die dominierende Selbstenergiekorrektur (SESE) gezeigt und zum Vergleich die gesamte Korrektur, für $2S$ und für $2P_{1/2}$ (positiv !) die Selbstenergie [68–70].

ist die Kenntnis um die Korrekturen in H-artigen Systemen elementar, nicht jedoch die der He-artigen Systeme. Deren genaue Betrachtung wäre zwar notwendig für die Bindung der Elektronen in der K-Schale in Li-artigen Systemen, jedoch nicht für das hier interessierende L-Schalen Leuchtelektron. Zur Lektüre der Zwei-Elektronen-Systeme sei z.B. auf [54] verwiesen.

2.2.3 Lamb-Shift und QED in hochgeladenen Li-artigen Ionen

In Li-artigen Systemen müssen neben den zuvor diskutierten Strahlungskorrekturen und Kerneffekten die Wechselwirkungen des L-Schalen Elektrons (Leuchtelektron) mit den hinzugekommenen zwei K-Schalen Elektronen berücksichtigt werden. Im Gegensatz zu neutralen Systemen bilden die zusätzlichen Elektronen in hochgeladenen Ionen lediglich eine Störung. In einem neutralen Atom ist die Ladung aller Elektronen gleich der Ladung des Kerns. Das einzelne Elektron sieht also fast so viel positive wie negative Ladung. In einem HClI ist das Elektron einer großen positiven Ladung und bei den wenigen weiteren Elektronen nur einer kleinen negativen Ladung ausgesetzt. Diese Störung wird über eine Entwicklung im Parameter $1/Z$ in die Theorie eingebracht, die zu den bekannten Entwick-

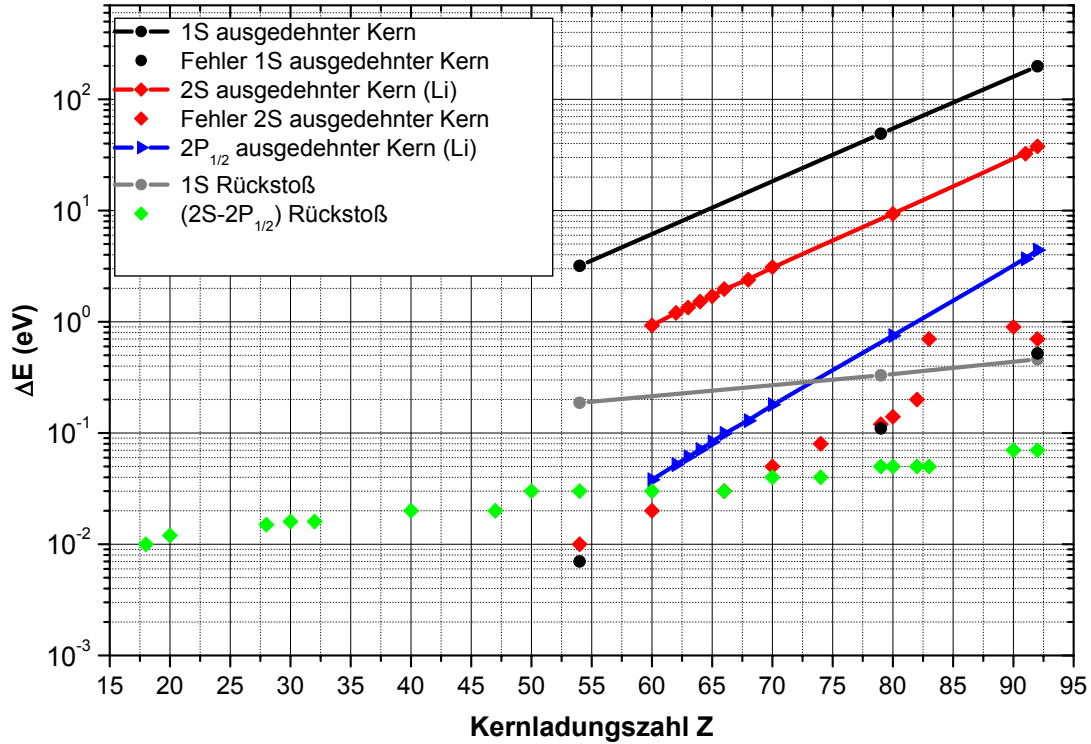


Abbildung 2.7: Korrekturen durch Kerneffekte verschiedener Niveaus. Die Korrektur auf Grund eines ausgedehnten Kerns für die Niveaus $2S$ und $2P$ sind bezogen auf Li-artige Niveaus, der Unterschied zum reinen H-artigen Ion sollte marginal sein. In grün ist der Beitrag des Rückstoßes auf den Li-artigen Übergang $2^2S_{1/2} - 2^2P_{1/2}$ gegeben.

lungen im H-artigen Ion in α (durchgeführt bis $\mathcal{O}(\alpha^2)$, $Z\alpha$ (möglichst in allen Ordnungen) und m_e/M_K bei den Kerneffekten [durchgeführt bis $\mathcal{O}((m_e/M_K))$] hinzutritt. Die Effekte durch die K-Schalen Elektronen lassen sich in zwei Teile dividieren. Zum einen können sie direkt mit dem L-Schalen Elektron durch Austausch von einem ($\mathcal{O}(\alpha)$), zweier ($\mathcal{O}(\alpha^2)$) oder mehr virtuellen Photonen ($\mathcal{O}(\alpha^n)$) wechselwirken. Oder sie modifizieren die Wechselwirkung der H-artigen Strahlungs- und Kerneffekte (Rückstoß, Polarisation), was in einer klassischen Betrachtung als Abschirmung zu bezeichnen wäre.

Inter-Elektron-Wechselwirkung: Zur Analyse der Inter-Elektron-Wechselwirkung gilt es ein Viel-Elektronen-Problem zu lösen. Typische Verfahren der Atomphysik sind hierzu, das auf dem Variationsansatz basierende *Multi-Configuration-Hartree-Fock* Verfahren (MCHF) und das perturbative *Many-Body Perturbation Theory* Verfahren (MBPT) [78, 79].

Die einfachste Inter-Elektron-Wechselwirkung zwischen zwei gebundenen Elektronen ist in Abb. 2.8 (a) dargestellt und besteht im Austausch eines Photons. Die Wechselwirkung ist damit von Ordnung $\mathcal{O}(\alpha)$. Gezeigt ist ferner die niedrigste Ordnung dieser Wechsel-

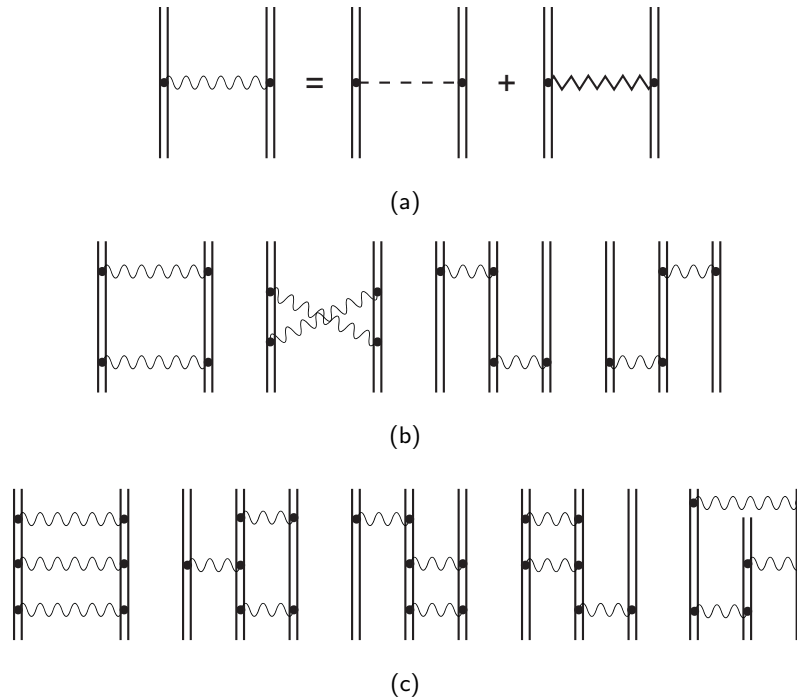


Abbildung 2.8: (a) Ein-Photonenaustausch gebundener Elektronen mit Darstellung der Breit-Näherung. Feynman-Diagramme der Inter-Elektronen-Wechselwirkung, (b) durch Zwei-Photonen-Wechselwirkung, (c) mit drei Photonen.

wirkung in Coulomb-Eichung. Diese Zerlegung ist als Breit-Näherung bekannt. Der erste Summand symbolisiert die Coulombwechselwirkung durch Austausch eines skalaren Photons, der zweite Summand stellt die Breit-Wechselwirkung durch Austausch eines transversalen Photons (magnetische Wechselwirkung) dar.

Die nächst höhere Ordnung bilden die Zwei-Photonen-Prozesse, deren Feynman-Diagramme in Abb. 2.8 (b) dargestellt sind. Die Anzahl der zu berechnenden Diagramme erhöht sich dadurch, dass die vorhandenen Elektronen über die Doppellinien zu permutieren sind. Auch Beiträge der Diagramme des Drei-Photonenaustauschs wurden berechnet, welche in Abb. 2.8 (c) zu finden sind. Auch hier muss permutiert werden.

Der Fortschritt theoretischer Berechnungen ist so weit gedungen, dass das Diagramm in Abb. 2.8 (a) exakt ohne Näherung berechnet werden kann. Ferner liegen auch für die Zwei-Photonen-Diagramme bezüglich Elektronen des $n = 2$ Niveaus in Li-artigen Systemen strenge QED Berechnungen vor [80–83]. Der Drei-Photonenaustausch nach Abb. 2.8 (c) wird derzeit nur in der Breit-Näherung in Anlehnung an Abb. 2.8 (a) berechnet und damit zur Ordnung $\mathcal{O}(\alpha^3(Z\alpha)^2m)$ [84]. Eine umfassende Berechnung der Inter-Elektronen-Wechselwirkung zu zahlreichen Z wird von Yerokhin [85] gegeben.

K-Schalen Abschirmung von Selbstenergie und Vakuumpolarisation: Die Feynman-Diagramme der Abschirmung der Vakuumpolarisation durch die besetzte K-Schale sind in Abb. 2.9 abgebildet. Es sind Prozesse der Ordnung $\mathcal{O}(\alpha^2)$. Die Wechselwirkung lässt

2.2. Beiträge zur Bindungsenergie in hochgeladenen Wenig-Elektronen Ionen

sich in zwei Teile aufspalten, die Korrektur der Vakuumpolarisation der $1s$ Elektronen untereinander (in (a)) und die Abschirmung durch Wechselwirkung des Leuchtelektrons (rot) mit der K-Schale als Ganzes (in (b)) [86, 87].

Die Zwei-Elektronen Selbstenergie spaltet sich analog der Vakuumpolarisation in einen Anteil der Wechselwirkung unter den K-Schalen Elektronen und einen zwischen Valenzelektron und K-Schale auf [88, 89]. In Abb. 2.9 (c) ist nur der einfache Satz der Diagramme dargestellt, der mit Abb. 2.9 (b) vergleichbare Satz wird nicht gezeigt.

Feynman-Diagramme der Ordnung $O(\alpha^2)$ oder höher bezüglich der Abschirmung von Selbstenergie und Vakuumpolarisation konnten bis dato noch nicht berechnet werden [90].

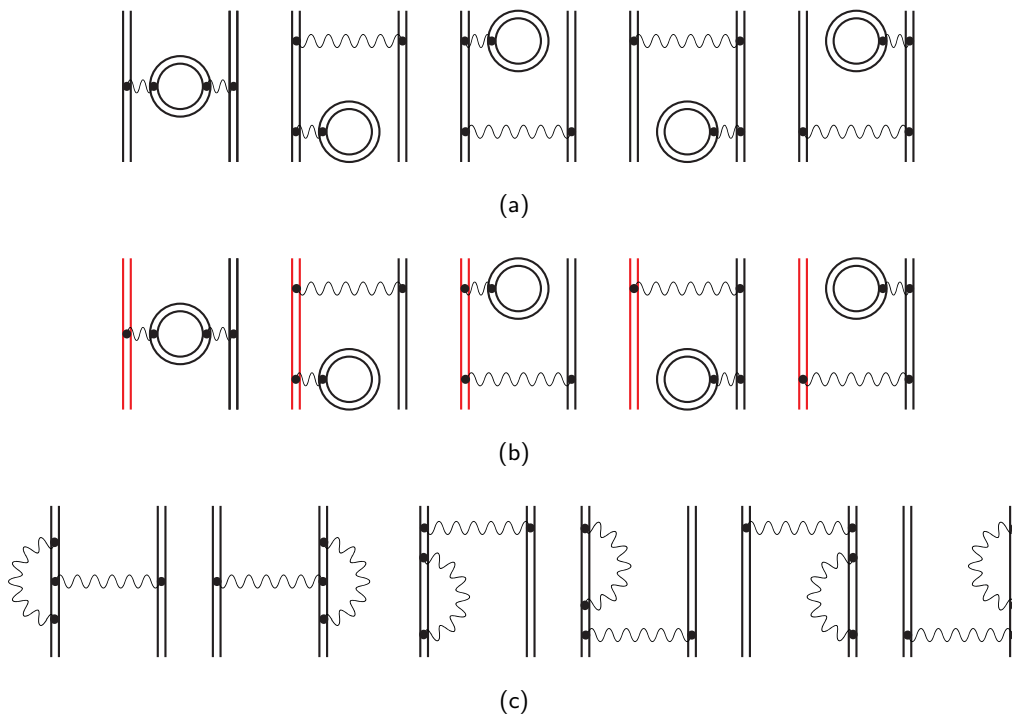


Abbildung 2.9: Feynman-Diagramme der Zwei-Elektronen Korrekturen der (a) Vakuumpolarisation innerhalb der K-Schale, (b) zwischen K-Schale und Valenzelektron (rot) und (c) der Selbstenergie innerhalb der K-Schale. Es fehlt die Darstellung der Korrektur der Selbstenergie durch Wechselwirkung zwischen K-Schale und Valenzelektron.

Allgemein lässt sich zusammenfassen, dass die bisher vorgestellten Korrekturen die einzelnen Elektronenniveaus betreffen und diese individuell auf der Energieachse verschieben. Die Spektroskopie von Übergängen zwischen diesen verschobenen Niveaus ist daher bestens geeignet, die entsprechenden Korrekturen zu bestimmen. Abb. 2.10 zeigt die verschiedenen Beiträge zur Übergangsenergie des Übergangs $1s^2 2s \ ^2S_{1/2} - 1s^2 2p \ ^2P_{1/2}$ in Li-artigen Ionen in Abhängigkeit von der Kernladungszahl Z . Ähnlich geeignet wäre der Übergang $1s^2 2s \ ^2S_{1/2} - 1s^2 2p \ ^2P_{3/2}$. Abb. 2.11 lässt sich die $2 \ ^2S_{1/2} - 2 \ ^2P_{1/2}$ Übergangsenergie als Funktion von Z , sowie die dazu relativen QED-Beiträge entnehmen.

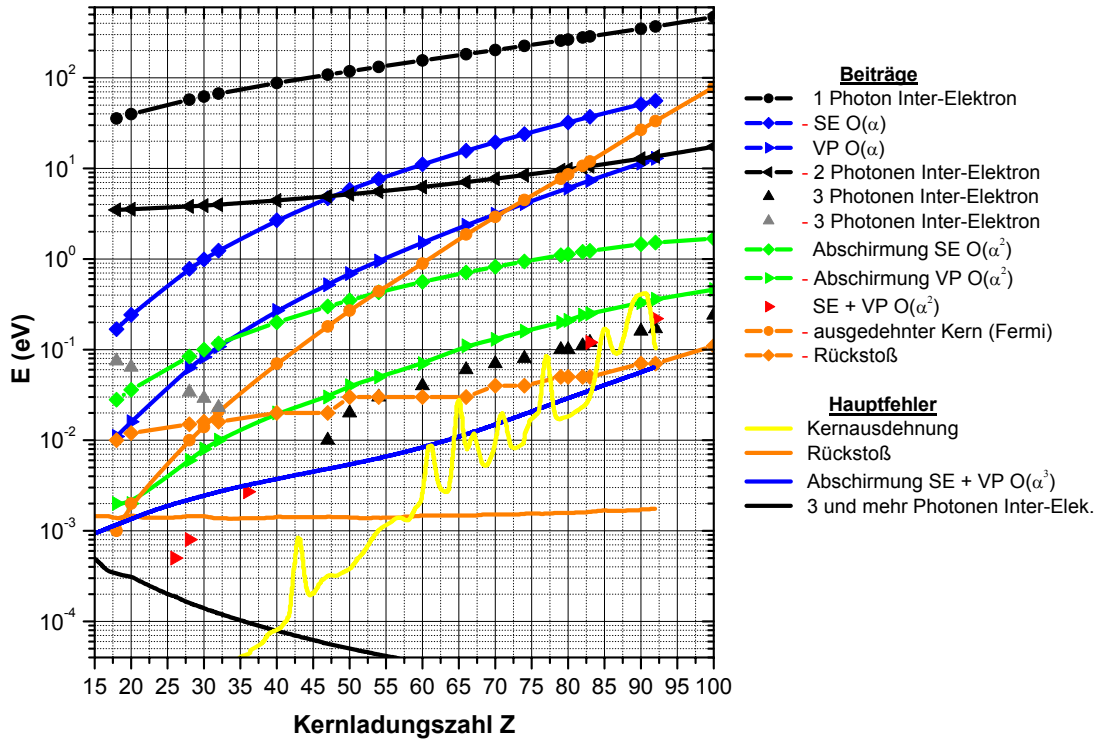


Abbildung 2.10: Theoretische Beiträge und deren Fehler zur Übergangsenergie $1s^2 2s^2 S_{1/2} - 1s^2 2p^2 P_{1/2}$ als Funktion der Kernladungszahl in Li-artigen Ionen. Datenpunkte sind, wenn möglich, zur besseren Visualisierung interpoliert und entnommen aus [69,74,85,88,90]. Beiträge, die in der Legende mit einem (roten) Minus versehen sind, gehen negativ ein. Die Drei-Photonen Wechselwirkung zeigt einen Nulldurchgang.

Ausgangspunkt der Überlegungen dieses Kapitels war die Entartung des $2S_{1/2}$ und $2P_{1/2}$ Niveaus gemäß der Dirac-Theorie in H-artigen Systemen. Bereits die Berücksichtigung einer ausgedehnten Kernladung, mitnichten ein QED-Effekt, führt zur Aufhebung der Entartung. Gemäß Abb. 2.10 verringert die ausgedehnte Kernladung (orange) die Übergangsenergie. Wichtigster Beitrag zur Energiedifferenz der beiden Zustände ist die, mittels eines virtuellen Photons vermittelte, Wechselwirkung der Elektronen untereinander. Die Elektronenwechselwirkung sorgt ja auch bereits bei neutralem Li für eine Aufhebung der Entartung um circa 1.8 eV. Dazu addieren sich die weiteren in Abb. 2.10 aufgeführten Korrekturen, die als Differenz $\Delta E(2s) - \Delta E(2p_{1/2})$ der Korrekturen der einzelnen Niveaus eingehen.

Für genaue experimentelle Tests der Voraussagen der QED sind die Fehler in den Rechnungen entscheidend. Abb. 2.10 zeigt daher auch die Hauptfehlerquellen. Für hohe Z ist die Unkenntnis der Kernaussdehnung der entscheidende Fehlerbeitrag, hier genügt es nicht nur den RMS (engl. *Root Mean Square*, d.h. die Wurzel der mittleren quadratische Abweichung) Radius des Kerns zu kennen, sondern auch die Kenntnis höherer Momente der Verteilung sind wichtig. Die Abschätzung des Fehlers beruht im wesentlichen auf der Dif-

2.2. Beiträge zur Bindungsenergie in hochgeladenen Wenig-Elektronen Ionen

ferenz der beiden Kernmodelle des homogen geladenen Kerns und der geladenen Schale. Der Fehler im Rückstoß des Kerns ist ein weiterer Kerneffekt, der in den Fehler eingeht. Die Korrektur des Rückstoßes durch die Elektron-Elektron-Wechselwirkung wird derzeit für Ordnungen $\mathcal{O}(1/Z)$ und höher nur nichtrelativistisch in die Theorie eingebracht [90]. Der dominierende Fehler für mittlere Z besteht in der nicht Berücksichtigung höherer Abschirmeffekte der Strahlungskorrekturen (blau). Diese können nur durch Abschätzungen gewonnen werden [85]. Darüber hinaus gilt es, Fehler in der Berechnung der Drei-Photonen Inter-Elektron-Wechselwirkung (schwarz) abzuschätzen, die noch nicht in voller QED Behandlung analysiert wurde, sondern bisher nur über MBPT [85]. Tab. 2.1 fasst einzelne Beiträge zu Übergangsenergien $1s^2 2s^2 S_{1/2} - 1s^2 2p^2 P_{1/2}$ und $1s^2 2s^2 S_{1/2} - 1s^2 2p^2 P_{3/2}$ an einigen Beispielsystemen zusammen.

| Korrektur | $1s^2 2s^2 S_{1/2} - 1s^2 2p^2 P_{1/2}$ | | | $1s^2 2s^2 S_{1/2} - 1s^2 2p^2 P_{3/2}$ | | |
|---|---|-------------|------------|---|--------------|------------|
| | $Z = 26$ | $Z = 36$ | $Z = 92$ | $Z = 26$ | $Z = 47$ | $Z = 83$ |
| Inter-Elektron-W.W. | 49.1031(5) | 72.8013(6) | 322.33(10) | 65.0333(5) | 307.1988(16) | 2814.39(3) |
| $\mathcal{O}(m_e \alpha(Z\alpha))$ | | | | | | |
| QED $\mathcal{O}(m_e \alpha(Z\alpha)^4)$ | -0.5565 | -1.6859 | -42.93 | -0.5119 | -3.7439 | -27.48 |
| Abschirmung QED $\mathcal{O}(m_e \alpha^2(Z\alpha)^3)$ | 0.0649(20) | 0.1433(32) | 1.16(3) | 0.0551(17) | 0.2316(39) | 1.15(4) |
| Rückstoß $\mathcal{O}(m^2/M_K(Z\alpha)^2)$ | -0.0121(19) | -0.0163(18) | -0.07 | -0.0123(20) | -0.0243(19) | -0.07 |
| QED $\mathcal{O}(m_e \alpha^2(Z\alpha)^5)$ | | | | | | |
| SESE | 0.0004(1) | 0.0022(4) | 0.296(3) | 0.0003(1) | 0.0072(20) | 0.145(4) |
| SEVP | -0.0002 | -0.0008 | -0.187 | -0.0002 | -0.0032 | -0.095 |
| VPVP | 0.0004 | 0.0015(1) | 0.136(46) | 0.0004 | 0.00478(5) | 0.083(25) |
| S(VP)E | -0.0001 | -0.0002(2) | -0.022(45) | -0.0001 | -0.0007(7) | -0.012(24) |
| Kernpolarisation $\mathcal{O}(m_e^2/M_K(Z\alpha)^2)$ | | | 0.04(2) | | | |
| Summe | 48.6000(28) | 71.2451(37) | 280.75(14) | 64.5647(26) | 303.6704(52) | 2788.12(7) |

Tabelle 2.1: Beiträge in eV zur $1s^2 2s^2 S_{1/2} - 1s^2 2p^2 P_{1/2}$ Übergangsenergie für Eisen, Krypton, Uran, sowie zur $1s^2 2s^2 S_{1/2} - 1s^2 2p^2 P_{3/2}$ Übergangsenergie für Eisen, Silber und Bismut. SESE bezieht sich auf die Diagramme Abb. 2.8 (a), SEVP sind alle Diagramme Abb. 2.8 (b,c) bis auf das vorletzte in (c) welches als S(VP)E bezeichnet ist (Quelle: [69, 85]).

2.2.4 Lamb-Shift und QED in hochgeladenen Mehr-Elektronen Ionen

Die nächst komplexen Mehr-Elektronen Ionen stellen die berylliumartigen Systeme dar. Sie sind die einfachsten HCIs mit zwei abgeschlossenen Unterschalen. Die Inter-Elektronen-Wechselwirkung setzt sich hierbei zusammen aus einer Wechselwirkung innerhalb der Schalen, wie bei He-artigen Ionen, und einer Wechselwirkung zwischen den Schalen, ähnlich Li-artiger Ionen. Die Schwierigkeiten der Beschreibung He-artiger und Li-artiger Ionen vereinigen sich in der theoretischen Betrachtung Be-artiger Systeme. Im Gegensatz zu den hochgeladenen Li-artigen Ionen sind die theoretischen Beschreibungen daher bis dato nicht in solch rigoroser QED Formulierung ausgeführt worden.

Relativistische Beschreibungen der Inter-Elektronen-Wechselwirkung wurden mittels MCDF (*Multi-Configuration-Dirac-Fock*), MBPT und *configuration-interaction* (CI) Methoden durchgeführt. Akkurate MCDF Berechnungen, in diesem Fall nicht-relativistisch, wur-

den für Be-artiges Eisen mittels $1/Z$ Entwicklung in [91] durchgeführt. Voll relativistische MCDF-Methoden werden in [92] für Fe XXIII und Mo XXXIX angesetzt. Über Berechnungen mittels MBPT Ansatz, gleichfalls für Fe XXIII und Mo XXXIX, wird in [93] berichtet. Sehr genaue MBPT Resultate für einen weiten Z Bereich finden sich in [94]. Dort wird die Inter-Elektron-Wechselwirkung in Störungsrechnung bis zweiter Ordnung Breit-Näherung ausgeführt, außerdem finden QED-Korrekturen Eingang.

Abb. 2.11 zeigt die Übergangsenergie zweier Grundzustandsübergänge innerhalb der $n = 2$ Schale in Be-artigen Ionen als Funktion der Kernladungszahl. Des Weiteren ist der QED-Anteil dieser Übergänge (rot) dargestellt. Wie zu sehen stehen die Be-artigen Systeme den Li-artigen bezüglich hoher QED-Anteile um nichts nach, teilweise sind diese in Übergängen in Be-artigen Ionen höher. Durch die Inter-Elektron-Wechselwirkung sind diese hervorragend geeignet, relativistische Effekte zu studieren. Abb. 2.12 zeigt die Übergänge aus Abb. 2.11 im Kontext des Termschemas dieser Ionen⁵. In den iso-elektrischen Sequenzen der B-, C-, N-artigen usw. Reihen nehmen die QED-Anteile immer mehr ab [95].

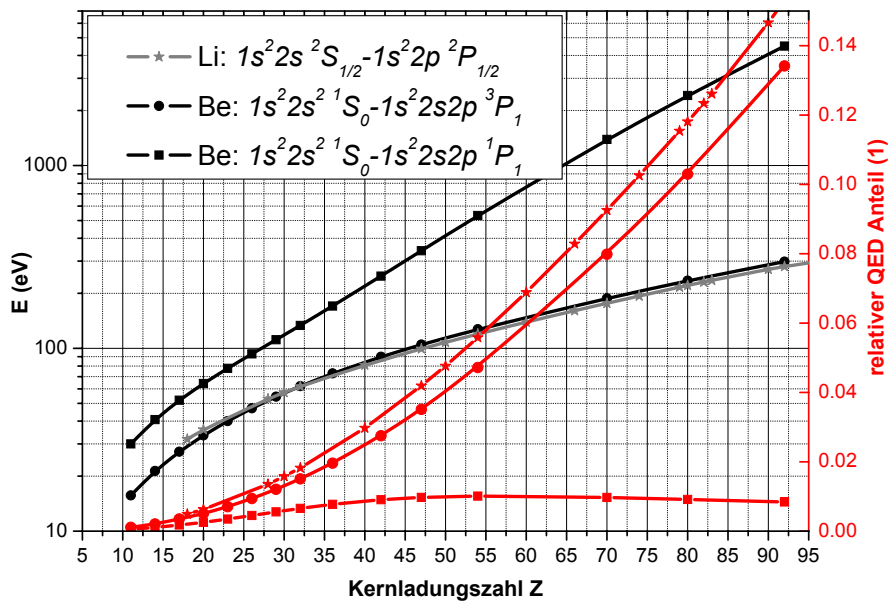


Abbildung 2.11: Übergangsenergie (schwarz) und relativer QED-Anteil $\Delta E/E$ (rot) an der Übergangsenergie als Funktion von Z für den Li-artigen Übergang $2 \ ^2S_{1/2} - 2 \ ^2P_{1/2}$ sowie für zwei Grundzustandsübergänge in Be-artigen Ionen.

⁵Skalierung ist dem Be-artiges Eisen nachempfunden.

2.2. Beiträge zur Bindungsenergie in hochgeladenen Wenig-Elektronen Ionen

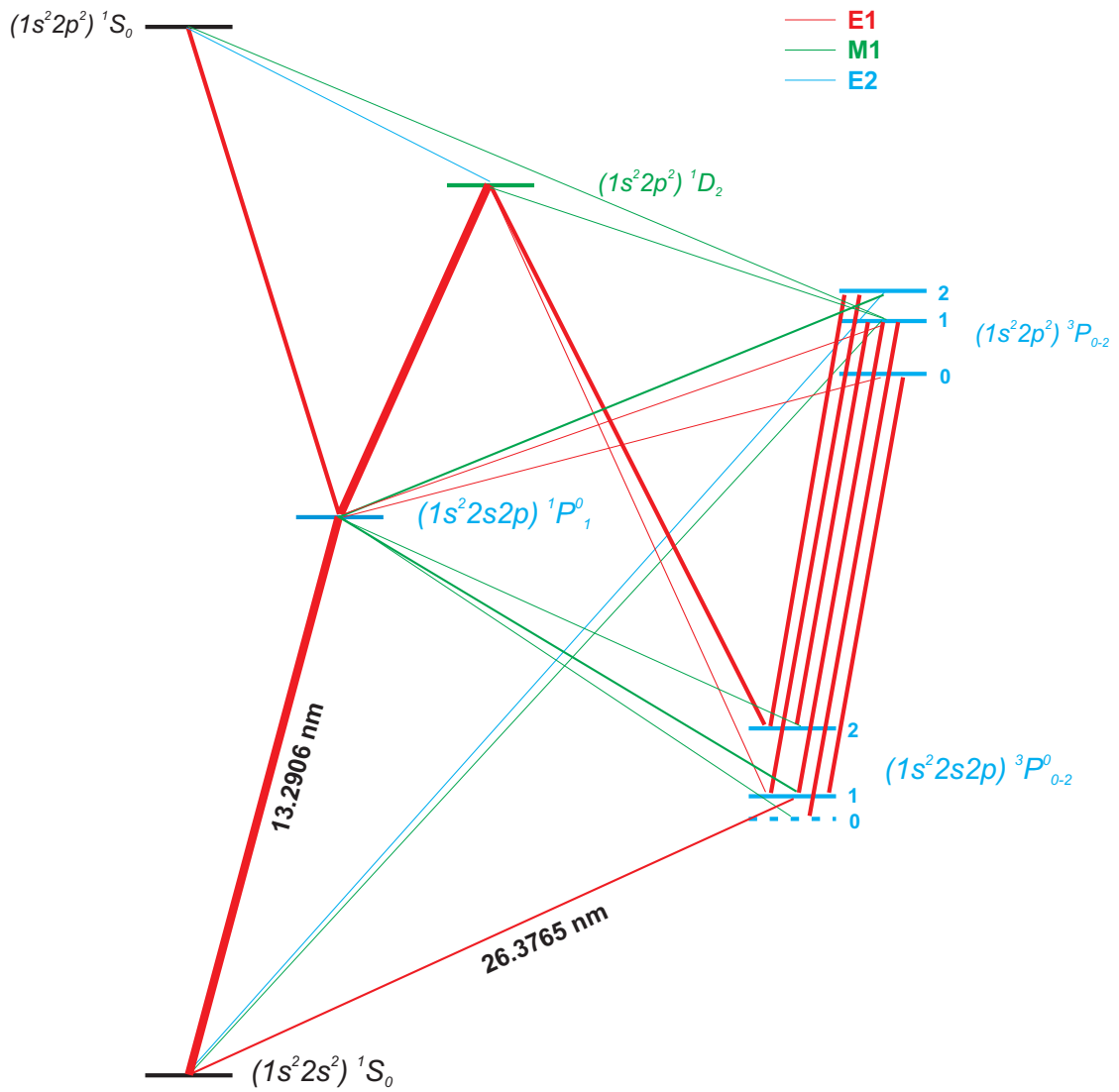


Abbildung 2.12: Typisches Termschema Be-artiger Ionen. Die Wellenlängen sind für Be-artiges Eisen angegeben (Quelle: [96]).

Kapitel 3

Eine kryogene EBIT neuester Generation

Auf den folgenden Seiten werden Prinzip und Physik der EBIT erläutert, sowie eine Übersicht über die physikalischen Prozesse in einem solchen Apparat gegeben. Augenmerk soll dabei vornehmlich auf die Prozesse gelegt werden, die in Verbindung zu dieser Arbeit stehen. Ein anderer Themenkomplex wird die Vorstellung der hier gebauten und auch in nicht unbedeutenden Teilen entwickelten EBIT sein.

Eine EBIT erzeugt und speichert hochgeladene Ionen in einem zylindrischen Volumen von der Dimension eines menschlichen Haares mit ein paar Zentimeter Länge. Sie ist ein *table top* Werkzeug zur Untersuchung von HCIs und deren Wechselwirkung. Ihr historischer Ahne ist die EBIS (engl. *Electron Beam Ion Source*), erfunden und erstmals betrieben in Dubna durch Donets et. al. [97] im Jahre 1969. Hierbei handelt es sich primär nicht um ein Werkzeug zur Speicherung von Ionen, sondern die sonst gleichen Techniken wie später bei der EBIT führen zum Betrieb als Ionenquelle.

Die erste EBIT wurde 1986 unter der Regie von Levine et. al. [98] am Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL) in Betrieb genommen. Das Nachfolgemodell, bekannt als Super-II, war Konstruktionsvorbild für drei weitere EBIT-Apparaturen (NIST, Oxford, Berlin). Eine am LLNL später in Betrieb genommene Hochenergieversion (Super-EBIT) war Vorlage für die Tokio-EBIT. 1999 nahm die Freiburg-EBIT ihren Betrieb auf. Diese Maschine war eine komplette Neuentwicklung¹. Eine Übersicht über die im Betrieb befindlichen Maschinen, sowie über die mit dieser Technologie verbundenen Schlüsselexperimente sei auf einen späteren Zeitpunkt verschoben. Für einen kurzen historischen Abriss über EBIS/T sei auf [99] verwiesen.

Bezüglich anderer Techniken zur Speicherung hochgeladener Ionen, wie z.B. Paul- und Penningfallen oder Speicherringe sei [100] empfohlen.

¹Höherem Magnetfeld und Stromstärke stand ein geringerer Heliumverbrauch gegenüber.

3.1 EBIT Grundlagen

Dieser Abschnitt beschreibt Aspekte der EBIT Maschinenphysik und folgt dabei hauptsächlich den hervorragenden Darstellungen in [101–104].

In Anlehnung an Abb. 3.1 nutzt man bei einer EBIT einen magnetisch komprimierten, nahezu monoenergetischen Elektronenstrahl aus einer Kathode, um Atome und dann Ionen sequentiell durch Elektronenstoß zu hohen Ladungszuständen zu ionisieren. Die hierfür nötige Energie erhalten die Elektronen durch eine entsprechende Potentialdifferenz zwischen Kathode und Falle.

Während die Elektronen im Fallenzentrum ein hohes, von außen angelegtes Magnetfeld, bei manchen EBITs bis zu 8 T, erfahren, wird darauf geachtet, dass selbige am Ort ihrer Entstehung² an der Kathode, kaum oder keinem Magnetfeld ausgesetzt sind. Wegen der Drehimpulserhaltung im Magnetfeld, verringert der Strahl seine radiale Ausdehnung auf dem Weg zur Fallmitte erheblich. Im Fallenzentrum sind Strahldurchmesser im Bereich von 100 μm typisch.

Der Elektronenstrahl sorgt, neben der Ionisation, durch seine negative linienförmige Raumladung dafür, dass die positiven Ionen radial an das Fallenzentrum gebunden werden. Da die radiale Dimension der Ionenwolke mit der radialen Dimension des Elektronenstrahls korreliert, führt die erzwungene Kompression des Strahls zu einer effektiven Erhöhung der Target- und Projektilsdichte, so ist effektive Ionisation möglich.

Um ein axiales Entkommen der erzeugten Ionen zu verhindern, genügt es die beiden Fallränder mittels Ringeletroden elektrisch positiver als das Zentrum zu betreiben, um so die Ionen axial in ein Kastenpotential zu sperren.

Der Protagonist in einer EBIT ist zweifelsfrei der Elektronenstrahl. Die wichtigsten Eingangsparameter für dessen Verhalten sind das Magnetfeld in der Fallmitte B_{Falle} und die Beschleunigungsspannung ΔU_{acc} zwischen Kathode und Falle. Starken Einfluss haben

²Von etwa 3 mm Ausdehnung.

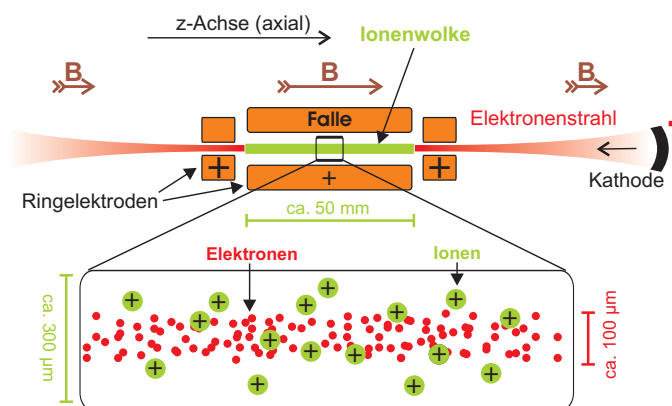


Abbildung 3.1: Funktionsprinzip der EBIT. Der Darstellung liegt eine Rotationssymmetrie um die z-Achse zugrunde. Beschreibung siehe Text.

auch sehr technische Parameter die Kathode betreffend, so dass es günstig erscheint, die genaueren Umstände des Elektronenstrahls im Zuge der Präsentation der gebauten EBIT zu beleuchten. An dieser Stelle ist es ausreichend, sich zu vergegenwärtigen, dass die Spannungsdifferenz ΔU_{acc} natürlich für eine korrespondierende Energie E_{kin} des Strahls sorgt. Dieses E_{kin} definiert den maximal erreichbaren Ladungszustand für jedes Element. Abb. 3.2 stellt die Mindestenergie als Funktion der Kernladungszahl des Ausgangsatoms dar, um ein H-artiges, Li-artiges und ein Ne-artiges Ion, in anderen Worten deren iso-elektronische Sequenz, zu erzeugen.

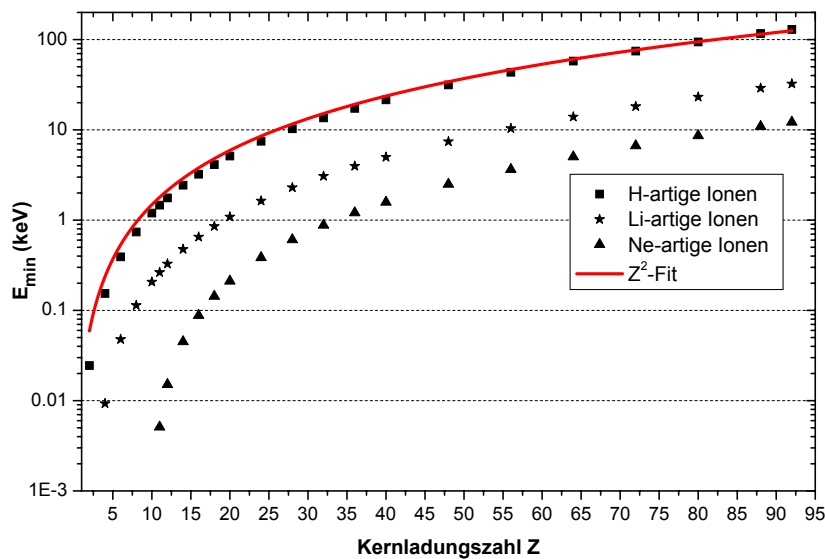


Abbildung 3.2: Mindestenergie des Elektronenstrahls zur Erzeugung H-artiger, Li-artiger und Ne-artiger Ionen verschiedener Kernladungszahl Z . Ein Z^2 -Fit zeigt ein quadratisches Verhalten der Mindestenergie.

3.1.1 Die Ionenwolke und ihre Wechselwirkung mit dem Elektronenstrahl

Die Länge der Ionenwolke, die sich um den Elektronenstrahl bildet, ist direkt durch den Abstand der beiden äußeren Fallenelektroden (Abb. 3.1) bestimmt und liegt typischerweise, je nach EBIT, zwischen 20 und 60 mm³. Radial ordnen sich die Ionen symmetrisch um den Elektronenstrahl. Ihre Ausdehnung in diese Richtung ist unter anderem verknüpft mit der elektrostatischen Anziehung, die der Elektronenstrahl entfaltet und wird in Kap. 3.2.2 diskutiert. Durchmesser wenigen 100 μm sind typisch.

Die Ionenwolke in einer EBIT kann als eine Überlagerung von mehreren Wolken von Ionen mit unterschiedlichen Ladungszuständen dargestellt werden. So ordnet man separat der Menge $N_{A,i}$ aller Ionen $A^{(i)+}$ eines Ladungszustandes i einer Atomsorte A eine eigene

³Fallenlängen bis 300 mm sind möglich.

Ionenwolke spezifischer Parameter zu. Ein Ion trägt die Ladung $Q_{A,i} = i e$.

Radiale und axiale Bewegung der Ionen werden in guter Näherung als entkoppelt angenommen. Die axiale Dichteverteilung eines Ladungszustandes wird als homogen angenommen. Für die radiale Dichteverteilung $\rho(r; N_{A,i})$ errechnet sich eine „Höhenformel“

$$\rho(r; N_{A,i}) = \rho(0; N_{A,i}) \exp \left[-\frac{Q_{A,i} V_{ges}(r)}{kT_{A,i}} \right], \quad (3.1)$$

wobei V_{ges} das gesamte Potential ist, das ein einzelnes Ion spürt, hervorgerufen durch äußere Spannungen auf den Elektroden sowie durch die Ladung von Elektronenstrahl und Ionenwolke selbst. $T_{A,i}$ entspricht der Zuordnung einer Temperatur bezüglich jedes Ladungszustandes i einer Atomspezies A, da hier kein lokales thermisches Gleichgewicht herrscht.

Die durch die Temperatur mitbestimmte Ausdehnung einzelner Ladungszustände führt zur Definition von so genannten Überlappfaktoren $f_{A,i}$, die den Anteil der Ionen eines Ladungszustandes, welcher sich innerhalb des Elektronenstrahls befindet, zu der Anzahl der Ionen dieses Ladungszustands in der gesamten Ionenwolke angeben. Ionen innerhalb des Elektronenstrahls können an Prozessen wie Bremsstrahlung, Elektronenstoß–Ionisation (EI), Elektroneneinfang, im Speziellen radiative Rekombination (RR) und dielektronische Rekombination (DR), sowie Anregung von Schalenelektronen durch Elektronenstoß (EE) teilnehmen. Die rein elastische Streuung von Strahlelektronen ist in einer EBIT von geringer Wichtigkeit. Im Falle von Ion-Atom Stößen handelt es sich um einen Ladungsaustausch–Prozess (ET), der den Ladungszustand des Ions erniedrigt. Die Ion–Ion Stöße überwinden auf Grund der zu niedrigen typischen EBIT Temperaturen zwar nicht die Coulombbarriere, so dass Ladungsaustausch bei dieser Wechselwirkung keine Rolle spielt. Durch diese Wechselwirkung kommt es jedoch zu einer langsamen Diffusion der Ionen quer über Magnetfeldlinien hinweg, die auf Grund von Drehimpulserhaltung sonst nicht möglich wäre. Dies trägt entscheidend auch zum Raum bei, den die Ionen einnehmen. Das statische Magnetfeld ändert die Gesamtenergie der Teilchen nicht, daher ist die Physik in einer EBIT im Wesentlichen durch die elektrostatischen Felder dominiert⁴. Es gilt hier jedoch zu bemerken, dass es einen metastabilen rein magnetischen Fallenmodus gibt [105], mit dem man die Ionen auf Milli– bis Sekundenbasis ohne Elektronenstrahl und dessen Raumladungspotential gefangen halten kann. Letztendlich wird die radiale Expansion durch Diffusion die Ionen an den Fallenrand bringen. Tab. 3.1 gibt einen groben Überblick über einige typische Zeitskalen in einer EBIT.

Die häufigen Ion–Ion Stöße führen wieder zurück auf die Temperatur in einer EBIT, sorgen sie doch mittels langreichweitiger Coulombkraft dafür, dass sowohl Energie innerhalb der Ionen eines Ladungszustands ausgetauscht wird und sich so eine Temperatur $T_{A,i}$ einstellen kann, als auch für den Transfer von Energie zwischen Ionen verschiedener Ladungszuständen und Atomsorten, womit heiße $N_{A,i}$ Energie an kalte abgeben können. Es gibt eine Reihe von Prozessen, die Ladungszustände aufheizen, siehe hierzu speziell [103]. Die beiden wichtigsten sind:

⁴So taucht das Magnetfeld z.B. auch in Gl. (3.1) nicht auf.

3.1. EBIT Grundlagen

| radiale Bewegung | axiale Bewegung | Ion-Ion- Stoßfolge | B-Feld Diffusion | Erhöhung der Ionisation |
|---------------------|--------------------|-----------------------|---------------------|--------------------------------|
| einige ns | ≈ 100 ns | $\lesssim 100$ ns | ≈ 1 ms | 1 μ s–s (stark variierend) |

Tabelle 3.1: Typische Zeiten für Ionenprozesse in einer EBIT. Von links nach rechts nehmen die Zeiten zu. Die schnellste Bewegung bezogen auf die typische Distanz ist die radiale Bewegung. In der Zeit zwischen zwei Ionisationsprozessen läuft das Ion praktisch den ganzen Ortsraum seiner Wolke ab und wird dabei zahlreichen Stößen unterzogen. (Quelle: [104].)

- **Aufheizung durch den Elektronenstrahl:** Die Coulombwechselwirkung zwischen Elektronen und der Menge von Ionen eines Ladungszustand $N_{A,i}$ führt auf eine Stoßfrequenz die proportional $Q_{A,i}^2 e$ ist und somit diese die höher geladenen Ionen stärker heizt.
- **Ionisationsheizung:** Ein im Fallenpotential oszillierendes Ion mit Ladung $Q_{A,i}$, das an Stellen hohen äußeren Potentials weiter ionisiert wird ($Q_{A,i+1}$), wird auf dem Weg in ein Potentialminimum mehr kinetische Energie und damit letztendlich Temperatur aufnehmen, als es auf dem Weg zum hohen Potential, noch mit Ladung $Q_{A,i}$, dem System entzogen hatte. Dieser Energiegewinn kann dann auf weitere Stoßpartner übertragen werden.

Die Rate, mit der Ionen benachbarte Ladungszustände $N_{A,i+1}, N_{A,i}$ stoßen, ist proportional $Q_{A,i+1}^2 \times Q_{A,i}^2$, was eine starke Kopplung gerade zwischen den Ionen der hohen Ladungszustände i herstellt. Diese Kopplung sollte auch gut sein, denn auf Grund obiger Heizmechanismen kann man annehmen, dass je höher der Ladungszustand i ist um so heißer die Ionen dieses Zustands. Hohe Temperaturen sorgen jedoch dafür, dass Ionen aus $N_{A,i}$ mit hohem i weniger Zeit innerhalb des Elektronenstrahls verbringen und sich ihre Wolke im Raum ausdehnt. Die abnehmenden Überlappfaktoren sorgen für ein Abnehmen der Ionisation und anderer Stoßprozesse, gerade bei den interessanten hochgeladenen Spezies. Daher ist dringend auch ein Kühlmechanismus von Nöten.

Kühlung bringt allein schon die Tatsache, dass die Fallenkapazität begrenzt ist. Oberes Ende ist die totale Kompensation der Raumladung des Elektronenstrahls durch Ionen. Allerdings gibt das axial angelegte Potential, also die Tiefe des Potentialkastens, eine Obergrenze der Temperatur vor. Heiße Ionen haben irgendwann genug kinetische Energie den Kasten zu verlassen. Das Verdampfen des hochenergetischen Schwanzes der Temperaturverteilung der Ionen sorgt für evaporative Kühlung. Je flacher der Potentialtopf ist, desto kälter sind die Ionen in diesem Topf, freilich zum Preis einer geringeren Anzahl.

Grundsätzlich verlassen bevorzugt niedrige Ladungszustände evaporativ die Falle, was zunächst der Angabe entgegen spricht, dass die hochgeladenen Ionen die heißen sind. Da gilt es aber zu beachten, dass für das Gefangenhalten der Faktor $(Q_{A,i} V_{ges} / (kT_{A,i}))$ entscheidend ist und $Q_{A,i}$ groß ist eben gerade für höchst geladene Ionen. Dies lässt feststellen: In einer EBIT werden hohe Ladungszustände stärker gebunden und gefangen als niedrige.

Bei vielen Experimenten ist es günstig, die Kühlung dadurch weiter zu erhöhen, dass ein leichtes Element, etwa Neon, in die Falle injiziert wird und dort seiner Aufgabe als eva-

poratives Kühlgas nachgeht. Die Verringerung der Temperatur der übrigen Ionen kann hierbei von mehreren Größenordnungen sein.

3.1.1.1 Die Bewegungsgleichung eines Ions

Die Lösung der Bewegungsgleichung eines einzelnen Ions unter Vernachlässigung der übrigen eine Million Ionen wird in [103] behandelt. Ausgehend von der Lagrangefunktion in zylindrischen Koordinaten ergibt sich dort, dass der Winkel eine zyklische Variable darstellt und somit ihr zugehöriger Impuls eine Konstante der Bewegung bildet. Außerdem wird gezeigt, dass axiale und radiale Bewegung nur schwach gekoppelt sind und unter normalen Bedingungen getrennt betrachtet werden können. Das effektive radiale Potential nimmt das einer typischen Zentralkraft an, mit der typischen abstoßenden Drehimpulsbarriere. Die resultierenden Bahnen sind mannigfaltige Rosettenbahnen um das Fallenzentrum.

3.1.1.2 Die Stoßprozesse

Wie bereits erwähnt, gibt es eine große Anzahl von möglichen Stoßprozessen innerhalb der Falle. Die EBIT stellt ein dünnes Ionengas bereit, in dem praktisch nur Stöße von genau zwei Partnern eine Rolle spielen. Von Seiten der Maschinenphysik definiert die Ladungszustandsbillanz die entscheidende Frage, z.b.: Wie viele $N_{A,i}$ gibt es zu einem Zeitpunkt t ? Antworten darauf müssen die die Ladung ändernden Prozesse EI, RR, DR und der Ladungsaustausch im Rahmen von ET geben. Für die Spektroskopie ist RR, DR sowie außerdem EE von Interesse.

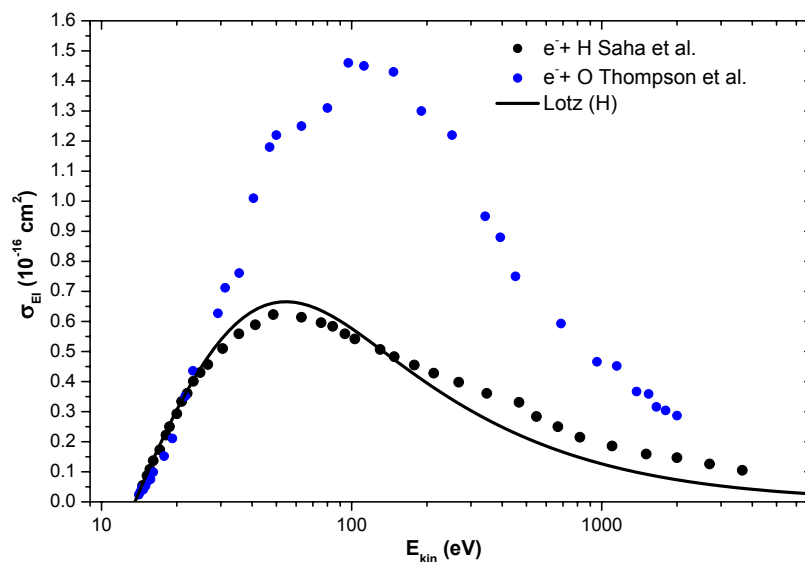


Abbildung 3.3: Wirkungsquerschnitt der Einfachionisation durch Elektronenstoß als Funktion der Elektronenenergie am Beispiel von Wasserstoff [106] und Sauerstoff [107]. Ferner sind die Datenpunkte der H-Ionisation über eine vereinfachte Formel von Lotz [108] genähert.

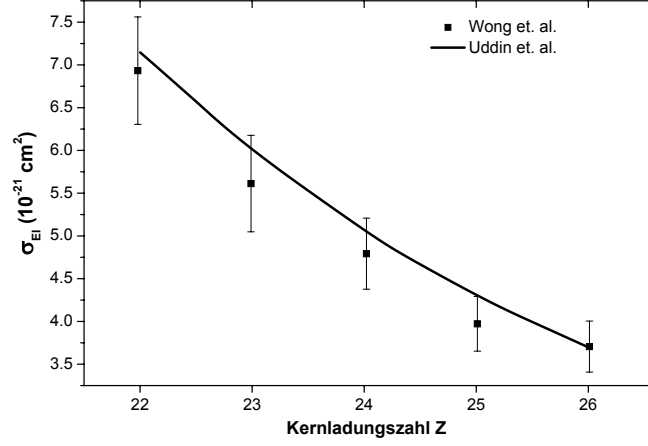
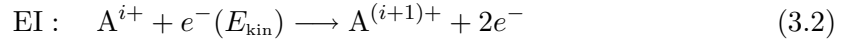


Abbildung 3.4: Wirkungsquerschnitt der Einfachionisation durch Elektronenstoß beim 2.3-fachen der Schwellenenergie I_p für die Li-artigen Ionen Ti^{19+} , V^{20+} , Cr^{21+} , Mn^{22+} und Fe^{23+} . Experiment [109], Theorie [110].

Elektronenstoßionisation (EI): Sobald die Elektronenenergie die Ionisationsenergie eines bestimmten Ladungszustandes überschreitet kann folgender Prozess stattfinden:



Von besonderem Interesse ist dabei die Energieabhängigkeit des Wirkungsquerschnitts $\sigma_{\text{EI}}(E_{\text{kin}})$ der Reaktion EI. Einen Einstieg bietet hierzu der Wirkungsquerschnitt für die Ionisation von Wasserstoff gemäß Abb. 3.3. Typisch für diese Wirkungsquerschnitte ist ein Maximum bei etwa dem zwei- bis dreifachen der Schwellenenergie und dann ein flacher Abfall mit der Energie. Dies sollte man aber nur auf Systeme mit sehr wenigen verbliebenen Elektronen anwenden. So zeigen beispielsweise Daten für die Einfachionisation von Sauerstoff, ebenfalls dargestellt in Abb. 3.3, dass obwohl es mit 13.6 eV die gleiche Schwellenenergie besitzt, das Maximum aber eher beim zehnfachen Wert zu finden ist⁵.

Eine semi-empirische Formel wurde von Lotz angegeben [108]:

$$\sigma_{\text{EI}}(E_{\text{kin}})[\text{cm}^2] = \sum_{j=1}^n a_j q_j \frac{\ln(E_{\text{kin}}/I_{p_j})}{E_{\text{kin}} I_{p_j}} \left[1 - b_j \exp(-c_j(E_{\text{kin}}/I_{p_j} - 1)) \right] \quad E_{\text{kin}} > I_{p_j} \quad (3.3)$$

Die Summe geht hierbei über alle voll- und teilbesetzten Hauptschalen j (K,L,M...), die Unterschalen bleiben unberücksichtigt. q_j nimmt gerade den Wert der Zahl der Elektronen in dieser Hauptschale an. I_p ist das Ionisationspotential und a_j, b_j, c_j sind Fitparameter und müssen für jedes Ion bestimmt werden. Das funktionale Verhalten des Wirkungsquerschnittes für die beiden Extremfälle $E_{\text{kin}} \rightarrow I_p$ und $E_{\text{kin}} \gg I_p$ ergibt sich mit $I_{p_1} = I_p$

⁵Dies Verhalten lässt sich durch indirekte Prozesse (Auger usw.) erklären, bei denen Innerschalenelektronen beteiligt sind.

nach Gl. (3.3) zu:

$$\sigma_{\text{EI}}(E_{\text{kin}} = I_p) \approx a_1 q_1 \frac{E_{\text{kin}}/I_p - 1}{I_p^2} (1 - b_1) \propto E_{\text{kin}}/I_p - 1 \quad (3.4)$$

$$\sigma_{\text{EI}}(E_{\text{kin}} \gg I_{p_j}) \approx a_j q_j \frac{\ln(E_{\text{kin}}/I_p)}{E_{\text{kin}} I_{p_j}} \propto \ln(E_{\text{kin}})/E_{\text{kin}}. \quad (3.5)$$

Für eine neuere Theorie sei z.B. auf [110] verwiesen. Dort finden sich auch Berechnungen zu Li-artigen Systemen. Abb. 3.4 zeigt die Wirkungsquerschnitte einiger Li-artiger Systeme beim 2.3-fachen des Ionisationspotentials, also nahe des Maximums. Entsprechend Abb. 3.4 fällt der maximale Wirkungsquerschnitt entlang der iso-elektronischen Sequenz mit steigendem Z . Bei der Ionisation von Fe^{23+} muss man mit einem Wirkungsquerschnitt zurecht kommen, der schon 4 Größenordnungen kleiner ist als der beim atomaren Wasserstoff.

Elektroneneinfang durch Ionen: Hierbei gilt es zwei Prozesse zu unterscheiden, die radiative Rekombination (RR) sowie die dielektronische Rekombination (DR).

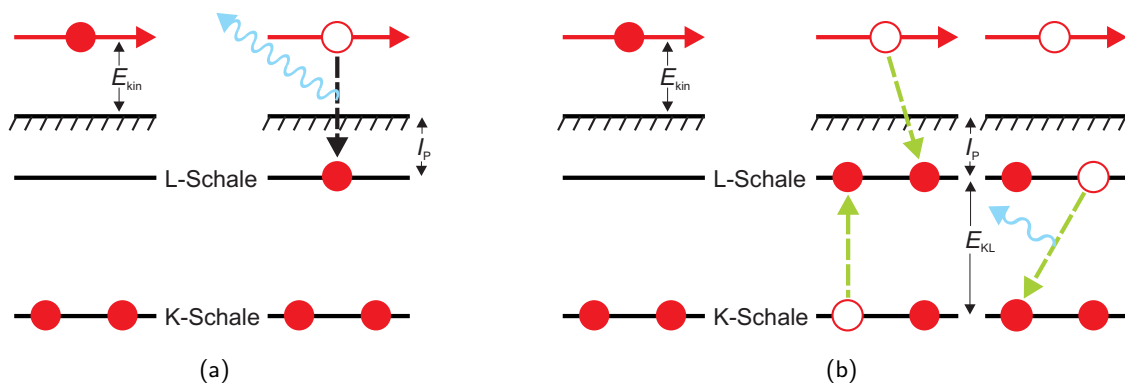
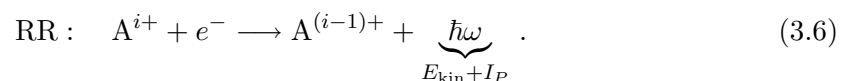


Abbildung 3.5: Schematische Darstellung der (a) radiative Rekombination und (b) dielektronische Rekombination am Beispiel eines He-artigen Ions.

Radiative Rekombination (RR): Bei RR handelt es sich um einen einfachen Einfangprozess. Gemäß Abb. 3.5 (a) passiert dabei Folgendes: Ein freies Elektron mit E_{kin} wird aus einem Kontinuumszustand in einen freien Schalenplatz eingefangen, hier in der L-Schale, dem die Bindungsenergie I_P zugerechnet werden kann. Die dabei frei werdende Energie wird als Photon abgestrahlt:



Diese Photonen haben immer eine um das Ionisationspotential höhere Energie als die kinetische Energie der Elektronen ($E_{\text{kin}} + I_P$). Die radiative Rekombination ist der direkte Umkehrprozess zur Photoionisation. Dies drückt sich auch in einer nach Milne benannten Relation aus, die basierend auf dem Prinzip des detaillierten Gleichgewichts die beiden

3.1. EBIT Grundlagen

Wirkungsquerschnitte in einer Proportionalität verknüpft [8].

Eine einfache Formel für den Wirkungsquerschnitt wurde von Bethe und Salpeter gegeben [111]:

$$\sigma_{\text{RR,H}}[\text{cm}^2] = 2.1 \times 10^{-21} \frac{Z^4 R_y^2}{n E_{\text{kin}} (Z^2 R_y + n^2 E_{\text{kin}})}, \quad \text{mit } R_y = 13.6 \text{ eV}. \quad (3.7)$$

Diese Formel wurde entwickelt für den Einfang in die Schale n bei nackten Ionen. Deren Anwendung auf jeweils drei unterschiedliche H-artige Ionen, sowohl nach $n = 1$, als auch $n = 2$, findet in Abb. 3.6 Darstellung. Die Wirkungsquerschnitte sind monoton fallend in der Energie und höher für den Einfang in freie tiefere Plätze.

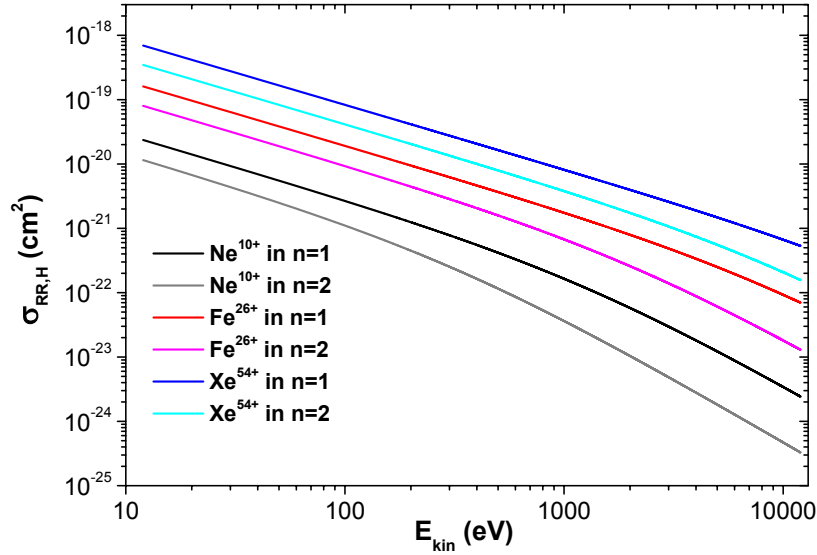


Abbildung 3.6: Typische Wirkungsquerschnitte für RR am Beispiel von H-artigem Ne, Fe und Xe.

Dielektronische Rekombination (DR): Im Gegensatz zu RR, stellt DR einen resonanten Prozess dar, siehe Abb. 3.5 (b). RR kann aus beliebigen Kontinuumszuständen des Elektrons stattfinden, hingegen muss bei DR gelten $E_{\text{kin}} + I_p = E_{\text{KL}}$. Im Beispiel des He-artigen Ions kann dann das freie Elektron in die L-Schale eingefangen werden und dabei resonant ein K-Schalen-Elektron in die L-Schale heben. Dieser intermediäre Zustand ist meist doppelt angeregt und kann autoionisierend strahlungslos zerfallen, oder aber unter Vollendung der DR radiativ in den Grundzustand übergehen. Es kommt zur typischen Emission eines energiereichen Photons, dessen Energie gerade E_{KL} entspricht.

Der energiedifferentielle Wirkungsquerschnitt der resonanten DR ist natürlich außerhalb der Resonanzen praktisch null. Als Anhaltspunkt beträgt die theoretische Halbwertsbreite einer typischen, starken Resonanz in He-artigem Fe^{23+} etwa 0.3 eV und der über die Resonanzkurve integrierte Wirkungsquerschnitt, die Resonanzstärke, beträgt $2 \times 10^{-19} \text{ eV cm}^2$. Dielektronische Resonanzen werden in Anlehnung an die Augernomenklatur mit 3 Buchstaben benannt: Der erste gibt die Schale an, aus der das Elektron angehoben wird. Im

Beispiel oben also K. Der zweite gibt an, in welchen Zustand selbiges angehoben wird. Der dritte in welchen Zustand das freie Elektron zunächst fällt. Abb. 3.5 (b) zeigt demnach eine KLL-Resonanz. Auch bedeutend sind beispielsweise die KLM-Resonanzen. Für eine tiefergehende Lektüre der DR möge man [112] heranziehen.

Elektronenstoßanregung (EE): Diese Prozesse sind essenziell für die Emissionsspektroskopie in einer EBIT und grundlegend für die in Kap. 4 durchgeführten Experimente. Ein Elektron des Strahls stößt dabei mit einem gebundenen Elektron eines Ions und hebt dieses in einen angeregten Zustand. Die dazu notwendige Energie muss selbstverständlich durch E_{kin} aufgebracht werden, so dass der Prozess erst bei ausreichender kinetischer Energie stattfinden kann.

In [113] lässt sich folgende Formel für den Wirkungsquerschnitt bei Li-artigen⁶ Ionen finden:

$$\sigma_{Z,nl,n'l'}(E_{\text{kin}}) = \pi a_0^2 \frac{\mathcal{E}_{nl,n'l'}(E_{\text{kin}})}{(Z - a_{nl,n'l'})^{(4-b_{nl,n'l'})}} \quad (3.8)$$

mit

$$\mathcal{E}_{nl,n'l'}(E_{\text{kin}}) = \frac{\eta_{nl,n'l'} \ln(E_{\text{kin}}) + \gamma_{nl,n'l'} + \frac{\delta_{nl,n'l'}}{E_{\text{kin}}} + \frac{\xi_{nl,n'l'}}{E_{\text{kin}}^2}}{E_{\text{kin}}}, \quad (3.9)$$

wobei n, l die Quantenzahlen des Ausgangszustands und n', l' die des Endzustands darstellen. Es gilt $2 \leq n \leq n' \leq 4$ und $6 \leq Z \leq 30$. $a, b, \eta, \gamma, \delta, \xi$ sind spezifische Parameter des Übergangs und in [113] tabelliert. Der Wirkungsquerschnitt besteht aus einem von der Elektronenenergie abhängigen Faktor \mathcal{E} und einem Teil, der eine Abhängigkeit von der Kernladungszahl aufweist. Da $Z > a$ und $4 \gg b$, skaliert dieser Teil etwa umgekehrt-proportional zum Quadrat der H-artigen Bindungsenergie für die höheren erlaubten Z . Abgesehen von $2s - 2p$ Übergängen sollte obige Formel auch bei höheren Z eine ausreichende Vorstellung über die Größenordnung des Wirkungsquerschnitts geben.

Abb. 3.7 zeigt am Beispiel von Fe^{23+} Wirkungsquerschnitte für Übergänge aus dem $1s^2 2s$ -Grundzustand für die beiden Monopolübergänge $2s-3s$ und $2s-4s$, die drei Dipolübergänge $2s-2p, 3p, 4p$, die beiden Quadrupolübergänge $2s-3d, 4d$ und den Oktupolübergang $2s-4f$. In (a) werden die Wirkungsquerschnitte als Funktion von Vielfachen der jeweiligen Übergangsenergie und in (b) als Funktion der absoluten kinetischen Energie des Elektrons dargestellt. Im Gegensatz zur Ionisation haben diese Wirkungsquerschnitte Maxima an der Schwelle und fallen im wesentlichen monoton mit der Energie. Der Wirkungsquerschnitt für $2s-2p$ überragt den anderer Übergänge deutlich. Optisch dipolverbotene Übergänge (z. B. $2s-3s$) erfahren in diesem Beispielsystem bei der Anregung durch Elektronenstoß bezüglich des Wirkungsquerschnitts eine deutlich geringere Diskriminierung relativ zum dipolerlaubten $2s-2p$ Übergang, als dies für die Wirkungsquerschnitte bei der Photoanregung für diese Übergänge der Fall ist.

⁶Eine ähnliche Formel für H-artige findet sich in [114]

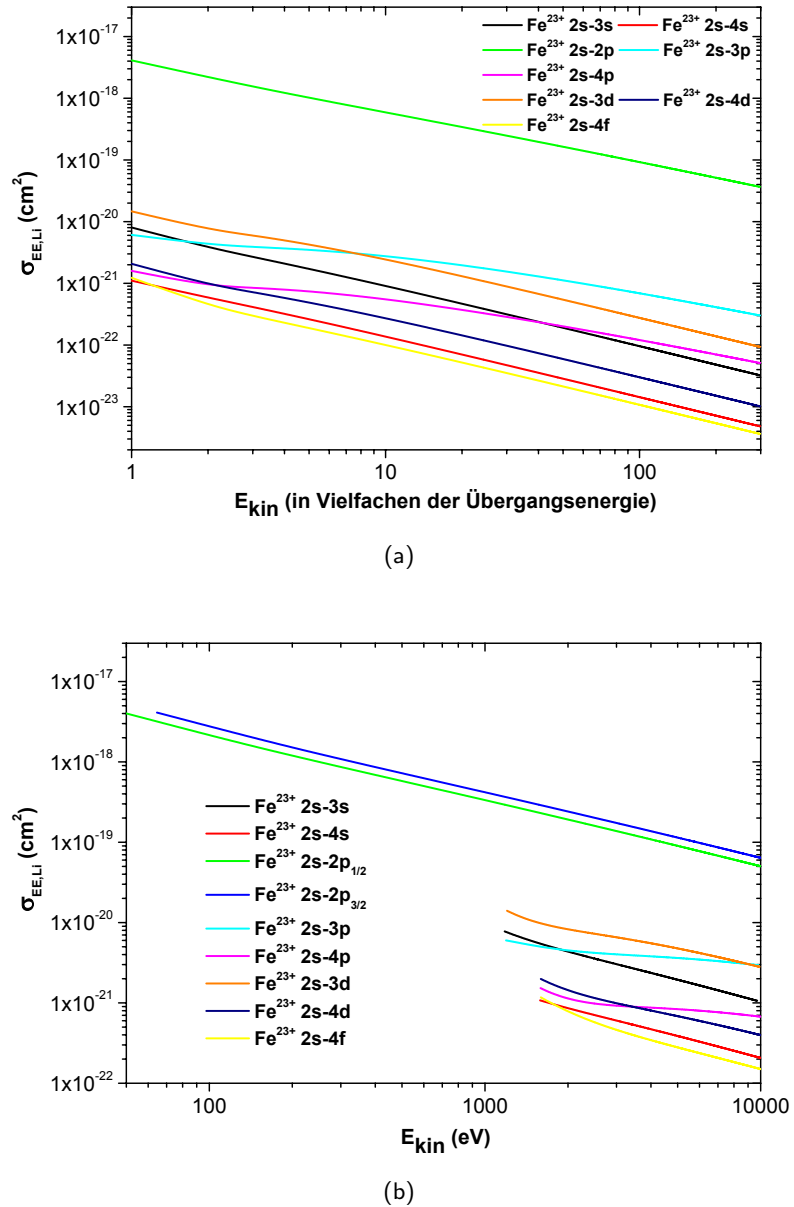
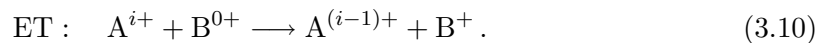


Abbildung 3.7: Wirkungsquerschnitte für Anregung durch Elektronenstoß in Fe^{23+} .

Ion-Atom Stöße (ET): Bei Ion-Atom Stößen können ein oder mehrere Elektronen des Atoms zum Ion überwechseln:



Bei kleinen Kollisionsgeschwindigkeiten, wie in einer EBIT, kann man sich den dominierenden Prozess so vorstellen, dass die Streupartner ein kurzlebige Quasimolekül bilden und das Elektron aus einer gemeinsamen Ladungswolke zum Ion überwechselt. Das Elektron

wird hierbei überwiegend in äußere Rydbergzustände transferiert. Eine einfache empirische Formel gibt Auskunft in welche Schale n_{ave} im Mittel der Einfang überwiegend stattfindet [103]:

$$n_{\text{ave}} = \frac{(i-1)^{0.75}}{\sqrt{I_b/13.6}}, \quad (3.11)$$

wobei i wieder den Ladungszustand angibt ($i = 1$ für neutral!) und I_b die Bindungsenergie des äußersten Elektrons von B^{0+} . n_{ave} ist im Besonderen unabhängig von der Kernladungszahl des Ions. Im Stoß von Fe^{23+} mit H_2 ergibt sich $n_{\text{ave}} = 10-11$.

Der totale Wirkungsquerschnitt σ_{ET} für HCIs ist bei kleinen Energien in erster Näherung unabhängig von der Energie und kann näherungsweise über folgende Gleichung bestimmt werden [115]:

$$\sigma_{\text{ET}}[10^{-13} \text{ cm}^2] = 2.6 \times i/I_b^2, \quad (3.12)$$

i gibt abermals den Ladungszustand an. Mit Fe^{23+} erhält man bei kleinen Kollisionsgeschwindigkeiten $\sigma_{\text{ET}} \approx 1/3 \times 10^{-13} \text{ cm}^2$. Ein riesiger Wirkungsquerschnitt im Vergleich zu den übrigen vorgestellten Prozessen. Da die Rate aber von der Dichte der neutralen Atome in der Falle abhängt, ist dieser Prozess bei normalen Betriebsbedingungen nur von sekundärer Bedeutung.

Ion–Ion Stöße: Bei diesen Stößen sind beide Partner geladen und es handelt sich um reine Coulombstreuung. Die Ionentemperaturen in der EBIT reichen nicht aus, die Ionen gegen die Abstoßung so nah kommen zu lassen, dass Ladungsaustausch etc. stattfinden kann. Die Ion–Ion Stöße sorgen wie berichtet für Diffusion über Magnetfeldlinien und sind so wesentlich für die Ausbreitung der Ionenwolke verantwortlich. Für das Erreichen stationärer Temperaturzustände spielen diese schnellen Prozesse eine entscheidende Rolle.

3.1.1.3 Die Ladungszustandsbilanz

Die Ladungszustandsbilanz ist beeinflusst durch eine ganze Reihe von Parametern. Dies sind sowohl all die oben beschriebenen Prozesse, als auch die äußeren an der EBIT einstellbaren Faktoren. Für die Entwicklung der Ionen eines jeden Ladungszustand $N_{A,i}$ erhält man eine gekoppelte Differentialgleichung mit folgendem Aussehen:

$$\begin{aligned} \frac{dN_{A,i}}{dt} = \frac{J_e}{e} [& N_{A,i-1} \sigma_{\text{EI},A,i-1} f_{A,i-1} + N_{A,i+1} \sigma_{\text{RR},A,i+1} f_{A,i+1} - N_{A,i} (\sigma_{\text{EI},A,i} + \sigma_{\text{RR},A,i}) f_{A,i} \\ & + \dots - N_{A,i} R_{\text{ESC}}]. \end{aligned}$$

Der erste Summand betrifft die Ionisation von Ionen des Zustands $N_{A,i-1}$, was zu Änderungen des Zustands $N_{A,i}$ beiträgt. Der zweite Summand betrifft die Rekombination von Ionen des Ladungszustands $N_{A,i+1}$ und der dritte die Änderung durch diese Effekte auf $N_{A,i}$ selbst. Weitere Terme wie der Ladungstransfer mit B^{0+} und mehr sind nicht dargestellt. Nicht zu vergessen ist der Term auf Grund von Verlusten R_{ESC} durch Verlassen der

Falle, sowohl radial, als auch axial. Eine grundlegende Arbeit zu dieser Ladungszustandsbilanz ist mit [116] gegeben. Unter Vernachlässigung aller Prozesse bis auf Ionisation und Elektroneneinfang lässt sich als grobe Vereinfachung angeben:

$$\frac{N_{A,i-1}}{N_{A,i}} \approx \frac{\sigma_{RR,A,i}}{\sigma_{EI,A,i-1}}. \quad (3.13)$$

In der EBIT stellt sich gewöhnlich nach wenigen Millisekunden bis wenigen Sekunden ein stationärer oder zumindest quasi-stationärer Zustand ein bei dem gilt $dN_{A,i}/dt = 0$. Abb. 3.8 zeigt eine Simulation der relativen Häufigkeit im stationären Zustand in Abhängigkeit der Elektronenstrahlenergie.

3.2 Die Tesla-EBIT

Die Tesla-EBIT besteht wie alle anderen EBITs im Wesentlichen aus:

- einem Fallenmagneten,
- einer Fallenkonstruktion,
- einer Elektronenkanone,
- einem Kollektor, der die Elektronen von mehreren keV kinetischer Energie einsammelt.

Abb. 3.9 zeigt die Maschine in einem axialen Schnitt entlang der Achse des Elektronenstrahls (rot, in Abb. 3.9) Die Länge der Maschine beträgt circa 2.5 m. Im Zustand wie abgebildet beläuft sich das Gewicht auf etwa 1.5 t.

Um die nötigen Elektronenenergien für die Produktion von HCIs aufbringen zu können ist

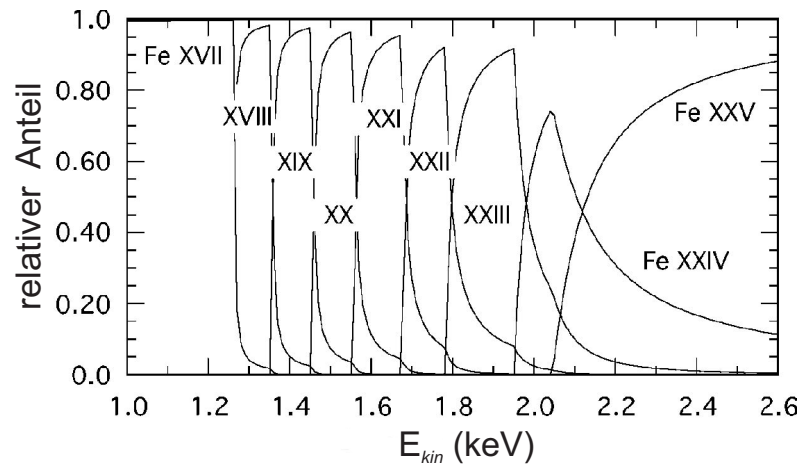


Abbildung 3.8: Stationäre relative Ionenhäufigkeit in der Falle in Abhängig von der Elektronenstrahlenergie E_{kin} (Quelle: [28]).

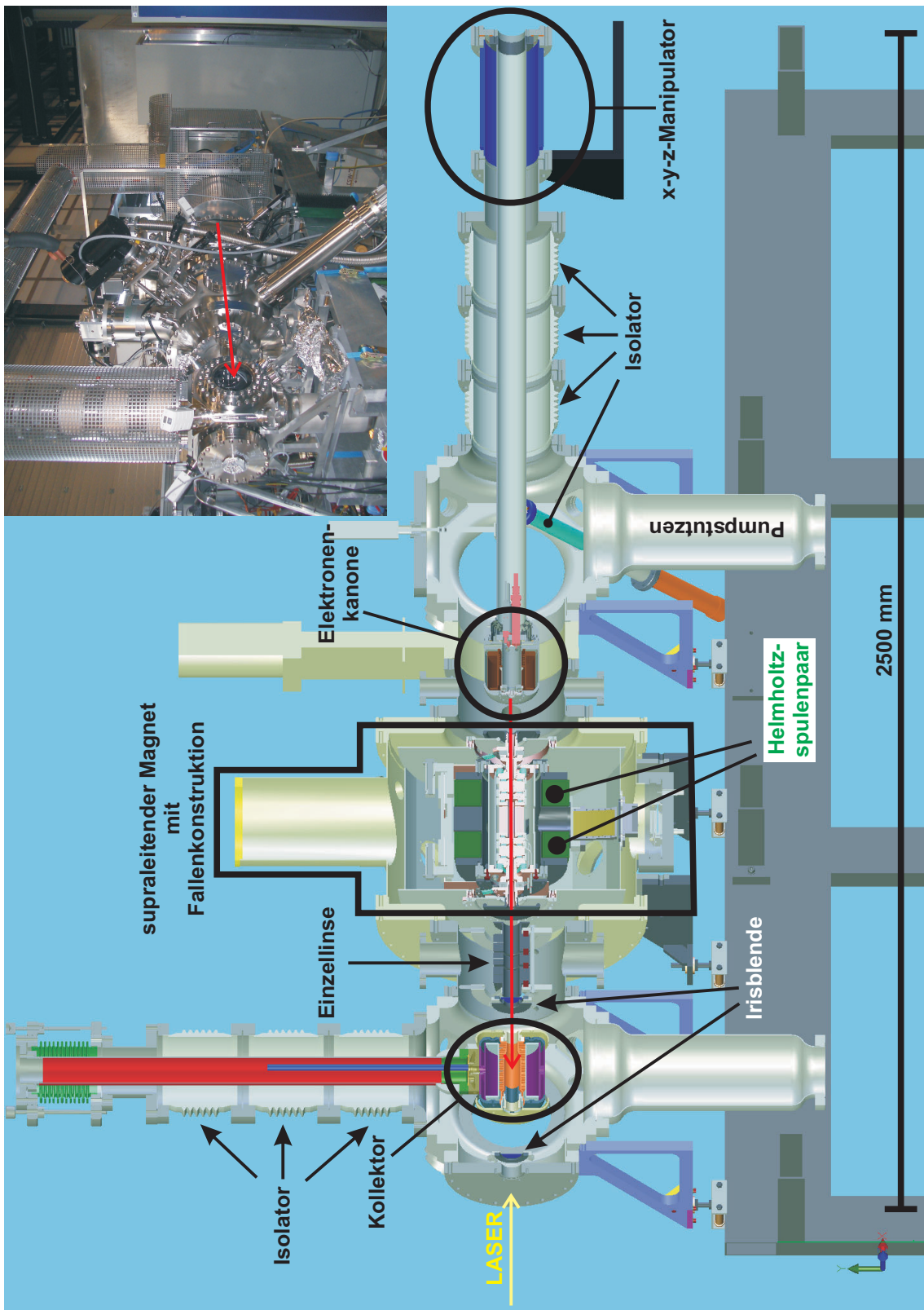


Abbildung 3.9: Tesla-EBIT in der axialen Schnittansicht (leicht gedreht). Ein Foto aus vergleichbarer Perspektive befindet sich oben rechts.

die Elektronenkanone isoliert gegen Masse und Falle aufgehängt, so dass Beschleunigungsenergien bis zu 180 000 V möglich wären. Dies genügt zur Erzeugung Li-artiger Ionen aller stabilen Elemente. Die Infrastruktur dafür, Faradaykäfige etc., befindet sich derzeit noch im Aufbau, so dass im Moment nur Beschleunigungsspannungen von 20–30 keV angelegt werden können. Allerdings wird hierbei nicht die Kanone, sondern die Fallenkonstruktion an sich gegen Masse und Kanone hochgelegt.

Entsprechend der Kanone ist auch der Kollektor isoliert. Damit ist es möglich Kollektor und Kanone auf ähnlichem Potential zu halten, mit dem Ergebnis, dass die Elektronen am Kollektor abgebremst und mit weniger als 2 keV kinetischer Energie eingesammelt werden. Dies minimiert zum einen die Röntgenbremsstrahlung, und zum anderen ist es nicht nötig eine Kühlleistung von kW Größenordnung aufzubringen, die nötig wären dumpft man einfach hunderte mA von einigen keV kinetischer Energie.

Das für das EBIT-Prinzip elementare Magnetfeld wird durch ein Paar supraleitender Helmholtzspulen erzeugt. Während bei EBIS-Maschinen normalerweise Solenoidmagnete eingesetzt werden, legt der bei der EBIT gewünschte Sichtzugang zu den Ionen zwecks Spektroskopie die Verwendung eines Helmholtzspulenpaars nahe.

3.2.1 Die Magnetkammer

3.2.1.1 Der supraleitende Magnet und die Fallenkonstruktion

In der Praxis eingesetzte supraleitende Materialien müssen auf kryogene Temperaturen gekühlt werden. Das käuflich bei der Firma *Cryogenics* erworbene 6 Tesla Magnetsystem verwendet den Supraleiter Nb₃Sn. Dieser hat eine Sprungtemperatur von 17 K. Die Induk-

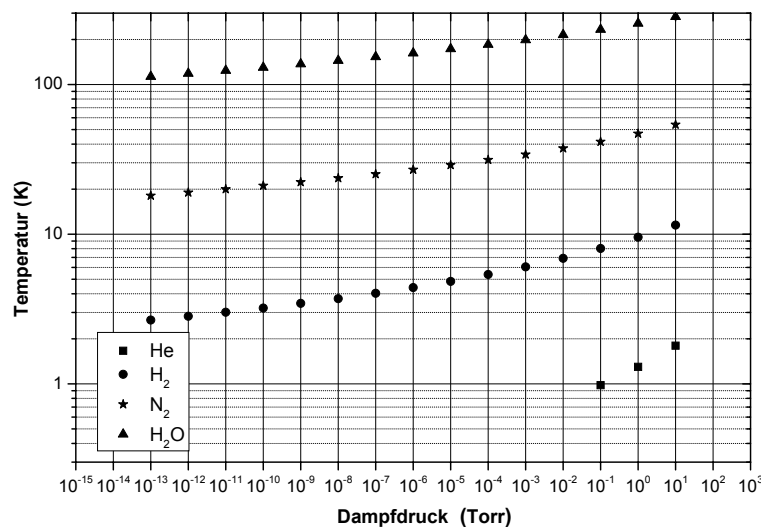


Abbildung 3.10: Temperatur gegen Dampfdruck von Helium, Wasserstoff, Stickstoff und Wasser.

tivität des Spulensystems beläuft sich auf 9.9 Henry.

Nicht bei allen EBITs wird zum Erzeugen des Magnetfelds auf supraleitende Materialien zurückgegriffen. Kleinere Systeme können auch mit Permanentmagneten bestückt werden (z.B. [117]). Nahezu alle supraleitenden Systeme nutzen zur Kühlung der Spulen jedoch ein Flüssighelium-Bad, in das die Spulen versenkt werden. Im Gegensatz dazu wird bei vorliegender Maschine ein auf Kompressortechnologie basierender Kältekopf verwendet, bei dem kein direkter Kontakt zwischen Kühlobjekt und Kühlmittel erfolgt. Betriebsmittel ist zwar dennoch Helium, jedoch in einem geschlossenen Kreislauf und im Vergleich zum Flüssighelium-System ergibt sich ein praktisch wartungsfreier Betrieb.

Bei obligatorischer kryogener Infrastruktur macht es Sinn, auch die Falle selbst an die Kühlung anzuschließen. Wie gesehen ist der große Wirkungsquerschnitt hochgeladener Ionen für Ladungstransfer beim Stoß mit neutralem Restgas einer der Gegenspieler auf dem Weg zur Produktion und Speicherung hochgeladener Ionen in einer EBIT. Abb. 3.10 zeigt, welche Temperaturen nötig sind, um einen Partialdruck, oder Dampfdruck, genehmer Größe zu erreichen. Hauptaugenmerk liegt hierbei auf Wasserstoff, als dominierendes Hintergrundgas bei kleinen Drücken. Im Sinne von Wasserstoff kann es praktisch gar nicht kalt genug sein. Um den Partialdruck um 3 Größenordnungen zu reduzieren, bedarf es gerade einmal einem Wechsel von 5 auf circa 4 Kelvin. Abb. 3.11 ergänzt Abb. 3.12 und zeigt die im Zuge dieser Arbeit konstruierte radial symmetrische Falle. Diese besteht aus einer zentralen Elektrode mit radialen Sichtschlitzen, ferner Fallenelektrode genannt, mit beidseitig jeweils vier anschließenden Elektroden. Die Isolation zwischen den Elektroden

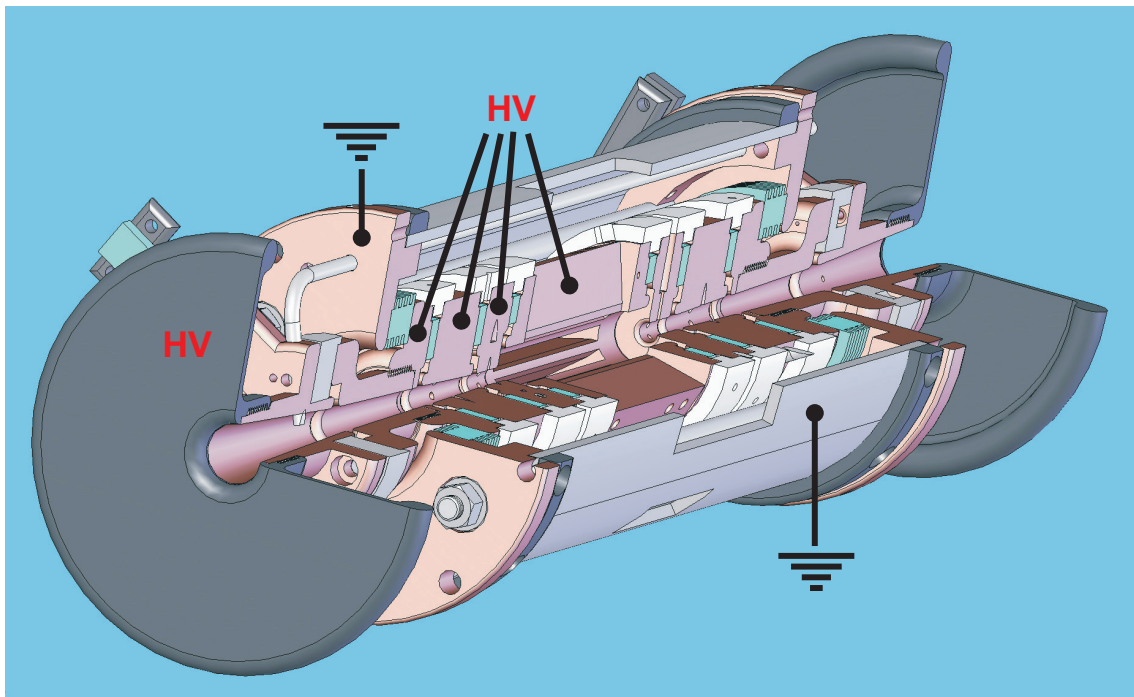


Abbildung 3.11: Axialsymmetrische Fallenkonstruktion im Segmentschnitt. Die 9 Elektroden liegen auf Hochspannung (<30 kV), die Fassung ist geerdet. Siehe auch Abb. 3.12.

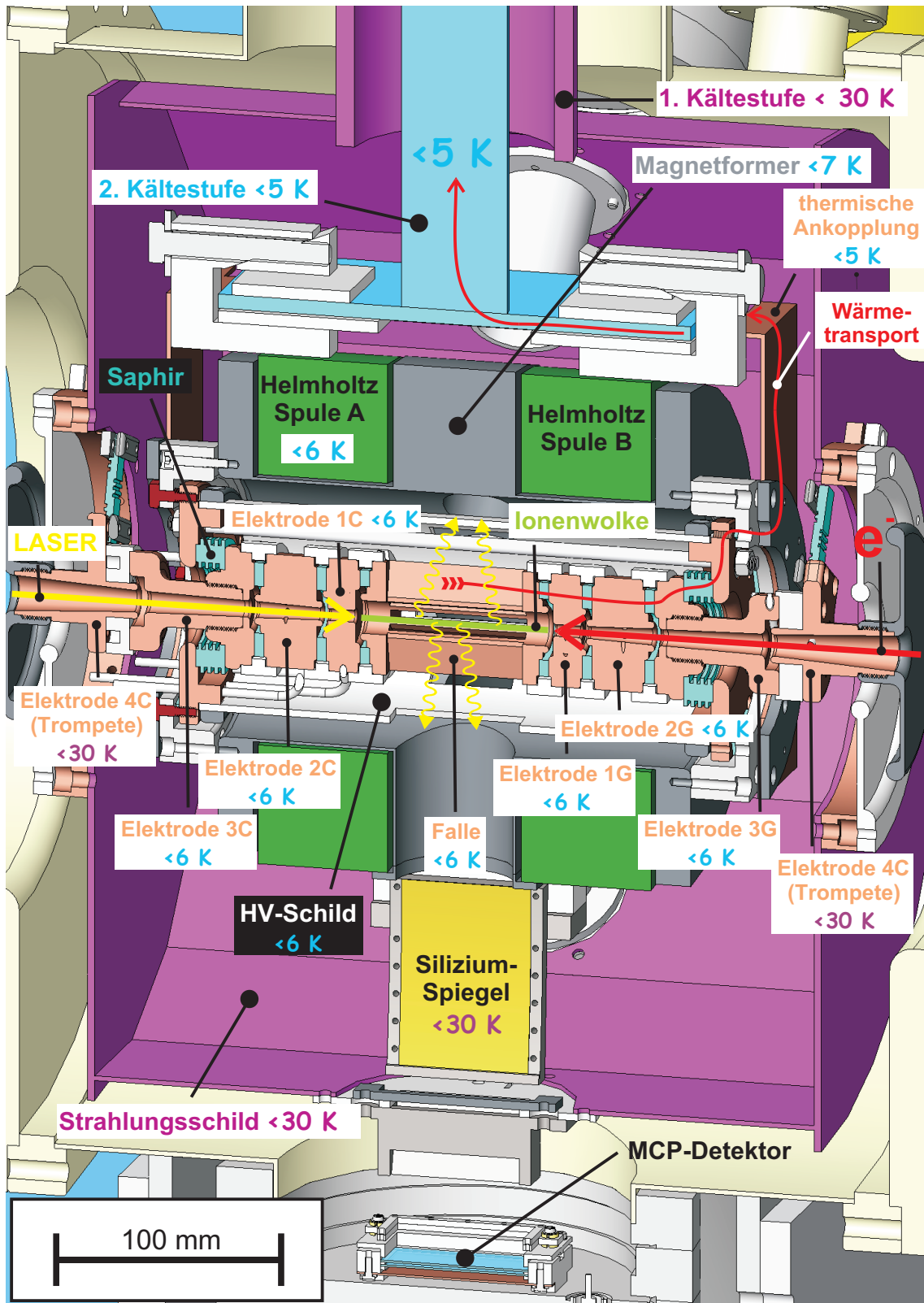


Abbildung 3.12: Supraleitender Magnet mit Fallenkonstruktion in axialer Schnittansicht (zur besseren Sichtbarkeit leicht gedreht).

ist auf etwa 5000 V ausgelegt. Die gesamte Falle kann auf über 30 kV gegenüber Masse gebracht werden.

Abb. 3.12 zeigt die Details der Magnetkammer (Abb. 3.9) und der darin verbauten Falle. In der Bildmitte findet sich die Ionenwolke. Die Länge der Fallenelektrode beträgt 80 mm, selbiges gilt im Normalbetrieb ungefähr für die Ionenwolke. Elektroden 1C und 1G sorgen für das nötige axiale Fallenpotential. Alle weiteren Elektroden dienen zur Optimierung der Strahlführung der Elektronen, die von rechts einlaufen (roter Pfeil), oder zur Realisierung längerer Ionenwolken. Sowohl Falle als auch die beiden Helmholtzspulen sind auf einem Halter aus Edelstahl montiert, Magnetformer genannt.

Um die Fallenelektrode effizient kühlen zu können, muss trotz Hochspannungsisolierung ein exzellenter Wärmefluss erreicht werden. Dazu sind die Fallenelektroden aus OFHC-Kupfer (engl. *oxygen free high conductive*) über Saphirscheiben aneinandergespresst. Saphir ist bei Temperaturen unter 30 K einer der besten Wärmeleiter überhaupt⁷, aber dennoch ein Dielektrikum mit ausgezeichneten Isolareigenschaften. Der Wärmeeintrag auf die Fallenelektroden, z.B. durch 300 K Wärmestrahlung, Elektronenbombardment, elektrischen Zuleitungen etc., wird entsprechend der roten Linie über die thermische Ankopplung aus 99.998% Reinkupfer zur zweiten Kältestufe des Kryokompressors (5 K) geführt.

Der Kühlkopf arbeitet mit zwei Kältestufen, einer bei 28.5 K, die so genannte „1. Stufe“, mit einer Kühlleistung von circa 10 W bei 28.5 K. Die 2. Stufe arbeitet mit einer Leistung $P(t[\text{K}]) \approx (t - 3.1 \text{ K}) \times 1 \text{ W}$ für $t < 7 \text{ K}$. Die Temperatur der 2. Stufe liegt im Messbetrieb bei circa 4.6 K und erfordert somit circa 1.5 W Kühlleistung. Bei diesen Parametern sollte die Fallenelektrode bei circa 6 K liegen.

Eine Metallscheibe von 5 cm Durchmesser emittiert bei Raumtemperatur bereits circa 1 W Wärmestrahlung in eine Halbkugel. Daher ist es notwendig Falle und im Besonderen die supraleitenden Spulen vor unerwünschter Wärmestrahlung zu schützen. Zu diesem Zweck umgibt ein zylindrisches Schild aus poliertem versilberten Kupfer (lila Abb. 3.9), welches direkt an die erste Kältestufe angeschlossen ist, die an die 2. Stufe angeschlossenen Teile der Maschine.

Das Magnetfeld der Helmholtzspulen: Abb. 3.13 zeigt den Betrag des Magnetfeldes auf der Strahlachse. Wie zu sehen produzieren die beiden Spulen nur ein unzureichendes Helmholtzfeld. Zu Gunsten eines optimalen Sichtzugangs zu den Ionen ist die Helmholtz-Bedingung verletzt, und der Abstand der beiden Spulen größer als der jeweilige Radius. Dadurch zeigt das resultierende Feld einen Doppelhöcker statt nur eines Maximums. Die beiden Maxima liegen bei maximalem Feld etwa 0.5 T über der Feldstärke im Fallenzentrum.

3.2.1.2 Detektoren und Peripherie der Magnetkammer

Abb. 3.14 zeigt einen radialen Schnitt durch das Zentrum der Falle, die Ionenwolke wird durch den Schnitt praktisch halbiert. In dieser Darstellung sind die zylindrischen Sicht-

⁷ $\lambda(30 \text{ K}) \approx 70 \text{ W}/(\text{cm K})$, $\lambda(5 \text{ K}) \approx 1 \text{ W}/(\text{cm K})$.

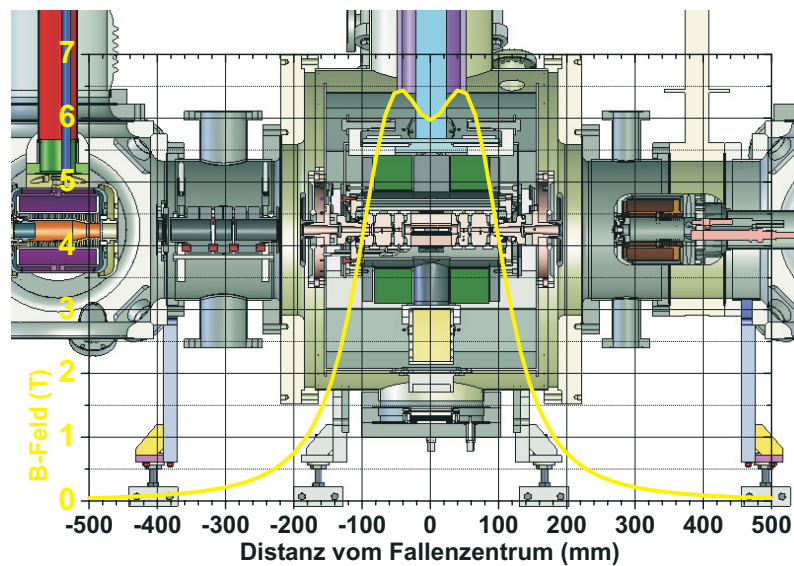


Abbildung 3.13: Axiales Magnetfeld der beiden Spulen.

zugänge zur Ionenwolke im Magnetformer deutlich zu sehen. Die drei großen Zugänge haben einen Durchmesser von 50 mm, die kleineren 30 mm. Beim Durchgang durch das Strahlungsschild ist penibel darauf zu achten, dass der Wärmeeintrag durch Strahlung minimiert wird. Dies erfolgt mit Schlitzblenden als auch durch den Einsatz dünner Folien. Die radialen Zugänge sind belegt mit einem Gaseinlass, dem MCP-56 Detektor, wobei dieses MCP (engl. *Micro-Channel-Plate*) bei den meisten Messungen in dieser Arbeit nicht montiert war, stattdessen befanden sich an dessen Stelle zwei Beryllium-Fenster, eines am Strahlungsschild, eines in einem CF-150 Flansch. Letzteres trennte Atmosphäre vom Vakuum. Damit konnte Röntgenstrahlung der Ionen einem Germanium-Detektor (GLP) zugeführt werden. Das zweite, als MCP-25 geführte MCP, fungiert als Detektor einer Silizium-Spiegel-Konstruktion zur Detektion weicher Röntgenstrahlung. Ein In-Vakuum Germanium Detektor (IGLET-Detektor) sowie ein VUV *grazing incidence* Gitterspektrometer komplementieren die Liste der Detektoren.

Der Gaseinlass: Dieser besteht aus einem Dosierventil als Düse, einer ersten differentiellen Pumpkammer, welche durch eine 1. Blende ($b \times h = (6 \times 0.8)$ mm) von der zweiten differentiellen Pumpkammer getrennt ist. Letztere wiederum wird durch eine 2. Blende ((10×1.4) mm) von der Hauptkammer getrennt. Es folgt eine 3. Blende ((20×3) mm) durch das Strahlungsschild, eine 4. Blende ((25×4) mm) mit Eingang in den Magnetformer und eine 5. Blende gleicher Dimension am Ausgang des selbigen. Mit verlassen der 6. und letzten Blende ((30×4) mm) landet der Gasstrahl im Pumprohr einer 3001/s Turbopumpe. Die Blenden drei bis sechs sind so dimensioniert, dass der gesamte Gasstrahl der in die Hauptkammer eintritt, diese auch wieder als kompletter Strahl über die 6. Blende verlässt.

Ein Maximaldruck von 5×10^{-4} mbar in der 1. Kammer gestattet einen Partialdruck von

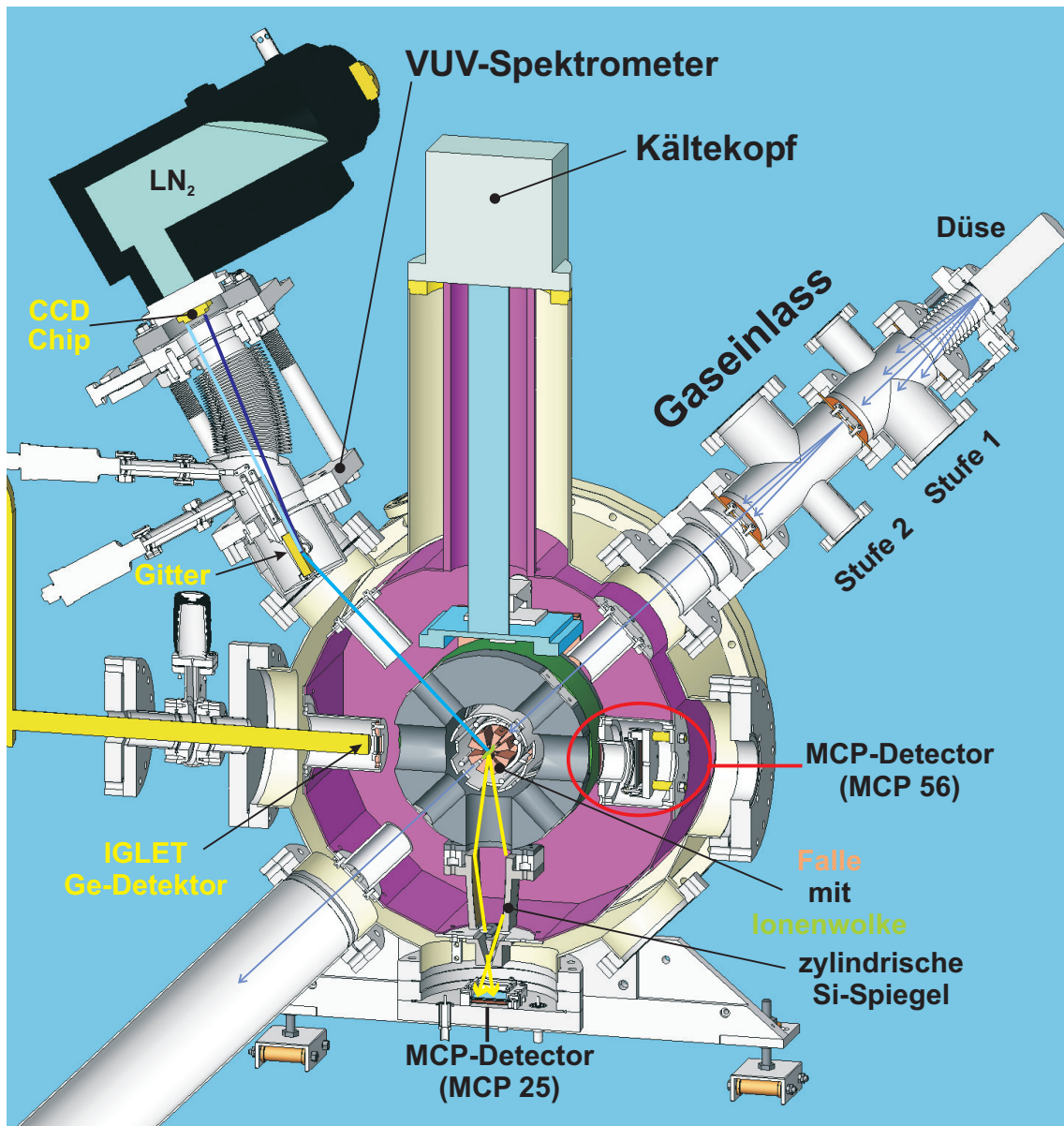


Abbildung 3.14: Transversale Schnittansicht auf das Fallenzentrum. Siehe auch Abb. 3.12.

3.2. Die Tesla-EBIT

$< 5 \times 10^{-9}$ mbar in der Hauptkammer zu erhalten, hervorgerufen durch molekularen Gasfluss. Der Strahl selbst hat dabei einen Gasfluss in die Magnetkammer, und auch wieder heraus, von circa 7×10^{-7} mbarl/s.

MCP-56 Detektor: Dieser runde MCP-Detektor mit einem Durchmesser von circa 45 mm ist ins Strahlungsschild eingekapselt. Thermisch fast ausschließlich über Strahlung gekoppelt, sollte dieses eine Temperatur von circa 100 K annehmen. Dabei verzehnfacht das MCP seinen Innenwiderstand, was höhere Verstärkungsspannungen für gleiche Verstärkung wie bei Raumtemperatur zur Folge hat. Das Kühlen des MCPs ist notwendig, um den Wärmeeintrag auf die Fallenkonstruktion zu minimieren. Vor das MCP ist ein nur 110 nm starker, freitragender Polyamidfilter montiert, der auf 30 K gekühlt wird. Die Transmissionscharakteristik für Strahlung verschiedener Energie ist in Abb. 3.15 dargestellt.

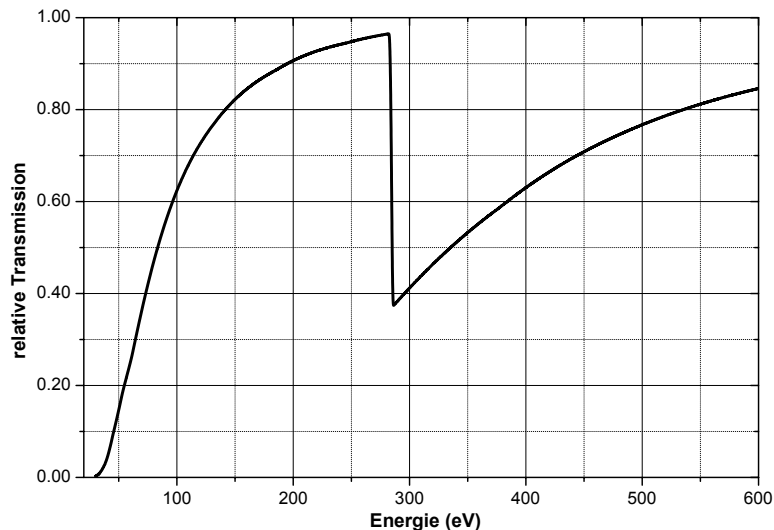


Abbildung 3.15: Relative Transmission einer 110 nm Polyamidfolie in Abhängigkeit der Photonenenergie.

Der GLP Ge-Detektor: (alternativ zu MCP-56) Hierbei handelt es sich um einen Flüssigstickstoff-gekühlten, aus intrinsischem Germanium gebauten Detektor der Firma *Ortec* (Modell: GLP-36360/13-P). Der kreisrunde Detektor hat einen Durchmesser von 36 mm. Geschützt wird er durch eine 0.254 mm starke Beryllium-Folie, gefolgt von einer inaktiven Ge-Schicht von $0.3 \mu\text{m}$. In Summe mit der zweiten, auf dem Strahlungsschild der EBIT eingebaute Beryllium-Folie von 0.025 mm Stärke ergibt sich die in Abb. 3.16 dargestellte energieabhängige Effizienz.

MCP-25 Detektor mit Silizium-Spiegel: Dieser Aufbau ist nochmal etwas deutlicher in Abb. 3.17 dargestellt. Bruchteile des durch die Ionen emittierten Lichtes werden durch

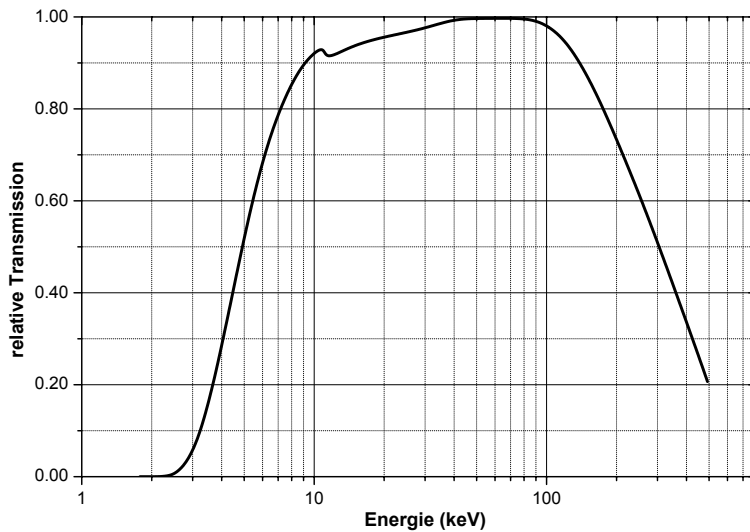


Abbildung 3.16: Detektionseffizienz des GLP unter Berücksichtigung montierter Beryllium-Folien in der EBIT.

zwei Silizium-Wafer, die jeweils auf einem zylindrischen Halter aus Titan aufgedrückt sind, auf eine Blende im Strahlungsschild fokussiert und dann mittels eines MCP-Detektors detektiert. Ein Wafer hat eine zugeschnittene Breite (in die Zeichenebene hinein) von 55 mm bei 80 mm Länge und 600 μm Dicke. Das Biegen dieses Einkristalls auf einen 600 mm Radius führt in $(100 - \epsilon)\%$ der Fälle zum Bruch des selbigen, so dass die Pärparation eines Spiegels einen kritischen Vorgang darstellte. Das Abkühlen der Spiegel auf 30 K kann ebenfalls zum Zerbrecen bei zu hohen mechanischen Spannungen im Material führen. Zwecks einfacher Abschätzung der Quanteneffizienz dieses Spiegel-Detektor-Systems sei angenommen jedes Ion der Ionenwolke emittiere seine Strahlung isotrop. Der meridionale Akzeptanzwinkel pro Spiegel beträgt 5° . Die Akzeptanz in der Senkrechten dazu, also die

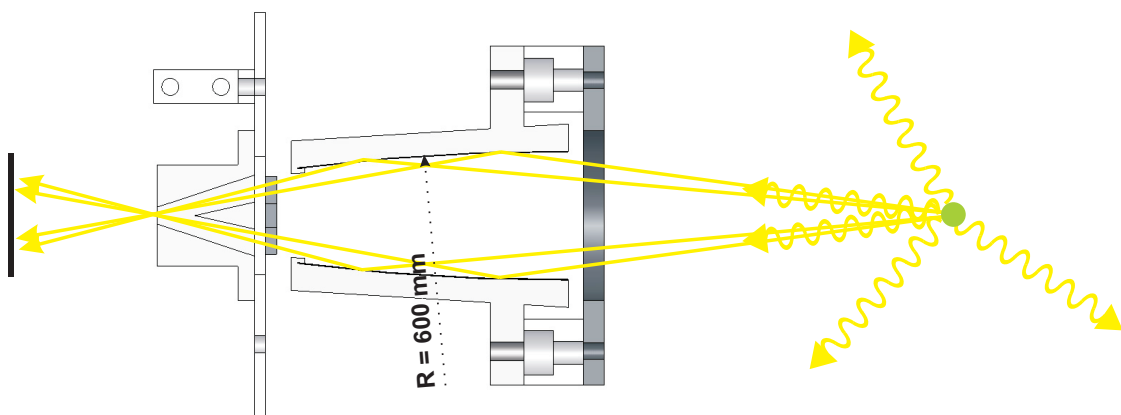


Abbildung 3.17: Der MCP-25-Detektor mit zylindrischen Silizium-Spiegeln. Ein Teil der Strahlung der Ionenwolke (grün) wird durch eine Blende im Kälteschild auf ein MCP-Detektor abgebildet.

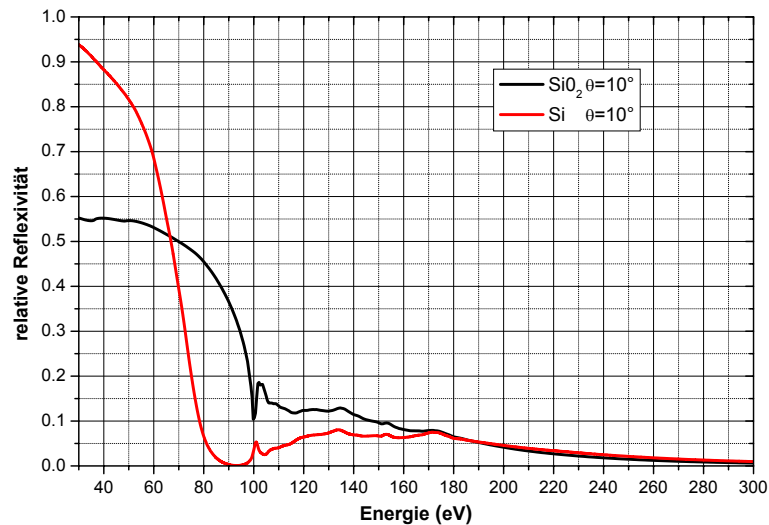


Abbildung 3.18: Reflexionsvermögen einer Si- bzw. SiO₂-Schicht bei 5 Å RMS-Rauhigkeit der Oberfläche. Der Einfallswinkel θ misst sich zur Tangentialen der Oberfläche (Quelle: „Center of X-Ray Optics“).

saggitale Ebene, ist durch die Länge des Schlitzes in der Blende gegeben. Diese beträgt 55 mm. Die Länge des sichtbaren Teils der Ionenwolke wird zu 50 mm gesetzt, gerade der Durchmesser des Zugangs durch den Magnetformer. Damit ergibt sich der Anteil der emittierten Strahlung der die Blende im Strahlungsschild passiert zu ungefähr 1.5×10^{-3} . Zu beachten ist nun noch das Reflexionsvermögen des Si-Wafers. Dieses ist sowohl von der Photonenergie abhängig, als auch von der Rauhigkeit der Waferoberfläche. Internationale Fertigungsnormen geben hier eine RMS Rauhigkeit von 5 Å vor. Normalerweise ist ein Si-Wafer mit SiO₂ terminiert. Abb. 3.18 zeigt das Reflexionsvermögen von sowohl Si als auch SiO₂ unter einem Winkel von 10°. Dies ist der Winkel (9–11°) mit dem die Strahlung zur Tangentialen (also rund 80° zur Normalen) der Zylinderoberfläche des Wafer einfällt. Die Wafer sollten zwischen 50 und 80% der Strahlung bei 50 eV reflektieren. Bei 50 eV Photonenenergie ergibt sich ferner eine Quanteneffizienz von circa 10% für das verbaute MCP. Es ergibt sich also eine mögliche Gesamtausbeute zwischen 5×10^{-4} und 1×10^{-3} im Bereich von 50 eV Photonenenergie. Das bei nachfolgenden Messungen benutzte MCP-25 deckt jedoch nur die Hälfte des möglichen Raumwinkels ab und erreicht damit etwa eine Gesamteffizienz von 5×10^{-4} .

Der IGLET Ge-Detektor: Dieser Ge-Detektor ist geeignet Röntgenstrahlung ab 1 keV zu detektieren, ein Bereich, der durch den GLP Detektor nicht abgedeckt werden kann. Der IGLET ist ebenfalls mittels Flüssigstickstoff gekühlt. Allerdings befindet sich dieser Detektor im Maschinenvakuum, was es möglich macht ohne ein verhältnismäßig dickes Beryllium-Fenster zu arbeiten, wie es als Grenze zwischen UHV und Atmosphäre im Falle des GLP Detektors nötig ist. Der eigentliche Detektor-Kristall des IGLET liegt hinter einem 25 µm Beryllium-Fenster und ist auf das Ende eines Kältefingers montiert, siehe hierzu

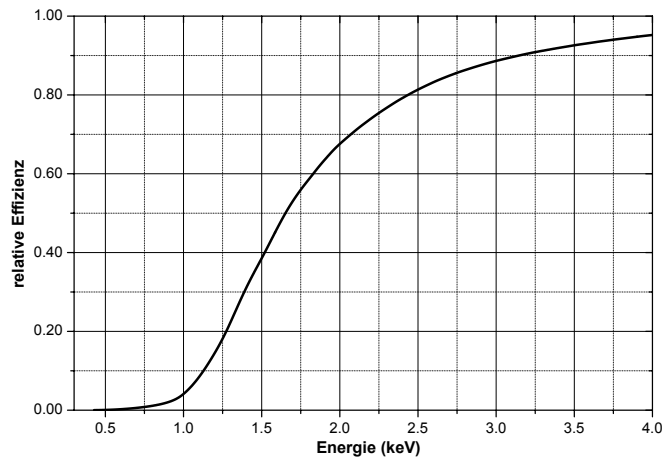


Abbildung 3.19: Detektionseffizienz des IGLET für kleine Röntgenenergien.

Abb. 3.14. Damit kann dieser Detektor von 11 mm Durchmesser mittels eines Schiebemanipulators sehr nahe an das Fallenzentrum gebracht werden. Die Strahlung muss auf dem Weg zum Detektor noch eine 800 nm Kohlenstoff-Folie passieren, die die nötige Öffnung im Kälteschild bedeckt. Die Gesamteffizienz dieser Anordnung, wobei die Kohlenstoff-Folie vernachlässigbar absorbiert, ist in Abb. 3.19 gegeben.

Das VUV-Spektrometer: Das Spektrometer, beschrieben in [119], verwendet ein zylindrisches *Hitachi* Gitter für einen Spektralbereich zwischen 5 und 35 nm. Es handelt sich hierbei um ein so genanntes *flat field* Gitter. Durch Variation der Liniendichte entlang der Gitteroberfläche gelingt es, zum einen die Foki der einzelnen Wellenlängen in eine Ebene parallel zur Gitternormalen zu fokussieren (Abb. 3.20 (a)), und zum anderen verschiedene optische Aberrationen erheblich zu reduzieren. Für die Theorie optischer Gitter sei auf [35, 120] verwiesen. Das Gitter ist entsprechend Abb. 3.20 (a) so verbaut, dass es die Ionenwolke direkt auf eine CCD-Kamera (engl. *Charged Coupled Device*) abbildet, siehe hierzu auch Abb. 3.14. Die verwendete *back-illuminated* CCD-Kamera ist Flüssigstickstoff-gekühlt und ein Produkt der Firma *Roper Scientific* (Modell SX 2048/LN SPR 2618). Der CCD-Chip verfügt über 2048×2048 Pixel á $(13.5 \times 13.5) \mu\text{m}^2$ Ausdehnung, zusammen $(27.65 \times 27.65) \text{mm}^2$. In den gepixelten Halbleiterstrukturen eines CCD-Chips erzeugen auftreffende Photonen Elektronen. Im Mittel $0.27 e^-$ pro eV Photonenenergie. Photonen können in einem Pixel entweder nur ihre gesamte Energie deponieren oder werden nicht absorbiert. Die Wahrscheinlichkeit mit der ein Photon absorbiert wird ist Ener-

| $l_{\text{Gitter}} \times b_{\text{Gitter}}$ (mm) | Liniendichte (l/mm) | R (mm) | d (mm) | α (Grad) | d' (mm) | α' (Grad) $\lambda_1 = 5 \text{ nm}$ | α' (Grad) $\lambda_2 = 20 \text{ nm}$ | L_{Disp} (mm) $\lambda_1 - \lambda_2$ |
|--|------------------------|-----------|-----------|--------------------|------------|--|---|---|
| 50×30 | 1200 | 5649 | 237 | 3 | 235.3 | 6.96 | 12.93 | 25.3 |

Tabelle 3.2: Spezifikationen des *Hitachi* Gitters Modell 001-0266 [118]. Die Furchen des Gitters verlaufen parallel der Breite und damit in axialer Richtung und somit auch parallel zur Ionenwolke.

gieabhängig und für diese Kamera in Abb.3.20(b) dargestellt. Für die Experimente in

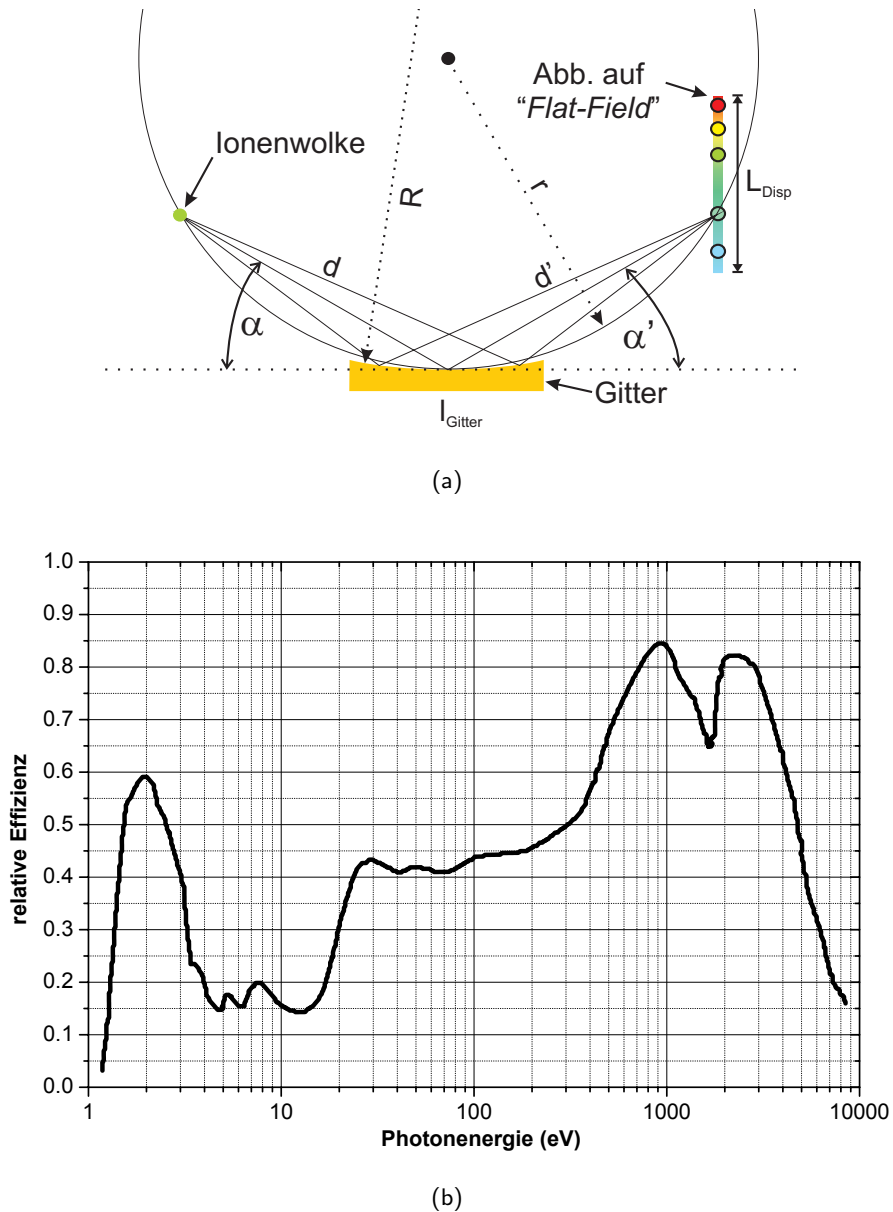


Abbildung 3.20: (a) Schematische Darstellung der Arbeitsweise des verwendeten Gitters. (b) Detektionswahrscheinlichkeit eines Photons in Abhängigkeit von dessen Energie.

Kap.4 wurde die höchste Verstärkungsstufe der Kamera gewählt. In diesem Falle ergeben 0.704 in einem Pixel erzeugte Elektronen ein digitales Ereignis (Einheit ADU), oder 0.193 ADU pro eV deponierter Photonenenergie.

Die Spezifikationen des Gitters sind in Tab. 3.2 zusammengestellt. Die Bezeichnungen korrespondieren mit Abb.3.20(a). Es ist zu beachten, dass Abb.3.20(a) aus Gründen der Darstellbarkeit nicht maßstabsgetreu ist. R ist hierbei der Krümmungsradius des Gitters, r der Radius des Rowland-Kreises, auf diesem liegen bei einem nicht korrigierten Gitter

die Foki der „Farben“, α und α' geben Ein- und Ausfallwinkel an, d und d' stehen für den Abstand von Objekt und Bild zum Gitter und L_{Disp} gibt den Abstand zweier als Beispiel gewählter Wellenlängen $\lambda_1 = 5 \text{ nm}$ und $\lambda_2 = 20 \text{ nm}$ auf entlang der Dispersionsebene an. Aus technischen Gründen musste das Spektrometer mit einem nominell vom idealen d abweichenden Abstand $d^* \approx 295 \text{ mm}$ verbaut werden. Dies kann in Teilen des Spektrums zu Auflösungsverlusten führen.

3.2.2 Die Elektronenkanone und die Eigenschaften des Strahls

3.2.2.1 Die Kanone

Der Elektronenstrahl nimmt seinen Ursprung in der Elektronenkanone, welche in Abb. 3.21 im axialen Schnitt dargestellt ist. Es gibt zwei Gruppen von Elementen, mit denen man versucht, die Elektronenbahnen in der Kanone und kurz danach zu beeinflussen. Dies sind die elektrostatischen Elektroden Kathodenhalter, Focus und Anode sowie die magnetostatischen Komponenten Bucking-Spule, Trim-Spule und das weichmagnetische Joch aus Reineisen.

Die Kathode selbst produziert Elektronen durch simples Ausheizen aus einem Festkörper, bei Temperaturen von circa $T_K = 1300 - 1500 \text{ K}$. Elektronenlieferant ist Barium, das in Form von BaO in einer porösen Wolfram-Matrix lagert. Diese Wolfram-Matrix mit einem Durchmesser von nur 3 mm ist von einem Molybdän-Halter umgeben, welcher in Abb. 3.21 als Kathode bezeichnet ist. Der Kathodenhalter liegt auf identischem Potential zur Kathode und definiert die Potentiallinien so, dass ein paralleler Elektronenfluss entsteht. Es handelt sich somit um eine Pierce-Elektronenkanone [121]. Die anschließende Focus-Elektrode stellt die eigentliche „Anode“ der Kanone dar und wird mit bis zu 8 keV

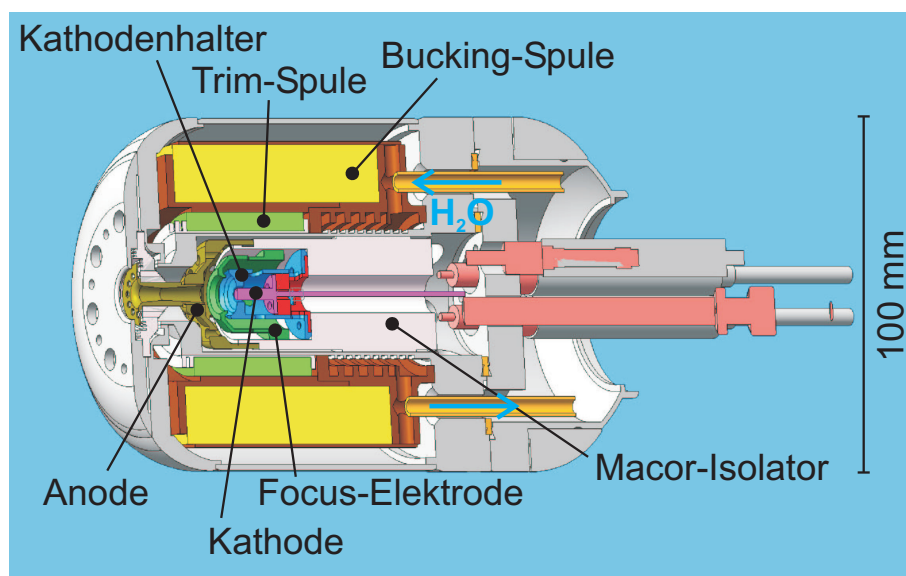


Abbildung 3.21: Die Elektronenkanone in axialer Schnittansicht.

Abzugsspannung gegenüber der Kathode betrieben, womit Ströme von über 500 mA bei dieser Maschine erreicht werden. Die Anode selbst kann zwar ähnliche Spannungsdifferenzen aufbauen, der Betrieb zeigt jedoch, dass dies mehr den Anschluss der Elektronen an die Felder außerhalb der Kanone (Elektrode 4G Trompete) bewerkstelligt, als diese von der Kathode abzusaugen.

Die von Herrmann [122] entwickelte Theorie des Elektronenstrahls zeigt, dass man sehr kleine Strahldurchmesser realisieren kann, wenn die Elektronen am Ort der Kathode nur sehr schwachen äußeren magnetischen Feldern ausgesetzt sind. Bucking-Spule, Joch und Trim-Spule dienen dazu, das Fallenmagnetfeld am Entstehungsort des Strahls zu minimieren bzw. ganz zu nivellieren. Sowohl der Hitzeeintrag durch Ströme von bis zu 30 A in der Bucking-Spule als auch durch die Heizung der Kathode, bedarf der Abführung durch eine entsprechende Wasserkühlung (Abb. 3.21).

3.2.2.2 Der Elektronenstrahl

Die Erzeugung und Speicherung hochgeladener Ionen verlangt hohe Stromdichten. Bei gegebener maximaler Stromstärke kann die Stromdichte nur durch geeignete Fokussierung auf kleinere Durchmesser gesteigert werden. Diese Fokussierung wird mittels des magnetischen Fallenfeldes durchgeführt. Dazu eine sehr einfache Betrachtung: Ein Elektron in einem magnetischen Feld B wird bei einer Geschwindigkeitskomponente v senkrecht zu diesem die bekannte Gyrationbewegung ausführen mit der Zyklotronfrequenz

$$\omega_z = -\frac{e}{2m_e}B. \quad (3.14)$$

Für die nicht relativistische Bewegung eines Elektrons in einem axialen, aber durchaus inhomogenen⁸ Magnetfeld gilt die Erhaltung des magnetischen Moments dieses Kreisstroms mit Frequenz ω_z [123], was äquivalent ist mit der Drehimpulserhaltung und der Erhaltung des Magnetischen Flusses Φ

$$\Phi = \pi r_g^2 B, \quad (3.15)$$

wobei r_g den Gyrationradius bezeichnet. Es ergibt sich für die Größen am Ort der Kathode (K) und am Ort der Falle (F) direkt die Relation

$$\left(\frac{r_{g,K}}{r_{g,F}}\right)^2 = \frac{B_F}{B_K}, \quad (3.16)$$

was die Kompression des Strahls bei kleinen Feldern an der Kathode und hohen Feldern in der Falle ersichtlich macht. Aufbauend auf der Theorie von Hermann [122], wird in [103] für den Elektronenstrahldurchmesser d_H , innerhalb dessen 80% der Elektronen liegen, angegeben:

$$d_H = d_B \times \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1 + 4 \left(\frac{8m_e k_B T_K d_K^2}{e^2 d_B^2 B^2} + \frac{B_K^2 d_K^4}{B^2 d_B^4} \right)}} \quad (3.17)$$

⁸Die Zyklotronfrequenz sollte immer noch schnell gegen die Änderung des Magnetfeldes sein und damit elektrische Felder parallel zum B-Feld von entsprechend geringer Größe.

mit

$$d_B = \sqrt{\frac{8m_e I}{\pi \epsilon_0 v e B^2}} \quad (3.18)$$

$$\iff d_B [\mu\text{m}] = 26.244 \frac{\sqrt{I [\text{mA}]}}{B [\text{T}] \sqrt[4]{E_{\text{kin}} [\text{eV}]}}. \quad (3.19)$$

Damit hängt der Durchmesser eines Elektronenstrahls am Ort eines axialen Feldes B von folgenden mehr oder weniger steuerbaren Größen ab: Dem Strom I des Strahls, dessen kinetischer Energie E_{kin} , sowie Parametern der Elektronenkanone, wie Temperatur T_K der Kathode, deren Durchmesser d_K und das Magnetfeld B_K vor Ort. d_H wird minimal falls die Wurzel gerade Eins ergibt. Das ist z.B. der Fall, falls am Ort der Kathode kein B-Feld herrscht und die Elektronen mit Temperaturen am absoluten Nullpunkt entspringen.

In einem realistischen Werteraum für die Temperatur der verwendeten Heizkathoden ist der Einfluss auf d_H marginal. Selbiges gilt für die kinetische Energie der Elektronen, auch hier gilt für EBIT-typische Betriebsparameter (<300 keV) ein geringer Einfluss auf den Durchmesser. Abb. 3.22 (a) zeigt die Abhängigkeit des Durchmessers vom Elektronenstrom, von diesem Parameter ist d_H bei realistischen Werten nur schwach abhängig. Es gilt jedoch zu beachten, dass die Stromstärke natürlich linear in die Stromdichte (rot) eingeht, welche ja einen der entscheidenden Parameter für die Ionisation darstellt. Abb. 3.22 (b) zeigt deutlich den starken Einfluss von B_K auf die Stromdichte und markiert hierdurch einen wesentlichen Optimierungsparameter. Wie die Stromdichte vom Feld in der Fallenmitte bei sonst gleichen Parametern abhängt und damit von der Stärke des Supraleiters, zeigt Abb. 3.22 (c). Nach Abb. 3.13 beträgt das Magnetfeld des Supraleiters im Abstand der Kathode beträchtliche 0.3–0.5 T.

Die Bucky-Spule ist in der Lage ein Magnetfeld von etwa 0.05 T zu erzeugen, bei einer Stromdichte von 4 MA/m^2 . Allerdings befindet sie sich außerhalb des Eisenjochs hoher Permeabilität, was ihre Wirkung deutlich reduziert. Sie nimmt daher eher im Bereich der Ankopplung der Elektronen an das Magnetfeld des Fallenmagneten mit Austritt aus der Kanone Einfluss, als auf die Nivellierung des Streufeldes an der Kathode.

In Rahmen der Messungen in Kap. 4 kann aus der Halbwertsbreite der dort beobachteten Spektrallinien eine obere Grenze für den Elektronenstrahlradius von $d_H \lesssim 75 \mu\text{m}$ gemessen werden.

Das elektrostatische Feld des freien Strahls: Nimmt man den Elektronenstrahl als homogen geladene Linienladung mit $r_H = d_H/2$ an, der man, zumindest auf Distanzen von wenigen Zentimeter, einen konstanten Radius zuordnen kann, so schreibt sich die Ladungsdichte in Abhängigkeit der radialen zylindrischen Koordinate r als:

$$\rho(r \leq r_H) = \frac{I}{v} \frac{1}{\pi r_H^2} \quad (3.20)$$

$$\rho(r > r_H) = 0. \quad (3.21)$$

$I/v = \rho_z(I, E_{\text{kin}})$ entspricht gerade der Ladung des Strahls pro Einheitslänge. Die Annahme eines nicht abrupt abbrechenden z.B. Gauss'schen Profils der Ladung in r , brächte für

3.2. Die Tesla-EBIT

das Folgende keine prinzipiellen Unterschiede, führt jedoch nicht auf analytische Lösungen für das Potential des Strahles.

Integration von $\nabla \vec{E}(\vec{r}) dV = \rho(\vec{r})/\epsilon_0 dV$ und Anwendung des Gauss'schen Satzes liefern für die Feldstärke außerhalb des Strahls ($r \geq r_H$):

$$\vec{E}(\vec{r}) = E_r(r)\hat{e}_r; \quad E_r^>(r) = \frac{\rho_z(I, E_{\text{kin}})}{2\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}. \quad (3.22)$$

Sowie innerhalb des Strahls ($r \leq r_H$):

$$\vec{E}(\vec{r}) = E_r(r)\hat{e}_r; \quad E_r^<(r) = \frac{\rho_z(I, E_{\text{kin}})}{2\pi\epsilon_0} \frac{r}{r_H^2}. \quad (3.23)$$

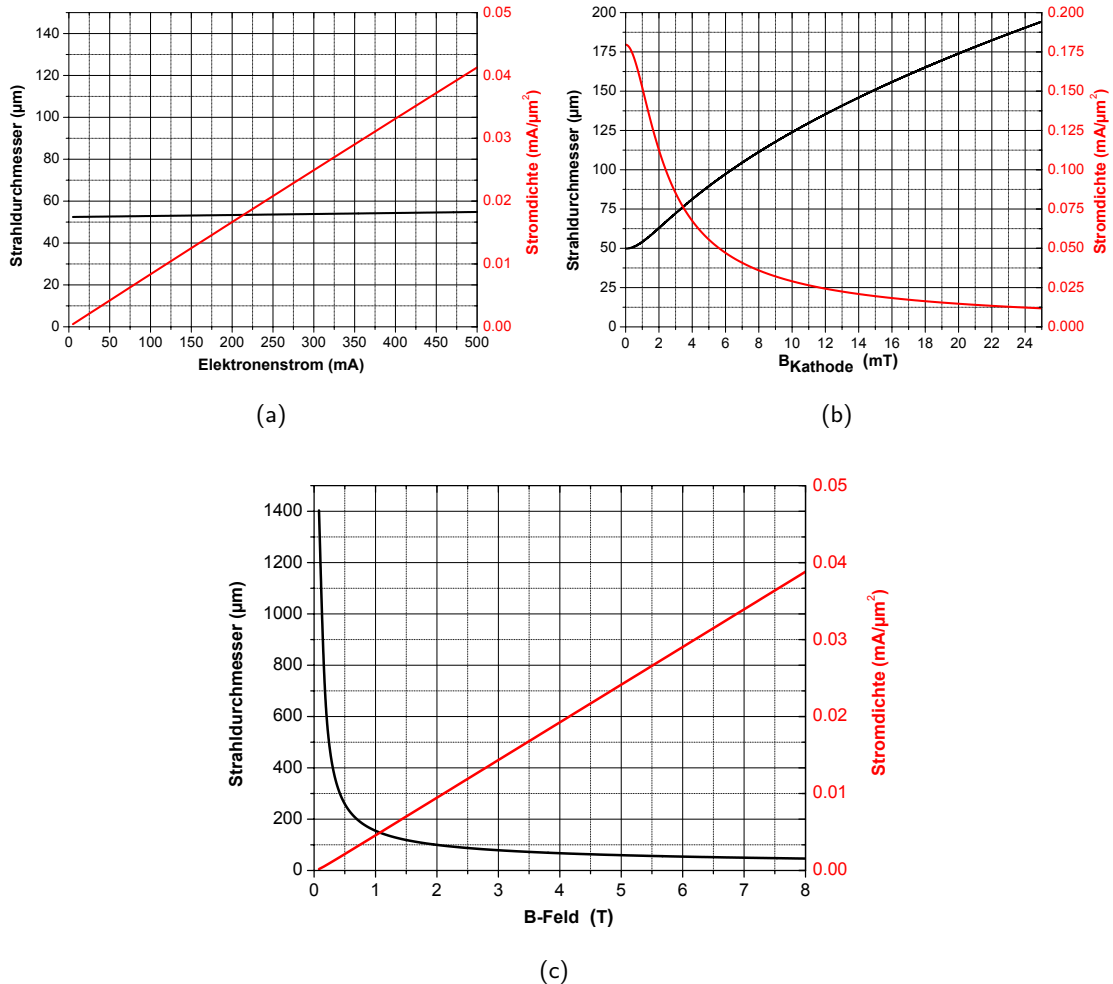


Abbildung 3.22: Strahldurchmesser (schwarz) und Stromdichte (rot) als Funktion einiger Parameter. Festgehalten sind: $T_K = 1350 \text{ K}$, $r_K = 3 \text{ mm}$, $E_{\text{kin}} = 6 \text{ keV}$. (a) als Funktion des Stroms bei $B_K = 1 \text{ mT}$ und $B = 6 \text{ T}$; (b) als Funktion des Feldes an der Kathode bei $I = 350 \text{ mA}$ und $B = 6 \text{ T}$; (c) als Funktion des Fallenmagnetfeldes bei $B_K = 1 \text{ mT}$ und $I = 350 \text{ mA}$.

Integration von $E_r(r)dr = -\frac{\partial\phi}{\partial r}dr$ unter Vorgabe eines stetigen Übergangs bei $r = r_H$ liefert das Potential des freien Elektronenstrahls:

$$\begin{aligned}\phi^>(r \geq r_H) &= - \int_{r_H}^r E_r(r')dr' = -\frac{\rho_z(I, E_{\text{kin}})}{2\pi\epsilon_0} \ln\left(\frac{r}{r_H}\right) + A \\ \phi^<(r \leq r_H) &= - \int_0^r E_r(r')dr' = -\frac{\rho_z(I, E_{\text{kin}})}{2\pi\epsilon_0} \left(\frac{r^2}{2r_H^2} - \frac{1}{2}\right) + A.\end{aligned}$$

Das Potential einer in z unbegrenzten zylindrischen Ladungsverteilung verschwindet im Unendlichen nicht und der übliche Schritt $\phi(\infty) \equiv 0$ kann nicht durchgeführt werden. Für einen Referenzpunkt und damit Definition der Konstanten A werden die Fallenelektroden sorgen.

3.2.2.3 Die Felder der Falle

Umgibt man den idealisierten Elektronenstrahl von homogener Ladungsdichte, konstantem Durchmesser und unendlicher axialer Ausdehnung konzentrisch mit einem Zylindermantel von Innenradius $r_F > r_H$ und Potential U_F so folgt aus der Forderung $\phi^>(r_F) \equiv U_F$:

$$\phi^>(r) = -\frac{\rho_z(I, E_{\text{kin}})}{2\pi\epsilon_0} \ln\left(\frac{r}{r_F}\right) + U_F, \quad r_H \leq r \leq r_F \quad (3.24)$$

$$\phi^<(r) = -\frac{\rho_z(I, E_{\text{kin}})}{2\pi\epsilon_0} \left[\frac{r^2}{2r_H^2} - \ln\left(\frac{r_F}{r_H}\right) - \frac{1}{2}\right] + U_F, \quad r \leq r_H. \quad (3.25)$$

Das Verhalten eines Ions an einem Ort $r' < r_F$ ist bestimmt von den herrschenden elektrischen Feldern. Diese ergeben sich wieder durch Gradientenbildung der Potentiale und sind identisch mit Gl. (3.22) und Gl. (3.23). Die Größen r_F, U_F beeinflussen damit nicht die Zentralkraft, die der Strahl auf ein Ion ausübt. Die Bewegungsgleichungen eines Ions bezüglich dieser Komponente bleiben von den Fallenelektroden unberührt, solange das Eigenfeld des Ions unberücksichtigt bleiben kann, was im Besonderen sehr nah an der Zylinderwand nicht mehr gilt.

Abb. 3.23 zeigt eine *finite Elemente* Berechnung des Verlauf von $\phi(r, z)$ entlang z für verschiedene radiale Koordinaten r . Alle Fallenelektroden haben ein Potential von 6000 V, dennoch variiert das Potential deutlich in z . Dies ist Folge verschiedener Innendurchmesser der Elektroden. Die zentrale Fallenelektrode weist einen Durchmesser $d_{FE} = 14$ mm auf, die anschließende (jeweils beidseitig symmetrisch) $d_{1C} = d_{1G} = 5$ mm, dann läuft der Durchmesser mit circa 4° Öffnungswinkel nach außen auseinander. Durch Präsenz des Elektronenstrahls und eines Sprungs des Innendurchmessers ergibt sich also bereits ein Kastenpotential in dem Ionen gefangen werden können. In diesem Beispiel, bei typischen Bedingungen (siehe Bildunterschrift), finden die Ionen eine Potentialtiefe von circa 75 V vor. Sobald also die Temperatur für eine kinetische Energie von mehr als 75 eV pro fehlendes Elektron eines Ions sorgt, kann das Ion die Falle mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit axial verlassen.

Des Weiteren ist in Abb. 3.23 das Raumladungspotential des Strahls ersichtlich. Auf der

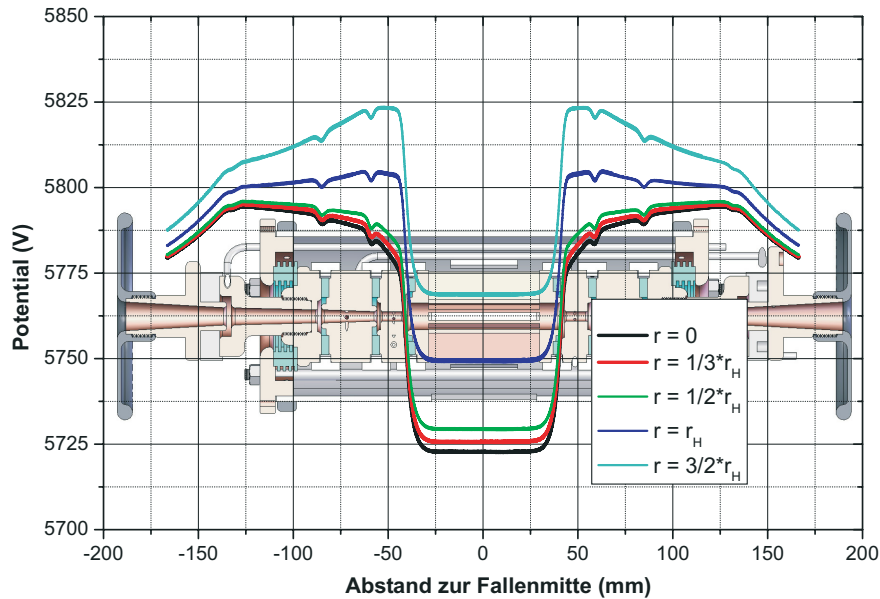


Abbildung 3.23: Verlaufs von $\phi(r, z)$ im Fallenbereich für verschiedene r , bei $I = 350$ mA, $d_H = 75$ μ m, $E_{\text{kin}} = 6$ keV und 6000 V Potential auf sämtlichen Elektroden.

axialen Achse (schwarze Kurve) beträgt das Potential circa 5725 V, an die Fallenelektrode werden aber 6000 V angelegt. Dies bedeutet, dass die Elektronen des Strahls keine 6000 eV kinetische Energie pro Elektron zur Ionisation bereitstellen können, sondern eben nur 5725 eV. Um den Elektronen dennoch 6 keV kinetische Energie zu geben, müssen entsprechend höhere Werte für die Beschleunigungsspannung ΔU_{acc} gewählt werden. Es gilt also in 1. Näherung:

$$E_{\text{kin}} = \Delta U_{\text{acc}} - \phi^<(r = 0; U_F, \dots), \quad (3.26)$$

wobei U_{acc} wieder für die Spannungsdifferenz Kathode zur Fallenmitte steht.

Es lohnt ein etwas genauerer Blick auf das Raumladungspotential in der zentralen Fallenelektrode mittels eines radialen Schnitts, gemäß Abb. 3.24 (a). Dadurch, dass die innere Fallenoberfläche von Sichtschlitzen unterbrochen ist, erhöht sich das Raumladungspotential auf der Achse und die effektive Beschleunigungsspannung wird etwas erniedrigt. Bei $E_{\text{kin}} = 6000$ eV beträgt die Verringerung der kinetischen Energie des Strahls pro 100 mA Strom circa 1 eV.

Abschließend zeigt Abb. 3.24 (b) eine typische axiale Fallenkonfiguration, die durch Anlegen geeigneter unterschiedlicher Spannungen auf den Elektroden eingestellt wird. Die Ionen sind in einem Potentialkasten von 500 V axial gefangen. Heiße Ionen verlassen die Falle, zurück bleiben nur die am höchsten geladenen und schweren Ionen.

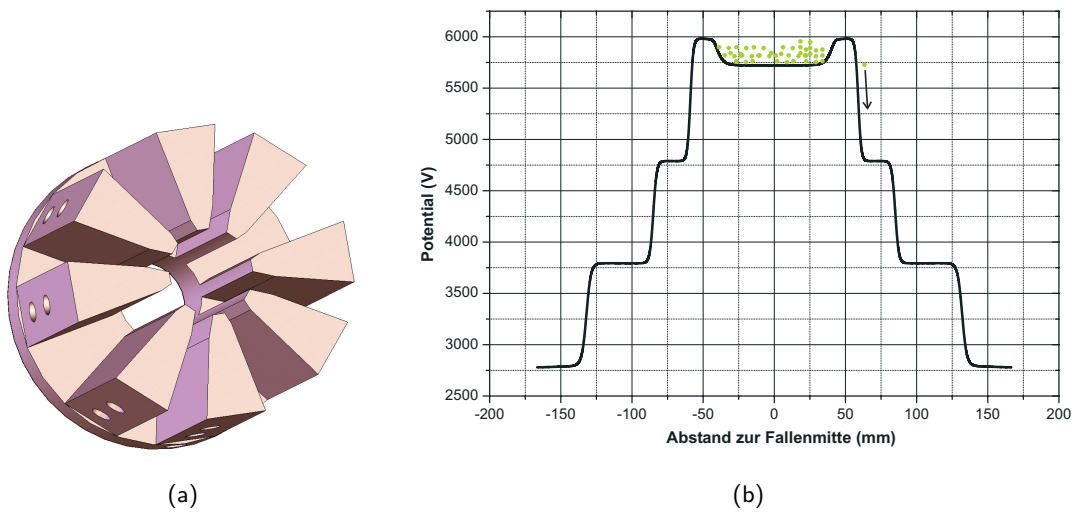


Abbildung 3.24: (a) Fallenelektrode halbiert durch radialen Schnitt. Die Sichtschlitze verändern das Potential des Elektronenstrahls. (b) Typische Fallenkonfiguration. Zu heiße Ionen (grün) verlassen vornehmlich auf axialem Wege die Falle.

3.2.2.4 Energieverteilung des Elektronenstrahls

Die Energie des Elektronenstrahls einer EBIT ist sehr scharf definiert. Dies ist einfach zu verstehen: Die Elektronen werden typischerweise auf einige keV kinetischer Energie beschleunigt. Ihre anfängliche Geschwindigkeitsbreite in axialer Richtung entspricht gerade der einer Maxwellverteilung bei $T_K \approx 0.13 \text{ eV}$, der Temperatur der Kathode. Die Energiebreite liegt im Bereich von $\delta E \approx k_B \times T_K$, die sich beim Beschleunigungsvorgang erhält. Die relative Breite $\delta E/E_{\text{kin}}$ jedoch wird sich um Größenordnungen im Verhältnis zu einer Maxwell-Verteilung um $\bar{E} = E_{\text{kin}}$ verringern. Dies macht z.B. erst die Vermessung von dielektronischen Resonanzen möglich.

3.2.3 Der Kollektor

Hauptaufgabe des Kollektors (Abb. 3.25) ist der Einfang des freien Elektronenstrahls. Dazu liegt er auf etwa 2 keV positiverem Potential als die Kathode. So ist es möglich die Elektronen mit nur wenig Energie aufzusammeln. Natürlich könnte man auch mit einer simplen Platte die Elektronen auffangen. Die Ausführung als Rohr vergrößert die Fläche, der von den Elektronen bombardierten Elektrode. Des Weiteren können so zum einen Ionen aus der Maschine extrahiert werden, und zum anderen erlaubt sie das Einkoppeln eines Lasers oder gar das Laden der Falle aus externen Quellen, z.B. mit Radioisotopen. Zum effektiven Einfang der Elektronen stehen folgende Elemente zur Verfügung: Die elektrostatischen Elektroden *Font-Shield*, *Suppressor*, *Extraktor* und *Back-Shield* sowie ein Magnetfeld, hervorgerufen durch die Kollektor-Spule. Dieses Feld ist so ausgerichtet, dass sich der Elektronenstrahl maximal aufweitet. Der Extraktor liegt dabei auf einem negativen Potential als die Kathode, so dass die Elektronen umkehren und dann die Innenseite

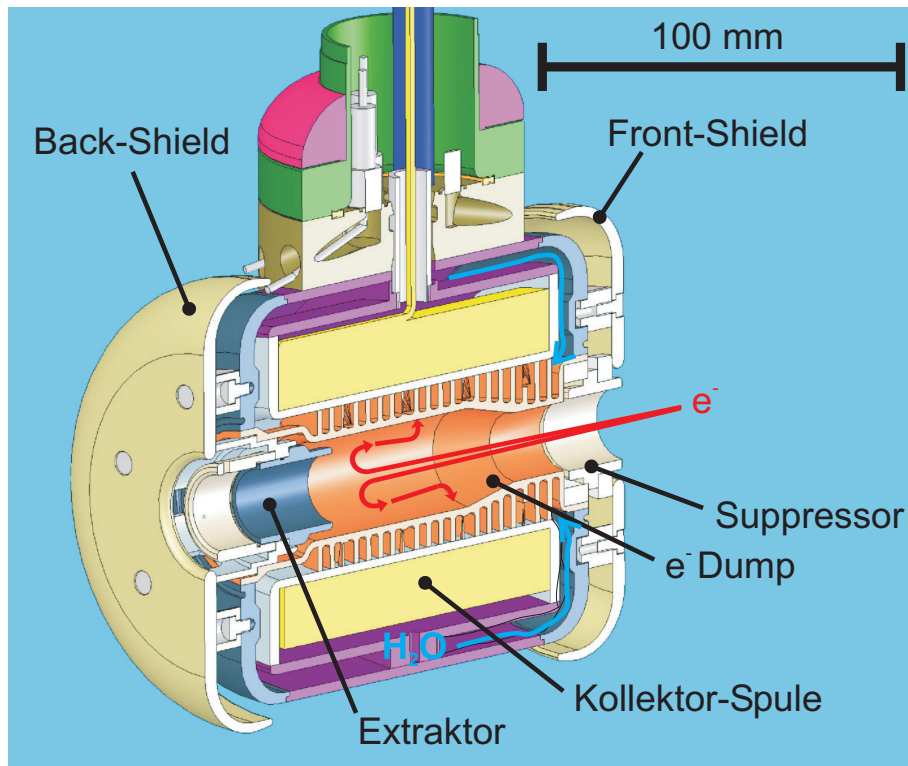


Abbildung 3.25: Der Kollektor in axialer Schnittansicht.

des Kollektors treffen.

3.2.4 Tesla-EBIT und andere EBITs

Das wissenschaftlich erfolgreichste EBIT-Labor ist zweifelsohne jenes am Lawrence Livermore National Laboratory. Dort gelang es beispielsweise nacktes Uran in einer EBIT zu produzieren [124]. Eine weitere kryogene EBIT in Nordamerika finden sich am NIST [125, 126], in Berkeley sowie am TRIUMF in Vancouver, wo eine ebenfalls in Heidelberg gebaute „Zwillingschwester“ (Titan-EBIT) der hier vorgestellten Tesla-EBIT arbeitet, die auch am MPI-K in 2006 gefertigt wurde. Auch in Japan an der University of Electro-Communications sowie in Shanghai in China findet sich jeweils eine kryogene EBIT [127, 128]. Weitere kryogene als auch „warme“ EBITs sind außerdem in Europa vertreten. Die kryogenen EBITs befinden sich in Oxford, wo die erste Laserspektroskopie in einer EBIT durchgeführt wurde [129], in Berlin [130] und hier am MPI-K, Heimat der vorgestellten Tesla-EBIT und der Heidelberg-EBIT.

Unter all diesen kryogenen Maschinen arbeiten die beiden Heidelberger EBITs bei den höchsten magnetischen Flussdichten und mit über 500 mA bei den stärksten Elektronenströmen. Daneben stellt die Tesla-EBIT die wohl einzige transportable kryogene Hochstrom-EBIT dar. Abb. 3.26 zeigt die Maschine in ihrem Transportkontainer, in dem diese Maschine bereits erfolgreiche Messkampagnen zum BESSY (Berliner Elektronenspeicherring-Ge-

sellschaft für Synchrotronstrahlung) und zu FLASH unternommen hat, und dort binnen weniger Tage voll einsetzbar war.



Abbildung 3.26: Tesla-EBIT im Reisecontainer.

Kapitel 4

Gitterspektroskopie an hochgeladenem Eisen

Dieses Kapitel stellt Ergebnisse von Messungen mittels des in Kap. 3 eingeführten *flat-field*-Gitterspektrometers vor, die beim Einsatz dieses Spektrometers im Rahmen des in Kap. 5 beschriebenen Experiments am FLASH durchgeführt wurden. Diese Resultate liefern hoch präzise Daten zur Atomstruktur hochgeladener Be- und Li-artiger Eisenionen.

4.1 Einleitung

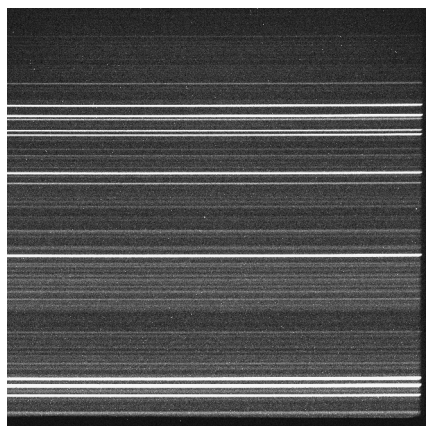


Abbildung 4.1: CCD-Kamera: Zweidimensionale Aufnahme eines Eisenspektrums.

Das *flat-field*-Gitterspektrometer (FFGS) wurde mit einem 1200 Linien/mm Gitter betrieben. Zweidimensionale Spektralaufnahmen im Bereich von 10–35 nm wurden damit aufgezeichnet. Abb. 4.1 zeigt eine typische Aufnahme von Spektrallinien, hier dargestellt in doppelter Originalgröße zum $(27.65 \times 27.65) \text{ mm}^2$ großen CCD-Chip. Über die in Abb. 4.1 abgebildeten Spektrallinien war nur bekannt, dass sie anhand der Spezifikationen des Gitters (Kap. 3) zwischen 5 und 35 nm liegen müssen. Entsprechend der *Atomic Spectra Database (ASD)* [96] des NIST (engl. *National Institute of Standards and Technology*) kommen damit etwa 2500 identifizierte Übergänge für verschiedene Ladungszustände der Elemente Fe, O und C in Frage, lässt man wie in

diesem Fall Eisen in Form von $\text{Fe}(\text{CO})_5$ über den Gaseinlass ein. Hinzu kämen Übergänge der Elemente Ba, W und Mo, die in Materialien im Bereich der Heizkathode enthalten sind und als potentielle „Störquellen“ in EBIT-Messungen bekannt sind. Da allerdings nur einige dieser Ladungszustände (Spezies) tatsächlich bei den eingestellten Fallenparametern in der EBIT vorkommen können, und weil etliche dieser Linien nur verschwindende

Intensität aufweisen, ist die Zuordnung der auf diesen Aufnahmen beobachteten Linien etwas einfacher.

Ziel der folgenden Auswertung ist die Bestimmung der Wellenlängen bzw. Energien der vier in Tab. 4.1 zusammengefassten QED-sensitiven Übergänge in Li- und Be-artigen Eisenionen.

| Be-artiges Fe ²²⁺ | Li-artiges Fe ²³⁺ |
|---|--|
| A: $1s^2 2s^2 {}^1S_0 - 1s^2 2s 2p {}^1P_1$ | B: $1s^2 2s {}^2S_{1/2} - 1s^2 2p {}^2P_{3/2}$ |
| D: $1s^2 2s^2 {}^1S_0 - 1s^2 2s 2p {}^3P_1$ | C: $1s^2 2s {}^2S_{1/2} - 1s^2 2p {}^2P_{1/2}$ |

Tabelle 4.1: Die betrachteten Grundzustandsübergänge in Be- und Li-artigen Eisenionen.

4.2 Durchführung

| Ladungszustand | Schwellenenergie (eV) | |
|----------------|-----------------------|--------|
| II | 1+ | 7.9 |
| III | 2+ | 16.2 |
| IV | 3+ | 30.7 |
| V | 4+ | 54.8 |
| VI | 5+ | 75.0 |
| VII | 6+ | 99.1 |
| VIII | 7+ | 125.0 |
| IX | 8+ | 151.1 |
| X | 9+ | 233.6 |
| XI | 10+ | 262.1 |
| XII | 11+ | 290.3 |
| XIII | 12+ | 330.8 |
| XIV | 13+ | 361.0 |
| XV | 14+ | 392.2 |
| XVI | 15+ | 457.0 |
| XVII | 16+ | 489.3 |
| XVIII | 17+ | 1262.2 |
| XIX | 18+ | 1362.2 |
| XX | 19+ | 1469.0 |
| XXI | 20+ | 1582.0 |
| XXII | 21+ | 1689.0 |
| XXIII | 22+ | 1799.0 |
| XXIV | 23+ | 1958.6 |
| XXV | 24+ | 2045.8 |
| XXVI | 25+ | 8828.1 |
| XXVII | 26+ | 9277.7 |

Tabelle 4.2: Schwellenenergie, die mindestens aufgebracht werden muss, um die verschiedenen Ladungszustände von Eisen zu erzeugen [131].

Abb. 4.2 zeigt dasselbe Spektrum wie Abb. 4.1, jedoch zur besseren Sichtbarkeit in Dispersionsrichtung gestreckt. Abb. 4.2 ist bereits mit einer provisorischen Wellenlängenkalibrierung versehen. Der durch die CCD-Kamera in dieser Einstellung abgedeckte Bereich erstreckt sich von 12 bis 33 nm. Daraus errechnet sich eine mittlere Dispersion von 0.75 nm/mm oder 0.01 nm/px. Zu beachten ist der nichtlineare Zusammenhang der Wellenlängenskala mit der Pixelposition, der die Dispersion mit höheren Wellenlängen abnehmen lässt.

Die Spektrallinien unterliegen auf Grund des Astigmatismus des Gitters einer Krümmung. Zur Visualisierung dieses Effekts ist durch die mit „A“ bezeichnete Linie in Abb. 4.2 eine am rechten Rand mittig platzierte Gerade gelegt. Optische Abbildungen von linienartigen Quellen (Ionenwolke) erfahren durch zylindrische Spiegel eine Krümmung [120], in diesem Fall nach oben, folgt man der Linie von rechts nach links. Um durch diesen Effekt nicht beeinträchtigt zu sein, werden nur Schnitte von 200 px Breite (magenta, Abb. 4.2) ausgewertet, wobei nur die Bereiche 151..350, 351..550 und 551..750 px genutzt werden.

Die mit Pfeil und Großbuchstaben gekennzeichneten Spektrallinien (Messlinien, Tab. 4.1) in Abb. 4.2 sind jene, deren Wellenlänge bestimmt werden soll. Bei A' handelt es sich um die Linie des Übergangs A

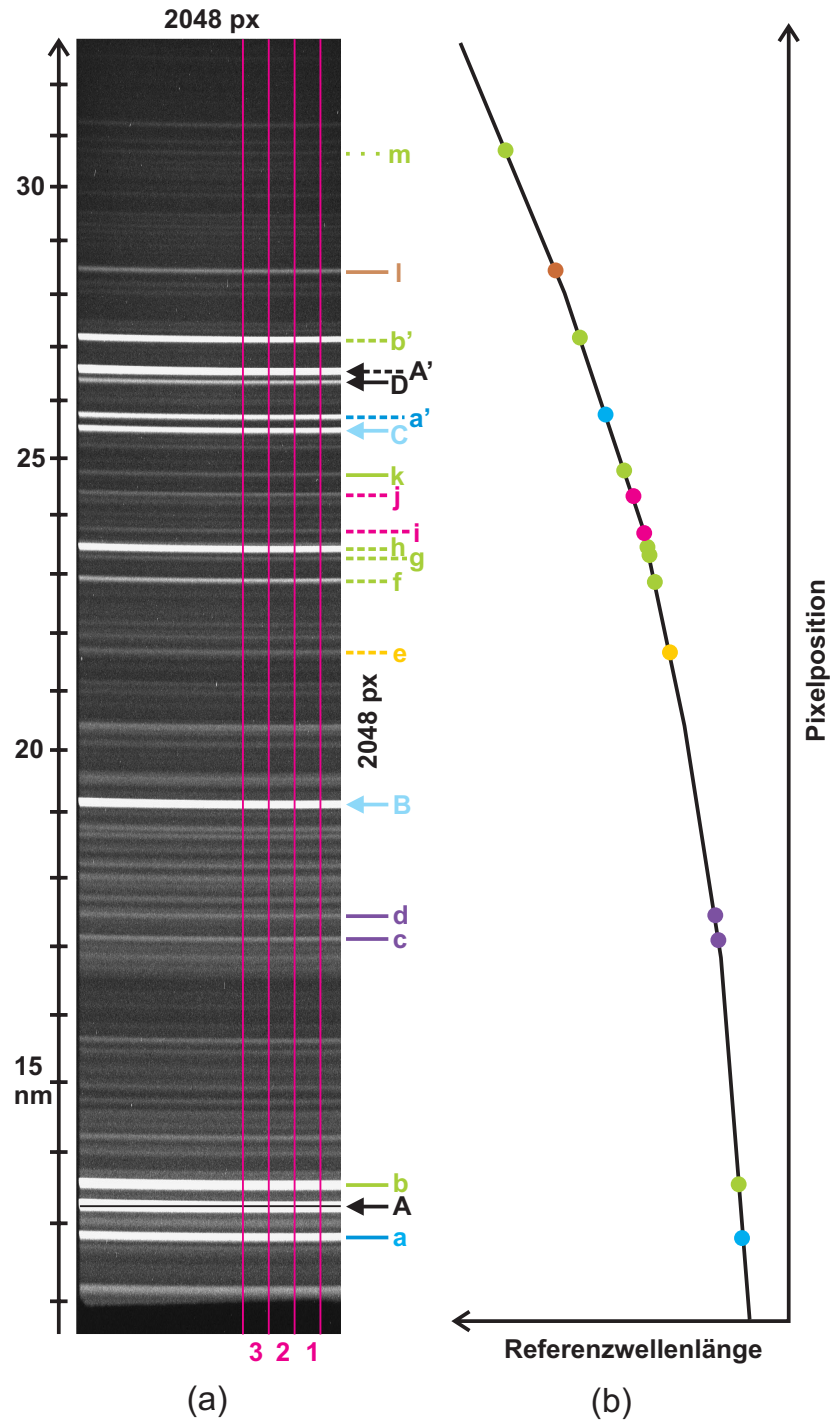


Abbildung 4.2: (a) Aufnahme der Spektrallinien hochgeladener Eisenionen (Fe^{x+} , $x \leq 24$). Die Dimensionen sind $2048 \text{ px} \times 2048 \text{ px}$ entsprechend Abb. 4.1, jedoch in Richtung der Dispersion gestreckt. (b) Dispersionspolynom durch die Kalibrationspunkte zur Wellenlängeneichung.

gemäß Tab. 4.1, jedoch beobachtet in zweiter Beugungsordnung des Gitters. Um die Wellenlängen dieser Linien bestimmen zu können, bedarf es einer Kalibrierung des Spektrums. Dies erfolgt durch Zuordnung beobachteter Linien geeigneter, bekannter und identifizierter Übergänge (kleine Buchstaben in Abb. 4.2 (a)), und Bestimmung des Dispersionpolynoms $\mathcal{P}_n(px)$ durch linearen Ausgleich dieser Kalibrationswellenlängen. Dieses Polynom stellt eine Zuordnungsvorschrift der Pixelposition auf dem CCD-Chip in eine Wellenlänge dar und ist schematisch in Abb. 4.2 (b) dargestellt. Mit Kenntnis der Schwerpunktspositionen der Messlinien in Pixel lassen sich dann die Wellenlängen der Linien A, B, C, D, A' bestimmen.

Von etwa 200 Spektren á 1800 s Aufnahmezeit, die während der Messkampagne zur Fallendiagnostik aufgezeichnet wurden, sind vier besonders geeignete zur Analyse ausgewählt worden. Entsprechend Abb. 4.2 (a) (magenta) werden zu jedem dieser Spektren nur drei Schnitte entlang der Dispersionsrichtung ausgewertet. Aus jedem dieser Schnitte, insgesamt also zwölf, lässt sich eine Projektion der zweidimensionalen Aufnahme auf die x -Achse (entlang der Dispersion) durchführen, als Beispiel sei Abb. 4.3 gegeben. In diesen Projektionen werden jeweils die Schwerpunkte (in Pixel) der Kalibrations- und Messlinien bestimmt. Durch Aufstellen des Dispersionpolynoms für jeden dieser Schnitte erhält man zwölf unabhängige Wellenlängenwerte für jede Messlinie. Die Wellenlänge des Übergangs wird dann durch Mittelwertbildung ermittelt.

4.2.1 Eigenschaften der ausgewählten Aufnahmen

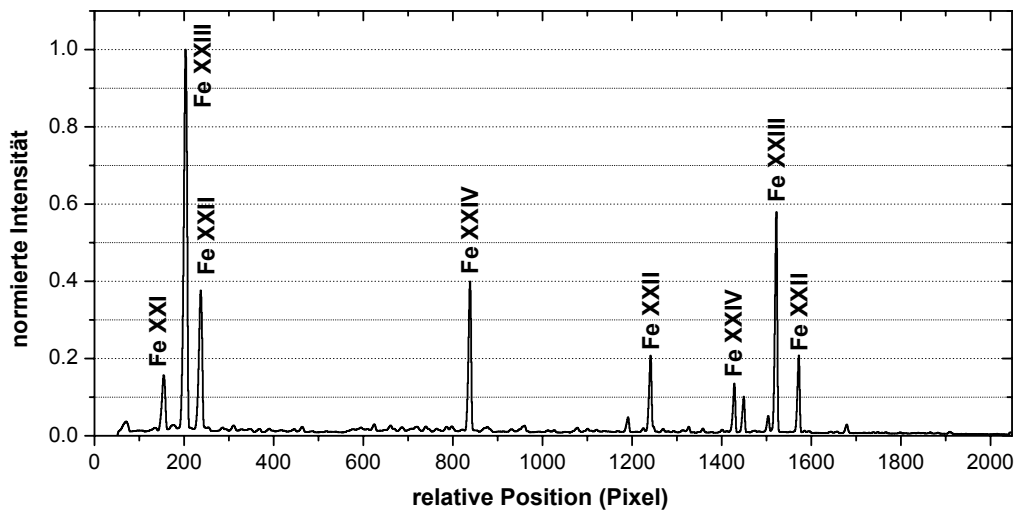
Jeder der einzelnen Projektionen wird individuell kalibriert. Besondere Beachtung muss Linienüberlagerungen gegeben werden (*Blends*). Sind diese durch das Spektrometer nicht auflösbar, ergeben sich potentielle Fehlerquellen in der Feststellung der Linienschwerpunkte. Die vier ausgewerteten Aufnahmen stellen jene mit dem besten Signal-zu-Rauschverhältnis dar, womit auch der Anteil von *Blends* an den Spektrallinien minimiert wird.

Vor Auswertung der Daten werden die Aufnahmen von dem unabhängig gemessenen Untergrund befreit. Die Beiträge die durch Einschläge kosmischer Teilchen, die typischerweise in wenigen lokalisierten Pixeln zur Sättigung des Signals führen, werden durch geeignete Diskriminatorschwellen entfernt.

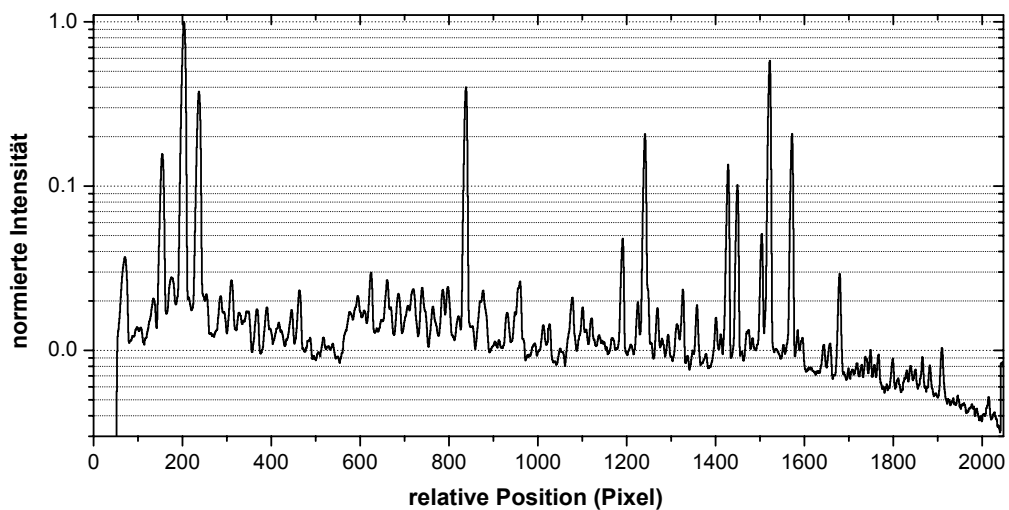
Die Betriebsparameter der EBIT während der vier Aufnahmen waren etwa gleich und sind unter Einstellung „A“ in Tab. 4.3 zusammengefasst.

| Einstellung | Elektronenstrom (mA) | Beschleunigungsspannung (kV) | Falltiefe (V) | Gaseinlass |
|-------------|----------------------|------------------------------|-----------------|--------------------------|
| A | 440 | 5.15 | $-200 + Q_{RL}$ | $\text{Fe}(\text{CO})_5$ |

Tabelle 4.3: EBIT-Parameter. Die Beschleunigungsspannung unterscheidet sich von der tatsächlichen Energie der Elektronen um den Betrag der Raumladung. Eine positive Falltiefe meint ein Ionen akkumulierendes Kastenpotential. Q_{RL} ist der Betrag der Raumladung der Elektronen und im Rahmen der Notation immer positiv.



(a)



(b)

Abbildung 4.3: Projektion eines Schnittes gemäß Abb. 4.2(a) auf die Achse entlang der Dispersion. (b) in logarithmischer Darstellung.

4.3 Identifikation der Spektrallinien

Befindet sich die Ladungsbilanz (Kap. 3) in einer EBIT im stationären Zustand entsprechend Kap. 3, so sind die relativen Häufigkeiten einzelner Ladungszustände in erster Linie eine Funktion der gewählten Elektronenstrahlenergie (Abb. 3.8) und der Dichte der neutralen Teilchen, die durch den Gasfluss bestimmt ist. Tab. 4.2 zeigt die Schwellenenergie zur Erzeugung verschiedener Ladungszustände des Eisens. Entsprechend der gewählten Elektronenstrahlenergie konnten theoretisch alle Ladungszustände bis hinauf zum He-artigen Eisen erzeugt werden. Ein Blick auf Abb. 4.3 zeigt, dass die dominierenden Spektrallinien

den höchsten Ionisationszuständen Fe XXI–XXIV¹ zugeordnet sind.

Zur Identifikation anderer Spektrallinien wurden alle bei NIST [96] bekannten Übergänge der Ladungszustände Fe XI–XII im Bereich von 5–35 nm (etwa 800 Stück) auf ihr Vorhandensein in den Spektren geprüft. Genauso wurde mit den zweiten und dritten Beugungsordnung der stärkeren dieser Linien verfahren. Darüber hinaus wurden die Bereiche um die einzelnen Mess- und Kalibrationslinien auch auf etwaige Spuren von Fe VII–X² verglichen. Jeder dieser untersuchten Linien konnte nach Abschluss der Verfahrens eine Obergrenze für ihre Intensität im Spektrum und eine Unsicherheit bezüglich dieses Wertes zugeordnet werden. Die Abschätzung der Intensität verlief in der großen Mehrheit der Fälle über Berücksichtigung der Übergangswahrscheinlichkeiten und *branching ratios* (Verzweigungsverhältnisse) eines Übergangs. Dabei geht man typischerweise folgendermaßen vor: Einer vorhandenen Spektrallinie soll der Übergang $a \rightarrow b$ eines speziellen Ladungszustands mit Übergangsrate A_{ab} zugeordnet werden. Existiert ein weiterer Übergang des gleichen Ausgangszustands $a \rightarrow c$, so lässt sich dessen Beitrag anhand der Übergangsraten A_{ab} und A_{ac} abschätzen.

Ein Vergleich mit Spektren unter Einstellung „A“ gemäß Tab. 4.3, jedoch ohne Injektion von Eisenpentacarbonyl, zeigte, dass keine Barium-, Wolfram- und Molybdän-Linien zu den Spektren beitragen. Der Einlass von Kohlenstoff und Sauerstoff als CO₂ zeigte ferner, dass auch diese Elemente auf die Spektren bei den gewählten Elektronenstrahlenergien ohne Einfluss sind. Die Ionen leichter Elemente wie C und O werden durch Stöße sehr schnell so heiß, dass sie die Falle axial verlassen können. Entsprechend Tab. 4.3 wurde eine Falle geringer Potentialtiefe gewählt, die dieses Evaporieren weiter begünstigt. Für leichte Elemente ist es unter Präsenz schwererer und höher geladener Ionen, wie im Falle von Eisen, nicht möglich, im Elektronenstrahl zu verbleiben; nur dort können Anregungen von Übergängen stattfinden. Dies erklärt, warum die Linien leichter Ionen in vorliegender Situation keinen Beitrag zu den Spektren leisten.

4.3.1 Das Dispersionspolynom

Als Näherung für die Dispersionsfunktion (Abb. 4.2 (b)) wird ein kubisches Polynom angesetzt. Dies ist sowohl von theoretischen Überlegungen [118], als auch durch die experimentelle Erfahrung [119] gedeckt. Die vorliegende Dispersion wird sowohl schlechter durch ein Polynom quadratischer, als auch vierter Ordnung beschrieben. Die erste Ableitung des Polynoms sollte darüber hinaus monoton steigend sein, denn es darf innerhalb des Definitionsbereichs auf Grund der Dispersionseigenschaften keine lokalen Maxima oder Wendepunkte geben.

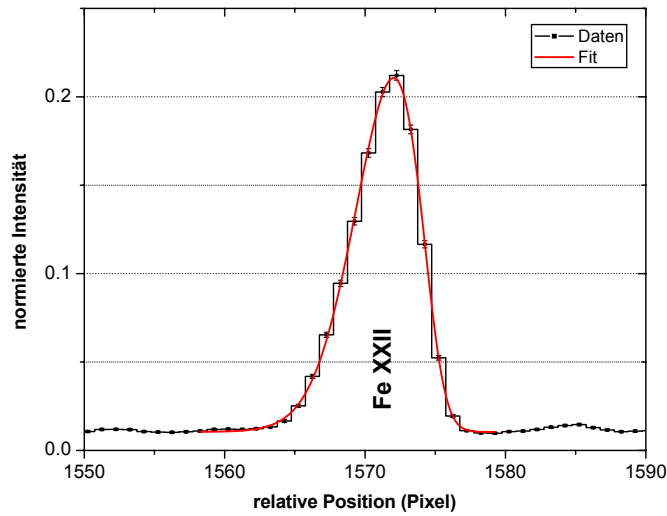
4.3.2 Die Bestimmung der Linienschwerpunkte

Die Intensität $I_{\text{Nat}}(E)$ in Abhängigkeit der Energie E des abgestrahlten Lichtes ist bei einem atomaren Übergang eine symmetrische Funktion in E bezüglich der Schwerpunkts-

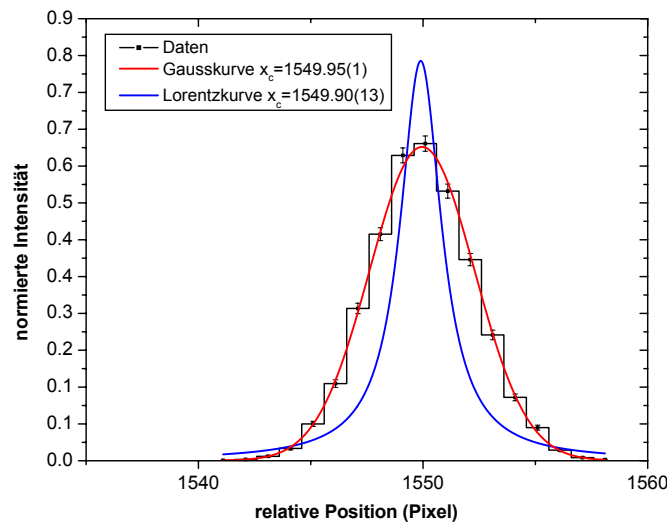
¹He-artiges Eisen emittiert bei gegebenen Bedingungen praktisch nicht im überwachten Spektralbereich.

²Fe I–VI zeigen keine Emission im überdeckten Spektralbereich.

4.3. Identifikation der Spektrallinien



(a)



(b)

Abbildung 4.4: (a) Aufgrund eines Defokussiereffekts sind die Linien der genommenen Spektren asymmetrisch. (b) Gauss und Lorentzfit an generierte symmetrische Daten.

energie E_0 [132]. Wegen des nichtlinearen Zusammenhangs zwischen E und der Wellenlänge λ gilt dies für $I_{\text{Nat}}(\lambda)$ nur noch in erster Näherung. Da Spektrallinien aber normalerweise ausreichend schmal sind, sei die Symmetrie auch für $I_{\text{Nat}}(\lambda)$ angenommen.

Abb. 4.4 (a) zeigt die vermutlich „reinste“ Linie in den ausgewerteten Spektren. Es handelt sich um die Spektrallinie b' gemäß Tab. 4.4 oder Abb. 4.2 (a), welche nicht durch innerhalb dieser liegenden, weiterer verborgener Linien (*Blends*) beeinträchtigt gilt. Leider ist diese Linie asymmetrisch. Dieser systematischer Effekt, der alle Linien dieser Spektren betrifft, wird möglicherweise hervorgerufen durch eine Defokussierung des Spektrometers, wie berichtet in Kap. 3.

Abb. 4.4 (b) zeigt ein Beispiel einer (fiktiven) symmetrischen Spektrallinie. Statistisch normalverteilte Daten um $x_c = 1550.0$ px werden in dieser Abbildung zum einen mittels einer Gauss'schen Kurve mit Ergebnis $x_{c,G} = 1550.95(1)$ px, und zum anderen mittels einer Lorentzkurve mit $x_{c,G} = 1550.90(13)$ px ausgeglichen. Man stellt fest, dass die zur Beschreibung der Daten wenig geeignete Lorentzkurve dennoch einen im Rahmen des Fehlers exakten Wert für den Schwerpunkt der Datenpunkte liefert. Symmetrische Daten sind, was die Bestimmung des Schwerpunkts angeht, tendenziell „gutmütig“ bezüglich der Wahl der symmetrischen Ausgleichsfunktion.

Die gemessene Intensität der Spektrallinien $I_A(px)$ im asymmetrischen Fall (Abb. 4.4 (b)) ergibt sich aus einer Faltung der symmetrischen Spektrallinie $I_{\text{Nat}}(px)$ mit einer unsymmetrischen Apparatefunktion $F_A(px)$. Zum tatsächlichen Schwerpunkt kommt man nur, falls man diese Faltung rückgängig macht und sich so $I_{\text{Nat}}(px)$ besorgt. Diese Vorgehensweise ist allerdings für vorliegende Anforderungen nicht zwingend notwendig, falls folgendes gilt:

$$\mathcal{S}(I_{\text{Nat}}(px)) + \mathcal{P}_3(px) = \mathcal{M}(I_A(px)) + \epsilon \quad \epsilon \ll 1. \quad (4.1)$$

Hierbei steht $\mathcal{S}(I_{\text{Nat}}(px))$ für den unbekanntes Schwerpunkt der symmetrischen Spektrallinien (in px), $\mathcal{M}(I_A(px))$ ist der Maximumwert (wahrscheinlichster Wert, in px) der gemessenen Daten, wobei deren Differenz in Pixel ausreichend gut als ein Polynom dritten Grades beschrieben ist. Wenn dieses Polynom die Eigenschaften des Dispersionspolynoms besitzt, so wird der offensichtliche Fehler, betrachte man den Maximumwert der asymmetrischen Linie als Schwerpunkt einer symmetrischen Linie, durch das Dispersionspolynom aufgefangen. Anders ausgedrückt, da die Kalibrationslinien in jedem Bereich des Spektrums eine Asymmetrie aufweisen, gleich derer der Messlinien, kann das Dispersionspolynom korrekt die Wellenlängen dieser Linien wiedergeben. Es ist an dieser Stelle nicht nötig, genauere Forderungen an das Polynom in Gl. (4.1) zu spezifizieren, denn werden die von diesem nicht erfüllt, wird auffallen, dass die Daten nicht ausreichend gut durch ein Polynom dritten Grades beschrieben werden.

Es bleibt für $\mathcal{M}(I_A(px))$ der diskreten Datenpunkte eine Näherung zu finden. Dafür kann folgende empirisch aufgestellte, asymmetrische Funktion konstruiert werden:

$$I_{\text{Fit}}(px) = y_0 + \frac{c_0 A}{\left(1 + 0.1 \exp\left(c_1 \frac{1.6(x_c - px + c_2 FWHM)}{FWHM}\right)\right)^2 + \left(1 + 0.2 \exp\left(c_1 \frac{2.9(px - x_c - c_2 FWHM)}{FWHM}\right)\right)^4} - 1 \quad (4.2)$$

mit den Konstanten $c_0 = 1.687942$, $c_1 = 1.507290$, $c_2 = 0.289358$, sowie den vier freien Parametern Amplitude A , Maximum bei x_c , Halbwertsbreite $FWHM$ und Grundlinie y_0 . Diese Formel fußt prinzipiell auf einer Zerlegung der symmetrischen Gausskurve in eine linke und rechte Flanke [133]. Entsprechend Abb. 4.4 (a) beschreibt $I_{\text{Fit}}(px)$ (rot) die Daten (schwarz) bei einem reduzierten $\chi^2 = 1.7$ [134] praktikabel. Allerdings lassen sich mittels $I_{\text{Fit}}(px)$ die Daten nicht über den gesamten beobachteten Spektralbereich ausreichend gut beschreiben, so dass ein flexibleres Verfahren benötigt wird.

4.3. Identifikation der Spektrallinien

Als eine Alternative werden die Linienprofile mittels kubischer B-Splines [135] interpoliert und deren Maxima bestimmt. Da bei diesem Verfahren, im Gegensatz zum Ausgleich mittels einer Funktion, nur die unmittelbaren Nachbarpunkte den Wert an einem Punkt beeinflussen, ist zu erwarten, dass nur bei ausreichend hoher statistischer Signifikanz in den Daten ein akzeptables Ergebnis erreicht werden kann. Darüber, inwieweit die kubischen B-Splines geeignet sind, lokale Maxima in den Datensätzen zu finden, soll folgender Test Aufschluss geben. Um das Ergebnis, welches durch die Spline-Interpolation gewonnen wird, bewerten zu können, wird ein statistisch streuender künstlicher Datensatz generiert, der in statistischer Signifikanz und Streuung mit den Daten in Abb. 4.4 (a) vergleichbar ist. Die Grundverteilung der generierten Daten folgt dabei $I_{\text{Fit}}(px)$. x_c wird dabei vorgegeben und dann geprüft ob die Interpolation mittels B-Spline diesen Wert reproduziert. Die x -Werte der Datenpunkte (px) laufen immer von $-14, -13, \dots, 13, 14$, und x_c wird dabei immer so gewählt, dass $x_c = 0 + i$ wobei $i * 10 = 1, 2, \dots, 9$, was dazu führt, dass das nominelle Maximum nicht grundsätzlich mit einem Datenpunkt zusammenfällt. Abb. 4.5 zeigt das Ergebnis der Interpolation mittels kubischer B-Splines von 150 generierten Datenkurven, wobei in diesem Beispiel $i = 0.3$ gesetzt war. Im Mittel reproduzieren die Splines also den gesetzten Wert von $x_c = 0.3$. Dies gilt auch für anders gewählte i . Die Standardabweichung der einzelnen Fits beträgt in diesem Beispiel etwa 0.06 px . Die Interpolation mittels kubischen B-Splines wird auf Basis der vorliegenden typischen statistischen Signifikanz in den experimentellen Daten als geeignet angesehen. Auch hier gilt, sollte dies nicht der Fall sein, wird die Konstruktion des Dispersionspolynoms darüber Aufschluss geben. Die so bestimmten Orte der Maxima (in Pixel) für Kalibrationslinien und Messlinien müssen auf die etwaige Mischung mit *Blends* korrigiert werden. Dies führt im Allgemeinen zu einer Verschiebung des zunächst bestimmten Maximums, was im nächsten Abschnitt

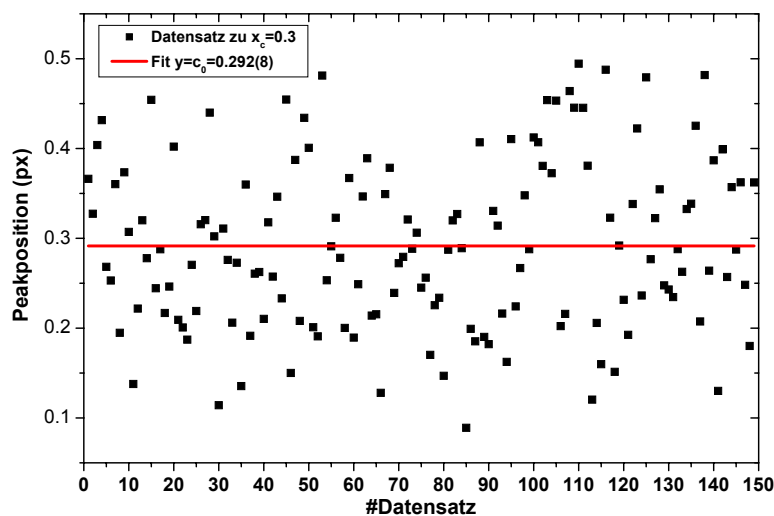


Abbildung 4.5: Simulation von B-Spline-Fits an 150 zufallsgenerierte unsymmetrische Spektrallinien (mit Erwartungswert $x_c = 0.3$) zur Maximumbestimmung.

diskutiert wird.

4.3.2.1 Die Kalibrationslinien

In Tab. 4.4 sind die verwendeten Kalibrationslinien aufgelistet. Die zweite Spalte gibt die Beugungsordnung der Linie an, unter der die Linie aufgezeichnet wird, die dritte Spalte die zur stärksten Linie A normierte Amplitude der Spektrallinie. Die vierte Spalte gibt

| Linie | Ordnung | normierte Amplitude | Referenzwellenlänge (nm) | Wellenlänge der Blends (nm) | normierte Amplitude | Korrektur (px) | Gesamtfehler (nm) |
|-------|---------|---------------------|--------------------------|-----------------------------|---------------------|----------------|-------------------|
| a | 1 | 0.16 | Fe XXI 12.8755(5) | 12.8278 | 0.002(2) | +0.025 | 0.001 |
| b | 1 | 0.33 | Fe XXII 13.5812(5) | 13.653 | 0.005(5) | -0.01 | 0.0007 |
| c | 1 | 0.03 | Fe XI 17.1073(4) | 16.954 | 0.009(0) | +0.1 | 0.0025 |
| | | | | 17.058 | 0.002(1) | | |
| d | 1 | 0.03 | Fe X 17.4531(2) | 17.331 | 0.002 | -0.04 | 0.0025 |
| | | | | 17.3544 | 0.0015 | | |
| | | | | 17.405 | 0.003 | | |
| | | | | 17.5266 | 0.003 | | |
| | | | | 17.5474 | 0.002 | | |
| e | 2 | 0.02 | Fe XIX 21.6710(10) | 21.552 | 0.008(1) | +0.16 | 0.0025 |
| | | | | 21.6228 | 0.003 | | |
| | | | | 21.6498 | 0.001(1) | | |
| | | | | 21.6898 | 0 | | |
| | | | | 21.730 | 0.002(2) | | |
| f | 2 | 0.05 | Fe XXII 22.8824(10) | | | 0 | 0.0016 |
| g | 2 | 0.02 | Fe XXII 23.2528(10) | 23.3234 | 0.002 | -0.11 | 0.0026 |
| | | | | 23.4288 | 0.2 | | |
| h | 2 | 0.2 | Fe XXII 23.4288(10) | 23.3234 | 0.001(1) | -0.04 | 0.0013 |
| | | | | 23.5002 | 0.009(1) | | |
| i | 2 | 0.025 | Fe XXI 23.7394(10) | 23.8477 | 0.007 | 0 | 0.0026 |
| j | 2 | 0.025 | Fe XX 24.3716(10) | 24.1739 | 0.001(1) | -0.05 | 0.0026 |
| | | | | 24.207 | 0.0025 | | |
| | | | | 24.2462 | 0.001 | | |
| | | | | 24.2834 | 0.002(1) | | |
| | | | | 24.3794 | 0.001(1) | | |
| k | 1 | 0.02 | Fe XXII 24.719(3) | 24.6208 | 0.002(1) | -0.11 | 0.004 |
| | | | | 24.7668 | 0.002(1) | | |
| | | | | 24.6987 | 0 | | |
| a' | 2 | 0.1 | Fe XXI 27.7190(10) | 25.642 | 0.002(2) | +0.03 | 0.0011 |
| | | | | 25.7264 | | | |
| b' | 2 | 0.2 | Fe XXII 27.1625(10) | | | 0 | 0.0011 |
| l | 1 | 0.03 | Fe XV 28.4164(5) | 28.3914 | 0.0015(5) | -0.38 | 0.0025 |
| | | | | 28.4296 | 0.005(1) | | |
| | | | | 28.4556 | 0.005(1) | | |
| m | 3 | 0.01 | Fe XXI 30.6648(15) | | | 0 | 0.0036 |

Tabelle 4.4: Liste der verwendeten Kalibrationslinien. Die Wellenlängen sind [96, 136] entnommen. Der Gesamtfehler ist vom statistischen Fehler in der Bestimmung des Linienmaximums und vom absoluten Fehler in der Referenzwellenlänge bestimmt. Ein systematischer Fehler in der Korrektur der Position (7. Spalte) auf Grund von *Blends* ist viel kleiner als die statistischen Fehler einer jeden Linie und für zwei verschiedene Kalibrationslinien unkorreliert, so dass dieser das Dispersionpolynom nur statistisch beeinflusst. Dieser Fehler bleibt daher unberücksichtigt.

4.3. Identifikation der Spektrallinien

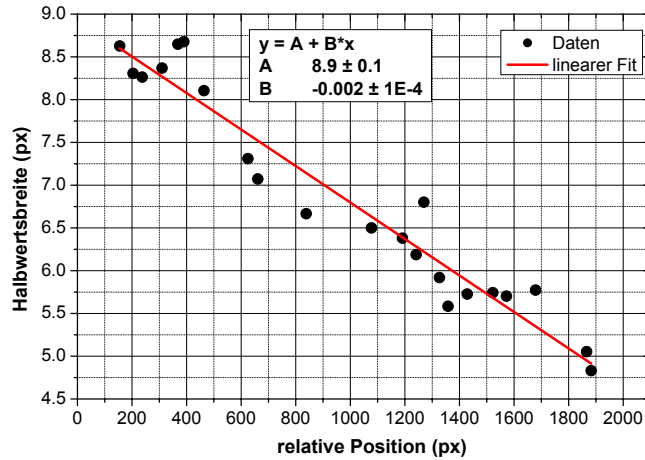


Abbildung 4.6: Halbwertsbreite der Spektrallinien in Abhängigkeit der Pixelposition.

die verwendete Referenzwellenlänge³ an und die Fünfte die Wellenlängen der *Blends*, die diese Kalibrationslinie beeinflussen. In der sechsten Spalte finden sich deren relativen Amplituden, während die siebte Spalte die ermittelte Verschiebung des zu bestimmenden Maximums auf Grund der *Blends* wiedergibt. Die letzte Spalte beinhaltet den Gesamtfehler der Kalibrationslinie. Dieser ist ein Wellenlängenfehler und ergibt sich durch quadratische Addition des Fehlers in der Lagebestimmung des Maximum und des Fehlers der Referenzwellenlänge (dritte Spalte). Als ein x -Fehler muss erstgenannter über die mittlere Steigung des Dispersionspolynoms von 0.0081 nm/px in einen y -Fehler umgerechnet werden. Zur Korrektur des Maximums wurden die *Blends* mittels Gl. (4.2) angenähert. Dabei wurde eine von der relativen Position abhängige Halbwertsbreite gemäß Abb. 4.6 angenommen. Der tatsächliche Wert der Korrektur ergibt sich aus einer statistischen Simulation der einzelnen möglichen Amplituden und deren Fehler.

4.3.2.2 Die Messlinien

Tab. 4.5 gibt die zu Tab. 4.4 analoge Auflistung der Messlinien.

4.3.3 Aufstellung des Dispersionspolynoms

Es gilt die unbekannt Koeffizienten a , b , c , d des Dispersionspolynoms

$$\lambda_{\text{Disp}}(x_{\text{px}}) = a + b x_{\text{px}} + c x_{\text{px}}^2 + d x_{\text{px}}^3 \quad (4.3)$$

zu bestimmen. Dazu muss ein überbestimmtes Gleichungssystem gelöst werden. Zuvor definiert man für jede Kalibrationslinie, hier am Beispiel der Linie „a“, mit W_a die Referenzwellenlänge der Linie und mit w_a den Gesamtfehler selbiger entsprechend Tab. 4.4

³Bereits mit der Beugungsordnung multipliziert.

| Linie | Ordnung | normierte Amplitude | Wellenlänge der Blends(nm) | normierte Amplitude | Korrektur (px) | Gesamtfehler (nm) |
|-------|---------|---------------------|----------------------------|---------------------|----------------|---|
| A | 1 | 1 | FeXX 13.2850 | 0.2 | +0.02(1) | 0.0008 _{stat.} + 0.0001 _{system.} |
| | | | ? 13.380 | 0.030(3) | | |
| B | 1 | 0.27 | Fe XII 19.1045 | 0.017(2) | +0.0(1) | 0.0008 _{stat.} + 0.0008 _{system.} |
| | | | Fe XII 19.0459 | 0.01(1) | | |
| | | | Fe XI 19.2020 | 0.014(2) | | |
| | | | Fe X 19.2244 | 0.002(1) | | |
| | | | Fe XII 19.2394 | 0.008(1) | | |
| | | | Fe XI 19.2641 | 0.008(1) | | |
| | | | Fe XI 19.2819 | 0.014(2) | | |
| | | | Fe XII 19.3509 | 0.015(2) | | |
| C | 1 | 0.13 | Fe XXI 25.408 | 0.005(2) | 0 | 0.0008 _{stat.} |
| D | 1 | 0.05 | | | 0 | 0.0016 _{stat.} |
| A' | 2 | 0.57 | Fe XIV 26.4785 | 0.0025(10) | +0.02(1) | 0.0008 _{stat.} + 0.0008 _{system.} |
| | | | Fe XX 26.5770 | 0.020(2) | | |

Tabelle 4.5: Liste der Messlinien. Die Wellenlängen sind [96,136] entnommen. Der Gesamtfehler ergibt sich aus dem statistischen Fehler in der Positionsbestimmung des Maximums der Spektrallinie und einem systematischen Fehler, nämlich dem Fehler der Korrektur der Pixelposition (6. Spalte) auf Grund von *Blends*.

und Tab. 4.5. x_{px} steht für die bestimmte Position des Maximums der Linie. Die ähnlichen Gleichungen der verschiedenen Kalibrationslinien bilden folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{aligned}
 I : \quad W_a &= a + b x_{px,a} + c x_{px,a}^2 + d x_{px,a}^3 \\
 II : \quad W_c &= a + b x_{px,c} + c x_{px,c}^2 + d x_{px,c}^3 \\
 III : \quad W_d &= a + b x_{px,d} + c x_{px,d}^2 + d x_{px,d}^3 \\
 &\quad \bullet \bullet \bullet \\
 X : \quad W_k &= a + b x_{px,k} + c x_{px,k}^2 + d x_{px,k}^3 \\
 XI : \quad W_{b'} &= a + b x_{px,b'} + c x_{px,b'}^2 + d x_{px,b'}^3 \\
 XIII : \quad W_l &= a + b x_{px,l} + c x_{px,l}^2 + d x_{px,l}^3 \\
 XIII : \quad W_n &= a + b x_{px,n} + c x_{px,n}^2 + d x_{px,n}^3 .
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

Hierbei gilt es zu beachten, dass die Linie a und ihre zweite Ordnung a', sowie b und die zweite Ordnung b' nur jeweils einmal auftauchen können, da die tatsächlichen Wellenlängen dieser Linien nicht unabhängig sind. Daher finden sich im Gleichungssystem (4.4) nur a und b'. Um die Bedingung über die zweite Ordnung in korrekter Weise einzubringen, sind folgende Gleichungen hinzuzufügen:

$$\begin{aligned}
 XIV : \quad 0 &= a + b(2x_{px,a} - x_{px,a'}) + c(2x_{px,a}^2 - x_{px,a'}^2) + d(2x_{px,a}^3 - x_{px,a'}^3) \\
 XV : \quad 0 &= a + b(2x_{px,b} - x_{px,b'}) + c(2x_{px,b}^2 - x_{px,b'}^2) + d(2x_{px,b}^3 - x_{px,b'}^3) \\
 XVI : \quad 0 &= a + b(2x_{px,A} - x_{px,A'}) + c(2x_{px,A}^2 - x_{px,A'}^2) + d(2x_{px,A}^3 - x_{px,A'}^3) .
 \end{aligned} \tag{4.5}$$

In der letzten Gleichung in (4.5) wird die Information über die zweite Ordnung A' der Messlinie A ausgenutzt, dabei muss in keiner Weise ihre Wellenlänge bekannt sein.

4.3. Identifikation der Spektrallinien

| Dispersionspolynom | reduziertes χ^2 | Koeffizient a (nm) | Koeffizient b (nm/px) | Koeffizient c (nm/px ²) | Koeffizient d (nm/px ³) |
|--------------------|----------------------|--------------------|-----------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|
| 1 | 1.17 | 11.5987(23) | .008066(14) | .124(2) $\times 10^{-5}$ | -0.45(6) $\times 10^{-10}$ |

Tabelle 4.6: Berechnete Koeffizienten (Gl. (4.3)) am Beispiel des Dispersionspolynoms der unter „1“ geführten Messung. Die Fehler geben das 68% Vertrauensintervall an.

In einer Schreibweise mit Matrizen und Vektoren ergibt sich für die Gl. (4.4), (4.5):

$$\begin{pmatrix} 1 & x_{\text{px},a} & x_{\text{px},a}^2 & x_{\text{px},a}^3 \\ 1 & x_{\text{px},c} & x_{\text{px},c}^2 & x_{\text{px},c}^3 \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ 1 & (2x_{\text{px},A} - x_{\text{px},A'}) & (2x_{\text{px},A}^2 - x_{\text{px},A'}^2) & (2x_{\text{px},A}^3 - x_{\text{px},A'}^3) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W_a \\ W_c \\ \bullet \\ \bullet \\ \bullet \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

oder in kurzer Darstellung:

$$\mathbf{X}\mathbf{k} = \mathbf{W}, \quad (4.7)$$

wobei \mathbf{X} für die 4×16 -Matrix steht, \mathbf{k} den Vierervektor der gesuchten Koeffizienten des Polynoms bildet und \mathbf{W} den 16-zeiligen Vektor der Pixelpositionen darstellt.

Die Lösung dieses Problems „kleinster Quadrate“ ist dann gefunden, wenn das Quadrat der Differenz $\mathbf{X} * \mathbf{k} - \mathbf{W}$ minimiert ist. Dies ist äquivalent der Lösung der Gleichung [137]:

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{k} = \mathbf{X}^T \mathbf{W}, \quad (4.8)$$

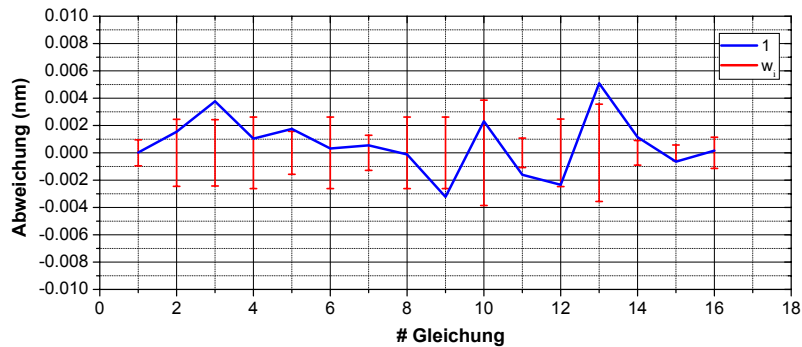
mit der durch T gekennzeichneten transponierten Matrix. Um den ungleichen Gesamtfehlern der einzelnen Linien (Tab. 4.4 und Tab. 4.5) zu wichten, müssen vor Aufstellen der Gl. (4.8) die Gleichungen (4.4) mit einem Faktor $1/w$ multipliziert werden, also (I) mit $1/w_a$, (II) mit $1/w_c$ usw. Bei den Gleichungen (4.5) wird mit dem Reziproken der quadratischen Addition der Fehler aus der Positionsbestimmung von erster und zweiter Ordnung multipliziert, da der Fehler der Referenzwellenlänge keinen Einfluss hat.

Mittels Gl. (4.8) können die Koeffizienten für die 12 Dispersionspolynome berechnet werden. Tab. 4.6 zeigt die Koeffizienten am Beispiel eines Dispersionspolynoms. Abb. 4.7 (a) zeigt hierzu die Residuen (blau) und die Fehler w_i (rot) für das Dispersionspolynom „1“ für die Gleichungen (4.4) und (4.5). Die Residuen berechnen sich durch Einsetzen der Koeffizienten in die rechten Seiten (RHS) der Gleichungen (4.4) und (4.5) und Subtraktion der linken Seite (LHS) von diesem Wert. Im Mittel sollten die Residuen eines Dispersionspolynoms gerade den angenommenen Fehlern w_i entsprechen. Abb. 4.7 (b), (c) sind die Residuen aller zwölf Polynome aufgetragen, allerdings im Gegensatz zu (a) in einer relativen Darstellung bezüglich des Fehlers w_i . Auf der Ordinate ist

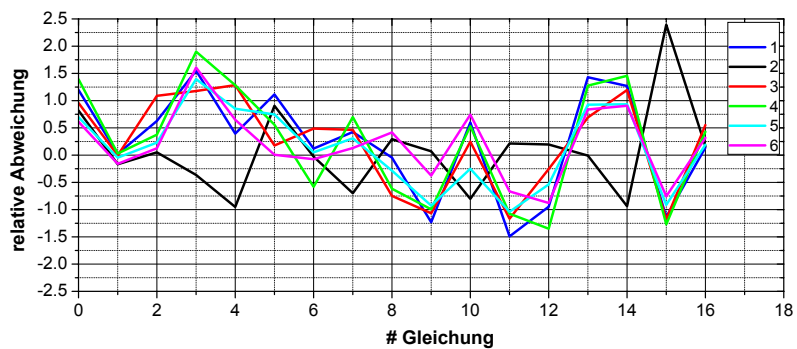
$$\frac{\text{LHS}(i) - \text{RHS}(i)}{w_i} \quad (4.9)$$

aufgetragen⁴, also ein Residuum in Einheiten des Fehlers w_i . Die Residuen jeder Gleichung sollten demnach nicht mehr zwischen $\pm w_i$ schwanken, sondern zwischen ± 1 . Diese reduzierten χ^2 der Polynome sind in $x = 0$ in Abb. 4.7 (b), (c) dargestellt. Die Werte

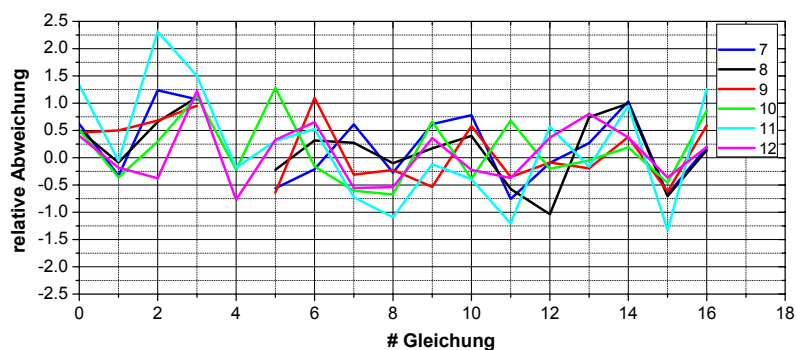
⁴Am Beispiel von Abb. 4.7 (a) werden Datenpunkte (blau) durch die entsprechenden Fehler (rot) geteilt.



(a)



(b)



(c)

Abbildung 4.7: Kalibrierung der Dispersionskurve des FFGS. (a) Residuen (blau) am Beispiel eines Dispersionspolynoms („1“). In rot sind die zugeordneten Geamtfehler der Gleichungen dargestellt. (b+c) Relative Abweichung (definiert nach Gl. (4.9)) der 12 Dispersionspolynome bezüglich der 16 Gleichungen Tab. 4.4 und Tab. 4.5. Zum x -Wert Null ist das reduzierte χ^2 des jeweiligen Polynoms aufgetragen. (b) Messung (Polynom) 1–6 und (c) Messung (Polynom) 7–12.

4.3. Identifikation der Spektrallinien

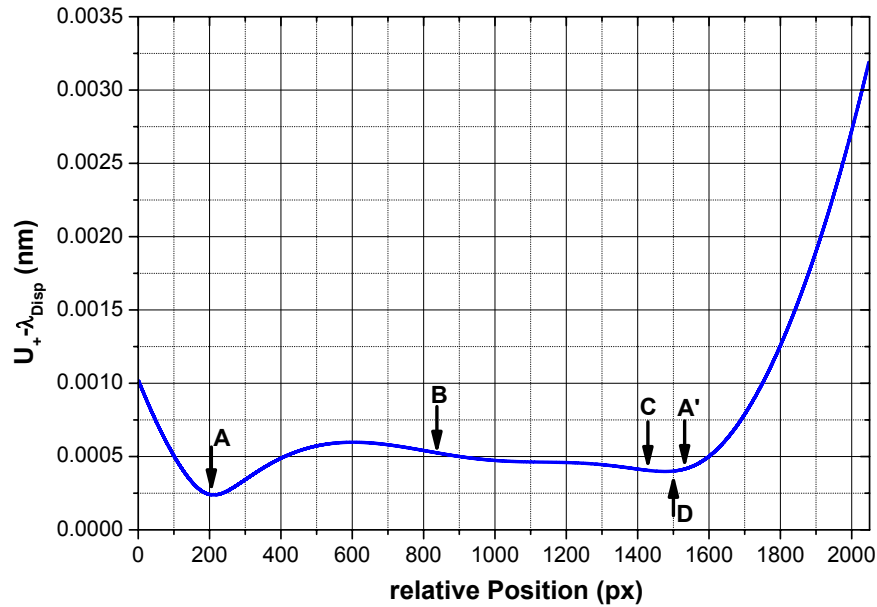


Abbildung 4.8: Typischer Verlauf, am Beispiel einer der zwölf Projektionen, der Differenz zwischen oberem Vertrauensband und Dispersionspolynom. Das untere Band liegt spiegelsymmetrisch zur x -Achse. Die Wahrscheinlichkeit, dass der Mittelwert $\bar{\lambda}_{\text{Disp}}(x_{\text{px}})$ innerhalb der Bänder liegt beträgt hier 68%.

für die reduzierten χ^2 liegen fast ausnahmslos unter Eins, was bedeutet, dass die Fehler (konservativ) überschätzt wurden.

4.3.4 Bestimmung der Wellenlängen der Messlinien

Unter Verwendung des so optimierten Dispersionspolynoms lassen sich nun auch die Wellenlängen der vier Messlinien bestimmen. Entscheidend ist hier neben dem tatsächlichen Wert auch der Fehler mit dem dieser Wert angegeben werden kann. Um diesen zu berechnen, können ein oberes ($U_+(x_{\text{px}})$) und unteres Vertrauensband ($U_-(x_{\text{px}})$) [138] um das jeweilige Polynom konstruiert werden. Diese symmetrisch zum Dispersionspolynom liegenden Bänder werden bezüglich eines Parameters α ($0 < \alpha < 100\%$) konstruiert und geben dann die Grenzen an, innerhalb derer der Mittelwert des Dispersionspolynoms an einer Stelle x_{px} mit Wahrscheinlichkeit α liegt.

$$U_{\pm}(x_{\text{px}}) = \lambda_{\text{Disp}}(x_{\text{px}}) \pm t_{\text{dof},\alpha} [\chi_{\text{red}}^2 \mathbf{f}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{f}]^{1/2} \quad (4.10)$$

$$\text{mit } \mathbf{f}^T = \left(\frac{\partial \lambda_{\text{Disp}}}{\partial a}, \frac{\partial \lambda_{\text{Disp}}}{\partial b}, \frac{\partial \lambda_{\text{Disp}}}{\partial c}, \frac{\partial \lambda_{\text{Disp}}}{\partial d} \right), \quad (4.11)$$

sowie dem Parameter $t_{dof,\alpha}$, der von der Anzahl freier Parameter $dof = 16 - 4 = 12$ abhängt und über folgende Integralgleichung bestimmt ist:

$$\int_{-t'}^{t'} \rho_{\text{stud}}(t, dof) dt = \alpha/100, \quad (4.12)$$

wobei nach $t_{dof,\alpha} \equiv t'$ aufzulösen ist und ρ_{stud} die Dichte der *student*-Verteilung [139] darstellt. Hier soll ein $\alpha = 68\%$ Vertrauensband konstruiert werden, es ergibt sich $t_{12;68\%} = 1.0374$. Abb. 4.8 zeigt ein typisches oberes Band, genauer die Differenz zwischen oberem Band und dem Dispersionspolynom. Der Gesamtfehler einer jeden der zwölf individuellen Bestimmungen der Wellenlänge einer Messlinie ergibt sich aus quadratischer Addition des Gesamtfehlers in Tab. 4.5 der Messlinie und des Fehlers aus dem 68%-Vertrauensband.

4.3.4.1 Die Spektrallinien A und A'

Abb. 4.9 (a) zeigt das Ergebnis aller 12 Messungen für den $1s^22s^2\ ^1S_0-1s^22s2p\ ^3P_1$ Übergang, ausgewertet in erster Ordnung. Es wurde der Mittelwert (rot), sowie das symmetrisch dazu liegende 68% Vertrauensintervall (rot gestrichelt) berechnet. Es handelt sich hierbei um rein statistische Fehler. Ein systematischer Fehler, der berücksichtigt werden muss, entsteht durch den Fehler in der Korrektur der Linienposition (Tab. 4.5). Dieser ergibt sich aus der Simulation der Verschiebung zu rund 0.0001 nm. Damit erhält man:

$$(13.29096 \pm 0.00006_{\text{stat.}} \pm 0.00010_{\text{syst.}}) \text{ nm.} \quad (4.13)$$

Für die Auswertung dieses Übergangs in zweiter Ordnung (Abb. 4.9 (b)) ergibt sich:

$$(13.29077 \pm 0.00005_{\text{stat.}} \pm 0.00010_{\text{syst.}}) \text{ nm.} \quad (4.14)$$

Bildet man den Mittelwert so folgt:

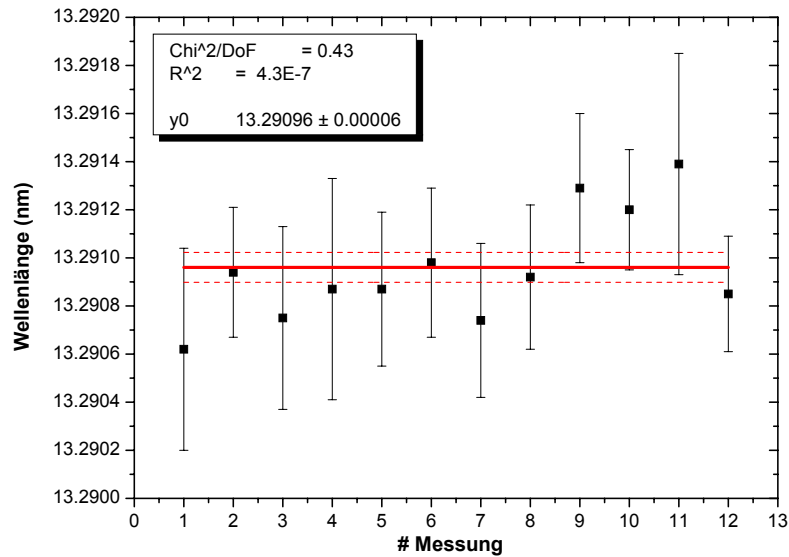
$$(13.29087 \pm 0.00004_{\text{stat.}} \pm 0.00010_{\text{syst.}}) \text{ nm,} \quad (4.15)$$

wobei der systematische Fehler der beiden Einzelmessungen nicht quadratisch addiert wurde. Der Übergang konnte mit einer relativen Genauigkeit von 11 ppm vermessen werden. Wenn man den Verlauf der Datenpunkte in Abb. 4.9 (a) und Abb. 4.9 (b) vergleicht, so scheinen diese korreliert, was auf Grund von Bedingung (XVI) in Gl. (4.5) zu erwarten ist. Die kleine Diskrepanz der ersten bzw. zweiten Ordnung zum Mittelwert wird daher als ein möglicher unbekannter systematischer Fehler im Dispersionspolynom aufgefasst und als solcher zu den übrigen Messlinien addiert.

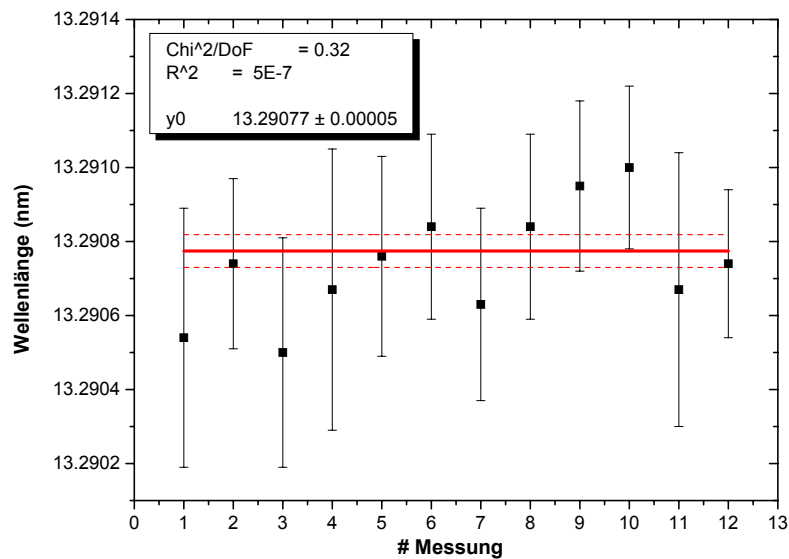
4.3.4.2 Die Spektrallinie B

Auf Grund der zahlreichen Satellitenlinien (Tab. 4.5) wird, obwohl im Mittel die Linie nicht verschoben wird, ein systematischer Fehler von 0.0008 nm angeben. Des Weiteren wird ein systematischer Fehler von 0.0001 nm addiert, der sich entsprechend der Differenz der ersten bzw. zweiten Ordnung der Linien A und A' zu ihrem Mittelwert ergibt. Unter

4.3. Identifikation der Spektrallinien



(a)



(b)

Abbildung 4.9: (a) Abgebildet ist das Ergebnis der 12 Einzelmessungen der Linie A gemäß Tab.4.5, sowie Mittelwert (rot) und 68% Vertrauensintervall des Mittelwertes. (b) entsprechende Darstellung der zweiten Ordnung von A (A').

Hinzunahme von Abb. 4.10 ergibt sich für den Übergang $1s^2 2s^2 S_{1/2} - 1s^2 2p^2 P_{3/2}$ in Li-artigen Eisen:

$$(19.2017 \pm 0.0003_{\text{stat.}} \pm 0.0009_{\text{sys.}}) \text{ nm.} \quad (4.16)$$

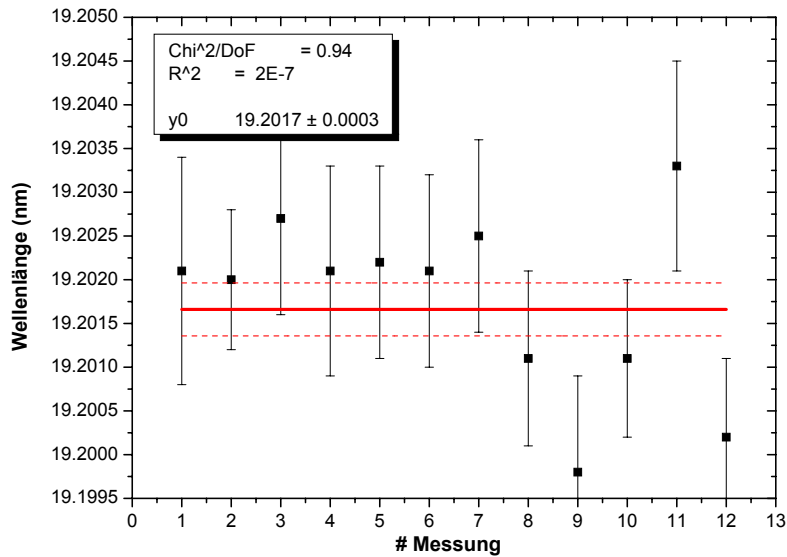


Abbildung 4.10: Dargestellt ist das Ergebnis der 12 Einzelmessungen der Linie B gemäß Tab.4.5, sowie Mittelwert (rot) und das 68% Vertrauensintervall des Mittelwertes.

Die relative Auflösung beträgt 62 ppm.

4.3.4.3 Die Spektrallinie C

Diese Linie erfährt keine Verschiebung durch *Blends*. Entsprechend Abb.4.11 ergibt sich für den Übergang $1s^2 2s^2 S_{1/2} - 1s^2 2p^2 P_{1/2}$ in Li-artigen Eisen:

$$(25.5118 \pm 0.0001_{\text{stat.}} \pm 0.0001_{\text{syst.}}) \text{ nm.} \quad (4.17)$$

Dies entspricht einer relativen Auflösung von 8 ppm.

4.3.4.4 Die Spektrallinie D

Entsprechend Abb. 4.12 ergibt sich für den Übergang $1s^2 2s^2 S_0 - 1s^2 2s 2p^1 P_1$ in Be-artigen Eisen, bei dem keine *Blends* festgestellt werden konnten:

$$(26.3739 \pm 0.0002_{\text{stat.}} \pm 0.0001_{\text{syst.}}) \text{ nm.} \quad (4.18)$$

Die relative Auflösung beträgt damit 11 ppm.

4.4 Die Auflösung des Spektrometers und Obergrenze des Elektronenstrahldurchmessers

Die relative Auflösung des Spektrometers ist gegeben durch den Quotienten der Halbwertsbreite $\Delta\lambda$ der Spektrallinie über der Wellenlänge λ . Gemäß Abb. 4.6 ist die Halbwertsbreite

4.4. Die Auflösung des Spektrometers und Obergrenze des Elektronenstrahldurchmessers

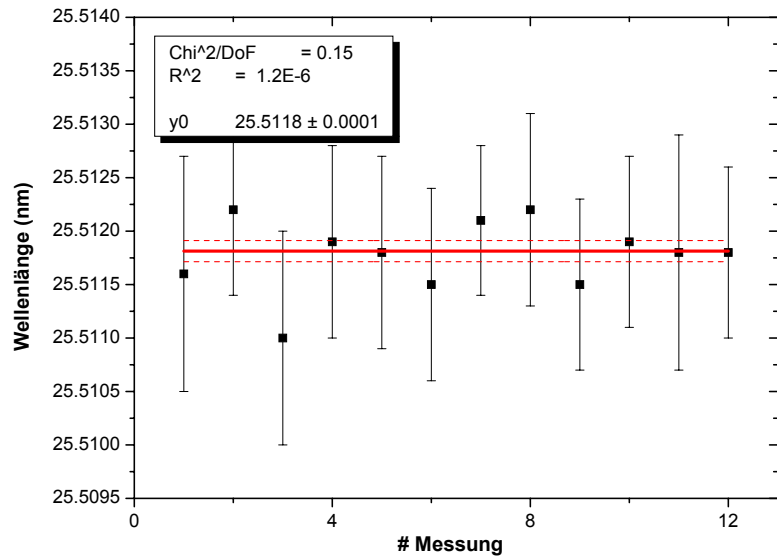


Abbildung 4.11: Dargestellt ist das Ergebnis der 12 Einzelmessungen der Linie C gemäß Tab.4.5, sowie Mittelwert (rot) und das 68% Vertrauensintervall des Mittelwertes.

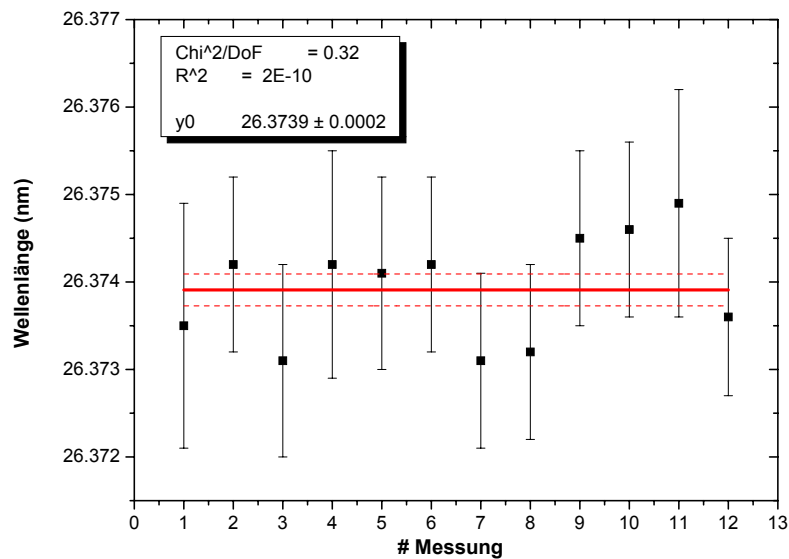


Abbildung 4.12: Dargestellt ist das Ergebnis der 12 Einzelmessungen der Linie D gemäß Tab.4.5, sowie Mittelwert (rot) und das 68% Vertrauensintervall des Mittelwertes.

eine lineare Funktion in der relativen Position (px). Damit ergibt sich die Halbwertsbreite in nm über den Koeffizienten b in Tab. 4.6 zu:

$$\Delta\lambda(px) = b (8.9 - 0.002 px) . \quad (4.19)$$

Die Auflösung beträgt daher zwischen 6000 ppm für niedrige Wellenlängen (13 nm) um Pixelposition 100 und 2000 ppm und weniger für größere Wellenlängen (25 nm) um Pixelposition 1500 und höher.

Auf Grund des etwa gleichen Abstands des Gitters von Quelle (Ionenwolke) und Bildebene (CCD) handelt es bei jeder Spektrallinie um eine „1:1“-Abbildung der Ionenwolke auf die CCD. Die gemessenen Halbwertsbreiten der Spektrallinien stellen somit obere Grenzen für die Halbwertsbreite des Elektronenstrahls dar, da es sich bei den beobachteten Übergängen um sehr schnelle Dipolübergänge handelt und die Anregung nur im Elektronenstrahl stattfinden kann. Optische Abbildungsfehler können nur zu einer größeren Breite führen, niemals zu einer reduzierten. Entsprechend Abb. 4.6 wird für hohe Pixelpositionen eine Breite der Spektrallinien von nur 5 px registriert. Bei einer Pixelbreite von $13.5 \mu\text{m}$ ergibt sich eine Halbwertsbreite von etwa $68 \mu\text{m}$ für die Ionenwolke. Beachtet man, dass der Durchmesser des Strahls jener ist, der 80% der Elektronen beinhaltet (Kap. 3), so ergibt sich eine obere Abschätzung von $d_{H,\text{max}} \leq 75 \mu\text{m}$.

Kapitel 5

Resonante

Röntgen–Laserspektroskopie von Li–artigem Fe^{23+} mittels FLASH

An dieser Stelle erfolgt die Beschreibung der ersten resonanten laserspektroskopischen Vermessung des $2\ ^2S_{1/2} - 2\ ^2P_{1/2}$ Übergangs in Li–artigem Fe^{23+} . Dazu wurde der neuartige Freie–Elektronen–Laser FLASH eingesetzt. Nach einem kurzen Exkurs in Prinzip, Wirkungsweise und Charakteristik dieses Werkzeugs, erfolgt die detaillierte Beschreibung des durchgeführten Experiments. Abgeschlossen wird dieses Kapitel mit Überlegungen bezüglich der Machbarkeit dieses Experiments an einem Synchrotron der 3. Generation, wie z.B. BESSY in Berlin. Die Diskussion der Ergebnisse erfolgt in Kap. 6.

5.1 Der Freie–Elektronen–Laser FLASH

In Abb. 5.1 ist die ganze Dimension des Aufbaus dargestellt. Dieser lässt sich grob in drei Teilabschnitte unterteilen: Den supraleitende Elektronenlinearbeschleuniger mit bis zu 1 GeV Beschleunigungsenergie, den daran anschließenden so genannten Undulatorabschnitt, wo die Erzeugung der gewünschten Strahlung stattfindet und als drittes Element die Experimentierhalle.

Damit im Undulatorabschnitt nach dem Prinzip der beschleunigten und verzögerten Ladung durch die Elektronen Licht erzeugt werden kann, muss im Beschleunigerabschnitt (Abb. 5.1 (b)) ein gepulster Elektronenstrahl höchster Qualität erreicht werden. Es gilt darauf zu achten, dass die räumliche Ausdehnung, transversal wie longitudinal, möglichst klein ist. Überdies muss eine sehr schmale Energieverteilung des Paketes erreicht werden. In anderen Worten, gilt es den sechsdimensionalen Phasenraum der Elektronen zu minimieren, was mit der Forderung einer kleinen Emittanz des Elektronenpaketes einhergeht. Diese Anforderungen führten auf die Realisierung des FLASH in Form eines gepulsten Linearbeschleunigers.

Die Elektronenkanone des Beschleunigers arbeitet mit einer Cs_2Te –Photokathode in einer

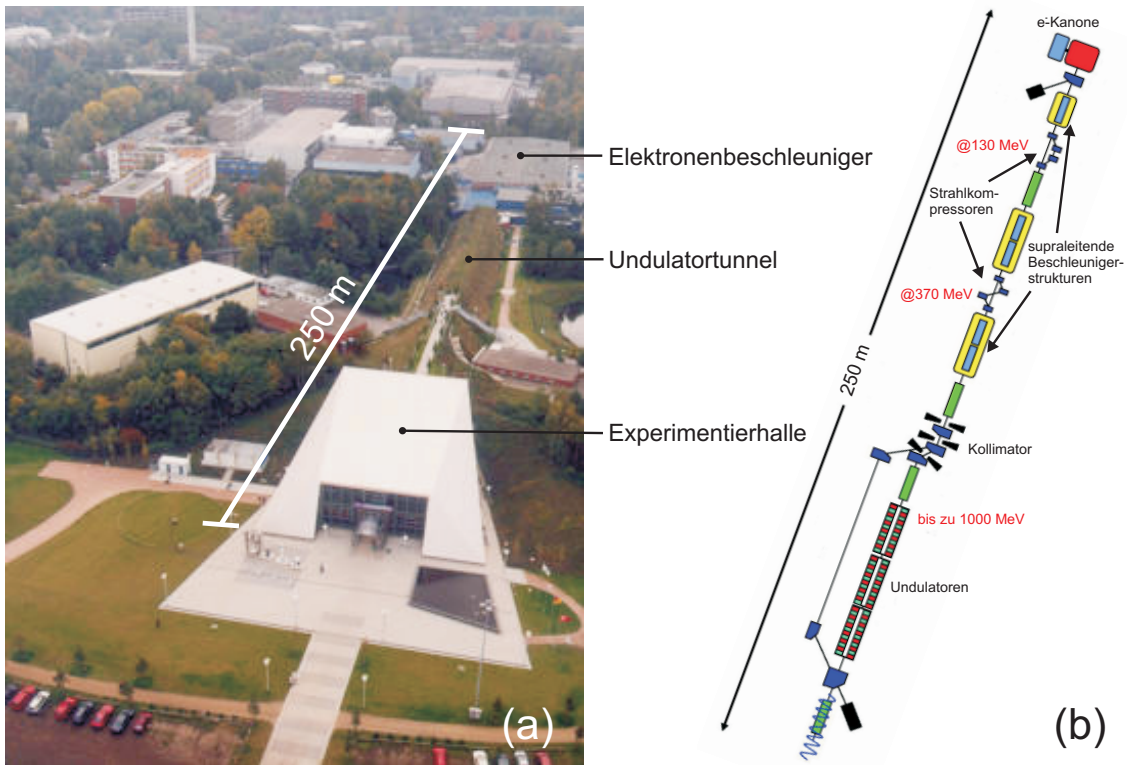


Abbildung 5.1: (a) FLASH aus der Vogelperspektive (Quelle: DESY). (b) Schematische Übersichtsdarstellung. 1 nC Elektronenpakete aus der Elektronenkanone werden beschleunigt und mehrfach komprimiert, um die für die Lichterzeugung nötigen Voraussetzungen zu schaffen. Der Elektronenspitzenstrom erhöht sich hierbei von weniger als 100 A auf bis zu 2 kA. Nach dem Undulator haben die Elektronen bis zu 0.01% ihrer Energie in Licht umgewandelt (Quelle: DESY, verändert).

supraleitenden RF-Kavität. Die mittels eines gepulsten Lasers per Photoeffekt erzeugten Elektronen werden dort mit Feldstärken von 40 MV/m abgesaugt. Die dem Emissionslaser aufgeprägte Zeit- und Repetitionsstruktur bestimmt maßgebend die Zeitstruktur des später erzeugten Lichtes. Den Anforderungen an Emittanz und Energieverteilung folgend, finden sich zwischen den supraleitenden RF-Beschleunigereinheiten immer wieder Anordnungen zur Strahlkompression bzw. zur Steuerung der Dispersion. Eine tiefergehende Darstellung des FLASH-Beschleunigers findet sich in [140].

Der Undulatorabschnitt nimmt als Quelle des FEL-Lichts die exponierteste Stellung ein. Das Grundkonzept eines Undulators gründet gemäß Abb. 5.2 auf einer periodischen Struktur alternierender Nord-Süd- und Süd-Nord-Dipole¹, mit höchsten Anforderungen an Feldverlauf und Homogenität. Der FLASH Undulator besteht aus mehreren Teilundulatoren zu 4.5 m Länge, die sich zu 30 m Gesamtmaß addieren. Der Spalt, also der Abstand zwischen Nord- und Südpol des selben Dipols, ist fix und beträgt 12 mm. Im Gegensatz zu vielen Undulatoren in Synchrotron-Anlagen wird das Spalt bei diesem FEL nicht als ein

¹Genau genommen sind die Undulatoren nach einer so genannten Hybrid-Anordnung verbaut, die in den entscheidenden Feldbereichen identische Felder erzeugt, aber die Dipole räumlich anders anordnet.

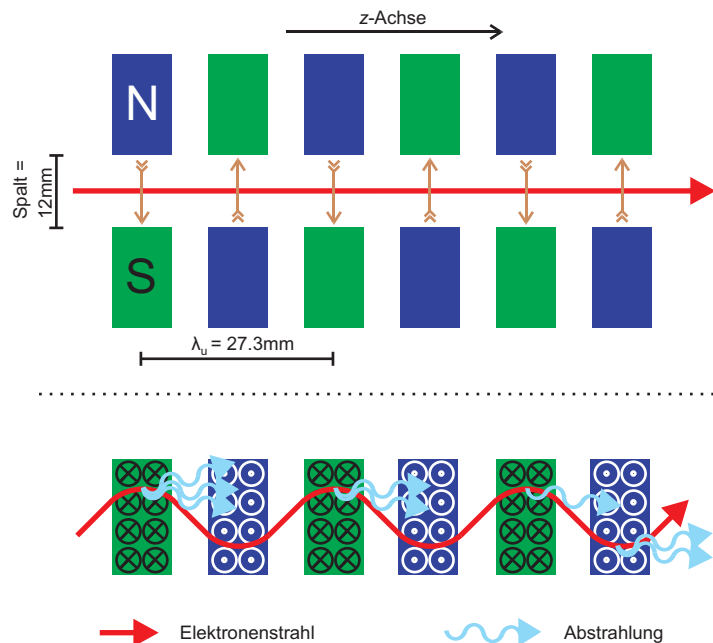


Abbildung 5.2: Seitenansicht (obere Darstellung) und Aufsicht (unten) auf einen Abschnitt im Undulator. Die Gesamtlänge des Undulators bei FLASH beträgt 30 m. Abstrahlung findet in den Bereichen stärkster Richtungsänderung statt.

möglicher Regelparameter zur Steuerung der Photonenwellenlänge genutzt. Bei FLASH stellt im Wesentlichen die Beschleunigungsenergie der Elektronen einen solchen Parameter dar.

Das Funktionsprinzip des vorliegenden FELs ist das der „Selbstverstärkten Spontanen Emission“, kurz SASE genannt, welches auf die theoretischen Arbeiten des Doktoranden J. Madey [32] aus dem Jahre 1970 zurückgeht. Im Unterschied zu allen weiteren existierenden FELs, handelt es sich bei FLASH um einen so genannten *single pass*² SASE-FEL. Ursache der Lichtemission in einem FEL ist wie bereits erwähnt das wohl bekannte Prinzip der beschleunigten und verzögerten Ladung, jedoch gewinnt in einem FEL das Licht gewisse laserartige, noch zu spezifizierende, Eigenschaften hinzu. Dies ist Folge einer speziell arrangierten Wechselwirkung der Elektronen mit ihrem eigenen Strahlungsfeld. SASE beschreibt genau diese Wechselwirkung.

Mit Eintritt des präparierten Elektronenpakets in den Undulator zwingt die Magnetfeldstruktur jedem einzelnen Elektron des Pakets einen sinusförmigen Bewegungspfad auf. Diese Sinusschwingung findet entsprechend der Lorentzkraft in der Ebene senkrecht zum Feldverlauf gemäß Abb. 5.2. Da jedes einzelne Elektron gezwungen ist, dem vorgegebenen sinusförmigen Pfad zu folgen, müssen diese Strahlung emittieren. Die Wellenlänge dieser Strahlung ist demnach in erster Näherung gegeben über die Durchflugzeit für eine Periode

²Das Licht entsteht durch die Elektronen bei nur einem einzigen Durchlauf durch den Undulator. FELs im Infraroten haben häufig einen Resonator, in dem das Licht mehrfach umläuft und so wie bei einem gewöhnlichen Resonator verstärkt wird.

des Sinuspades, womit die Energie der Elektronen und die Länge einer Dipolperiode λ_U (Abb. 5.2) eingeht. Bei 1 GeV Elektronenenergie³ ergibt sich aus der relativistischen Gesamtenergie E_{rel} eine Geschwindigkeitsdifferenz $v - c$ vom Elektron zum eigenen Licht im Laborsystem von:

$$E_{\text{rel}} \equiv mc^2 \quad \Rightarrow \quad E_{\text{kin}} = m_0c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} - 1 \right)$$

$$\Rightarrow \quad \beta = 0.9999998696 = \frac{v}{c} \quad \Rightarrow \quad v = 29979241.9 \text{ m/s}$$

$$\Rightarrow \quad c - v \approx 141 \text{ km/h}.$$

Das Magnetfeld der periodischen, sich in z -Richtung erstreckenden Undulatorstruktur (Abb. 5.2, lässt sich über sein sinusförmiges Vektorpotential schreiben als:

$$\vec{A}(z) = \frac{B_{\text{max}}}{k} \cos(kz) \hat{e}_y \quad (5.1)$$

$$\Rightarrow B_{\text{Lab}}(z) = \nabla \otimes \vec{A} = B_{\text{max}} \sin(kz) \hat{e}_x, \quad (5.2)$$

wobei B_{max} das Spitzenfeld der Dipole darstellt, k den Betrag des Wellenvektors, B_{Lab} das Magnetfeld im Laborsystem und im Folgenden $\gamma = 1/\sqrt{1 - \beta^2}$ definiert ist. Eine Transformation ins Ruhesystem des relativistischen Elektrons ergibt bei geeigneter Wahl der Einheiten:

$$B' = \gamma B_{\text{max}} \sin(k\gamma(z' + \beta ct')) \hat{e}_x \quad (5.3)$$

$$E' = \beta B'. \quad (5.4)$$

Im Falle $\beta = v/c \rightarrow 1$ erscheinen diese Felder dem Elektron als eine nach $-\hat{e}_z$ laufende elektromagnetische Welle. Die Wellenlänge dieser Strahlung im Ruhesystem des Elektrons beträgt $\lambda' = (1/\gamma) \lambda_U$.

In einem vereinfachten Ansatz kann man nun die bekannte Streuformel nach Thomson [141, 142] nutzen und damit einen Wirkungsquerschnitt für eine Rückstreuung der Photonen am Elektron mit $\theta = \pi$ im Ruhesystem des Elektrons berechnen. Im Laborsystem ergibt sich gerade die Emission in Vorwärtsrichtung.

Unter Annahme gleicher Wellenlänge für die einlaufende Welle und die gestreute Welle im Ruhesystem des Elektrons, ergibt sich für das Laborsystem eine Abstrahlwellenlänge von

$$\lambda_{\text{Lab}} \approx \frac{\lambda_U}{\gamma^2}.$$

Die Leistung, welche eine beschleunigte Ladung abstrahlt ist unabhängig vom Bezugssystem [143]. Insbesondere ist sie dadurch berechenbar in einem Koordinatensystem K' ,

³Wegen Fehlens einer letzten Beschleunigungsstufe derzeit noch nicht möglich.

welches sich mit dem in $\hat{\mathbf{e}}_z$ -Richtung laufenden Elektron mitbewegt. Der Vektor $-\hat{\mathbf{e}}_y$ gibt wieder die Schwingungsrichtung der Elektronen an und man erhält für die Leistung P'_γ :

$$P'_\gamma = P_\gamma \propto e^2 (\dot{v}'_y)^2.$$

Die Transformation ins Laborsystem ist über $\dot{v}'_y = \gamma^2 \dot{v}_y$ [143] gegeben, es ergibt sich:

$$P_\gamma \propto e^2 \gamma^4 \dot{v}_y^2.$$

Diesem Ausdruck kann man entnehmen, dass die Beschleunigung auf hochrelativistische Energien mit einem starken Anstieg der Strahlungsleistung einhergeht, und dass die abgestrahlte Leistung quadratisch mit der Ladung des Teilchens wächst. Bei einem FEL wie FLASH wird daher versucht N_e individuelle Elektronen zu einem engen Paket zu komprimieren, welches als ein Teilchen der Ladung $N_e e$ agiert. Man macht also den Übergang:

$$P_\gamma(N_e) \propto N_e e^2 \gamma^4 \dot{v}_y^2 \longrightarrow P_\gamma(N_e) \propto (N_e e)^2 \gamma^4 \dot{v}_y^2 = N_e^2 e^2 \gamma^4 \dot{v}_y^2,$$

der bei gleicher Ladung einen zusätzlichen Faktor N_e liefert. Einem vereinfachten Gedanken folgend, scheint es dazu nötig zu sein, die Ausdehnung des Paketes unter die Dimension der abgestrahlten Wellenlänge zu komprimieren.

Die Polarisationsrichtung der spontan abgestrahlten Wellen liegt in der Schwingungsebene der Elektronen, so dass zwischen Lichtfeld und Elektronen eine Wechselwirkung stattfinden kann. Dabei kann auf die Elektronen sowohl Energie übertragen, als auch entzogen werden. Die Richtung des Energietransfers ist hierbei durch die Phasenlage von Elektronenschwingung und Welle gegeben. In dem zweidimensionalen Phasenraum, aufgespannt zum einen von der Phasenlage $\Delta\phi$ zwischen Welle und Elektronenschwingung und zum anderen von der Änderung $\Delta\gamma$, also nichts anderes als der Änderung der Energie der Elektronen auf Grund von Emission oder Absorption von Strahlung, kommt es zu einer zweidimensionalen Pendelbewegung. Der Endzustand in diesem Phasenraum hängt vom Startpunkt ab. Manche Elektronen geben Energie ab, andere nehmen Energie auf, dies führt letztendlich zu dem so genannten *micro-bunching*, also einer longitudinalen Ladungsdichtemodulation gemäß Abb. 5.3, deren Ordnungsparameter gerade der emittierten Wellenlänge entspricht.

Wenn auch die Vorgänge, die zu dieser Strukturierung führen komplex sind und hier nicht detaillierter ausgeführt werden können, siehe hierzu [144, 145], so ist doch einsehbar, worin das Exponierte der Situation liegt, hat sich die Mikrostrukturierung schließlich eingestellt. Durch den Geschwindigkeitsunterschied, um den die Elektronen langsamer sind als das Licht, kommt es zu einem Schlupf. Dieser beträgt auf einer Periode der Elektronenbahn, also auf 27.3 mm (Abb. 5.2), genau eine Periode der emittierten Strahlung. Die Minima und Maxima des Sinuspades, also die Positionen maximaler Auslenkung, stellen die Orte stärkster Richtungsänderung dar und damit die Positionen stärkster Strahlungsemission. Durch die Retardierung um eine Lichtwellenperiode auf einer Undulatorperiode λ_U fallen diese Stellen immer wieder genau mit den Maxima des eigenen, propagierenden, nun dem Gesamtensemble der Elektronen zuzurechnenden Strahlungsfeldes zusammen. Die Strahlung kann sich so konstruktiv überlagern.

Je nach Elektronenenergie und damit Photonenenergie wird die optimale Strukturierung des Elektronenpakets, Sättigung genannt, nach unterschiedlichen Wegstrecken im Undulator erreicht. Je höher die Energie ist, umso später wird Sättigung erreicht. Bei 1 GeV Elektronenenergie oder äquivalent circa 6 nm Abstrahlwellenlänge wird die Sättigung nach circa 25 m erreicht. Entsprechend Abb. 5.3 erhält man an dieser Stelle maximale Photonemission, danach nimmt die Emissionleistung auf weiterem Wege durch den Undulator auf Grund von Phaseneffekten wieder ab. Der resonante Charakter des SASE-Prozesses zeigt sich in der Anzahl der emittierten Photonen⁴. Im Sättigungspunkt B (Abb. 5.3) ist die emittierte Strahlung proportional N_e^2 , der Anzahl von Elektronen im Paket zum Quadrat. Zu Beginn des Prozesses (Punkt A in Abb. 5.3) und im Falle, dass die äußeren Umstände, wie Emittanz des Strahls, nicht die Voraussetzungen zum Ausbilden der Mikrostrukturierung mit Sättigung schaffen, was im Speziellen gerade bei Synchrotron-Maschinen gilt, verhält sich die Intensität der Strahlung nur proportional zu N_e . Abb. 5.4 stellt hierzu ergänzende Information bereit.

Bei FLASH ist nach Gesagtem mit einem hohen Photonenfluss zu rechnen. Abb. 5.5(a) zeigt, wie sich FLASH bei voller Leistungsentfaltung (Designparameter) bezogen auf die physikalische Größe „Brillanz“ in den Kanon existierender und vergleichbarer Lichtquellen einfügt. Die Brillanz enthält nicht nur den spektralen Fluss, im Sinne von Photonen

⁴Präzise gesprochen ändert sich die Anzahl der Photonen nicht. Sie werden jedoch in die Lage versetzt konstruktiv zu interferieren, was zu einer Intensitätssteigerung führt.

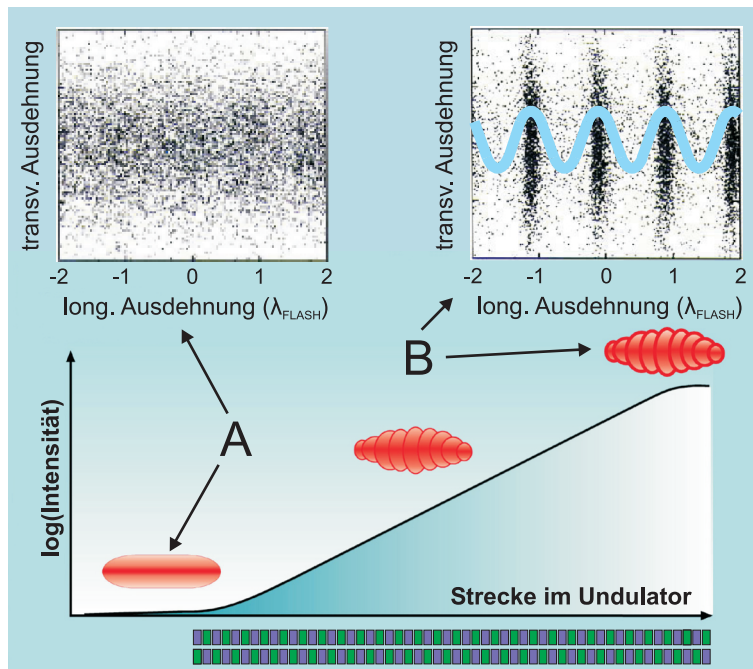


Abbildung 5.3: Ausbildung von SASE eines homogenen Elektronenpaketes (Punkt A) entlang des Weges im Undulator. Die tatsächliche Anzahl von Ladungsdichtemaxima im Sättigungspunkt B beträgt mehrere Tausend. (Quelle: DESY, verändert)

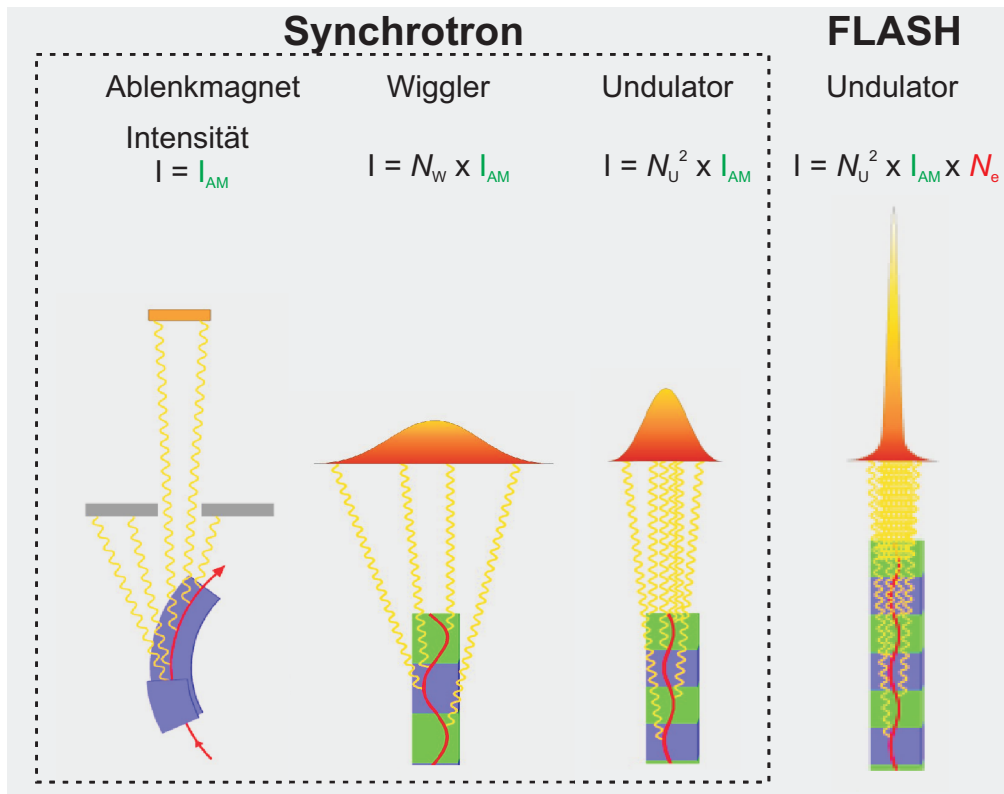


Abbildung 5.4: Qualitativer Vergleich der Abstrahlcharakteristik des Freie-Elektronen-Lasers FLASH gegenüber gängiger zur Lichterzeugung verwendeter Magnetstrukturen an Synchrotron-Quellen. Bei dem Wiggler handelt es sich um eine periodische Fortsetzung des Ablenkmagneten. Die Intensität wächst linear mit der Anzahl der verbauten Perioden N_W . Bei modernen Undulatoren an Synchrotron-Anlagen beobachtet man bereits einen nicht-linearen Effekt, der die Anzahl der Perioden N_U quadratisch eingehen lässt. Des Weiteren ist die Abstrahlkeule stärker relativistisch vorwärtsgestreut. Dieser Effekt verstärkt sich abermals beim Übergang zu FLASH. Die Intensität erhöht sich weiter, indem ein zusätzlicher Faktor N_e , die Anzahl der Elektronen, hinzutritt. Es sei angemerkt, dass in I_{AM} ein weiteres N_e verborgen ist. (Quelle: DESY, verändert)

pro Sekunde und Photonenergie, sondern gibt diesen pro Flächenelement der Quellgröße und Berücksichtigung der Divergenz der Strahlung an (siehe Ordinate in Abb. 5.5 (a)). Dies bedingt, dass die extreme Vorwärtsstreuung entsprechend Abb. 5.4 zusätzlich eingeht. Eine ganze Klasse neuartiger Experimente lebt von dieser Erhöhung der Brillianz, z.B. [36, 147, 148]. Zusammenfassend ist FLASH-Licht bei kleinerer Quellgröße intensiver und kollimierter als das vergleichbarer Quellen, wie Synchrotron-Quellen der 3. Generation (Abb. 5.4).

Die mit der Brillianz einhergehende niedrige transversale Emittanz ist gemeinhin eine Eigenschaft, die man dem Laser zu Eigen macht. Wesentliche Eigenschaften eines Lasers sind auch die zeitliche und räumliche Kohärenz der Strahlung. Für räumlicher Kohärenz ist charakteristisch, dass zwei räumlich getrennten Punkten auf der Wellenfront des Lichtes eine feste Phasenlage zugeordnet werden kann. Hohe räumliche Kohärenz äußert sich unter Anderem im Erscheinen der typischen Interferenzstruktur im Rahmen eines Young'schen

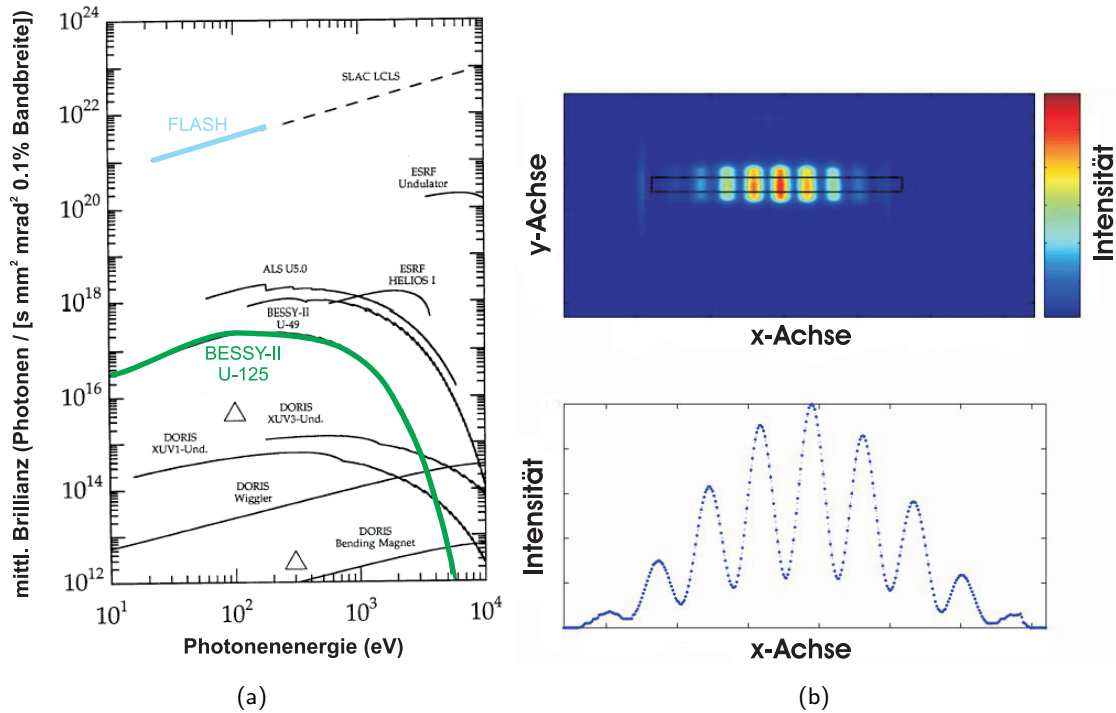


Abbildung 5.5: (a) Mittlere Brillanz gegen Photonenenergie für FLASH nach Designparametern und vergleichbarer Lichtquellen. (Quelle: [140]), (b) Doppelspaltexperiment mit FLASH-Strahlung. Die Interferenz deutet auf hohe räumliche Kohärenz hin. (Quelle: [146])

(Doppel-) Spaltexperimentes. Abb. 5.5 (b) zeigt das Ergebnis eines solchen Experimentes unter Verwendung von FLASH. Offensichtlich offeriert dieses Licht Eigenschaften ausgeprägter transversaler räumlicher Kohärenz.

Zeitliche Kohärenz ist bei FLASH nur äußerst eingeschränkt gegeben. Es besteht praktisch keine feste Phasenbeziehung zwischen Punkten gleichen zeitlichen Abstands entlang der Ausbreitungsrichtung. Eine solche würde Möglichkeiten der Interferenz im Sinne eines Michelson-Moreley-Interferometers [150] geben. Gegen die zeitliche Kohärenz arbeitet eine inhärent zu breite spektrale Verteilung des Lichtes, die dem SASE-Prozess aus dem Rauschen geschuldet ist. Abhilfe wird wohl in Zukunft ein Verfahren schaffen, das als *Seeding* bekannt ist [151]. Den Elektronen wird hierbei bereits kohärente Strahlung der gewünschten Wellenlänge im Undulator überlagert. Diese Strahlung fungiert dabei als eine Art Kondensationskeim, welcher den Verstärkungsprozess dann nicht mehr zufallsbehaftet aus dem Rauschen starten lässt. Eine so erzeugte Kohärenz kann aber natürlich nur innerhalb der Strahlung des selben Elektronenpaketes erzeugt werden. Die Strahlung zweier verschiedener Pakete wird nicht kohärent sein.

Die Puls- und Zeitstruktur von FLASH ist in Abb. 5.6 dargestellt. FLASH-Licht entsteht in Form von Photonenpulsen. Diese Photonenpulse aus N_γ Photonen werden als Einzelpulse bezeichnet. Über die Zeitspanne der Durchführung dieses Experiments kann ein Mittelwert im Bereich von etwa $N_\gamma \approx 2 \times 10^{12}$ Photonen pro Einzelpuls gegeben werden.

5.1. Der Freie-Elektronen-Laser FLASH

Abb. 5.6 (b) zeigt die typische zeitliche Struktur eines solchen Einzelpulses im so genannten Femtosekundenmodus⁵. Auf Grund des SASE-Charakters haben solche Einzelpulse häufig mehrere Maxima⁶, die von Puls zu Puls an völlig verschiedenen Stellen innerhalb des Pulses auftreten können und dabei in Intensität nahezu beliebig variieren. Ein Einzelpuls ist das Ergebnis der Abstrahlung genau eines mikrostrukturierten Elektronenpakets nach Abb. 5.3. Durch den SASE-Prozess ist dieser innerhalb gewisser Grenzen zufallsbeeinflusst, sowohl was das Amplitudenverhalten als Funktion der Zeit angeht, wie gesehen in Abb. 5.6 (a), als auch als Funktion der Frequenz, wie im Folgenden zu sehen sein wird. In der Regel werden die Elektronenpakete zeitlich nicht äquidistant gruppiert, sondern zu Pulszügen angeordnet. Im Rahmen dieser Messung wurden $N = 30$ Einzelpulse zu einem Pulszug gruppiert (Abb. 5.6 (c)), der zu diesem Zeitpunkt maximal möglichen Anzahl⁷. Die Pulszüge untereinander sind äquidistant, im vorliegenden Fall betrug $1/\Delta t_{PZ} = 5$ Hz. Damit ergeben sich in der Summe 150 Einzelpulse pro Sekunde, verteilt auf fünf Pulszüge.

Abb. 5.2 folgend ist FLASH-Strahlung in der Ebene der Sinusschwingung linear polarisiert.

⁵Falls nicht explizit erwähnt, handelt es sich bei sämtlichen Angaben bezüglich FLASH um Eigenschaften hinsichtlich dieses Modus. Daneben existiert, bzw. ist geplant, ein Kurzwellenmodus und ein Langwellenmodus. Letztere werden im Rahmen dieser Arbeit keine Rolle mehr spielen.

⁶Hier in der Zeitdomäne.

⁷Damit auch maximal möglicher Fluss.

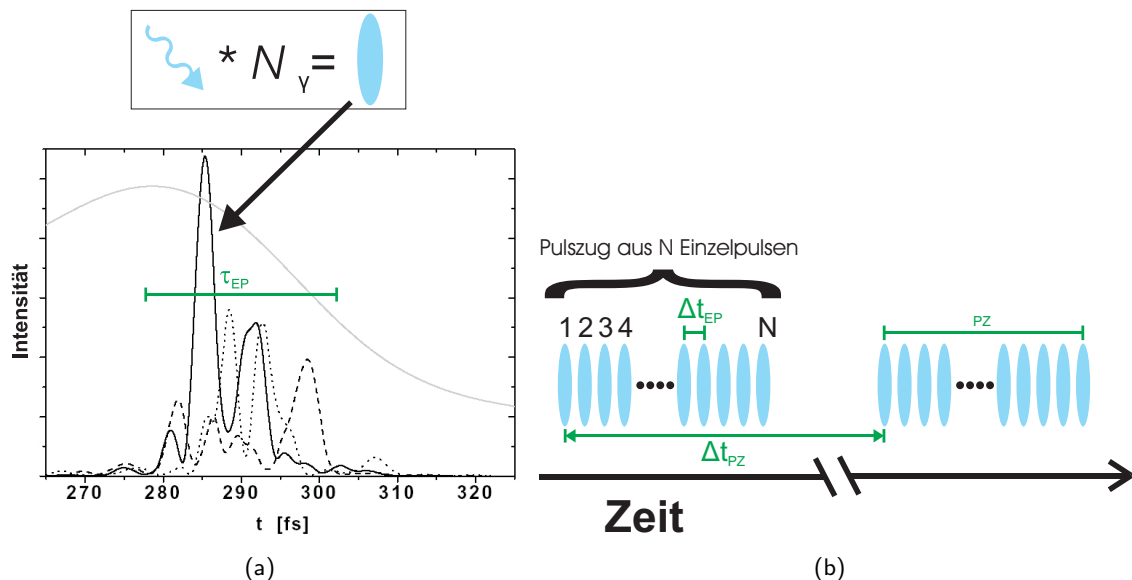


Abbildung 5.6: (a) Oben: FLASH-Strahlung erscheint in Form von Einzelpulsen, die im Mittel aus N_γ Photonen bestehen. Unten: Zeigt die zeitliche Struktur (Rechnung) von 4 verschiedenen Einzelpulsen. Deutlich erkennbar ist die leicht erratische Struktur. Die glatte graue Kurve symbolisiert die Ladungsverteilung des den Einzelpuls erzeugenden Elektronenpaketes in der Zeit. (Quelle: [149]), (b) Einzelpulse sind zu Pulszügen gruppiert. Der Abstand Δt_{EP} zwischen zwei Einzelpulsen beträgt bei diesem Experiment $1 \mu\text{s}$. Bei $N=30$ beträgt die Pulslänge des Pulszuges $\tau_{PZ} = 30 \mu\text{s}$. Die Repetitionsrate der Pulszüge war mit $1/\Delta t_{PZ} = 5$ Hz gegeben.

Eingedenk des reziproken Verhaltens von Lichtpulsen in Zeit- und Frequenzdomäne, lässt sich bereits erahnen, wie sich unter Zuhilfenahme von Abb. 5.6 (a) das Frequenzverhalten, bzw. das äquivalenter Größen, darstellen könnte. Abb. 5.7 zeigt die spektrale Analyse von vier willkürlich gewählten Einzelpulsen, sowie den Mittelwert aus 30 solcher Pulse. Der Gauss'sche Fit dieses Mittelwerts liefert eine Halbwertsbreite von etwa 0.6 eV, was einer spektralen Breite $E/\Delta E \approx 70$ entspricht. Der Pulszug bestand bei diesen Aufnahmen nur aus genau einem Einzelpuls und nicht etwa aus dreißig. Dies hat durchaus Einfluss auf die spektrale Verteilung, wie sich noch zeigen wird.

Für viele Anwendungen, inklusive der vorliegenden, erscheint obige intrinsische spektrale Verteilung von FLASH zu breit. Daher wurde eines von vier Strahlrohren (PG2) in der Experimentierhalle mit einem Monochromator zur Reduktion der spektralen Breite ausgestattet. Das Konzept dieses Monochromators geht zurück auf einen Ansatz in [154], welcher an Synchrotron-Anlagen üblicherweise Verwendung findet. Vorliegender Gitter-Monochromator im Speziellen wird im Detail in [153] diskutiert. Der Strahlverlauf zu diesem Monochromator-Strahlplatz ist in Abb. 5.8 dargestellt. Im Undulator entsteht Strahlung von einer Quellausdehnung zwischen 150–300 μm . Dem planaren Schaltspiegel M0 folgt der toroidale Spiegel M1, dessen Hauptaufgabe im Kollimieren des in vertikaler Richtung mit 15–170 μrad divergenten Lichtes besteht. Daneben fokussiert er bezüglich der Horizontalen in den Zwischenfokus Z. Der planare Spiegel M2 lenkt (Winkel θ) die Strahlung auf das Gitter des Monochromators. Das durch das Gitter nun vertikal dispersive

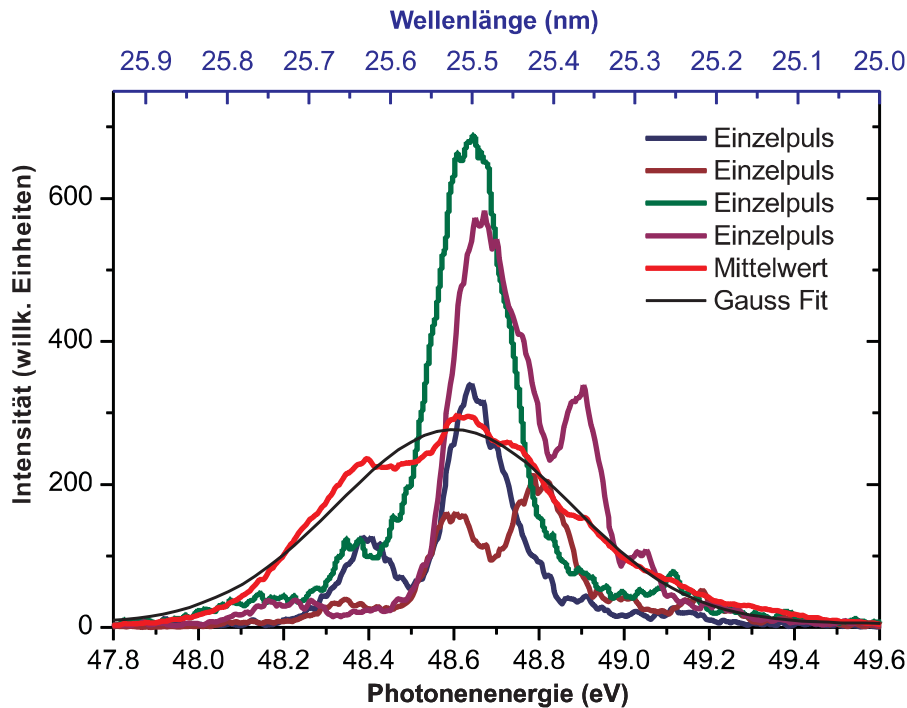


Abbildung 5.7: Energie- und Wellenlängenverteilung von verschiedenen Einzelpulsen. Der Mittelwert (rote Kurve) berechnet sich aus 30 Einzelpulsen. Die Daten wurden aus [152] entnommen.

5.1. Der Freie-Elektronen-Laser FLASH

Licht wird vom zylindrischen Spiegel M3 wieder vertikal so fokussiert, dass jede Wellenlänge am Spalt S einen vertikalen Brennpunkt hat. M4, wieder ein toroidaler Spiegel, vermag es sowohl den horizontalen Fokus Z, als auch den vertikalen Fokus in S, in den selben Brennpunkt F abzubilden.

Die Auflösung $\delta = E/\Delta E$ wird durch die Liniendichte des verwendeten Gitters (200 oder 1200 Linien/mm) und der so genannten *fix-focus*-Konstante bestimmt:

$$c_{\text{ff}} = \frac{\sin \beta}{\sin \alpha}, \quad (5.5)$$

welche gemäß Abb. 5.8 durch den Ein- und Ausfallswinkel des Gitters bestimmt wird. Sowohl beim Einstellen der Energie, als auch der Auflösung δ , sind die Winkel θ , α und β zu beachten. Für diese Parameter sind nicht beliebige Werte möglich, sondern nur solche entsprechend des Parameterraums gemäß Abb. 5.9 (a).

Bei einer gegebenen *fix-focus*-Konstanten erhält man einen im Ort festen Fokus F und einen konstanten Winkel zwischen der 1. gebeugten Ordnung des Gitters und dem spekularen Reflex, der so genannten nullte Ordnung.

Abb. 5.9 (b) gibt Aufschluss über die zu erwartende Auflösung der beiden Gitter. Das 1200 Linien/mm Gitter ist das höher auflösende. Die Auflösung ist für beide Gitter eine Funktion der Energie, hinzu tritt eine Abhängigkeit vom Parameter c_{ff} . Exemplarisch sind Kurven zu zwei verschiedenen Werten dieses Parameters angegeben. Die Auflösung an der Position des Spaltes S, ist in diesem Falle angegeben über ΔE als die beugungsbedingte

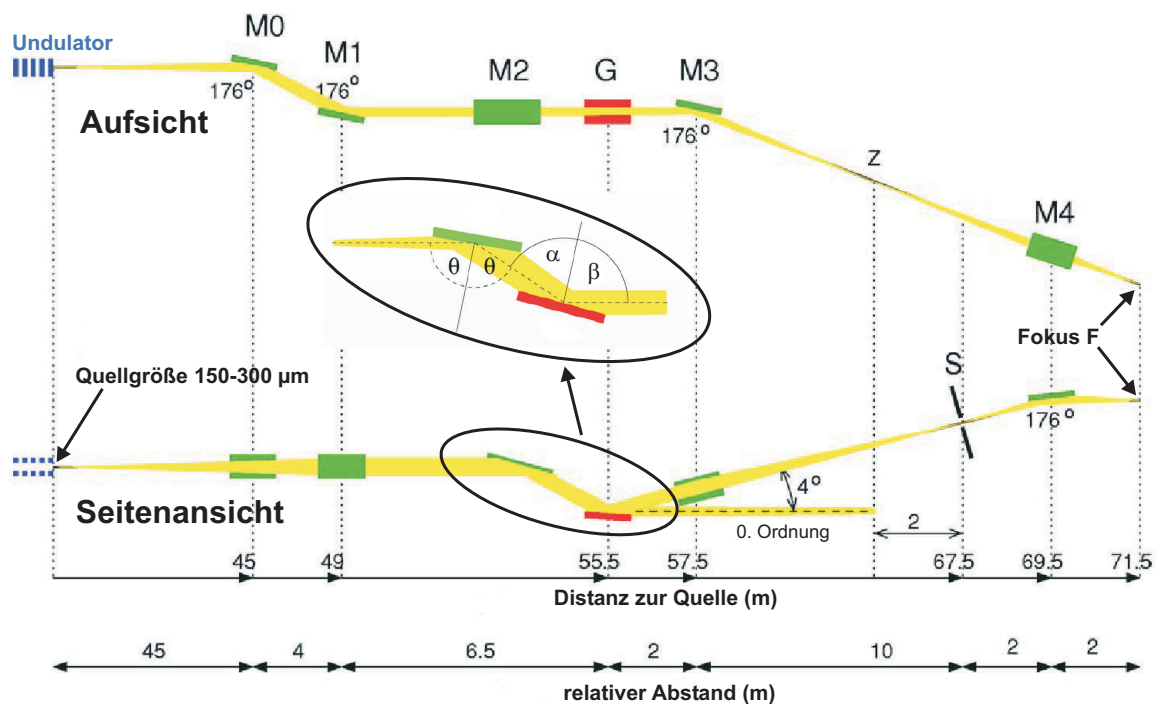


Abbildung 5.8: Strahlverlauf an der PG2 Linie. Zentrales Bauelement stellt der planare Gitter-Monochromator dar. Spiegel sind mit **M** bezeichnet, das Gitter mit **G**. (Quelle: [153], verändert)

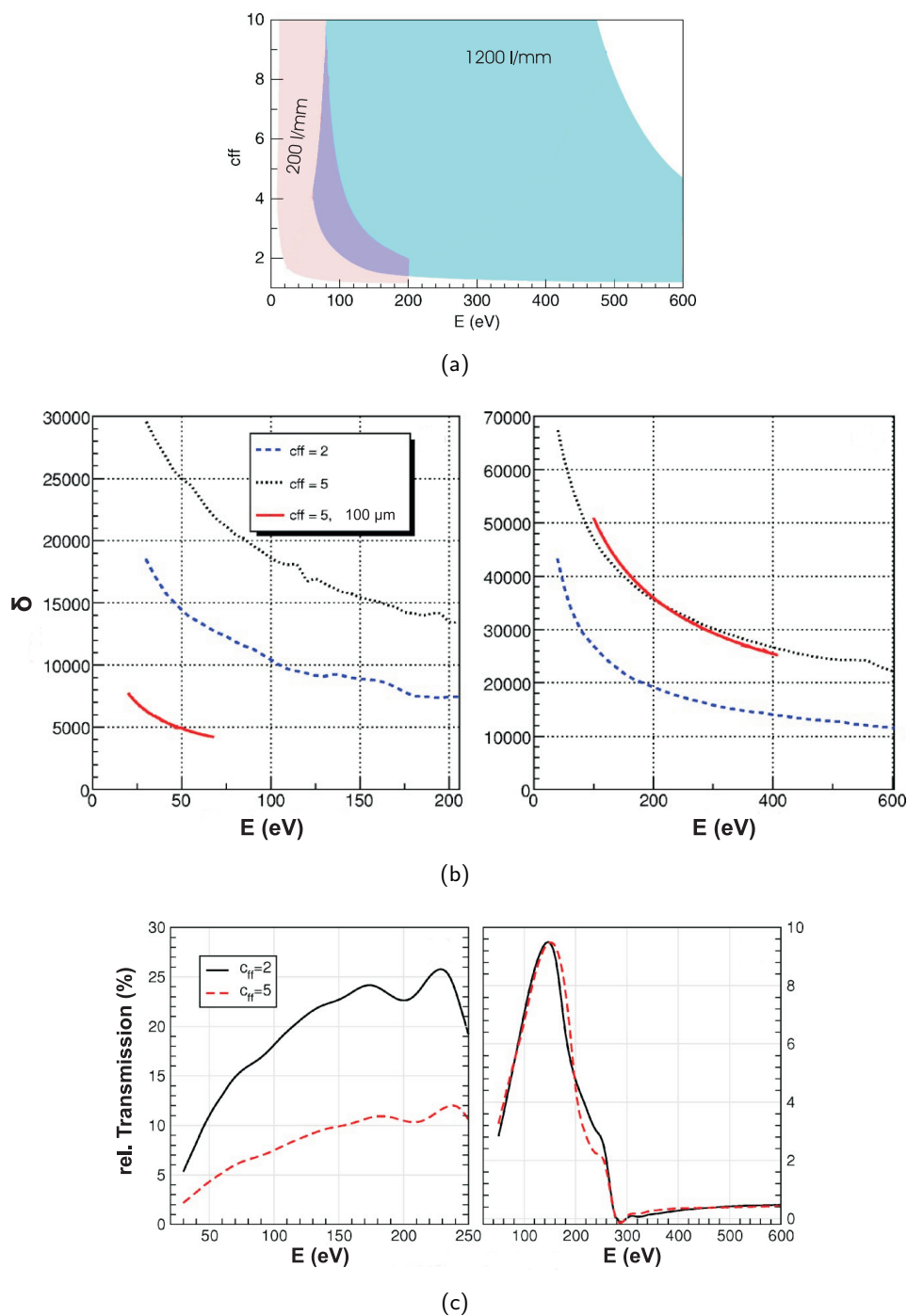


Abbildung 5.9: (a) Arbeitsbereich des Monochromators für die beiden zur Verfügung stehenden Gitter. (b) Auflösung δ gegen die Energie der Strahlung für verschiedene Werte c_{ff} . 200 Linien/mm links, 1200 Linien/mm rechts. (c) Transmissionsvermögen der beiden Gitter als Funktion der Energie. 200 Linien/mm links, 1200 Linien/mm rechts. (Quelle: [153])

| Parameter | Experiment | Design |
|--|-----------------------------|----------------|
| Elektronenenergie | 500 MeV bei 25 nm | |
| Ladung Elektronenpaket | n.b. | 0.5-1 nC |
| Spitzenstrom | n.b. | 1.3-2.2 kA |
| Einzelpulse pro Pulszug | 30 [†] | bis 1800 |
| Pulszüge | 5 1/s [†] | 10 1/s |
| Wellenlänge | 25.5 nm [#] | 6-120 nm |
| mittl. Energie pro Einzelpuls | 5-20 μ J [†] | 50-150 μ J |
| Einzelpulslänge | 10-50 fs | |
| mittl. Strahlungsleistung | \approx 2 mW [†] | bis 2 W |
| rel. spektrale Breite des Einzelpulses | 1-2% | 0.8 % |

Tabelle 5.1: Übersicht über verschiedene FLASH Parameter während des Experiments. Zusätzlich sind die Designparameter aufgeführt. ([†] Zu diesem Zeitpunkt maximal möglicher Wert. [#] Es waren nur isolierte Energien möglich, daneben 13.5 eV, 38 eV und wenige mehr isolierte Energien.)

Halbwertsbreite eines imaginären absolut monochromatischen FLASH-Strahls. Eingangsgrößen sind hier ein RMS Strahldurchmesser von 180–270 μ m bei 70–80 μ rad radialer Dispersion. Da FLASH aber de facto nicht monochromatisch ist, kommt neben c_{ff} der variablen Spaltgröße des Spaltes S (Abb. 5.8) eine entscheidende Rolle bezüglich des Auflösungsvermögens zu. Außerdem bestimmt die Spaltgröße die Ausdehnung des vertikalen Fokus im Brennpunkt F. Die Gesamtausdehnung des Fokus F ergibt sich folgendermaßen: Der intermediäre Fokus Z wird durch den Spiegel M4 um den Faktor 2 vergrößert in F abgebildet (Abb. 5.8). Die vertikale Ausdehnung ist 1:1 durch die Spaltgröße ΔS gegeben. Theoretisch erwartet man damit einen Brennpunkt F mit $RMS_{hor.} \times RMS_{vert.} = 100\text{--}150 \mu\text{m} \times \Delta S [0\text{--}2000 \mu\text{m}]$ [155]. Nach [152] wurde experimentell ein Fokus von etwa doppelter Ausdehnung bestimmt. Für einen tatsächlich 0.5–1% polychromatischen FLASH-Strahl ergibt sich bei einem Spalt von 100 μ m eine Auflösung entsprechend der roten Kurve in Abb. 5.9(b). Die Dispersion d am Spalt ist dabei gegeben durch die Gitterordnung n , Liniendichte l und den Abstand s vom Gitter zum Spalt:

$$d[\text{nm/mm}] = \frac{\sin \beta}{n l s} \times 10^6 \text{ nm/mm}. \quad (5.6)$$

Tab. 5.1 fasst eine Auswahl charakteristischer Parameter zum Zeitpunkt des Experiments, sowie angestrebte Designwerte zusammen. Festzuhalten bleibt in diesem Zusammenhang, dass FLASH zum Zeitpunkt dieses Experiments teilweise noch Größenordnungen von den anvisierten Designwerten entfernt war. Dennoch bestanden für die ersten Nutzerexperimente, zu denen auch vorliegendes zählt, wenn auch unter „rauen“ Bedingungen bereits einmalige Möglichkeiten.

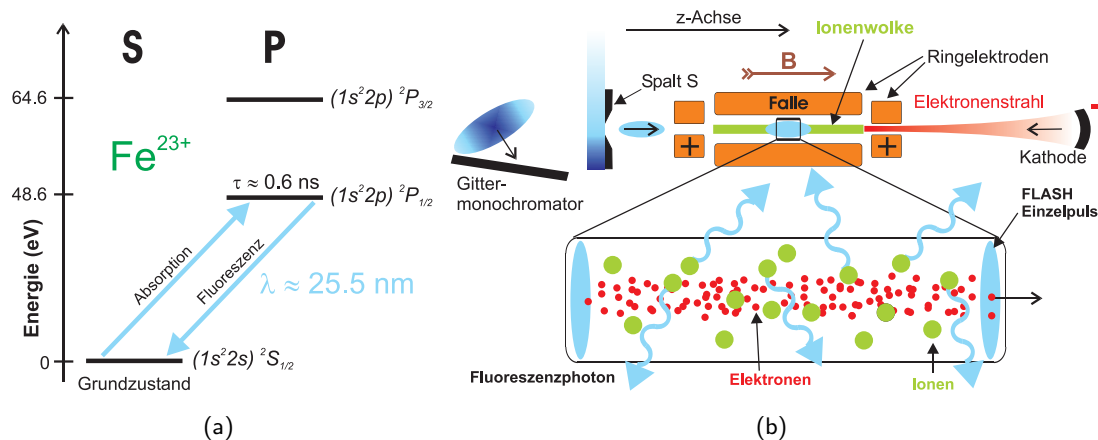


Abbildung 5.10: Prinzip des Experiments: (a) Termschema. (b) Monochromatisiertes Licht von FLASH wird zum Überlapp mit den in der EBIT befindlichen Fe^{23+} Ionen gebracht. Die Fluoreszenz wird als Funktion der Monochromatorenergie aufgenommen.

5.2 Das Experiment

Zunächst sei die Grundidee des Experimentes rekapituliert. Mittels resonanter Ein-Photonenabsorption soll der Übergang $2^2S_{1/2} - 2^2P_{1/2}$ in Li-artigen Fe^{23+} Ionen laserspektroskopisch vermessen werden. Dabei wird FLASH resonant auf die Übergangsenergie gemäß Abb. 5.10 eingestellt. Dadurch kann FLASH den $2^2S_{1/2} - 2^2P_{1/2}$ Übergang anregen und in Anbetracht der kurzen Lebensdauer des angeregten Zustands von 0.6 ns, instantanes Fluoreszenzlicht detektiert werden. Nutzt man nun den Monochromator, um die Resonanz abzufahren, so sollte der Verlauf der Fluoreszenzrate als Funktion der eingestellten Monochromator-Wellenlänge die Bestimmung der Übergangsenergie erlauben.

Die Einkopplung des FLASH-Strahls erfolgt kollinear zur Achse des Elektronenstrahls über die Kollektor-Kammer, siehe hierzu Abb. 3.9 und Abb. 3.12. Der Laser ist dort in gelb dargestellt. Das Fluoreszenzlicht wird senkrecht zur Strahlachse detektiert.

5.2.1 Experimenteller Aufbau

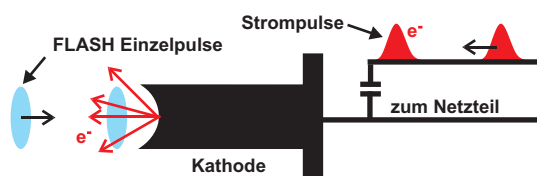


Abbildung 5.11: Verwendung der thermischen Elektronenkathode als Photokathode. FLASH-Einzelpulse verursachen zum konstanten thermischen Strom zusätzlich auskoppelbare Strompulse.

Abb. 5.12 zeigt das EBIT Experiment während der zweiwöchigen Strahlzeit am FLASH im Mai 2006. Während dieser Kampagne war die Falle mit fünf Detektorsystemen unterschiedlichster Art für Analyse und Überwachung ausgestattet. Das MCP-25 mit Siliziumspiegeln, die beiden Ge-Detektoren und das Gitterspektrometer wurden bereits in Kap. 3 diskutiert. Der fünfte, neue Detektor lag

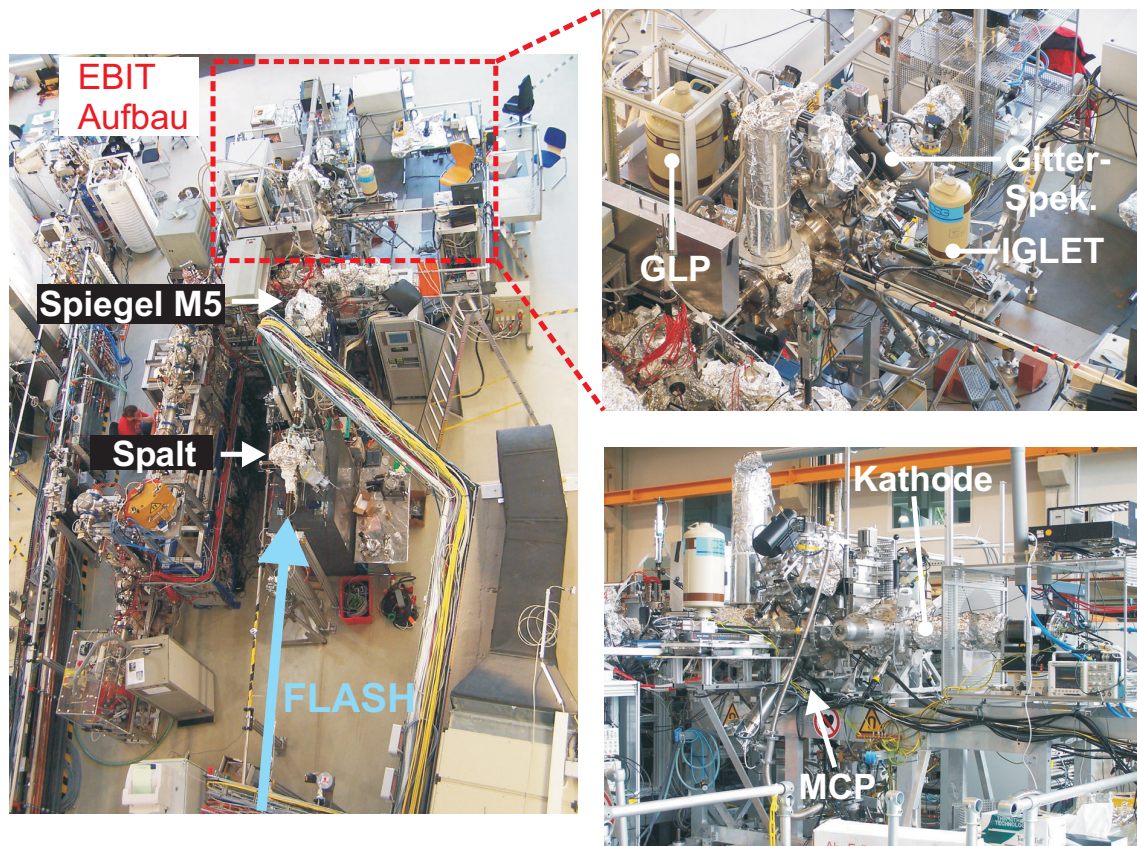


Abbildung 5.12: Aufbau der EBIT während der Strahlzeit am FLASH. In der Gesamtübersicht links ist unter anderem der letzte Abschnitt des Strahlverlaufs mit dem Ausgangsspalt des Monochromators und dem Refokussierspiegel M5 zu erkennen. In den Nahaufnahmen rechts sind die verwendeten Detektoren bezeichnet.

auf der Strahlachse von FLASH. Dazu wurde die auf Hochspannung liegende thermische Kathode der Elektronenkanone, neben ihrer eigentlichen Aufgabe, als Photokathode betrieben. Entsprechend Abb. 5.11 war es möglich, einen durch FLASH hervorgerufenen Photostrom auszukoppeln. Dieses Signal kann als Taktsignal benutzt werden und die einfache Frage nach Laser „AN“ oder „AUS“ beantwortet werden.

5.2.2 Durchführung

Zur erfolgreichen Durchführung des Experimentes sind folgende Voraussetzungen nötig:

- Ein möglichst dichtes Target aus Fe^{23+} Ionen, um eine ausreichende Zahl von Anregungen sicherzustellen.
- Ein optimaler Überlapp der zylinderförmigen Ionenwolke von nur 200 μm Durchmesser mit einem FLASH-Strahl von ähnlichem Ausmaße.
- Resonante Anregung des Übergangs.

- Ein Fluoreszenzsignal ausreichender Stärke um dieses vom Untergrund trennen zu können.
- Identifizierung des $2^2S_{1/2}-2^2P_{1/2}$ Übergangs in Fe²³⁺ als Verursacher der Fluoreszenz.

Diese fünf Punkte werden im Folgenden einzeln diskutiert.

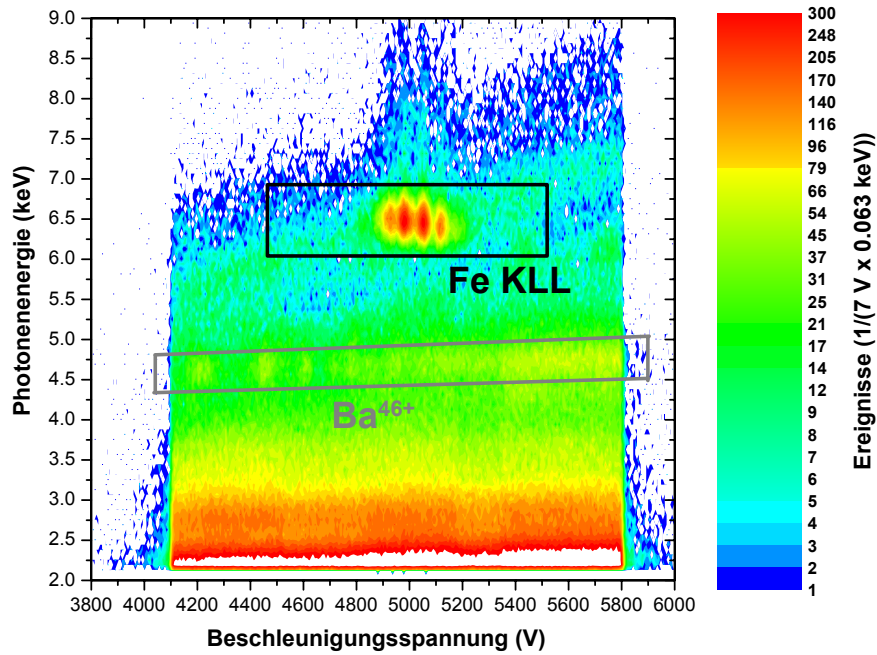
5.2.2.1 Bereitstellung eines Targets aus Fe²³⁺ Ionen

Wie in Kap. 3 geschildert, hängt die Produktion von HCIs und damit auch Fe²³⁺ Ionen von der Stromdichte des Elektronenstrahls, von dessen Energie und von der Fallkonfiguration ab. Um hohe Targetdichten zu erreichen, wurde bei diesem Experiment die Stromdichte durch hohe Stromstärken so hoch wie möglich getrieben. Ströme zwischen 300 und 500 mA wurden dabei erreicht. Gegen Ende der Strahlzeit hatte sich die Kathode soweit „eingebraunt“, dass zwischen 450 und 500 mA Stromstärke gearbeitet werden konnte.

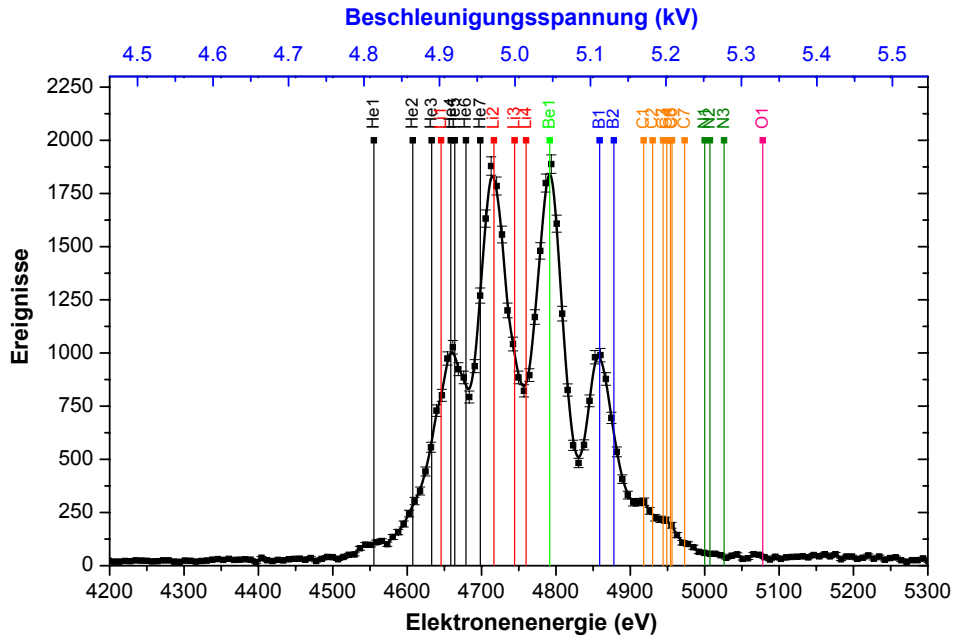
Man erhält ein Maximum im Wirkungsquerschnitt für die Ionisation durch Elektronenstoß beim 2.5– bis 3–fachen der nominellen Ionisationsenergie (Kap. 3). Die Ionisationsenergien der verschiedenen Ladungszustände von Eisen kann man Tab. 4.2 entnehmen. Zur Ionisation von Fe²²⁺ Ionen in den Ladungszustand Fe²³⁺ sind 1959 eV von Nöten. Ionisation höchster Ausbeute sollte sich demnach zwischen 4900 und 5877 eV Elektronenstrahlenergie einstellen. Um noch höhere Fe²³⁺ Ausbeuten und damit Targetdichten zu erreichen, wurde versucht, das Experiment in einem resonanten Kanal der dielektronischen Rekombination zu betreiben. Dabei wurde die Elektronenenergie so eingestellt, dass effektiv He-artiges Fe²⁴⁺, das schon bei 2046 eV und damit bei wenig mehr Energie als Fe²³⁺ produziert wird, mittels einer dielektronischen Resonanz nach Fe²³⁺ zurück rekombiniert wird, was die Targetdichte der Fe²³⁺ Ionen erhöht. Einen Überblick über die dielektronischen Vorgänge (Kap. 3) verschafft folgendes Experiment: Dabei wird die Beschleunigungsenergie der Elektronen als Funktion der Zeit linear variiert, und dabei die von den Ionen produzierte Strahlung registriert. Die Detektion dieser Röntgenphotonen kann mittels eines der beiden Germanium-Detektoren erfolgen, in diesem konkreten Fall wurde der IGLET-Detektor verwendet und die Beschleunigungsspannung etwa zwischen 4250 und 5750 V linear verfahren. Abb. 5.13 (a) zeigt die zweidimensionale Auftragung der Anzahl der registrierten Photonen in Abhängigkeit ihrer Energie und der kinetischen Energie der Elektronen, die, es sei nochmal erwähnt, auf Grund der Raumladung (Kap. 3) ein paar hundert Volt niedriger liegt als die nominelle Beschleunigungsspannung. Im vorliegenden Experiment wurden vergleichsweise sehr hohe Elektronenströme von 300 mA eingesetzt. Typischerweise werden DR Experimente [112, 156] bei weit geringeren Strömen durchgeführt. Bei Strömen von wenigen mA können die Resonanzstrukturen weit besser aufgelöst werden. Hier galt es allerdings die Resonanzen unter Bedingungen zu inspizieren, wie sie später bei den eigentlichen Fluoreszenzmessungen herrschen.

Die Fe KLL-Resonanzstruktur ist etwas genauer in Abb. 5.13 (b) als Projektion auf die x -Achse (Elektronenenergie) dargestellt. Die Eichung der x -Achse im Sinne der tatsächlichen

5.2. Das Experiment



(a)



(b)

Abbildung 5.13: (a) Anzahl von Photonen (farbkodiert) als Funktion ihrer Energie und der Beschleunigungsspannung der Elektronen. Zentral sind einige KLL-Resonanzen in hochgeladenem Eisen zu erkennen. Eine Gruppe von Resonanzen ist dem Ne-artigen Ba^{46+} zuzuordnen. (b) 1-dimensionale Projektion der KLL-Resonanz (innerhalb der Markierung) auf die Abzisse. Die stärksten Resonanzen sind Li2, Be1, B1, He4 und He5. Die Beschleunigungsspannung liegt auf Grund der Raumladung des Elektronenstrahls wenige hundert Volt über der kinetischen Energie der Elektronen (geteilt durch die Elementarladung). Die Bezeichnungen folgen Tab. 5.2.

kinetischen Energie (vgl. Abb. 5.13) (a) erfolgt über die Identifikation der Resonanzen unter Verwendung derer in [156] experimentell oder in [157] theoretisch bestimmten Werten bezüglich der Elektronenenergie und auch der Photonenenergie, die das ausgesandten Photon trägt, zerfällt der angeregte Zwischenzustand. Die Bezeichnung der Resonanzen folgt hierbei Tab. 5.2. Die erkennbar dominierenden vier Resonanzen sind He4, Li2, Be2 und B1. Über die Resonanz He4 rekombiniert man effektiv He-artiges Fe²⁴⁺ in den in Tab. 5.2 angegebenen Li-artigen angeregten Zwischenzustand. Dieser Zustand zerfällt dann entweder mit etwa gleicher Wahrscheinlichkeit autoionisierend und nicht registrierbar zurück nach He, oder radiativ unter Beibehaltung des Ladungszustandes — genau dieses Photon wird gemessen. Entsprechend erfolgt bei Li2 ein im Sinne der Anforderung kontraproduktives Entvölkern des Li-artigen Zustands zu Gunsten des Be-artigen Ionisationszustandes, analog sind die übrigen Resonanzen entsprechend ihrer Bezeichnung zu verstehen. Zum Rekombinieren von He-artigem Eisen in den gewünschten Li-artigen Zustand ist die starke Doppelresonanz He4/He5 geeignet. Nach dem ersten radiativen Zerfall befindet sich das System allerdings weiter in einem angeregten Zustand. Daher kommt es zu einem weiteren Photonenübergang kleinerer Energie, nämlich entweder Li $1s^2 2p_{1/2} - 1s^2 2s$ oder $1s^2 2p_{3/2} - 1s^2 2s$. Für jene die Emission ausnutzende konventionelle Gitter-Spektroskopie ist dies also eine Möglichkeit, diese interessanten Übergänge über die dielektronische Rekombination gezielt zu treiben.

Während des Experiments am FLASH wurde versucht die Elektronenenergie so zu wählen, dass die He4/He5-Resonanz ausgenutzt werden konnte. Dazu musste die EBIT regelmäßig wieder auf diese Resonanz getrimmt werden, da schon kleinste, nicht zu vermeidende Drifts in den Einstellungen, wie z.B. im Elektronenstrom, schnell wieder aus dieser Resonanz führen.

Anzahl hochgeladener Ionen in der Falle: Die Daten in Abb. 5.13 sind geeignet die Anzahl der Ionen in der Falle abzuschätzen. Am Beispiel der Li2- und B1-Resonanz soll jeweils die Menge der Li-artigen, bzw. der B-artigen Ionen bestimmt werden. Ein gangbarer Weg hierzu stellt sich so dar: Die einzelne Resonanzlinie (Abb. 5.13 (b)) ist augenscheinlich in ausreichendem Maße durch eine Gaussglocke beschreibbar. Einem Gauss'schen-Fit an die Daten entnimmt man die Gesamtzahl $N_R \approx 100\,000$ der Ereignisse unter einer jeden der beiden Li2-, B1-Resonanzlinien. Für N_R lässt sich ansetzen:

$$N_R = \frac{N_{\text{Ion}}^*}{A_e} \Omega_{\text{IGLET}} \int \sigma_{\text{DR}}(E) \frac{I_e f}{v_U e} dE, \quad (5.7)$$

wobei nach N_{Ion}^* , der Anzahl der Ionen im Strahl, aufzulösen ist. $A_e = (35 \times 10^{-6})^2 \pi \text{ mm}^2$ steht für den Strahlquerschnitt des Elektronenstrahls, denn nur dort kann es zu nennenswerter Rekombination kommen. In $\Omega_{\text{IGLET}} = 8 \times 10^{-5}$ stecken der Raumwinkel und die Quanteneffizienz des verwendeten IGLET-Detektors. $\sigma_{\text{DR}}(E)$ ist der von der Energie der Elektronen abhängige Wirkungsquerschnitt der DR. Die restlichen Parameter ergeben die Gesamtzahl der Projektile, also der Elektronen. Ihre Zahl hängt ab von der Stromstärke des Strahls $I_e = 300 \text{ mA}$, der Geschwindigkeit $v_U = 38 \text{ eV/s}$, mit der die Be-

5.2. Das Experiment

| Ausgangszustand | Bezeichnung | Resonanz (angeregt) | Elektronenenergie (eV) | Photonenenergie (keV) [157] |
|-----------------|------------------|---|------------------------|-----------------------------|
| He-artig | He1 | Li $[1s(2s^2)_0]_{1/2}$ | 4555.2 | 6.55/6.53 |
| | He2 | Li $[1s(2s)_0 2p_{1/2}]_{1/2}$ | 4607.5 | 6.65 |
| | He3 | Li $[1s(2s)_0 2p_{3/2}]_{3/2}$ | 4632.9 | 6.68 |
| | He4 | Li $[(1s 2p_{1/2})_0 2p_{3/2}^2]_{3/2}$ | 4658.6 [157] | 6.64 |
| | He5 | Li $[1s 2p_{3/2}^2]_{5/2}$ | 4664.0 [157] | 6.64 |
| | He6 | Li $[1s 2p_{3/2}^2]_{3/2}$ | 4679 | 6.66 |
| | He7 | Li $[1s(2p_{3/2}^2)_0]_{1/2}$ | 4698.3 | 6.68 |
| Li-artig | Li1 | Be $[1s 2s^2 2p_{1/2}]_1$ | 4645.6 | 6.60 |
| | Li2 [†] | Be $[(1s 2s)_1 (2p_{3/2}^2)_2]_3$ | 4716.6 | 6.61 |
| | Li3 | Be $[(1s 2s)_0 (2p_{1/2} 2p_{3/2}^2)_2]_2$ | 4744.4 | 6.60 |
| | Li4 | Be $[(1s 2s)_0 (2p_{3/2}^2)_2]_2$ | 4759.8 | 6.61 |
| Be-artig | Be1 | B $[1s 2s^2 (2p_{3/2}^2)_2]_{5/2}$ | 4791.6 | 6.58 |
| B-artig | B1 | C $[(1s 2s^2 2p_{1/2})_1 (2p_{3/2}^2)_2]_2$ | 4858.8 | 6.53 |
| | B2 | C $[(1s 2s^2 2p_{1/2})_1 (2p_{3/2}^2)_2]_1$ | 4877.9 | 6.55 |
| C-artig | C1 | N $[1s 2s^2 2p_{1/2}^2 (2p_{3/2}^2)_2]_{5/2}$ | 4918 [157] | 6.5 |
| | C2 | N $[1s 2s^2 2p_{1/2}^2 (2p_{3/2}^2)_0]_{1/2}$ | 4930 [157] | 6.51 |
| | C3 | N $[(1s 2s^2 2p_{1/2})_1 (2p_{3/2}^3)_{3/2}]_{3/2}$ | 4944 [157] | 6.51 |
| | C4 | N $[(1s 2s^2 2p_{1/2})_1 (2p_{3/2}^3)_{3/2}]_{5/2}$ | 4949 [157] | 6.51 |
| | C5 | N $[(1s 2s^2 2p_{1/2})_1 (2p_{3/2}^3)_{3/2}]_{1/2}$ | 4954 [157] | 6.50/5.52 |
| | C6 | N $[(1s 2s^2 2p_{1/2})_0 (2p_{3/2}^3)_{3/2}]_{3/2}$ | 4956 [157] | 6.51 |
| | C7 | N $[(1s 2s^2 (2p_{3/2}^4)_0]_{1/2}$ | 4973 [157] | 6.51 |
| N-artig | N1 | O ? | 5000 [157] | 6.47 |
| | N2 | O ? | 5007 [157] | 6.47 |
| | N3 | O ? | 5026 [157] | 6.47 |
| O-artig | O1 | F ? | 5078 [157] | 6.44 |

Tabelle 5.2: Auswahl (unvollständig, die He-artigen Resonanzen summieren sich z.B. zu 16 Stück) der stärksten Fe KLL Resonanzen mit Angabe des resonanten Zustands, der Elektronenenergie und der wahrscheinlichsten Photonenergie im Falle eines radiativen Zerfalls der angeregten Resonanzen. Die doppelt angeregten Zustände können auch strahlungslos autoionisierend zerfallen. († eine Doppellinie zweier etwa gleichstarker Linien.)

schleunigungsspannung durchfahren wurde und der Gesamtzahl $f = 16$ der Durchläufe über die Resonanz. Der Wirkungsquerschnitt $\sigma_{\text{DR}}(E)$ ergibt sich aus einer Faltung der theoretischen Resonanzlinie R_T — eine Lorentzkurve — mit einer gaussförmigen Apparatfunktion. Der Wirkungsquerschnitt einer Lorentz-förmigen Resonanzlinie ist ebenfalls Lorentz-förmig [132]. Gemäß [157] beträgt der über die Energie integrierte Wirkungsquerschnitt, Resonanzstärke genannt, für beide Resonanzen⁸ etwa $\bar{\Sigma} = 2.5 \times 10^5$ barn eV, bei einer Halbwertsbreite von circa $\Delta E_T = 0.25$ eV. Im vorliegenden Fall, wo die Breite des Gauss'schen Detektorsignals für eine Resonanz Größenordnungen über der Breite der

⁸Li2 ist dabei als Doppellinie anzunehmen, so dass die Summe des Wirkungsquerschnitts beider Linien gleich dem der B1-Resonanz ist.

natürlichen Resonanzlinie liegt, ergibt sich ein ebenfalls Gauss-förmiger Wirkungsquerschnitt [132]. Dieser ist so konstruiert, dass das Integral über dem Wirkungsquerschnitt identisch erhalten bleibt, also 2.5×10^5 barn eV. Es ergibt sich:

$$\sigma_{DR}(E) = \bar{\Sigma} \frac{2\sqrt{\ln(2)}}{\sqrt{\pi} \Delta E_{\text{exp}}} \exp\left(-4 \ln(2) \frac{(E - E_0)^2}{\Delta E_{\text{exp}}^2}\right), \quad (5.8)$$

hierbei symbolisiert E_0 den Schwerpunkt der jeweiligen Resonanzlinie (Abb. 5.13 (b)) und $E_{\text{exp}} \approx 50$ eV deren Halbwertsbreite. Einsetzen von Gl. (5.8) in (5.7) und auflösen nach N_{Ion}^* liefert:

$$N_{\text{Be}}^* \approx N_{\text{Li}}^* \approx 240\,000 \quad (5.9)$$

Ionen jeweils im Zustand Fe^{23+} und Fe^{22+} . Dies ist die Anzahl der Ionen im Elektronenstrahl, die zugehörige Ionenwolke beider Ladungszustände ist allerdings größer. Ionen außerhalb des Elektronenstrahls können bis hin zum Durchmesser von FLASH (etwa 200 μm) auch an der Fluoreszenz mitwirken. Die Ionenwolke organisiert sich radial entsprechend der „Höhenformel“ Gl. (3.1). Daher kann man von einer Million Be-artiger wie auch Li-artiger Eisenionen innerhalb eines Durchmessers von 200 μm ausgehen.

5.2.2.2 Justage und Überlapp mit FLASH

Die Justage stellte eine der zentralen Herausforderungen im Zusammenhang mit diesem Experiment dar. Die weniger als 200 μm Durchmesser fassende Ionenwolke musste gemäß Abb. 5.10 (b) mit dem FLASH-Strahl überlagert werden, welcher in einer Dimension ähnliche Abmessungen aufweist und in der zweiten eine vom Spalt (Abb. 5.8) abhängige vertikale Breite (siehe weiter oben).

Der Strahlverlauf von FLASH ist im Nutzerbetrieb praktisch fix im Raum. Daher muss der Nutzer sein Experiment relativ zu FLASH positionieren. Im vorliegenden Fall bedeutet dies, dass die gesamte EBIT Apparatur von 1500 kg Gewicht im Sub-Millimeter-Bereich verfahren werden muss, um die relativ zur EBIT ortsfeste, durch den Feldverlauf des Magneten bestimmte, Lage der Ionenwolke mit dem FLASH-Strahl zum Überlapp zu bringen. Um zwei zylinderförmige Gebilde konzentrisch zu überlagern, gilt es 6 freie Parameter zu bestimmen. Die Mitte der Ionenwolke muss zu FLASH zentriert werden, dazu kommen die 3 Winkel einer Geraden im Raum. Um dies zu bewerkstelligen wurde das Gestell der EBIT auf 3 unabhängigen x - y - z -Verfahrfüßen montiert. Gemäß Abb. 5.14 (a) können dann die 6 Parameter ($X_1, X_2, Y_1, Y_2, Y_3, Z$), wobei Z unkritisch ist, eingestellt werden. Jeder der 5 kritischen Koordinaten wird dabei mittels einer Distanz-Messuhr überwacht (Abb. 5.14 (b)).

Eine grobe Justage auf circa 1 bis 2 mm genau, kann mittels der im Vakuum eingebauten Irisblenden erfolgen. Dabei wird ein Justagelaser benutzt, der dem FEL beim Verlassen des Undulators überlagert wird. Nach dieser Voreinstellung ist die Maschine bereits so justiert, dass auf der Kathode ein durch FLASH hervorgerufenes Photosignal detektiert werden kann.

Die Suche nach dem Fluoreszenzsignal und damit dem Überlapp gestaltete sich so, dass

5.2. Das Experiment

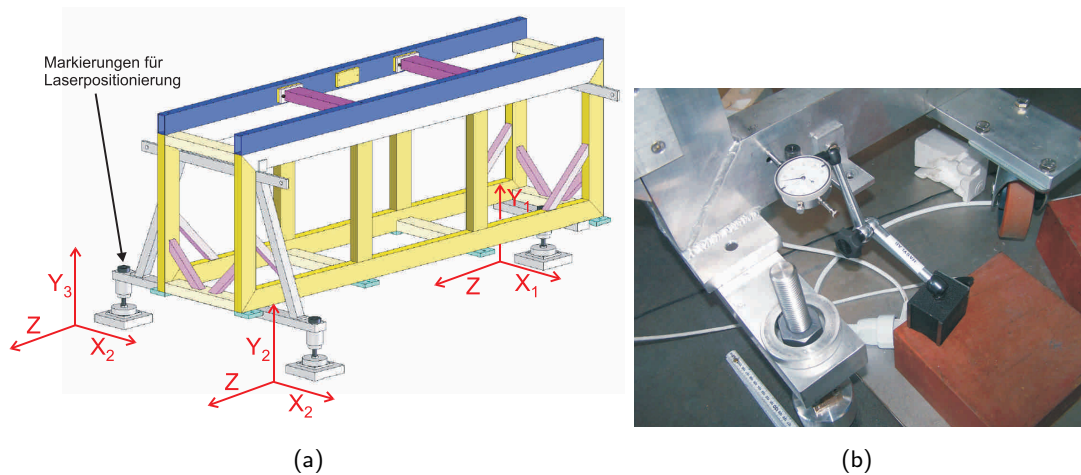


Abbildung 5.14: (a) Gestell der EBIT. Durch Montage auf x - y - z -Fahrtischen können die nötigen 6 freien Parameter zur Justage eingestellt werden. Vorrichtungen zum Einrichten mittels Laserpositioniersystemen sind vorhanden. (b) Die Positionierung auf 50 μm -Level erfolgte über fünf entsprechend verteilte Messuhren.

ein Raster von $(2 \times 2) \text{ mm}^2$ in 200 μm Schritten abgefahren werden musste. Im Extremfall sind hierbei 200–400 Messpunkte anzufahren. Hinzu kommt, dass ein erstes Signal erwartungsgemäß sowohl absolut, als auch relativ zum Untergrund, klein zu erwarten ist (siehe weiter unten). Dies erforderte lange Integrationszeiten pro Messpunkt ($\approx 10 \text{ min}$).

5.2.2.3 Theoretische und experimentelle Betrachtung der Fluoreszenz

Magnetische Aufspaltung: Für Labormaßstäbe wird bei der EBIT ein sehr starkes Magnetfeld von 6 T verwendet. Es ist bekannt, dass entartete atomare Energieniveaus in statischen Magnetfeldern aufspalten. Der damit verbundene Zeeman-Effekt [158] kann hierbei einen entscheidenden Einfluss auf die Spektroskopie des Übergangs nehmen. Allerdings kann angeführt werden, dass im Rahmen der Auflösung bei der konventionellen Spektroskopie in Kap. 4 keine Aufspaltung in Magnetfeldkomponenten beobachtet wurde. Trotzdem soll hier eine Abschätzung mit welchen Größenordnungen hinsichtlich der Aufspaltung zu rechnen sind durchgeführt werden.

Dabei spalten die (ohne Magnetfeld) entarteten Zustände (Abb. 5.10 (a)) im Magnetfeld gemäß Abb. 5.15 auf. Die Elektronen der K-Schale werden nicht betrachtet, es ist also von einem H-artigen Ion auszugehen. Das magnetische Moment des Ions sollte, unter Vernachlässigung etwaiger Kernspins, alleine durch das L-Schalen Elektron verursacht werden, da die K-Schalen Elektronen keinen Bahndrehimpuls aufweisen und sich ihre Spins gegenseitig aufheben. Der Wechselwirkungs-Hamiltonoperator eines gebundenen Elektrons im Magnetfeld ist z.B. in [159] zu finden und gegeben über:

$$\mathbf{H}_B = \mu_B (g_L \mathbf{L} + g_S \mathbf{S}) \mathbf{B}, \quad (5.10)$$

wobei μ_B das Bohr'sche Magneton, g_L und g_S die jeweiligen gyromagnetischen Verhältnisse und \mathbf{B} das Magnetfeld darstellen. Im Falle eines schwachen Feldes, so schwach, dass dieses

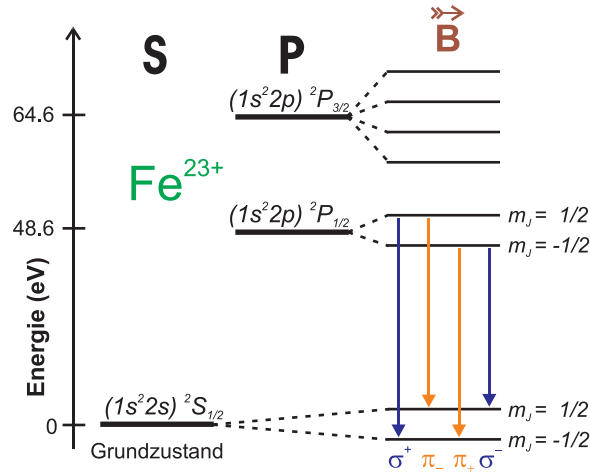


Abbildung 5.15: Aufspaltung der untersten drei Niveaus von Fe^{23+} Ionen in einem Magnetfeld. Entsprechend $J = 1/2$ spalten der Grundzustand und der erste angeregte Zustand jeweils in ein Dublett. Die Übergänge zwischen diesen Dubletts erscheinen als σ^- und π -Licht.

nicht im Stande ist die Bindung L zu S entscheidend zu stören (wovon zunächst auch bei 6 T ausgegangen wird), findet die Standardprozedur mittels einfacher Störungsrechnung in der Basis $\mathfrak{B} = (n, L, S, J, m_j)$ das Ergebnis

$$\Delta E = g_J \mu_B m_j B \quad (5.11)$$

für den Zusammenhang der Verschiebung und Aufspaltung eines Energieniveaus bezüglich m_j , wobei m_j die Magnetquantenzahl des Gesamtdrehimpulses darstellt.

Einzige Unbekannte dieser Gleichung stellt derzeit noch g_J dar. Dieses ergibt sich zu [159]:

$$g_J = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + 3/4}{2j(j+1)}. \quad (5.12)$$

Es resultieren hieraus Verschiebungen der magnetischen Unterniveaus, wie in Tab. 5.3 (a) zusammengefasst. Dies verursacht für die verschiedenen Polarisationskomponenten des

| Zustand \ Unterzustand | (a) | | (b) | |
|----------------------------|-------------|--------------|--------------|-------------|
| | $m_j = 1/2$ | $m_j = -1/2$ | Polarisation | δE |
| $\Delta E_{1s^2 2s}$ | 0.00035 eV | -0.00035 eV | σ^+ | 0.00047 eV |
| $\Delta E_{1s^2 2p_{1/2}}$ | 0.00012 eV | -0.00012 eV | π_+ | 0.00023 eV |
| | | | π_- | -0.00023 eV |
| | | | σ^- | -0.00047 eV |

Tabelle 5.3: (a) Verschiebung ΔE der magnetischen Unterniveaus des Grundzustandes und des ersten angeregten Zustandes. (b) Verschiebungen der Übergangsenergie für die verschiedenen Komponenten nach Abb. 5.15 gegenüber des entarteten Übergangs $2 \ ^2S_{1/2} - 2 \ ^2P_{1/2}$.

Lichtes Verschiebungen δE in der Energie zur nominellen Übergangsenergie $2 \ ^2S_{1/2} - 2 \ ^2P_{1/2}$ ohne Magnetfeld (Abb. 5.15) wie in Tab. 5.3 (b) dargestellt. Diese Verschiebungen

stehen entsprechend der erreichten Auflösung in Kap. 4, also der Halbwertsbreite der Spektrallinien, außerhalb der möglichen Messgenauigkeit. Allerdings sind die Verschiebungen in der Übergangsenergie so groß, dass sie in den Bereich der Auflösung fallen, mit dem teilweise der Schwerpunkt der Spektrallinien bestimmt werden konnte. Bei Messungen in Emission, wie in Kap. 4, beobachtet man allerdings immer beide Komponenten einer Polarisationsrichtung, so dass sich der Schwerpunkt der Linie im Magnetfeld nicht ändert und der Übergangsenergie im entarteten Falle entspricht. Die Frage, welche Konsequenzen durch die Werte der Tab. 5.3 (b) für das folgende Fluoreszenzexperiment entstehen, wo ja die Absorption der Spektrallinie entscheidend ist, wird weiter unten diskutiert.

Die Annahme eines schwachen Magnetfeldes ist auch bei 6 T gerechtfertigt, wie ein Vergleich der Aufspaltung von wenigen meV mit der Feinstrukturaufspaltung $\Delta E_{\text{FS}} 2^2P_{3/2} - 2^2P_{1/2}$ von zig eV im Falle von Fe^{23+} zeigt. Der Effekt eines starken Feldes tritt genau dann ein, wenn der Energiebeitrag durch das äußere Feld von der Größenordnung der Feinstrukturaufspaltung ist. Auch das stärkste statische Labor-Magnetfeld von circa 45 T vermag es in diesem Sinne nicht Bedingungen eines starken Feldes zu schaffen.

Anregung des $2^2S_{1/2} - 2^2P_{1/2}$ Übergangs durch FLASH: Zur Klärung dieses Sachverhalts ist es aufschlussreich, sich den historischen Versuch von Zeeman zu vergegenwärtigen. Betrachtet man die in Abb. 5.16 dargestellte Situation, so stellt man grundlegende Ähnlichkeiten mit dem Experiment in dieser Arbeit fest. Zeeman beobachtete die D_1 -Linie des Natriums im Magnetfeld. Wie Lithium reiht sich auch Natrium in die Gruppe der Alkalimetalle ein. Sein der D_1 -Linie zugeordneter Übergang $1s^2 2p^6 3p^2 P_{1/2} - 1s^2 2p^6 3s^2 S_{1/2}$ steht in großer Analogie zum Übergang $1s^2 2s^2 S_{1/2} - 1s^2 2p^2 P_{1/2}$ in Li-artigen Ionen. Zeemans Natriumatome (grün) befinden sich in Form einer Dampfampe in einem homogenen, entlang der z -Achse verlaufenden Magnetfeld (braun). Bei diesem Experiment konnte er bezüglich der Emissioncharakteristik der D_1 -Linie folgende Feststellungen machen: Beobachtete er die Atome senkrecht zur z -Achse, so stellte er die Emission von linear polarisiertem π_- - und π_+ -Licht gemäß Abb. 5.16 und entsprechender Analogie zu Abb. 5.15 fest. Außerdem fand er entlang der x -Achse linear polarisiertes Licht (σ^{\parallel}) mit den beiden Wellenlängen wie sie genau beim zirkularen σ^- - und σ^+ -Licht zu erwarten sind (Kap. 3). Auf Grund der radialen Beobachtungsrichtung hatte dieses σ -Licht seinen zirkularen Charakter verloren. Blickte Zeeman entlang der z -Achse auf den Natriumdampf, so registrierte er nur die beiden zirkularen σ -Komponenten. Er konnte im Besonderen entlang der z -Achse, und damit entlang des B-Feldes, keinerlei linear polarisiertes Licht feststellen. Tauscht man im Geiste den Natriumdampf mit Fe^{23+} Ionen aus und lässt entsprechend der experimentellen Situation bei dieser Arbeit den entlang der y -Achse linear polarisierten FLASH (hellblau) einfallen, so sieht man sich mit der Situation konfrontiert, dass im Sinne des Fluoreszenzexperimentes die Fe^{23+} Ionen Licht einer Polarisation absorbieren sollen, welches in der Emission entlang diese Einfallrichtung (z -Achse) nicht auftritt. Ein klassischer Oszillator, etwa eine Antenne, an der Stelle der Ionen mit entsprechender Ausrichtung entlang des Magnetfeldes, wird mit in y -Richtung polarisierter elektromagnetischer Strahlung nicht wechselwirken — sprich diese Strahlung induziert in der Antenne kein Dipolmoment

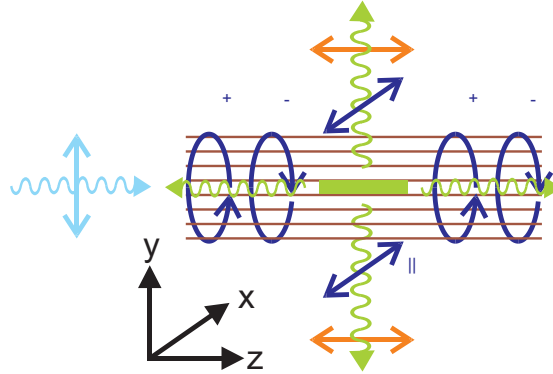


Abbildung 5.16: Typisches Abstrahlungsbild von Licht verschiedener Polarisation eines Ensembles von Ionen oder Atomen (grün) unter einem $2^2S_{1/2}-2^2P_{1/2}$ Übergang innerhalb eines homogenen Magnetfeldes (braun). In hellblauer Farbe ist die Einfallsrichtung und Polarisation des FLASH-Strahls gezeigt.

— und in diese Richtung auch keine Strahlung abgeben. Dies führt direkt auf die Frage, ob der quantenmechanische Dipol ($-$ übergang) $1s^22s^2S_{1/2}-1s^22p^2P_{1/2}$ Strahlung der geschilderten Form, die in Emission nicht auftritt, entgegen klassischen Überlegungen absorbieren kann oder etwa das Experiment in dieser Geometrie nicht durchführbar ist.

Bei der quantenmechanischen Betrachtung startet man am besten mit folgendem Ausdruck für die Absorption eines Photons im Teilchenbild (z.B. [160]):

$$dW = \frac{e^2\omega_{fi}}{2\pi\hbar c^3 m_e^2} |\hat{\mathbf{e}}_{k\rho} \langle \psi_i | \mathbf{p} \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}) | \psi_f \rangle|^2 \bar{\mathbf{n}}_{k\rho} d\Omega. \quad (5.13)$$

Gl. (5.13) gibt die Wahrscheinlichkeit an für die Absorption eines entlang $\hat{\mathbf{e}}_{k\rho}$ polarisierten Photons pro Raumwinkelelement $d\Omega$, wobei $\bar{\mathbf{n}}_{k\rho}$ der Mittelwert der Anzahl von vorhandenen Photonen im Wellenvektor-Intervall $\mathbf{k} + d\mathbf{k}$ darstellt. ω_{fi} ist dabei die Übergangsfrequenz. Mit der Absorption ist der Übergang des Systems aus dem Zustand $|\psi_i\rangle$ nach $|\psi_f\rangle$ verknüpft. Von weiterem Interesse ist das Matrixelement M_{if} mit:

$$|M_{if}|^2 = |\hat{\mathbf{e}}_{k\rho} \langle \psi_i | \mathbf{p} \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}) | \psi_f \rangle|^2 \quad (5.14)$$

$$\approx |\hat{\mathbf{e}}_{k\rho} \langle \psi_i | \mathbf{p} | \psi_f \rangle|^2, \quad (5.15)$$

wobei im letzten Schritt die Exponentialfunktion auf Grund der Dipolnäherung nur in erster Ordnung der Taylorentwicklung berücksichtigt wird. Ganz allgemein gilt für den Kommutator $[\mathbf{H}_0, \mathbf{r}] \propto \mathbf{p}$ mit $\mathbf{H}_0 = \mathbf{p}^2/(2m_e) + V(r)$. Setzt man für ein gegebenes System in ausreichender Näherung den folgenden „H-artigen“ Hamiltonoperator

$$\mathbf{H} = \mathbf{p}^2/(2m_e) + V_C(r) + a(r)\mathbf{L}\mathbf{S} + c_1B(\mathbf{J}_z + \mathbf{S}_z) \quad (5.16)$$

an, so kann man \mathbf{p} in Gl. (5.15) ersetzen durch einen Ausdruck proportional zu:

$$[\mathbf{H}_0, \mathbf{r}] = [\mathbf{H} - a(r)\mathbf{L}\mathbf{S} - c_1B(\mathbf{J}_z + \mathbf{S}_z), \mathbf{r}]. \quad (5.17)$$

5.2. Das Experiment

In der Basis $\mathfrak{B} = (n, \mathbf{L}, \mathbf{S}, \mathbf{J}, m_j)$ folgt für M_{if} damit:

$$M_{if} \propto \hat{\mathbf{e}}_{k\rho} \overbrace{\langle n'=2, L'=0, S'=1/2, J'=1/2, m'_j |}^{\langle \psi_i |} [\mathbf{H} - a(r)\mathbf{L}\mathbf{S} - c_1 B(\mathbf{J}_z + \mathbf{S}_z), \mathbf{r}] \underbrace{|n=2, L=1, S=1/2, J=1/2, m_j\rangle}_{|\psi_f\rangle}. \quad (5.18)$$

In gewählter Basis sind \mathbf{H} , $a(r)\mathbf{L}\mathbf{S}$ und \mathbf{J}_z diagonal, daher reduziert sich der Ausdruck (5.18) unter verkürzter Schreibweise der Wellenfunktionen auf die Darstellung:

$$M_{if} = \hat{\mathbf{e}}_{k\rho} [d_1 \langle \psi_i | \mathbf{r} | \psi_f \rangle + d_2 \langle \psi_i | a(r)\mathbf{r} | \psi_f \rangle + d_3 \langle \psi_i | \mathbf{S}_z \mathbf{r} | \psi_f \rangle + d_4 \langle \psi_i | \mathbf{r} \mathbf{S}_z | \psi_f \rangle], \quad (5.19)$$

wobei die d_i hier und im Folgenden Vorfaktoren darstellen, die all die Größen aufnehmen, die aus dem Matrixelement herausgezogen wurden. Das Ausführen der Integration über den Radialanteil, also zur Quantenzahl n , vereinfacht weiter zu:

$$M_{if} = \hat{\mathbf{e}}_{k\rho} \times [d_5 \langle \psi_i | \mathbf{r} | \psi_f \rangle + d_3 \langle \psi_i | \mathbf{S}_z \mathbf{r} | \psi_f \rangle + d_4 \langle \psi_i | \mathbf{r} \mathbf{S}_z | \psi_f \rangle], \quad (5.20)$$

Der Übergang von der Basis $\mathfrak{B} = (n, \mathbf{L}, \mathbf{S}, \mathbf{J}, m_j)$ in die Basis $\mathfrak{B}^* = (\mathbf{L}, m_j; \mathbf{S}, m_s)$, in der S_z diagonal ist, ist einfach durchzuführen und von der Form:

$$\begin{aligned} |L=1, S=1/2, J=1/2, m_j\rangle &= - \underbrace{\frac{\sqrt{\frac{3}{2} - m_j}}{\sqrt{3}}}_{\alpha_{1,m_j}} \times |L=1, m_j - \frac{1}{2}; S=1/2, m_S=1/2\rangle \\ &\quad + \underbrace{\frac{\sqrt{\frac{3}{2} + m_j}}{\sqrt{3}}}_{\beta_{1,m_j}} \times |L=1, m_j + \frac{1}{2}; S=1/2, m_S=-1/2\rangle \\ |L=0, S=1/2, J=1/2, m_j\rangle &= \underbrace{\sqrt{\frac{1}{2} + m_j}}_{\gamma_{0,m_j}} \times |L=0, m_j - \frac{1}{2}; S=1/2, m_S=1/2\rangle \\ &\quad + \underbrace{\sqrt{\frac{1}{2} - m_j}}_{\delta_{0,m_j}} \times |L=0, m_j + \frac{1}{2}; S=1/2, m_S=-1/2\rangle. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Gl. 5.20 reduziert sich damit zu:

$$\begin{aligned} M_{if} &= d_6 \left[\alpha_{1,m_j} \gamma_{0,m_j} \langle L=0, m_j - \frac{1}{2}; S=1/2, m_S=1/2 | \hat{\mathbf{e}}_{k\rho} \mathbf{r} | L=1, m_j - \frac{1}{2}; S=1/2, m_S=1/2 \rangle \right. \\ &\quad \left. + \beta_{1,m_j} \delta_{0,m_j} \langle L=0, m_j + \frac{1}{2}; S=-1/2, m_S=-1/2 | \hat{\mathbf{e}}_{k\rho} \mathbf{r} | L=1, m_j + \frac{1}{2}; S=1/2, m_S=-1/2 \rangle \right] \\ &= d_6 \left[\alpha_{1,m_j} \gamma_{0,m_j} \langle L=0, m_j - \frac{1}{2} | \hat{\mathbf{e}}_{k\rho} \mathbf{r} | L=1, m_j - \frac{1}{2} \rangle \right. \\ &\quad \left. + \beta_{1,m_j} \delta_{0,m_j} \langle L=0, m_j + \frac{1}{2} | \hat{\mathbf{e}}_{k\rho} \mathbf{r} | L=1, m_j + \frac{1}{2} \rangle \right]. \end{aligned} \quad (5.22)$$

Die Wellenfunktionen in Gl. (5.22) sind die Eigenfunktionen des Operators \mathbf{J}_z . Die Eigenfunktionen dieses Operators sind bekanntlich die Kugelflächenfunktionen $Y_{l,m}$ [160], mit $\mathbf{J}_z Y_{l,m} = \hbar m Y_{l,m}$. Auch $\hat{\mathbf{e}}_{k\rho} \mathbf{r}$ aus Gl. (5.22) lässt sich vermöge der Kugelflächenfunktionen ausdrücken [56]:

$$\hat{\mathbf{e}}_{k\rho} \mathbf{r} = r \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \left(\underbrace{\frac{-\hat{e}_{\mathbf{x},k\rho} + i\hat{e}_{\mathbf{y},k\rho}}{\sqrt{2}}}_{\hat{e}_1} Y_{1,1} + \underbrace{\frac{\hat{e}_{\mathbf{x},k\rho} + i\hat{e}_{\mathbf{y},k\rho}}{\sqrt{2}}}_{\hat{e}_{-1}} Y_{1,-1} + \underbrace{\hat{e}_{\mathbf{z},k\rho}}_{\hat{e}_0} Y_{1,0} \right). \quad (5.23)$$

Damit folgt für Gl. 5.22:

$$M_{if} = d_7 \sum_{q=-1}^1 \left[\alpha_{1,m_j} \gamma_{0,m_j} \int Y_{0,m'_j-\frac{1}{2}}^* \hat{e}_q Y_{1,q} Y_{1,m_j-\frac{1}{2}} d\Omega \right. \\ \left. + \beta_{1,m_j} \delta_{0,m_j} \int Y_{0,m'_j+\frac{1}{2}}^* \hat{e}_q Y_{1,q} Y_{1,m_j+\frac{1}{2}} d\Omega \right]. \quad (5.24)$$

Die Summe Σ über alle möglichen Kombinationen m_j, m'_j ergibt:

$$\Sigma \equiv \sum_{m'_j=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \sum_{m_j=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} |M_{if}| = d_7 \left(2 \times \frac{1}{\sqrt{12\pi}} \hat{e}_0 + \frac{1}{\sqrt{6\pi}} |\hat{e}_{-1}| + \frac{1}{\sqrt{6\pi}} |\hat{e}_1| \right) \\ = d_7 \left(2 \frac{1}{\sqrt{12\pi}} \hat{e}_{\mathbf{z},k\rho} + \frac{1}{\sqrt{6\pi}} \frac{|\hat{e}_{\mathbf{x},k\rho} + i\hat{e}_{\mathbf{y},k\rho}|}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{6\pi}} \frac{|-\hat{e}_{\mathbf{x},k\rho} + i\hat{e}_{\mathbf{y},k\rho}|}{\sqrt{2}} \right). \quad (5.25)$$

Entsprechend Abb. 5.16 ist FLASH entlang der y -Achse polarisiert ($\hat{\mathbf{e}}_{k\rho} = (0, 1, 0)^t$). Es ergibt sich:

$$\Sigma_y = d_7 \left(\frac{1}{\sqrt{12\pi}} + \frac{1}{\sqrt{12\pi}} \right) = \frac{d_7}{\sqrt{3\pi}}, \quad (5.26)$$

wobei nur Beiträge durch $q = 1$ und $q = -1$ eingehen. Ließe man einen entlang der z -Achse polarisierten FLASH mit dem Ensemble wechselwirken, ergäbe sich entsprechend Gl. (5.25) ebenfalls:

$$\Sigma_z = d_7 \frac{2}{\sqrt{12\pi}} = \frac{d_7}{\sqrt{3\pi}}. \quad (5.27)$$

Gl. (5.26) und (5.27) entnimmt man identische Beträge und damit, dass unter der gegebenen experimentellen Situation wie in Abb. 5.16 dargestellt, FLASH genutzt werden kann, den $1s^2 2s^2 S_{1/2} - 1s^2 2p^2 P_{1/2}$ Übergang zu treiben. Dies geschieht überdies mit genau gleicher Effektivität wie im als „klassisch“ zu bezeichnenden Fall, bei dem die Ionen in Abb. 5.16 mit in Richtung der z -Achse polarisiertem Licht bestrahlt werden. Es gilt hierbei jedoch die Übergangsenergie zu beachten. Gemäß Tab. 5.3 (b) haben die zu den verschiedenen Polarisationen gehörigen Übergänge zwischen den magnetischen Unterniveaus verschiedene Energien. Ein sehr schmalbandiger⁹ Pump-Laser kann dann immer

⁹Schmäler als die Aufspaltung der Unterniveaus im Magnetfeld

5.2. Das Experiment

nur genau einen Übergang (${}^2S_{1/2,m'_j} \longrightarrow {}^2P_{1/2,m_j}$) anregen. Stellt man sich einen sehr schmalbandigen FLASH-Strahl vor so könnte man mit diesem entweder den σ^{+-} oder σ^{-} -Übergang gemäß Abb. 5.15 treiben, aber nicht beide, was mit einer breitbandigeren Einstellung möglich wäre, wo alle Übergänge zwischen den Unterniveaus innerhalb der Bandbreite liegen. Durch die Dopplerverbreiterung (siehe weiter unten) ist die Bandbreite, in der die Ionen auf dem Übergang $2\ {}^2S_{1/2} - 2\ {}^2P_{1/2}$ Licht akzeptieren, stets so ausgeprägt, dass durch FLASH die σ^{+-} und σ^{-} -Übergänge gleich stark getrieben werden. Nutzt man aus, dass eine linear polarisierte Lichtwelle immer als Überlagerung zweier zirkularer Wellen verschiedener Händigkeit schreiben kann, so erklärt sich sofort wie das linear polarisierte Licht σ^{+-} und σ^{-} -Übergänge anregen kann.

Die beiden magnetischen Unterzustände im Grundzustand sind gleich besetzt. Die Absorption von FLASH führt damit auch zu einer Gleichbesetzung in den magnetischen Unterzuständen des angeregten $2\ {}^2S_{1/2} - 2\ {}^2P_{1/2}$ -Niveaus. Die Fluoreszenzstrahlung dieser Anregungen besteht dann zu gleichen Teilen aus π_{-} , π_{+} , σ^{+-} und σ^{-} -Licht. Definiert man mit θ den Winkel zwischen Ausbreitungsrichtung des Fluoreszenzlichtes und der z -Achse, so ergibt sich die Intensitätsverteilung $I(\theta)$ der einzelnen Polarisationen zu [161]:

$$I_{\pi_{-}}(\theta) d\Omega = I_{\pi_{+}}(\theta) d\Omega = \frac{3}{8\pi} \sin^2(\theta) d\Omega \quad (5.28)$$

$$I_{\sigma^{+-}}(\theta) d\Omega = I_{\sigma^{-}}(\theta) d\Omega = \frac{3}{8\pi} \frac{1 + \cos^2(\theta)}{2} d\Omega. \quad (5.29)$$

Abb. 5.17 zeigt die beiden Emissionscharakteristiken der Strahlungskomponenten Gl. (5.28) und (5.29), sowie deren Summe (schwarz), welche höchste Abstrahlung in Richtungen senkrecht zur Ionenwolke und damit in Richtung der radial montierten Detektoren zeigt.

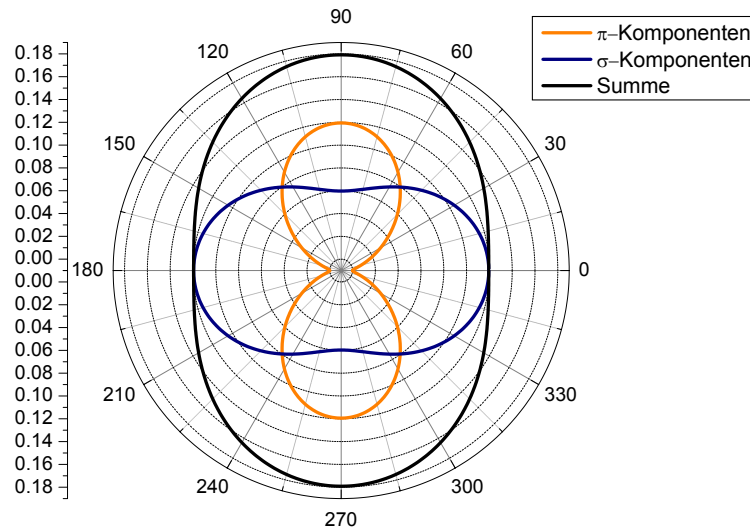


Abbildung 5.17: Emissionscharakteristik des Fluoreszenzlichtes in Polar-Darstellung (willkürliche Einheiten). Dargestellt in der y - z -Ebene für unterschiedliche Polarisationen in Abhängigkeit des Winkels θ . Die Richtung $\theta = 0^\circ$ verläuft entlang der z -Achse. Rotation um selbige erzeugt das vollständige Abstrahlungsmuster.

Abschätzung der maximalen Signalrate: Die Anregungsrate \dot{N}_{Fluo}^* der durch FLASH induzierten Übergänge $1s^2 2s^2 2^2 S_{1/2} - 1s^2 2p^2 P_{1/2}$ in einer Ionenwolke von Fe^{23+} ist gegeben über:

$$\dot{N}_{\text{Fluo}}^* = \frac{N_{\text{EP}}}{\Delta t_{\text{PZ}}} \frac{N_{\text{Ion}}}{A_{\text{Ion}}} \frac{a}{A_{\text{FLASH}}} \int \bar{N}_{\gamma}(E) \sigma_{2s2p}(E) dE, \quad (5.30)$$

mit dem energieabhängigen Wirkungsquerschnitt $\sigma_{2s2p}(E)$ der Reaktion, der mittleren spektralen Intensität eines FLASH-Einzelpulses $\bar{N}_{\gamma}(E)$, der jeweiligen Querschnittsfläche $A_{\text{FLASH}} \approx (\pi 100) \mu\text{m}^2$, $A_{\text{Ion}} \approx (\pi 100) \mu\text{m}^2$ von FLASH und Ionenwolke, einem Faktor a , der den Wert der kleineren der beiden Flächen A_{FLASH} oder A_{Ion} annimmt, sofern diese ungleich sind, der Anzahl von Ionen $N_{\text{Ion}} \approx 1\,000\,000$ innerhalb A_{Ion} und der Gesamtzahl von FLASH-Einzelpulsen pro Sekunde $\frac{N_{\text{EP}}}{\Delta t_{\text{PZ}}} = 150$. Der spektralen Intensität eines FLASH-Einzelpulses $\bar{N}_{\gamma}(E)$ wird eine Gauss'sche Verteilung mit einer relativen Breite von $\Delta E_{\text{FLASH}}/E = 2.5\%$ zu Grunde gelegt:

$$\bar{N}_{\gamma}(E) = \bar{N}_0(E) \frac{\sqrt{4 \ln(2)}}{\sqrt{\pi} \Delta E_{\text{FLASH}}} \exp\left(-4 \ln(2) \frac{(E - E_{2s2p})^2}{\Delta E_{\text{FLASH}}^2}\right). \quad (5.31)$$

In Gl. (5.31) findet bereits Berücksichtigung, dass höchste Fluorezenzausbeute natürlich dann besteht, wenn die Schwerpunktsenergie von FLASH gerade der Übergangsenergie $E_{2s2p} \approx 48.6 \text{ eV}$ entspricht. $\bar{N}_0 = \bar{Q}_{\text{EP}}/E_{2s2p} \approx 2 \times 10^{12}$ gibt die mittlere Menge von Photonen in einem FLASH-Einzelpuls auf der Resonanzwellenlänge an. Hierbei steht $\bar{Q}_{\text{EP}} \approx 15 \mu\text{eV}$ für die mittlere Lichtenergie pro Einzelpuls.

Der Wirkungsquerschnitt des vorliegenden Übergangs $2^2 S_{1/2} - 2^2 P_{1/2}$ ist in Abhängigkeit der Energie gegeben durch eine Lorentzkurve [132]:

$$\sigma_{\text{nat}}(E) = \sigma_0 \times \frac{1}{1 + \left(\frac{2(E - E_{2s2p})}{\Delta E_{\text{nat}}}\right)^2}, \quad (5.32)$$

wobei $\Delta E_{\text{nat}} = 1.2 \mu\text{eV}$ [96] für die natürliche Linienbreite steht und σ_0 den Wirkungsquerschnitt im Schwerpunkt bezüglich vorliegenden Übergangs darstellt. Es ergibt sich für diese Linie [132]:

$$\sigma_0 = \frac{6\pi (\hbar c)^2}{\Delta E_{\text{nat}}^2} \approx 3.1 \times 10^{-16} \text{ m}^2. \quad (5.33)$$

Die Ionen unterliegen jedoch einer Dopplerverbreiterung auf Grund ihrer Bewegung in der Falle. Es ergibt sich eine Verbreiterung des Übergangs mit einer Halbwertsbreite von:

$$\Delta E_{\text{Dop}} = E_{2s2p} 7.16 \times 10^{-7} \sqrt{\frac{T_{\text{Ion}}[\text{eV}]}{M_K[u]}} \approx 0.02 \text{ eV}, \quad (5.34)$$

bei einer Masse $M_K = 56$ und einer Temperatur $T_{\text{Ion}} \approx 1200 \text{ eV}$. Diese Temperatur folgt aus einer Annahme von 70 eV Temperatur pro Ionisationsstufe. Bei Fe^{23+} Ionen sind dies demnach $23 \times 70 \text{ eV}$. 70 eV entspricht gerade der axialen Potentialtiefe, die alleine durch die Präsenz des Elektronenstrahl entsteht, siehe hierzu Kap. 3. Die Abschätzung der richtigen Temperatur ist für das Folgende jedoch von geringerer Bedeutung. Die Dopplerverbreiterung in Gl. (5.34) dominiert bei weitem über die natürliche Linienbreite. In diesem Falle

kann man für den energieabhängigen Wirkungsquerschnitt unter Dopplerverbreiterung folgenden gaussförmigen Verlauf ansetzen [132]:

$$\sigma_{2s2p}(E) \equiv \sigma_{\text{Dop}}(E) = \sqrt{\pi \ln(2)} \sigma_0 \frac{\Delta E_{\text{nat}}}{\Delta E_{\text{Dop}}} \exp\left(-4 \ln(2) \frac{(E - E_{2s2p})^2}{\Delta E_{\text{Dop}}^2}\right), \quad (5.35)$$

dabei entspricht die Resonanzstärke identisch jener aus Gl. (5.32). Die Gl. (5.30) kann unter gegebenen Voraussetzungen nun integriert werden, mit einem Ergebnis für die Anregungsrate unter optimalen Bedingungen von:

$$\dot{N}_{\text{Fluo}}^* \approx 1.4 \text{ MHz}. \quad (5.36)$$

Pro Einzelpuls sind dies circa 9 000 Anregungen unter den etwa eine Million Fe^{23+} Ionen, also fernab der Regionen, wo Sättigungseffekte eine Rolle spielen können. Bei einer Gesamteffizienz des MCP-25 Detektorsystems (Kap. 3) von etwa 10^{-4} ergibt sich eine obere Fluoreszenzrate von 136 Ereignissen pro Sekunde im Falle des Einstrahlens eines unmonochromatisierten FLASH-Strahls. Unter diesen Bedingungen gilt $\Delta E_{\text{FLASH}}/\Delta E_{\text{Dop}} = 2500$. Um diesen Faktor ist FLASH breiter als die Dopplerbreite des Übergangs.

5.2.2.4 Datenaufnahme

Zur Datenaufnahme wurde ein System der Firma *FAST ComTec GmbH* eingesetzt. Es handelt sich hierbei um ein Multiparameter Datenakquisitionssystem, welches mehrere Kanäle bei hohen Signalraten in Koinzidenz und mit Zeitstempel niederzuschreiben vermag. Von bis zu 16 anschließbaren Analog-Digital-Wandlern (ADC), *Multiscalern* oder Flugzeiteinheiten (TDC) konnten zum Zeitpunkt des Experimentes nur vier betrieben werden, mittlerweile wurde das System auf 8 Kanäle erweitert. Es können Koinzidenzzeiten von 150 ns bis 3 ms verarbeitet werden.

Die vier zur Verfügung stehenden Kanäle wurden durch *7072T Dual Timing 500 ns ADCs* des gleichen Herstellers gespeist. Diese Module können zum einen in einem schnellen Pulshöhen-ADC Modus (PHA) betrieben werden mit 500 ns fixer Konversionszeit, zum anderen als *Sampling-Voltage-Analyzer-ADC* (SVA), aber auch als TDCs. Im Einzelnen bedeuten diese Arbeitsmoden:

- **PHA:** Der Kanal akzeptiert dabei Signale von 0.025 bis 10 V und misst die Amplitude eines geeigneten Pulses mit Extremum (Gauss'scher Puls etc.) und konvertiert diese, wie bei allen drei Betriebsmoden, in einen digitalen Wert zwischen 1 und 8192 (oder auch 1..UL mit $\text{UL}=2^n$, $n \leq 13$).
- **SVA:** Der SVA digitalisiert beliebige von der Zeit abhängige Spannungen zwischen 0 und 10 V bezüglich deren Mittelwerte innerhalb eines zu setzenden Zeitfensters (>65 ns).
- **TDC:** Der TDC digitalisiert die Zeit, die zwischen einem Start- und Stoppuls verstreicht (max. 20 μs). Zu jedem Start gibt es genau einen oder keinen Stopp. Es ist keine mehrfach Stoppmessung möglich.

Wie bereits erwähnt, standen Signale von fünf Detektoren zur Verarbeitung bereit. Bei vier Kanälen können mit diesem System nicht alle Detektorsignale in Koinzidenz [162] aufgenommen werden. Ferner ist es teilweise von Nöten, weitere wichtige Parameter des Experimentes zu protokollieren, was die für die Detektoren verfügbaren Kanäle weiter reduziert.

Während der Messkampagne wurden prinzipiell zwei Datenaufnahmeschemata verwendet. Die Messungen teilen sich zeitlich so auf, dass zunächst mit „Datenaufnahmeschema 1“ gemessen wurde, und dann aus Gründen besserer Leistungscharakteristik auf „Datenaufnahmeschema 2“ gewechselt wurde.

Zentraler Ansatz beider Schemata ist, dass das im Sinne des Messvorhabens „echte“ Fluoreszenzlicht nur dann registriert werden kann und soll, wenn FLASH-Pulse gerade am Ort der Ionen sind, bzw. waren. Zeitlich gesehen ist FLASH entsprechend des beschriebenen Zeitschemas, selbst im Betrieb zu $(100 - 10^{-9})\%$ de facto aus, also ohne Lichtemission.

„Datenaufnahmeschema 1“: „Datenaufnahmeschema 1“ findet in Abb. 5.18 Darstellung. In dieser schematischen Präsentation sind aus Platzgründen die verwendeten üblichen elektronischen Geräte der Signalmanipulation — überwiegend NIM-Einschübe wie Gate-Generator, Diskriminatoren, Stromverstärker, Spektroskopieverstärker, NIM-TTL Konverter und vieles mehr — die zwischen Rohsignal und Endsignal zahlreich auftreten, nicht dargestellt¹⁰. Oben links in Abb. 5.18 sind verschiedene relevante Signale aufgezeigt. Die Darstellung wurde dabei einem Mehrkanaloszilloskop nachempfunden. Zentrales Signal stellt das MC-Fluoreszenzsignal, ferner als MCP-Signal geführt, dar. Zu einem MCP-Signal kommt es, wann immer das MCP von Photonen ausreichender Energie getroffen wird, gänzlich unabhängig deren Ursprungs. Auf Grund des fortwährenden Beschusses der Ionenwolke mit Elektronen und der damit verbundenen kontinuierlich Anregung und Ionisation, die mit Emission von Strahlung einhergeht, werden die wenigsten detektierten Ereignisse der interessierenden Fluoreszenzstrahlung zurechenbar sein. Um den MCP-Signalen einen Ursprung in der Fluoreszenz nach Anregung durch FLASH nachweisen zu können, muss man einen zeitlichen Zusammenhang zwischen Anregungspuls und Fluoreszenzlicht aufzeigen. Man bedient sich hierbei einer Spannungsrampe, die mittels eines *Tektronix AFG3102* Funktionsgenerators erzeugt wird. Diese Spannungsrampe von circa 90–100 μ s Anstiegszeit wird getriggert durch den Haupttakt (*Masterclock*) des FELs und in der Phase so verschoben, dass ein einzelner FLASH-Pulszug von 30 Einzelpulsen etwa in der Mitte des Anstieges liegt. Damit ergibt sich ein Vor- und Nachlauf der Rampe¹¹ von jeweils etwa 30 μ s. Mit Hilfe eines aus dem MCP-Signal gebildeten Zeitfensters (*Gate*) kann das Spannungssignal der Rampe, und damit ein relatives Zeitsignal zum Pulszug, mittels eines SVA gewonnen werden. Jedem MCP-Signal kann somit ein fester zeitlicher Bezug zu FLASH zugeordnet werden.

Neben der Zeitdifferenz relativ zu FLASH wird mit jedem MCP-Ereignis ferner auch das Signal eines der Germanium-Detektoren, sowie die Wellenlänge der FEL-Strahlung

¹⁰Für genaue Details kann auf das Laborbuch dieser Messung am MPI-K zurückgegriffen werden.

¹¹nicht maßstäblich in Abb. 5.18

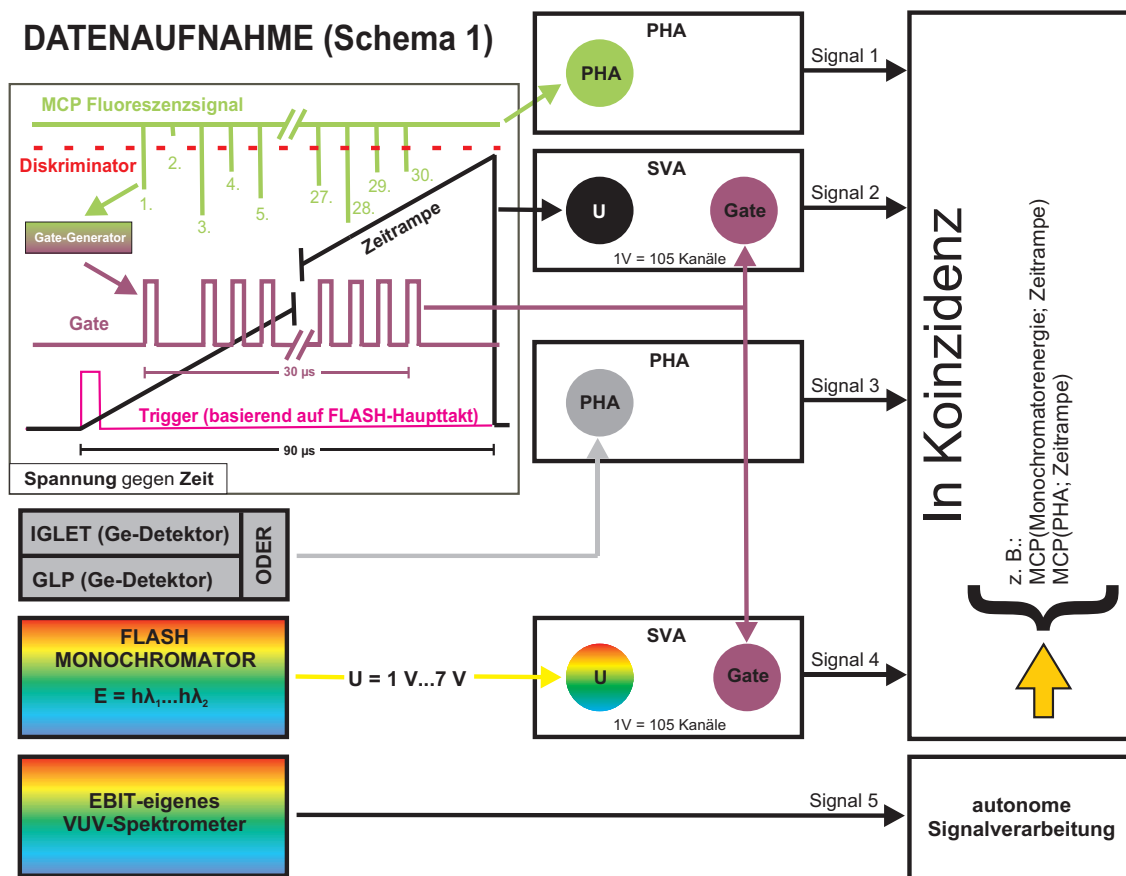


Abbildung 5.18: „Datenaufnahmeschema 1“. Beschreibung siehe Text.

anhand der Einstellungen des Monochromators in Koinzidenz aufgezeichnet. Durch die Koinzidenzmessung ist es nun möglich, verschiedene Abhängigkeiten der Signale untereinander festzustellen, wie z.B. die Abhängigkeit der Zählrate als Funktion von Wellenlänge und relativer Zeit. Beliebige Kombinationen der Signale 1 bis 4 können so einfach in Beziehung gesetzt werden. Das VUV-Spektrometer der EBIT läuft dabei unter autonomer Signalverarbeitung. Ein Einbringen in den Rahmen der Koinzidenzmessung ist aufgrund des Funktionsprinzips der Kamera schwer möglich.

„Datenaufnahmeschema 2“: Die wesentlichen Unterschiede dieses Datenaufnahmeschemas zum „Datenaufnahmeschema 1“ ergeben sich zum einen dadurch, dass das Kathodensignal als weiterer Parameter koinzident protokolliert wurde, und zum anderen die zeitliche Abhängigkeit der MCP-Signale nicht bezüglich eines Pulszuges (90 μs Zeitfenster) genommen wurde, sondern bezüglich der Einzelpulse (1 μs Zeitfenster). Dazu wurde auf den TDC-Modus der ADCs anstelle der Konstruktion mittels der Spannungsrampe zurückgegriffen. Da nur 4 Kanäle zur Verfügung stehen, musste dem Kathodensignal die koinzidente Verschaltung der Germanium-Detektoren weichen. Dies ist nicht weiter

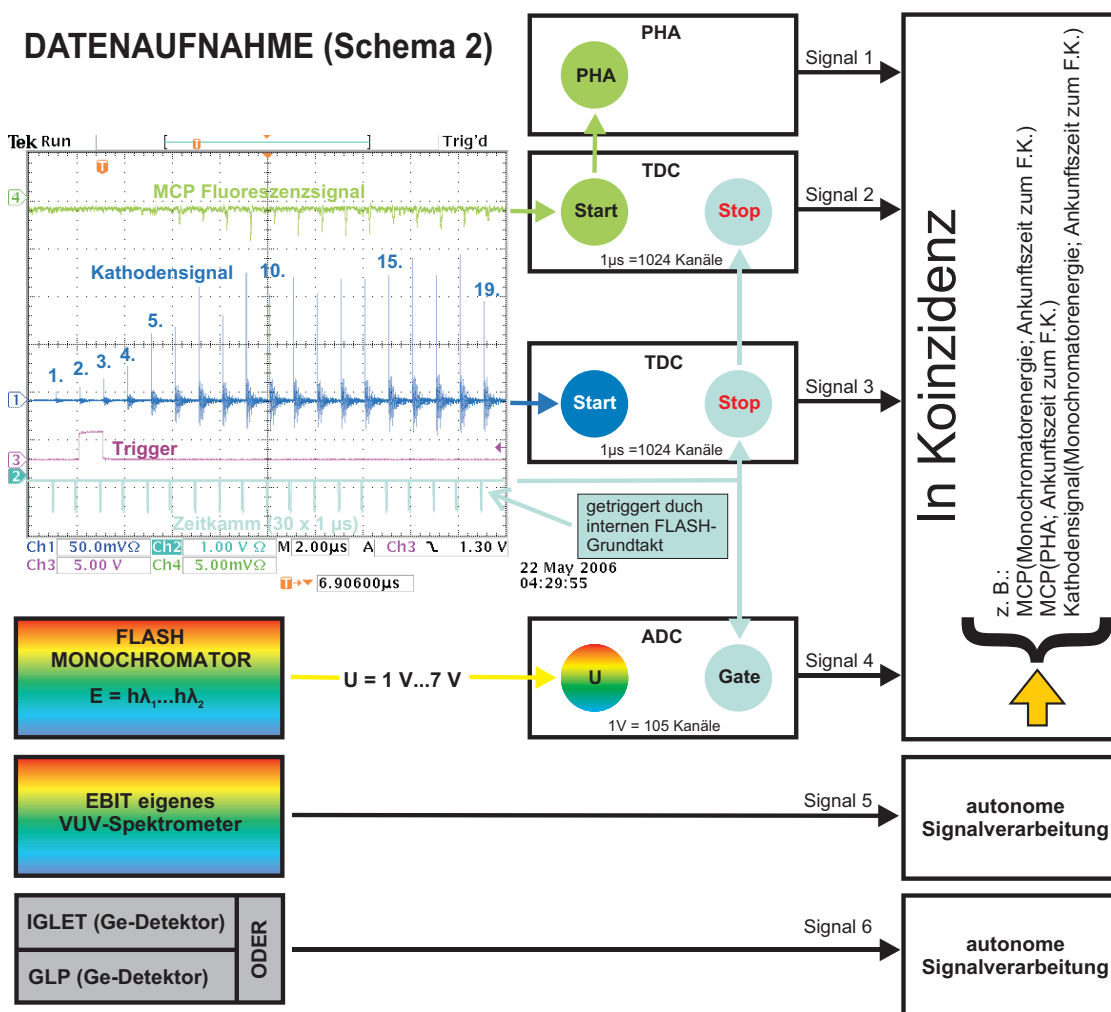


Abbildung 5.19: „Datenaufnahmeschema 2“. Beschreibung siehe Text.

von Nachteil, da deren koinzidente Protokollierung keinerlei tiefere Aufschlüsse erbrachte. Die neue Situation stellt sich entsprechend Abb. 5.19 so dar, dass jedes MCP-Signal¹² und jedes Kathodensignal jeweilig einen TDC starten, der entweder durch Erreichen eines Zeitlimits, oder aber durch den Stoppimpuls eines Zeitkamms gestoppt wird. Dieser Zeitkamm wird mittels des Funktionsgenerators erzeugt und ist getriggert durch die *Masterclock* von FLASH. Die absolute Lage des Zeitkamms zum FLASH-Pulszug ist unbekannt, jedoch in einer konstanten Phasenbeziehung, und so liegend, dass in der Zeit zwischen zwei Zinken des Zeitkamms ($1 \mu\text{s}$) genau ein Einzelpuls von FLASH mit der Ionenwolke wechselwirkte. Dieser FLASH-Einzelpuls liegt im Rahmen des Jitters des Haupttaktes mit immer gleichem, aber unbekanntem, absoluten Abstand zum nächsten oder vorgehenden Zinken des Kamms. Das Kathodensignal kann nicht genutzt werden, um die Fluoreszenz der Ionen zu detektieren. Mittels der Kathode detektiert man in direkter Weise die FLASH-Einzelpulse.

¹²Es handelt sich in Abb. 5.19 um das unverstärkte Rohsignal.

In Abb. 5.19 sind die ersten 19 Einzelpulse eines Pulszuges zu sehen, die restlichen 11 sind außerhalb des Bildes. Prinzipiell wäre es statt des Zeitkamms auch möglich gewesen das Kathodensignal als Start oder Stoppsignal des MCP-Kanals zu nutzen. Aus signaltechnischen Gründen jedoch wurde dies nicht weiter angestrebt, zumal ein echter Fortschritt gegenüber des Zeitkamms nicht ersichtlich ist. Analog zum „Datenaufnahmeschema 1“ wird weiter die Pulshöhe des MCP-Signals aufgezeichnet und auch die Monochromator-Wellenlänge koinzident mitprotokolliert.

5.2.2.5 Störquellen von Fluoreszenz ähnlicher Strahlung

Möglichen Quellen von Strahlung, die potentiell den Anschein einer Fluoreszenz auf Grund resonanter Absorption eines FLASH-Photons auf dem Übergang $2^2S_{1/2}-2^2P_{1/2}$ in Fe^{23+} Ionen geben können, aber tatsächlich anderen Prozessen zuzuordnen sind, muss eine kritische Betrachtung gewidmet werden. Zunächst bleibt festzuhalten, dass der Signalrate der „echten“ Fluoreszenz im obigen Sinne, weiter oben bestimmt zu etwa 140 MCP-Ereignissen pro Sekunde unter perfekten Bedingungen und breitbandigem Einstrahlen von FLASH, ein ständiger und zeitlich unkorrelierter Untergrund von bis zu 100 000 Ereignissen pro Sekunde gegenüber steht. Das Fluoreszenzsignal muss also eines vergleichsweise großen Untergrundes entzogen werden. Ereignisse, die mit „echter“ Fluoreszenzstrahlung verwechselt werden können, müssen in zeitlicher und somit tatsächlicher Verbindung zu FLASH stehen. Es handelt sich hierbei um verschiedene Erscheinungen von Streulicht. Streulicht kann hervorgerufen werden durch:

1. Streuung von FLASH an Festkörpern in der EBIT, wie Fallenelektroden oder Elektronenkanone, bei der das reflektierte Licht den Weg zum MCP-Detektor findet,
2. eine elastische nicht-resonante Streuung von FLASH an Fallenionen,
3. eine elastische nicht-resonante Streuung von FLASH an Elektronen des Strahls [163] oder
4. elastische nicht-resonante Streuung von FLASH an neutralen Atomen, die über den Gaseinlass in die Fallenregion gelangen.

Diese Quellen potentieller Störstrahlung werden im Laufe des Folgenden nach und nach ausgeschlossen.

5.2.3 Die Messungen

Während der Messkampagne gelang es zunächst Streulicht der FLASH-Strahlung in nullter Ordnung zu messen, also mit unmonochromatisiertem und daher breitbandigem Strahl. Durch eine absichtlich herbeigeführte unvollständige Justage traf Licht von FLASH auf eine der Innenseiten der Fallenelektroden und ein starkes Streulichtsignal war zu verzeichnen. In einem zweiten Schritt wurde auf dieser Streulichtposition ein Monochromator-Scan

durchgeführt, woraus Erkenntnisse über die spektrale Zusammensetzung des FLASH-Lichtes gezogen werden konnten. Daraufhin wurde die erste resonante Fluoreszenz von Fe²³⁺ registriert, allerdings in nullter Ordnung des Monochromators, also nur mit Wellenlängeninformation auf wenige Prozent genau, eben der intrinsischen spektralen Breite von FLASH entsprechend. Letzte Messung wurde anschließend mittels „Datenaufnahmeschema 2“ wiederholt, bevor schließlich auch eine Messung in erster Ordnung gelang, bei der die Wellenlängenabhängigkeit des $2\ ^2S_{1/2}-2\ ^2P_{1/2}$ Übergangs in einem Monochromator-Scan aufgezeichnet wurde.

5.2.3.1 Streulicht durch Reflexe an Oberflächen in der Falle

Dabei war der Elektronenstrahl der EBIT ausgeschaltet und keine Ionen in der Falle. Bei laufendem FLASH wurden dann gemäß „Datenaufnahmeschema 1“ (Abb. 5.18) Daten akkumuliert. Abb. 5.20 (a) zeigt das über circa 3100 Pulszüge¹³ integrierte MCP-Signal¹⁴. Erwartungsgemäß sind 30 Zinken zu sehen. Im ersten Zinken haben sich genau alle ersten Einzelpulse eines jeden der 3100 Pulszüge aufsummiert, in Zinken mit Nummer 30 entsprechend alle Signale, welche mit dem dreißigsten Einzelpuls eines jeden Pulszuges in Verbindung gebracht werden können. Bei dieser Messung ist praktisch kein Untergrund zu erkennen. Ferner entnimmt man der Abbildung, dass scheinbar auch im Mittel über die Zeit die Energie, und damit die Anzahl der Photonen, pro Einzelpuls verschieden ist. Die circa 3100 Einzelpulse auf Position 6 im Pulszug überragen in integrierter Intensität die anderen teilweise deutlich. Dies ist Konsequenz der jeweiligen Einstellungen am Beschleuniger.

Abb. 5.20 (b) zeigt ein Pulshöhenspektrum (Signal 1 in Abb. 5.18). Neben einer exponentiellen Verteilung der Pulshöhen stellt man um den Bereich der relativen Pulshöhe 75 eine nicht im Einklang mit dem exponentiellen Verhalten stehende Struktur fest. Der Verdacht, diese könnte durch FLASH hervorgerufen worden sein, bestätigt sich, wenn man die zweidimensionale Darstellung in Abb. 5.20 (c) betrachtet. Dargestellt ist hier die Zählrate in Abhängigkeit von Ankunftszeit und Pulshöhe, also gerade die Information aus Abb. 5.20 (a) und Abb. 5.20 (b) kombiniert. Deutlich zeichnen sich die 30 Einzelpulse pro Pulszug ab. Die Struktur aus Abb. 5.20 (b) findet sich blau eingekreist auch wieder in Abb. 5.20 (c). Ihre zeitliche Koinzidenz mit FLASH ist offensichtlich und dieser als nahezu sichere Ursache dieser Struktur anzunehmen. Auffällig ist, dass die Struktur erst ungefähr ab dem 15. Einzelpuls entsteht und die Pulshöhe auffällig gerade bei 85 Skalen limitiert ist. Wie dieses Artefakt entsteht ist unklar. Es könnte sich um eine Licht erzeugende Elektronen- oder Ionenemission aus dem Kupfer der Fallenelektroden handeln. Der Elektronenstrahl war zwar aus, aber dennoch war das Fallenpotential als solches geschaltet, so dass Ionen, je nachdem wo sie entstehen, in der Falle gefangen werden können. Durch FLASH ausgelöste Elektronen können in der Falle befindliches Restgas ionisieren. Solche Effekte wurden auch bei einer späteren Strahlzeit am BESSY beobachtet (Kap. 5.3). Die deutliche Diskriminie-

¹³Messzeit 620 s.

¹⁴Signal 2 im Sinne des „Datenaufnahmeschemas 1“.

5.2. Das Experiment

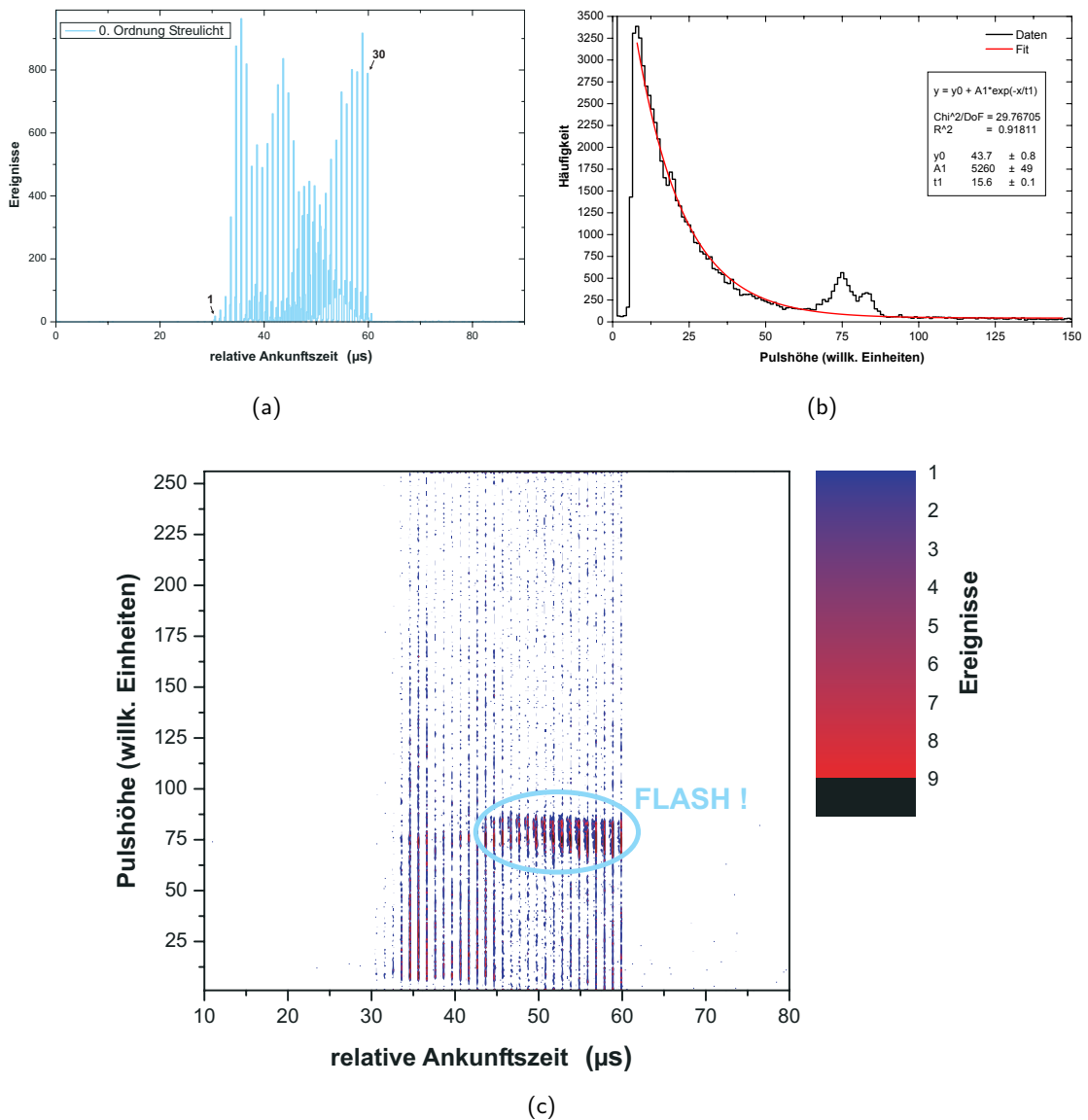


Abbildung 5.20: Streulichtsignal von FLASH durch Wechselwirkung mit metallischer Fallenelektrode (Elektronenstrahl der EBIT aus). (a) Integrales MCP-Signal der Pulszüge in der Zeit, (b) Pulshöhenanalyse des MCP-Signals über alle registrierten MCP-Pulse (auch wenn FLASH aus ist), (c) Zweidimensionale Darstellung der Zählrate in Abhängigkeit von Pulshöhe und Ankunftszeit innerhalb eines Pulszuges.

rungsschwelle in der Pulshöhe könnte auch dafür sprechen, dass Echoeffekte im MCP als Grund in Betracht gezogen werden müssen.

Ohne weitere Änderungen wurde daraufhin der Elektronenstrahl der EBIT angeschaltet und die EBIT als Ionenfalle betrieben. Eine Aufnahme unter diesen Bedingungen ist Abb. 5.21 (a) dargestellt. Es finden sich wieder 30 Zinken, wobei die Abbildung sehr Abb. 5.20 (a) ähnelt. Allerdings ist die Aufnahme nicht mehr ganz so frei von Untergrundsignalen. Die kontinuierliche Ionisation sowie Anregung der Ionen durch die Elektronen

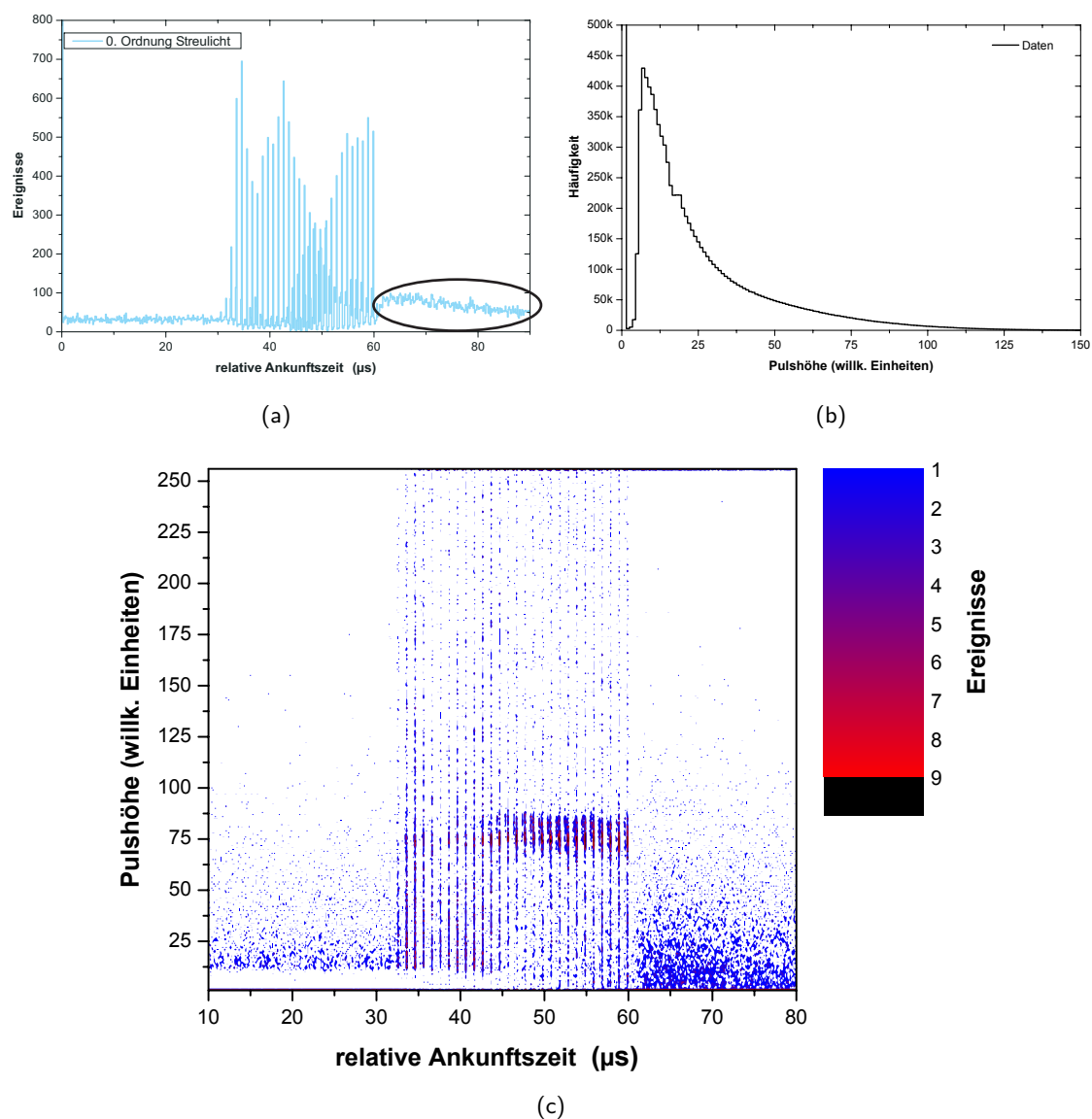


Abbildung 5.21: Streulichtsignal der FLASH-Strahlung durch Treffen der metallischen Fallenelektroden. (a) Integrales MCP-Signal der Pulszüge in der Zeit, (b) Pulshöhenanalyse des MCP-Signals über alle registrierten MCP-Pulse (auch wenn FLASH aus ist), (c) Zweidimensionale Darstellung der Zählrate in Abhängigkeit von Pulshöhe und Ankunftszeit innerhalb eines Pulszuges.

des Strahls sorgte für einen konstanten Untergrund. In Abb. 5.21 (b) scheint offenbar die Struktur, wie sie in Abb. 5.20 (b) noch zu finden war, durch den höheren Untergrund überdeckt zu sein. Betrachtet man im Gegenzug Abb. 5.21 (c), so muss man feststellen, dass diese Struktur nach wie vor präsent ist.

Es lohnt sich kurz auf Abb. 5.21 (a) zurückzukommen. Der eingekreiste Bereich dieser Abbildung lässt bereits hier Rückschlüsse auf Anregungen der Ionen durch FLASH zu, ergänzend ist dabei der Blick auf den gleichen Zeitbereich in Abb. 5.21 (c). Es scheint, als

käme es in Folge von FLASH zu Anregungen, die nach Ende des Pulszuges abklingen. Es kann sich hierbei durchaus um metastabile Niveaus handeln, wenn auch wahrscheinlicher um spallatierte Kupferatome/Ionen die über mehrere Mikrosekunden hinweg in den Elektronenstrahl diffundieren, dort ionisiert und angeregt werden und so für ein Signal in definiertem zeitlichen Zusammenhang mit FLASH sorgen.

5.2.3.2 Monochromator–Scan unter Streulicht

Eine über die Zeit gemittelte spektrale Analyse von FLASH ergibt sich, wenn man unter geschilderten Streulichtvoraussetzungen einen Monochromator–Scan durchführt. In diesem Beispiel wurde ein Scan über 2 eV bei 0.01 eV Schritten von 47.6 eV bis 49.6 eV durchgeführt. Abb. 5.22 (a) zeigt wieder das einfache Zeitsignal. Die integrale spektrale Zusammensetzung der Einzelpulse auf den ersten drei der dreißig Einzelpulspositionen innerhalb der Pulszüge scheint so weit außerhalb des durchfahrenen Spektralbereichs zu liegen, dass diese erst gar nicht als Zinken in der Darstellung Abb. 5.22 (a) auftauchen. Daher sind nur 27 statt 30 Einzelpulspositionen zu sehen. Die zeitlich erste Einzelpulsposition scheint Nummer 4, bzw. möglicherweise auch Nummer 3, zu sein.

In Abb. 5.22 (b) ist die zeitliche Koinzidenz in Abhängigkeit der eingestellten Monochromatorenenergie abgebildet. Diese Darstellung zeigt nicht nur die unterschiedliche integrale spektrale Zusammensetzung der verschiedenen Einzelpulspositionen der Pulszüge, sondern es spiegelt sich auch deren integrale relative Photonenzahl (Abb. 5.22 (a)) wieder. Eine individuelle spektrale Analyse der Einzelpulspositionen von obigen circa 5700 Pulszügen ist in Abb. 5.23 respektive Abb. 5.24 dargestellt. Im Rahmen einer willkürlichen Auswahl ist aus Platzgründen nur jeder dritte Einzelpuls aus Abb. 5.22 in diesen Abbildungen gezeigt. Es wurde versucht, die spektrale Verteilung mit einem Gaussprofil zu fitten. Diese Wahl entspringt nicht der Kenntnis der theoretischen Verteilung, sondern stellt einen empirischen Ansatz dar.

Die mittlere Halbwertsbreite, bestimmt als Durchschnitt aller 27 Pulse, beläuft sich auf

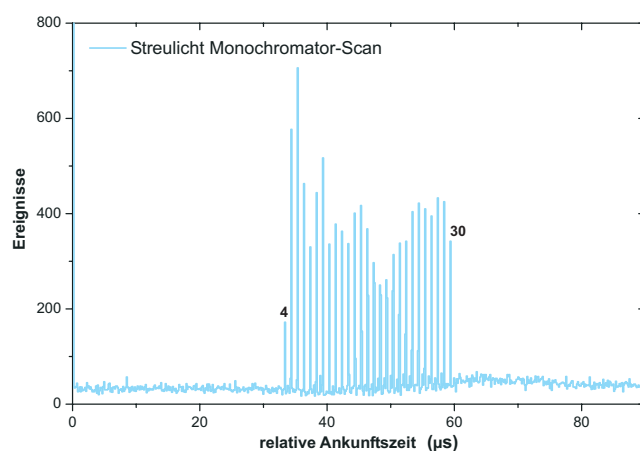
$$\bar{\sigma}_{EP} = (0.75 \pm 0.16) \text{ eV} \Rightarrow \frac{E}{\Delta E} \approx 60.$$

Dies entspricht im Kehrwert einer Auflösung von circa 1.5% und deckt sich in etwa mit dem weiter oben angegebenen Ergebnis von $E/\Delta E \approx 70$ im Falle von nur einem Einzelpuls pro Pulszug.

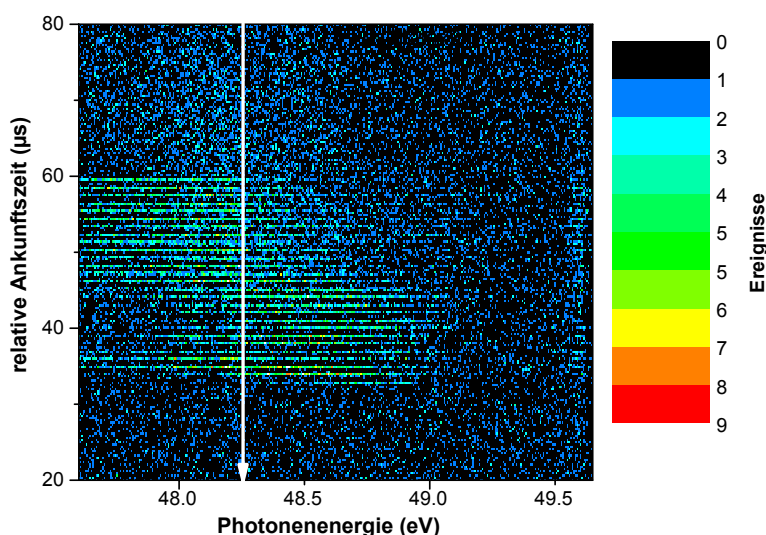
Abb. 5.24 (e) zeigt die spektrale Verteilung der Summe der Einzelpulse, zusätzlich summiert über alle Positionen im Pulszug, also die Projektion der Daten aus Abb. 5.22 (b) entsprechend des Pfeils auf die Energieachse (x -Achse). Gauss-förmiger Ausgleich der Daten liefert die spektrale Unschärfe der Summe aller 5700 Pulszüge:

$$\sigma_{ave} = (1.10 \pm 0.05) \text{ eV} \Rightarrow \frac{E}{\Delta E} \approx 40,$$

oder entsprechend 2.5% relative Auflösung.



(a)



(b)

Abbildung 5.22: Streulichtsignal durch FLASH über Wechselwirkung mit metallischer Fallenelektrode (Monochromator-Scan von 47.6 bis 49.6 eV in 0.01 eV Schritten). (a) Integrales MCP-Signal der Pulszüge in der Zeit, (b) Zweidimensionale Darstellung der Zählrate in Abhängigkeit von Monochromatorenenergie und Ankunftszeit innerhalb eines Pulszuges.

5.2.3.3 Erste Fluoreszenz von Fe^{23+} Ionen

Das Hauptproblem auf dem Weg zu „echter“ Fluoreszenz bestand nun darin, aus vorsätzlich dejustierter Position zu genau der Position zu gelangen, wo FLASH und zylindrische Ionenwolke kollinear überlagern. Zum Erreichen dieses Ziels musste die EBIT, wie bereits beschrieben, in 200 μm Schritten ein Bereich von $(2 \times 2) \text{ mm}^2$ abgerastert werden. Bis das

5.2. Das Experiment

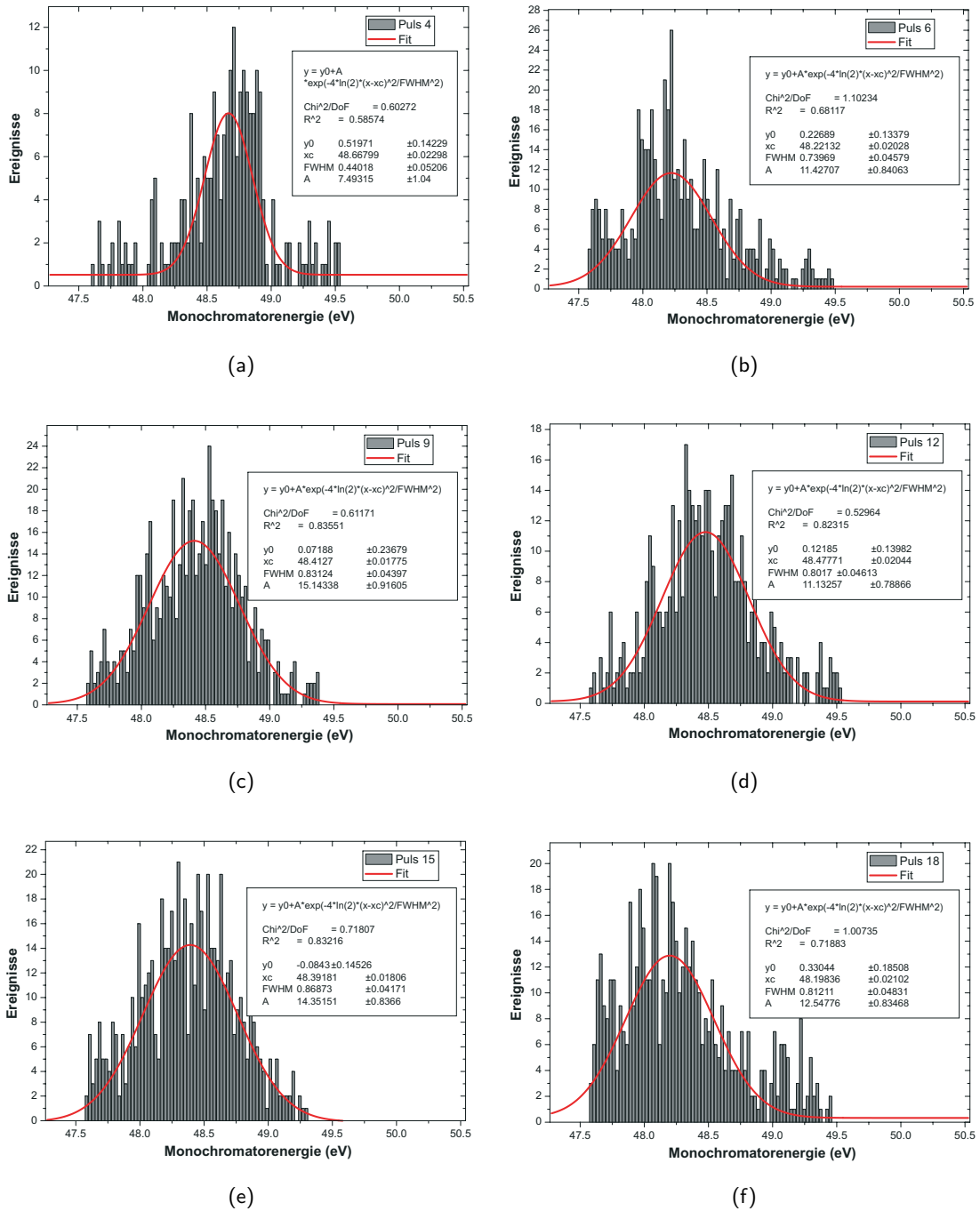


Abbildung 5.23: Spektrale Verteilung der über die Pulszüge summierten Einzelpulse: (a) Einzelpuls 4, (b) Einzelpuls 6, (c) Einzelpuls 9, (d) Einzelpuls 12, (e) Einzelpuls 15 und (f) Einzelpuls 18.

erste Fluoreszenzsignal erkennbar wurde, waren circa 24 Stunden Justagearbeit von Nöten. Abb. 5.25 stellt das Ergebnis weiterer Signaloptimierung dar. Zu sehen sind 3 Datenkurven, die bei unterschiedlichen Bedingungen aufgenommen wurden.

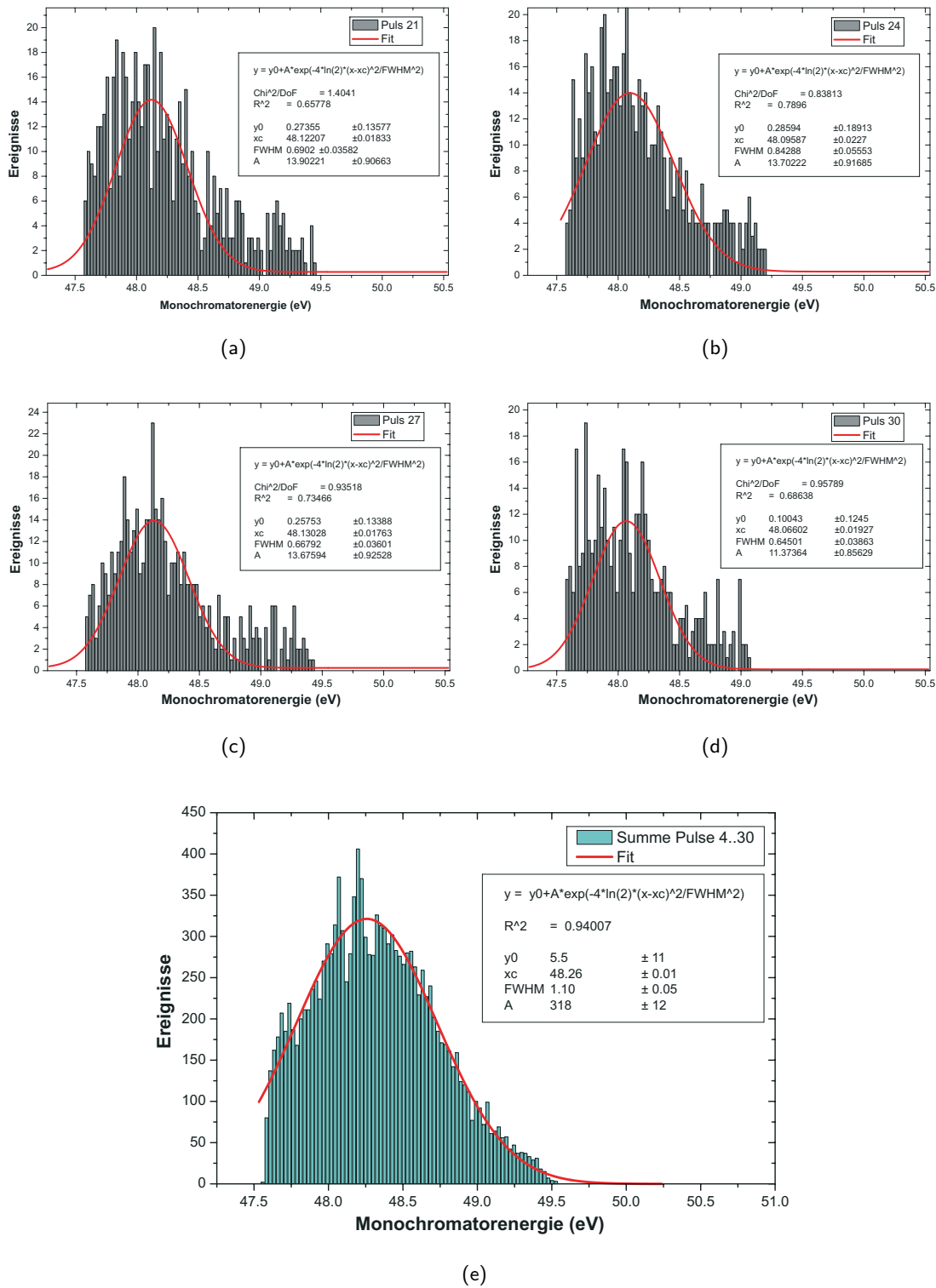


Abbildung 5.24: (Fortsetzung) Spektrale Verteilung der über die Pulzzüge summierten Einzelpulse: (a) Einzelpuls 21, (b) Einzelpuls 24, (c) Einzelpuls 27, (d) Einzelpuls 30 und (e) Summe aller 27 Pulse.

5.2. Das Experiment

| Einstellung | Elektronenstrom (mA) | Beschleunigungsspannung (kV) | Falltiefe (V) | Gaseinlass |
|-------------|----------------------|------------------------------|-----------------------|---------------------|
| A | 320 | 4.90 (KLL) | $(-200 + Q_{RL}) > 0$ | Fe(CO) ₅ |
| B | 320 | 6.2 | - 1300 | Fe(CO) ₅ |
| C | 320 | 4.90 (KLL) | $(-200 + Q_{RL}) > 0$ | — |
| D | 440 | 4.90 (KLL) | $200 + Q_{RL}$ | Fe(CO) ₅ |

Tabelle 5.4: EBIT-Parameter. Die Beschleunigungsspannung unterscheidet sich von der tatsächlichen Energie der Elektronen um den Betrag der Raumladung. KLL steht für Einstellungen in einer He-artigen KLL-Resonanz. Eine positive Falltiefe meint ein Ionen akkumulierendes Kastenpotential. Q_{RL} ist der Betrag der Raumladung der Elektronen und im Rahmen der Notation immer positiv.

Die hellblaue Kurve zeigt das zeitliche Fluoreszenzsignal in der Darstellung entsprechend Abb. 5.20 (a) und Abb. 5.21 (a). Die Daten wurden unter Einstellung „A“ gemäß Tab. 5.4 aufgenommen. Die Energie der Elektronen war so gewählt, dass diese die He4-Resonanz in He-artigem Eisen treiben konnte. Von vormals 30 Einzelpulsen unter Streulicht, zeigt dieses Signal nur noch 22 Zinken. Eine Resonanz vorausgesetzt, lässt sich dies zwanglos dadurch erklären, dass wie zuvor gesehen, gewisse Einzelpulse auf gewissen Positionen im Pulszug in ihrer Schwerpunktswellenlänge zu weit abseits liegen und so die Resonanz nicht treffen können. Nicht minder bedeutend sind die grüne und blaue Kurve, die unter den Einstellungen „B“ bzw. „C“ (Tab. 5.4) aufgenommen wurden. Bei der grünen Kurve wurden repulsive Fallenparameter eingestellt, so dass der Potentialkasten für Ionen zu einem Potentialhut wurde und dadurch keinerlei Ionen gefangen werden konnten. Als Konsequenz verschwindet das zuvor beobachtete Signal. Bei der dunkelblauen Kurve wurde vor der Aufnahme der Gaseinlass abgestellt. Damit kann der vorhandene Elektronenstrahl kein weiteres neutrales Eisen ionisieren und die Produktion von Fe²³⁺ Ionen bricht zusammen.

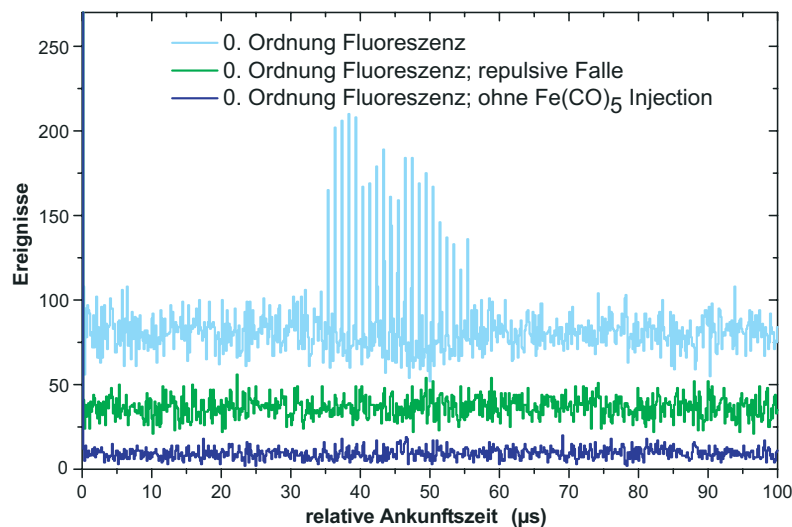


Abbildung 5.25: Fluoreszenz von Fe²³⁺ Ionen in nullter Ordnung des Monochromators.

Dadurch verschwindet das Signal abermals.

Es lassen sich die folgenden Schlussfolgerungen bezüglich der hellblauen Kurve in Abb. 5.25 ziehen:

1. Es kann sich hierbei nicht um ein Streulichtsignal als Ergebnis von Reflexen an Oberflächen handeln. Diese würden dann sowohl bei der grünen, als auch dunkelblauen Kurve auftauchen.
2. Es kann sich unmöglich um nicht-resonante elastische Streuung am Elektronenstrahl handeln, wie durch die grüne Kurve gezeigt wird.
3. Das Signal verschwindet, wenn man die Gaszufuhr unterbricht. Damit steht fest, dass es nur durch Atome oder Ionen der Spezies Eisen, Sauerstoff oder Kohlenstoff hervorgerufen worden sein kann, die in Folge der Zusammensetzung von $Fe(CO)_5$ injiziert werden.

Zu diesem Zeitpunkt gilt es festzuhalten, dass nur resonante Fluoreszenz oder nicht-resonante elastische Streuung an unbekanntem Ladungszuständen von Eisen, Sauerstoff oder Kohlenstoff als Ursache für das diskutierte Signal in Frage kommt. Der Vollständigkeit halber sollte erwähnt werden, dass in Abb. 5.25 nach dem Pulszug keine erhöhte linear oder exponentiell abfallende Signalkurve wie bspw. in Abb. 5.21 (a) festzustellen ist. Unter Vorenthaltung eines graphischen Beweis sei notiert, dass auch die Struktur in der Pulshöhenverteilung (Abb. 5.20 (c)) nicht mehr feststellbar ist.

Fluoreszenzrate Die hellblaue Kurve in Abb. 5.25 enthält etwa 1100 „echte“ Fluoreszenzereignisse bei einer Aufnahmezeit von circa 2000 s unter Verwendung der unmonochromatisierten FLASH-Strahlung. Damit ergibt sich eine Fluoreszenzrate von etwa 0.5 Ereignissen pro Sekunde. Weiter oben wurde festgestellt, dass die theoretische obere Grenze bei etwa 140 Fluoreszenzereignissen pro Sekunde liegt. Es ergibt sich daher eine Diskrepanz von 2 Größenordnungen. Dabei gilt es zu beachten, dass die Schwerpunktlage der Photonenenergie nur selten überprüft werden konnte und der FLASH-Strahl sich diesbezüglich in einem ständigen Drift befand. So ist es leicht möglich, dass das Schwerpunkt der Energie des FLASH-Lichts nicht mit der Übergangsenergie übereinstimmte und die Ionen nur mit einem weniger intensiven Schwanz der spektralen Verteilung wechselwirken konnten. Ferner ist über das tatsächliche Reflexionsvermögen der verwendeten Siliziumspiegel nichts bekannt. Hier können Erhöhungen der Rauigkeit durch SiO_2 leicht zu einem Verlust von einer Größenordnung im Reflexionsvermögen führen. Bedingt durch die Konversionszeit des Datenaufnahmesystems können Fluoreszenzereignisse die in aufeinander folgenden Einzelpulsen stattfinden nur für den ersten der beiden Pulse registriert werden.

5.2.3.4 Umbau auf „Datenaufnahmeschema 2“

Die im Folgenden vorgestellten Datensätze wurden entsprechend des in Abb. 5.19 geschilderten Verfahrens aufgenommen. Wichtigster Unterschied ist, dass die MCP-Signale nun

5.2. Das Experiment

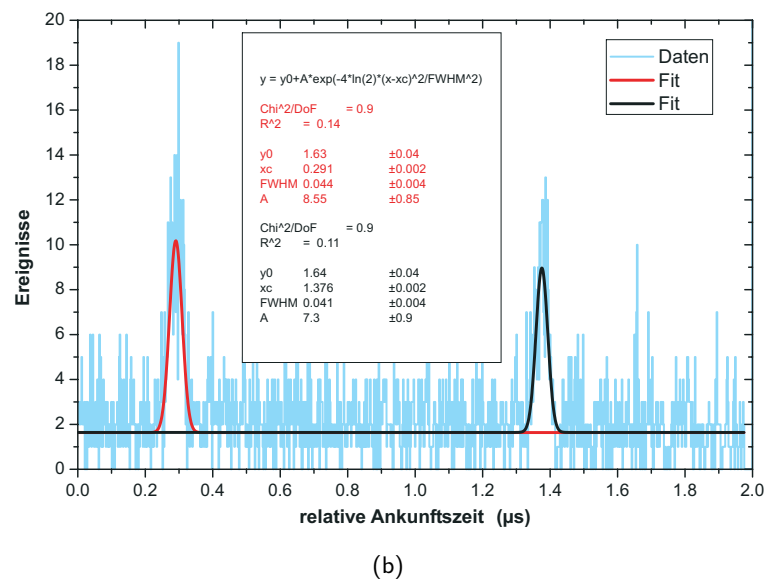
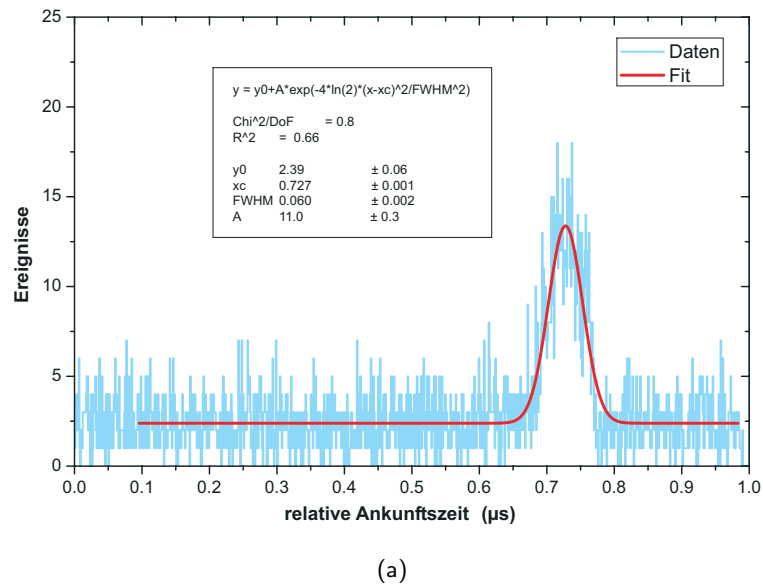


Abbildung 5.26: Fluoreszenz von Fe^{23+} Ionen in nullter Ordnung des Monochromators nach „Datenaufnahmeschema 2“. (a) Mikrosekundenmessung (Standard) und (b) zwei Mikrosekunden.

nicht mehr in Relation zum Pulszug sondern zum Einzelpuls gemessen wurden. Damit wurde nicht mehr in 30 einzelne Zinken akkumuliert, sondern alle Ereignisse in genau einem summiert.

Fluoreszenz in nullter Ordnung des Monochromators: In Abb. 5.26 (a) findet sich die Darstellung einer Zeitmessung bei Fluoreszenzbedingungen, also analog der Messung Abb. 5.25. Wie erwartet entsteht genau ein Peak bei einer TDC-Zeitspanne von einer

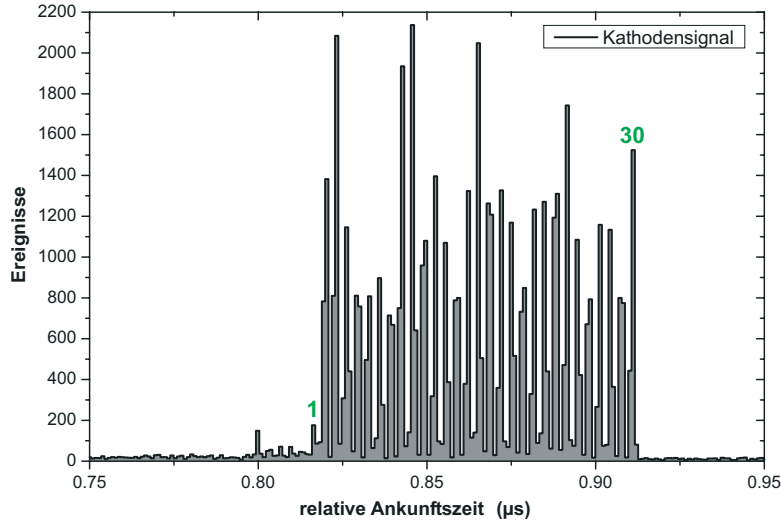


Abbildung 5.27: Typisches Kathodensignal.

Mikrosekunde. Es sei darauf hingewiesen, dass die Schwerpunktsposition der relativen Ankunftszeit bei $x_c = 0.73 \mu\text{s}$ ein Produkt der Signalverarbeitung ist und nicht besonderen physikalischen Diktaten folgt. Durch zeitliche Verschiebung des Mikrosekundenkamms (Abb. 5.19) lässt sich die Schwerpunktskoordinate beliebig innerhalb der Mikrosekunden-spanne platzieren.

Wählt man statt eines Mikrosekundenkamms einen über zwei Mikrosekunden, so akkumuliert man entsprechend in zwei Fluoreszenzpeaks innerhalb der Referenzspanne. Nominell sollte genau eine Mikrosekunde Abstand zwischen den Resonanzen liegen. Abb. 5.26 (b) entnimmt man einen Abstand $\Delta t_{\text{EP}} = (1.38 - 0.29) \text{s} = 1.09 \mu\text{s}$. Ferner zeigt Abb. 5.27 ein typisches Kathodensignal (Signal 3 in Abb. 5.19). Dem Signal kann man 30 Zinken zuordnen. Es ähnelt damit sehr den zeitlichen Darstellungen der Pulszüge (z. B. Abb. 5.20). Die Zeitachse ist jedoch völlig verschieden, im vorliegenden Fall geht auch die Zeitachse des Kathodensignals nur über eine Mikrosekunde. Hier ist gar nur ein Bruchteil dieser Mikrosekunde dargestellt. Einen Signalverlauf wie in Abb. 5.27 würde man erhalten, wäre der Abstand vom n -ten Einzelpuls im Pulszug zum $(n+1)$ -ten Einzelpuls leicht verschieden für alle n . Oder aber der konstruierte Zeitkamm harmonierte nicht ganz perfekt mit der *Masterclock* von FLASH. Dies könnte auch den gemessenen zeitlichen Abstand von etwas mehr als einer Mikrosekunde in Abb. 5.26 (b) erklären. Allerdings gilt es festzuhalten, dass diese kleinen zeitlichen Unregelmäßigkeiten die Messungen nicht weiter beeinflussen werden.

5.2.3.5 Fluoreszenz von Fe^{23+} Ionen in 1. Ordnung des Monochromators

In diesem Unterkapitel wird das zentrale Ergebnis der Arbeit vorgestellt. Durchgeführt wurde diese Teilmessung entsprechend „Datenaufnahmeschema 2“ (Abb. 5.19). Die wich-

5.2. Das Experiment

| Einstellung | Elektronenstrom (mA) | Beschleunigungsspannung (kV) | Fallentiefe (V) | Gaseinlass | c_{ff} | Austrittsspalt (μm) |
|-------------|----------------------|------------------------------|-----------------|--------------------------|-----------------|----------------------------------|
| A | 415 | 5.00 (KLL) | $200 + Q_{RL}$ | $\text{Fe}(\text{CO})_5$ | 1.5 | 700 |

Tabelle 5.5: EBIT-Parameter. Die Beschleunigungsspannung unterscheidet sich von der tatsächlichen Energie der Elektronen um den Betrag der Raumladung. KLL steht für Einstellungen in einer He-artigen KLL-Resonanz. Eine positive Fallentiefe meint ein Ionen akkumulierendes Kastenpotential. Q_{RL} ist der Betrag der Raumladung der Elektronen und im Rahmen der Notation immer positiv.

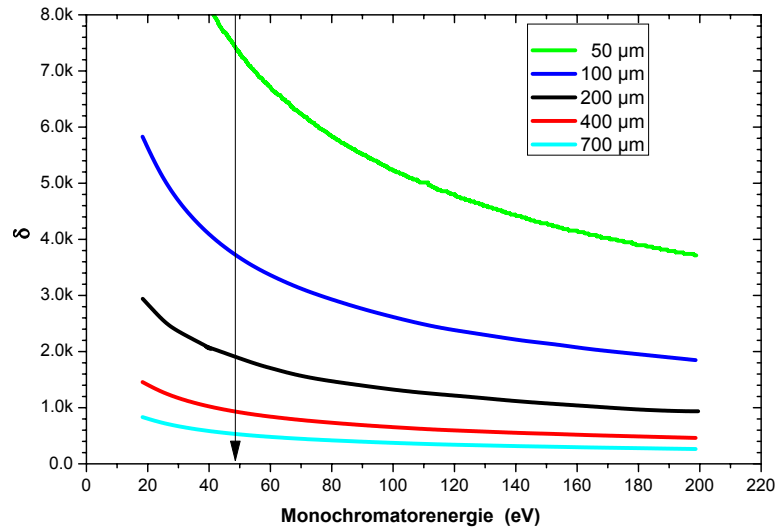


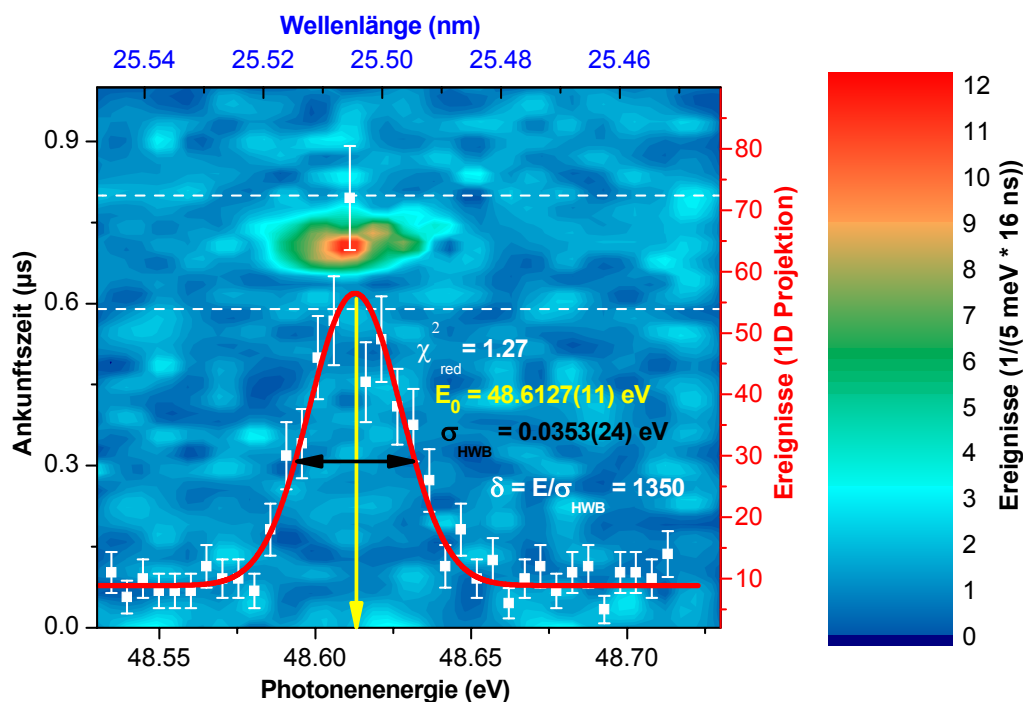
Abbildung 5.28: Theoretisches Auflösungsvermögen δ bei $c_{\text{ff}} = 1.5$ für verschiedene Spalteinstellungen.

tigsten Einstellungen sind unter „A“ in Tab. 5.5 aufgelistet.

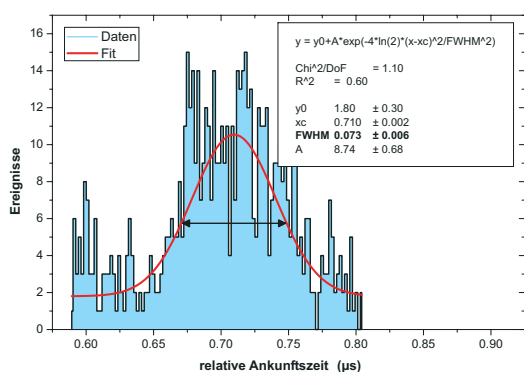
Ausgehend von der Position, in der Fluoreszenz in nullter Ordnung gemessen werden konnte, musste in eine Position gefahren werden, in der auch in 1. Ordnung eine gute Überlagerung von Ionenwolke und FLASH-Strahl gegeben ist. Wie man während des Experiments feststellte, stimmen offensichtlich die Positionen der Foki der ersten und nullten Ordnung des Monochromators nicht innerhalb der typischen Ausdehnung der Ionenwolke überein. Das Signal in erster Ordnung ist ungleich schwerer als in nullter Ordnung zu finden, da das Signal in erster Ordnung auf Grund von Transmissions- und Bandbreiteverlusten weitaus schwächer ist. Es war daher zielführend, die Auflösung des Monochromators nicht zu hoch zu wählen, um nicht zu große Flussverluste zu erleiden.

Gearbeitet wurde mit dem 200 Linien/mm Gitter und einem im Sinne der Auflösung moderaten Wert $c_{\text{ff}} = 1.5$. Nimmt man $c_{\text{ff}} = 2$ als Anhaltspunkt, so liegt die Transmission gemäß Abb. 5.9 (c) zwischen 10 und 15%. Zum Vergleich sollte die Transmission in nullter Ordnung bei über 80% liegen.

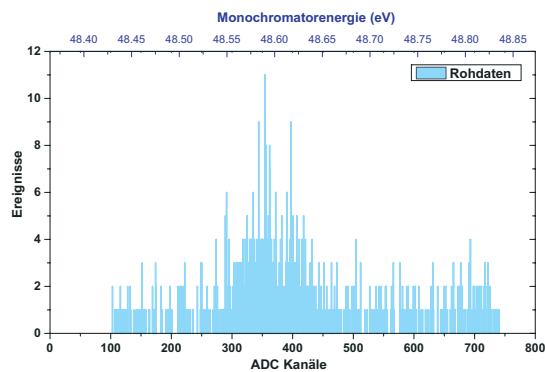
Die Auflösung hängt außer von c_{ff} auch von der gewählten Ausgangsspaltbreite ab, wobei diese linear mit der Spaltbreite fällt. Doppelte Spaltbreite ergibt halbe Auflösung. Abb. 5.28 zeigt das Auflösungsvermögen für verschieden Spalteinstellungen. Nach Tab. 5.5



(a)



(b)



(c)

Abbildung 5.29: (a) Zweidimensionale Darstellung der MCP-Signale. Die weißen Datenpunkte ergeben sich aus der Projektion auf die Energieachse (x -Achse). In roter Farbe: Gauss'scher Fit an die Daten. Ordinate der eindimensionalen Projektion ist rechts. (b) Projektion der Resonanz in „(a)“ auf die Zeitachse (y -Achse). (c) Ungebinnte Rohdaten der Zählrate der zeitkoinzidenten MCP-Signale gegen Wellenlänge.

wurde mit einem Spalt von $700 \mu\text{m}$ gearbeitet, was einer Auflösung von rund $\delta \approx 600$ entspricht. Es ist jedoch zu beachten, dass die Ionenwolke mit einem Durchmesser $d = 200 \mu\text{m}$ als eine Art zusätzlicher Spalt eben dieser Breite agiert. Daher kann man eher von Werten $\delta \approx 1000\text{--}2000$ ausgehen. Bei diesen Einstellungen beträgt die Dispersion am Spalt gemäß Gl. 5.6 circa 0.129 eV/mm .

Der Monochromator wurde nun zyklisch von 48.53 bis 48.73 eV in Schritten von 0.005 eV

durchgeföhren, erwartet man die Resonanz von $2^2S_{1/2}-2^2P_{1/2}$ in Fe^{23+} gemäß Kap. 4 doch bei circa 48.6 eV. Auf jedem Datenpunkt wurde über 3 s integriert und dann zum nächsten übergegangen. Die Gesamtdauer der Messung betrug lediglich 1987 s. Abb. 5.29 (a) zeigt die in dieser Zeit aufgenommenen Daten. Dargestellt sind die Zählereignisse des MCP-Detektors (Signal 2) in einer zweidimensionalen Abbildung als Funktion der Monochromatorenenergie und der Ankunftszeit des einzelnen MCP-Signals relativ zum Einzelpuls von FLASH. Die dargestellten Daten gehen aus den Rohdaten durch binnen in $16 \text{ ns} \times 5 \text{ meV}$ Parzellen¹⁵ hervor. Die weißen Datenpunkte und deren rote Fitkurve gehen aus der Projektion der zweidimensionalen Daten auf die Energieachse (x -Achse) hervor. Die zugehörige Ordinate ist rechtsbündig.

Abermals, die $0 \mu\text{s}$ der Ordinate entsprechen nicht dem Zeitpunkt, in dem ein Einzelpuls gerade am Ort der Ionen ist. Dieser Zeitpunkt ist unbekannt und auch unwichtig im Sinne dieses Experiments. Was man sagen kann ist, dass diese Wechselwirkung prompt erfolgt. Gemessen wurde lediglich die Verzögerung des MCP-Signale bezüglich eines Triggersignals, welches in fester Phase zum Einzelpuls steht.

Die inselförmige Struktur der Daten in Abb. 5.29 (a) stellt bezüglich der x -Ausdehnung eine Resonanzstruktur in der Wellenlänge und bezüglich der y -Ausdehnung eine zeitliche Koinzidenz mit FLASH dar. Abb. 5.29 (b) entspricht der Projektion des Signals innerhalb des weiß markierten Bandes auf die Zeitachse, allerdings hier ungebinnt. Die zeitliche Halbwertsbreite mit dem Wert $\sigma_t = (73 \pm 6) \text{ ns}$ ist überwiegend durch Signaljitter und elektronische Signalverarbeitung verursacht. Die Projektion der Daten auf die Energieachse ist ebenfalls in Abb. 5.29 (a) dargestellt (weiße Datenpunkte und rote Kurve). Zwecks Vollständigkeit zeigt Abb. 5.29 (c) dazu die ungebinnten Rohdaten. Eine Gauss'sche Anpassung an die Datenpunkte (weiß, Abb. 5.29 (a)) liefert die Resonanzenergie von

$$E_0 = (48.6127 \pm 0.0011_{\text{stat.}}) \text{ eV}, \quad (5.37)$$

dies entspricht einer Wellenlänge von

$$\lambda_0 = (25.5045 \pm 0.0006_{\text{stat.}}) \text{ nm}. \quad (5.38)$$

Die angegebenen Fehler sind soweit nur statistischer Natur.

Tab. 5.6 fasst einige Informationen bezüglich der Gauss'schen Anpassung in Abb. 5.29 (a) zusammen. Es ist durch das schmale Zeitfenster und die Pulsstruktur gelungen 370 „echte“ Ereignisse in 1987 s von einem integralen Signal von etwa 500×10^6 Ereignissen zu trennen. Die erreichte spektrale Auflösung $\delta = E_0/\sigma_{\text{HWB}}$ beträgt circa 1350. Statistisch konnte die Resonanzenergie auf 22 ppm Genauigkeit bestimmt werden. Es ist zu berücksichtigen, dass auf Grund der Konversionszeiten der Datenaufnahme nur etwa ein Fünftel der tatsächlichen Fluorezenzereignisse registriert werden konnte. Dieses Problem ist durch Verbesserung der Signalverarbeitung mittlerweile behoben worden.

¹⁵Der Parzelle wird ein Mittelwert zugeordnet und nicht etwa ein Integral ihrer Rohdaten.

| Ausgleichsfunktion | $y(E) = y_0 + A \exp\left(-4 \ln(2) \left(\frac{E-E_0}{\sigma_{\text{HWB}}}\right)^2\right)$ |
|---|--|
| reduziertes χ^2 [134] | 1.27 |
| A | $(47.5 \pm 3.7) \text{ eV}$ |
| y_0 | $(8.90 \pm 0.6) \text{ eV}$ |
| E_0 | $(48.6127 \pm 0.0011) \text{ eV}$ |
| σ_{HWB} | $(0.0353 \pm 0.0024) \text{ eV}$ |
| $\delta = E_0/\sigma_{\text{HWB}}$ | 1350 |
| totale Integrationszeit | 1987 s |
| Integrationszeit pro Datenpunkt pro Lauf (zyklisch) | 3 s |
| Anzahl „echter“ Ereignisse im $5 \sigma_{\text{HWB}}$ Intervall | 370 |
| Brutto MCP-Zählrate | 50 000 1/s |
| Untergrund-Zählrate pro Zeitkanal (1024 Kanäle $\hat{=}$ 1 μs) | 0.0017 1/s |

Tabelle 5.6: Zusammenstellung der Parameter des Gauss'schen Ausgleichs der weißen Datenpunkte in Abb. 5.29 (a), sowie einiger Parameter der Messung (unterer Teil).

Energieskala des Monochromators: Es ist notwendig etwas genauer auf das Wellenlängen- bzw. Energiesignal (Signal 4 gemäß Abb. 5.19) des Monochromators einzugehen. Die Steuerungselektronik des Monochromators liefert Analogspannungen, die der eingestellten nominellen Photonenergie proportional ist. Für das untere Ende des Scanintervalls liefert diese immer 1 V, in diesem Fall entspricht dies 48.53 eV, für das obere Ende immer 7 V, was hier 48.73 eV entspricht. Für Photonenergien zwischen diesen Grenzen werden die entsprechend linear skalierten Werte ausgegeben.

Bei der für diesen Scan eingestellten Schrittweite von 0.005 eV sollte der Monochromator 41 Punkte ansteuern. Beim auftragen des Brutto-MCP-Signals gegen die Energieposition des Monochromators sollte eine Kammstruktur mit 41 Zinken erkennbar sein. Abb. 5.30 (a) zeigt eine solche Darstellung der Zählrate gegen die Ausgangsspannung für obige Resonanzmessung. Die vom Monochromator gelieferte Spannung ist hier in digitalen Kanälen des Datenaufnahmesystems gegeben. Dieses Signal zeigt allerdings nicht die erwartete Form. Der Grund hierfür ist einfach: Die Wellenlängenposition, die der Monochromator einnimmt, entsteht aus einem Wechselspiel eines Schrittmotors mit einem Winkelkodierer. Im vorliegenden Fall wurde schlicht der Schrittmotor überfordert. Der Schrittmotor ist in seinen Einstellmöglichkeiten grober als der Winkelkodierer. Für eine mit dem eingestellten $c_{\text{ff}} = 1.5$ verknüpften eher niedrigen Auflösung waren die Schritte von 0.005 eV zu fein für den Schrittmotor, jedoch war die Winkelinformation durch den Kodierer, und damit die eingestellte und übermittelte Energie korrekt¹⁶, wurde jedoch nicht mehr äquidistant angefahren. Abb. 5.30 (b) zeigt, dass bei 41 Schritten, aber doppelter Schrittweite unter gleichem c_{ff} , bereits ein relativ regelmäßiges Bild entsteht, welches sich bei noch größerer Schrittweite (Abb. 5.30 (c)) in das erwartete Signalbild wandelt. Der erhöhte letzte Peak

¹⁶Selbst wenn dem nicht so wäre, ist der Fehler kleiner als der Abstand zwischen zwei Positionen anzunehmen, das entspräche 0.005 eV. Somit läge der Fehler aber weit unter dem statistischem Fehler des Datenpunkts.

5.2. Das Experiment

entsteht dadurch, dass der Monochromator nur in eine Richtung scannt und mit Erreichen des Endwertes auf den Startwert zurückfährt, um einen neuen Durchlauf zu starten. Während des Zurückfahrens wird durch die Elektronik des Monochromators der Wert der letzten angefahrenen Position weiter übermittelt.

Die Energieskala für Abb. 5.29 ergibt sich aus Gauss'schen Anpassungen an die Anfangs- und Endpeaks von Abb. 5.30 (a). In Abb. 5.30 (a) und Abb. 5.30 (b) gilt es zu beachten, dass der Monochromator teilweise nicht auf die Endposition gefahren ist, sondern des öfteren bereits auf vorletzter Position stehen blieb und dort die doppelte der nominellen Integrationszeit pro Datenpunkt stand.

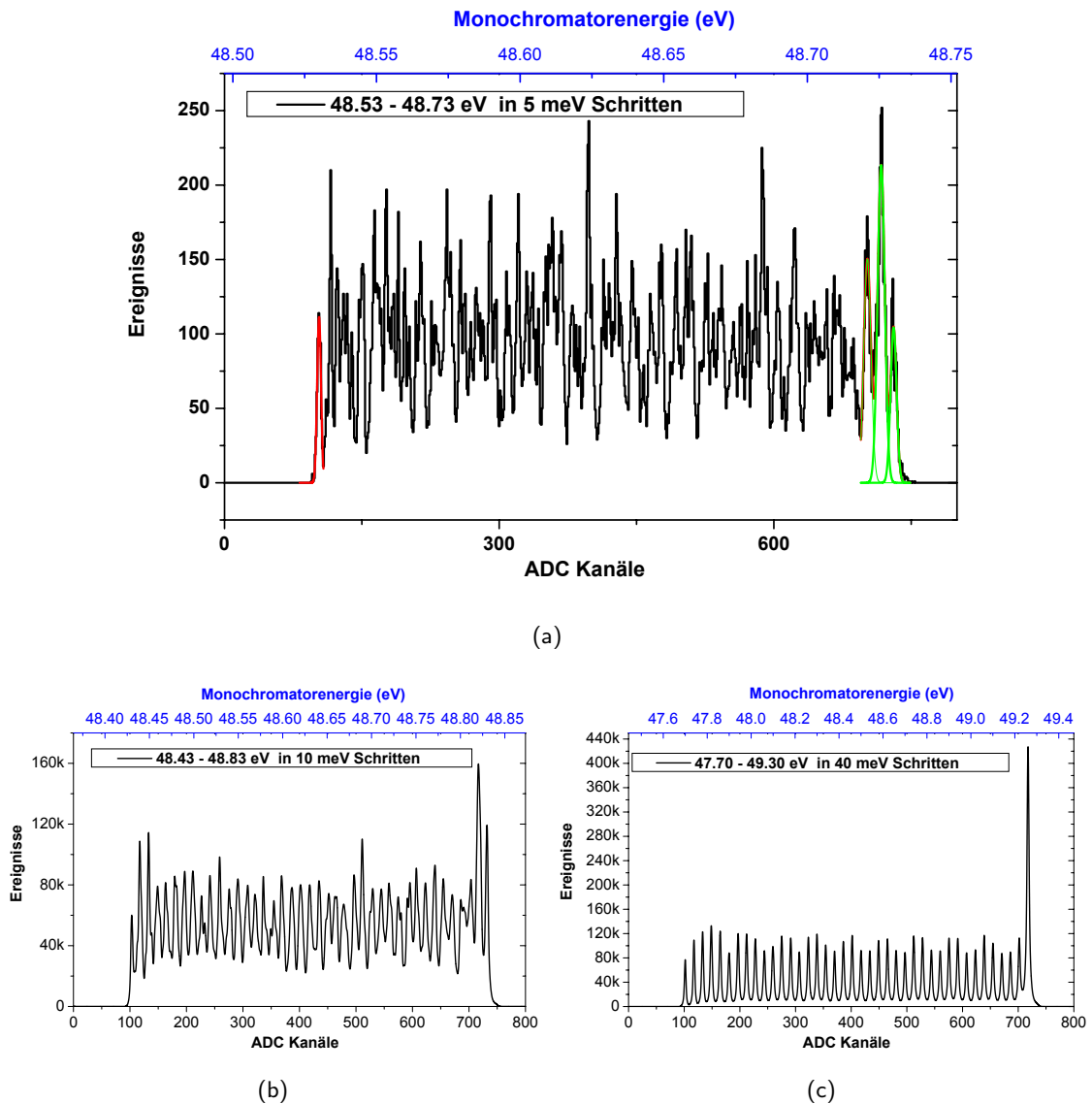


Abbildung 5.30: Brutto (unselektiert) MCP-Ereignisse gegenüber der Monochromatorenergie. (a) Einstellung „A“, (b) Vergleichsmessung, (c) Vergleichsmessung.

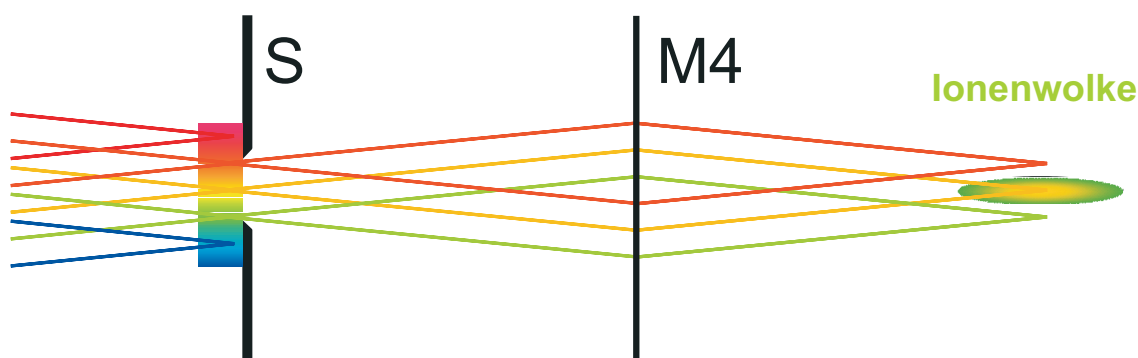


Abbildung 5.31: Schematische Darstellung des Strahlverlaufs bei Wechselwirkung der Ionenwolke mit Photonen der nominellen Schwerpunkswellenlänge des Monochromators unter einem groß gewählten Austrittsspalt S und damit breitem FLASH-Strahl. Der eigentlich unter streifendem Einfall reflektierende Fokussierspiegel M4, siehe auch Abb. 5.8, ist hier unter Erhaltung der Abbildungseigenschaften aus Darstellungsgründen als Sammellinse gezeigt.

Selbstverständlich wäre es günstiger, wenn man Bedingungen entsprechend Abb. 5.30 (c) hätte, so könnte man zur Eichung sämtliche Positionen verwenden. Im vorliegenden Fall jedoch spielt dies keine Rolle, da die Kalibration des Monochromators von Hause aus unter einem systematischen Fehler von ungefähr 0.0150 eV [146] leidet. Der Monochromator war zum Zeitpunkt des Experiments nur mit einer vorläufigen Kalibrierung versehen, welche in naher Zukunft verbessert werden wird. Letztendlich führt jedoch kein Weg daran vorbei, dass in Zukunft eine *in situ* Kalibration des Monochromators mit der EBIT selbst durchgeführt wird, siehe hierzu Kap. 7.

Neben dem dominierenden Kalibrationsfehler des Monochromators sollte auch ein weiterer systematischer Fehler angeführt werden, der auf Grund des Kalibrationsfehlers die Messung aber derzeit nur in unbedeutendem Maße belastet. Ursache hat dieser in der Wahl eines zu großen Austrittsspalt, welcher einen breiteren FLASH-Strahl passieren lässt, bei dem die Ionen dann aus geometrischen Gründen nur mit einem Bruchteil der Strahlung wechselwirken können. Die Ionenwolke verhält sich dann ähnlich eines zusätzlichen Spaltes. Durch den größeren möglichen Überlappbereich kommt es auch zur Fluoreszenz, falls die Ionenwolke nicht exakt auf der Strahlachse liegt. Dann stimmt aber die Wellenlänge an diesem Ort der Wechselwirkung nicht mit der nominellen Wellenlänge bzw. Photonenergie überein, wie sie mittels des Monochromators eingestellt ist, denn im Fokus wird der Austrittsspalt abgebildet und an diesem ist die Strahlung entsprechend ihrer Wellenlänge aufgefächert, siehe hierzu Abb. 5.31. Selbiges gilt damit auch im Fokusbereich und ein Versatz von der Strahlachse weg, führt zur Fluoreszenz bei falscher nomineller Photonenergie. Gute Bedingungen ergeben sich dann, wenn der Spalt kleiner oder um die Größe der Ionenwolke gewählt wird. Dies erhöht natürlich die Genauigkeit der Wellenlängeninformation, allerdings um den Preis eines schwieriger einstellbaren Überlapps.

Unter Berücksichtigung des systematischen Kalibrationsfehlers ergibt sich für die Über-

5.2. Das Experiment

| ION | NIST Wellenlänge (nm) | NIST W.L. (nm) (Rechnung) | Übergangsenergie (eV) | Übergangswahrscheinlichkeit (1/s) | Niveaus (eV) | Konfiguration |
|---------|-----------------------|---------------------------|-----------------------|-----------------------------------|-----------------------|-------------------------------------|
| Fe XVII | 25.475 | 25.48 | 48.6690 | - | 739.0536 - 787.7224 | 2s2.2p5.(2P* <1/2>).3s - 2s2.2p5.3p |
| O VII | | 25.5083 | 48.6054 | 3.68E+09 | 664.11140 - 712.71692 | 1s.3s - 1s.5p |
| Fe XXIV | 25.5113 | 25.511 | 48.5997 | 1.81E+09 | 0.0 - 48.5997 | 1s2.2s - 1s2.2p |
| O VII | | 25.5135 | 48.5955 | 8.31E+09 | 664.01841 - 712.61401 | 1s.3p - 1s.5d |
| O IV | | 25.5250 | 48.5736 | 2.81E+09 | 15.73809 - 64.3117 | 2s.2p2 - 2s.2p.(1P*).3s |
| O IV | | 25.5259 | 48.5719 | 3.13E+08 | 15.73982 - 64.3117 | 2s.2p2 - 2s.2p.(1P*).3s |
| O VII | | 25.5265 | 48.5708 | 6.22E+09 | 664.01841 - 712.58922 | 1s.3p - 1s.5d |
| O VII | | 25.5265 | 48.5708 | 2.07E+09 | 664.01841 - 712.58922 | 1s.3p - 1s.5d |
| O IV | | 25.5266 | 48.5706 | 3.13E+09 | 15.73982 - 64.3105 | 2s.2p2 - 2s.2p.(1P*).3s |
| O VII | | 25.5278 | 48.5683 | 4.61E+09 | 664.01841 - 712.58674 | 1s.3p - 1s.5d |
| O VII | | 25.5278 | 48.5683 | 3.46E+09 | 664.01841 - 712.58674 | 1s.3p - 1s.5d |
| O VII | | 25.5278 | 48.5683 | 2.30E+08 | 664.01841 - 712.58674 | 1s.3p - 1s.5d |

Abbildung 5.32: Ladungszustände der Elemente Fe, O und C mit Übergangsenergien zwischen 48.6690 und 48.5683 eV. Gelbe Markierung: $(48.6127 \pm \sigma_{\text{HWB}}) \text{ eV} = (48.6127 \pm 0.0353) \text{ eV}$. Rote Markierung: $(48.6127 \pm \sigma_{\text{sys.}}) \text{ eV} = (48.6127 \pm 0.0150) \text{ eV}$. (Quelle: NIST [96])

gangenergie der Resonanz:

$$E_0 = (48.6127 \pm 0.0011_{\text{stat.}} \pm 0.0150_{\text{sys.}}) \text{ eV}, \quad (5.39)$$

bzw. eine Wellenlänge des Übergangs von

$$\lambda_0 = (25.5045 \pm 0.0006_{\text{stat.}} \pm 0.008_{\text{sys.}}) \text{ nm}. \quad (5.40)$$

Zuordnung der Resonanz: Weiter oben in diesem Kapitel wurde bereits festgestellt, dass die Resonanz nur durch einen Ladungszustand der Elemente Eisen, Sauerstoff oder Kohlenstoff hervorgerufen werden kann. Auszuschließen wäre noch eine etwaige nicht-resonante elastische Streuung an einem der eben genannten Atome oder Ionen. Dies kann aber auf Grund des in der Wellenlänge resonanten Charakters des Signals aus Abb. 5.29 (a) ausgeschlossen werden, da es sich ja bei dieser Streuung per Definition um einen nicht-resonanten Prozess handelt. Elastische Streuung an einem solch dünnen Ensemble von Ionen und Atomen hat zudem sehr kleine Wirkungsquerschnitte [142].

Abb. 5.32 zeigt alle Übergänge aller Ladungszustände der Elemente Fe, O und C mit Übergangsenergien zwischen 48.6690 und 48.5683 eV, ein Bereich der weitaus größer ist als die Kalibrationsunschärfe oder die Halbwertsbreite der Resonanz. Der einzige Übergang, welcher unter Fluoreszenz beobachtbar wäre ist $\text{Fe}^{23+} 1s^2 2s^2 S_{1/2} - 1s^2 2p^2 P_{1/2}$. Der Grund dafür ist, dass alle übrigen Zustände dieser Liste von einem angeregten unteren Niveau ausgehen. Die Anzahl der Atome in einer EBIT, die sich in einem angeregten Zustand befinden, der nicht metastabil ist, ist wegen der dann hohen Übergangswahrscheinlichkeiten in den Grundzustand klein. Für Pulse, die eine Länge von wenigen Dutzend Femtosekunden¹⁷ aufweisen wie FLASH, ist die Anzahl der Ionen in einem angeregten Zustand mit denen die Strahlung wechselwirken werden kann praktisch Null. Übrigens wurde bereits in Kap. 4 festgestellt, dass Sauerstoff im Prinzip nicht zum beobachteten Emissionsspektrum

¹⁷In erster Ordnung des Monochromators eine bis zwei Größenordnungen mehr.

beiträgt und keine physikalische Gründe anführbar sind, warum dies unter Absorption anders sein sollte. Es gibt keinen Sauerstoff innerhalb des Elektronenstrahls und damit auch keine Anregungen, denn das Sauerstoffion vermag es nicht, sich im unmittelbaren Bereich um den Elektronenstrahl gegen das schwerere und höher geladene Eisen durchzusetzen. Somit ist bewiesen, dass es sich bei der Resonanz E_0 um den Übergang $Fe^{23+} 1s^2 2s^2 S_{1/2} - 1s^2 2p^2 P_{1/2}$ handelt und damit die erste resonante Ein-Photon-Laserspektroskopie eines Dipolübergangs im Röntgenbereich durchgeführt wurde.

FLASH stellt eine weltweit noch einzigartige Strahlungsquelle dar, befindet sich aber selbst noch im Stadium eines Experimentes und kommt nach momentanem Stand der Entwicklung nicht an die Verlässlichkeit und Vielseitigkeit etablierter Synchrotron-Quellen heran. Daher ist es interessant inwieweit dieses Experiment an solchen Strahlungsquellen durchgeführt werden kann.

5.3 Möglichkeiten der Spektroskopie von HCIs mittels Synchrotron-Quellen

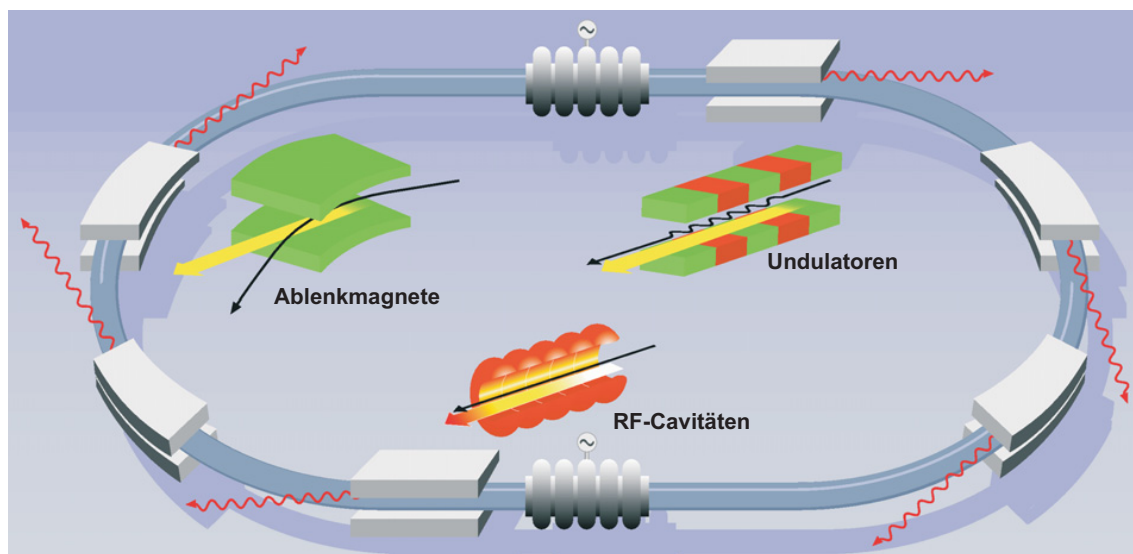


Abbildung 5.33: Schematische Darstellung eines Synchrotrons. Neben den Licht erzeugenden Magnetfeldstrukturen finden sich immer wieder Beschleunigungsstrukturen, die den Elektronen abgestrahlte Energie zurückgeben. Der Durchmesser eines typischen Synchrotrons der 3. Generation zur Erzeugung von Strahlung im VUV und weichen Röntgenbereich liegt um die 70–80 m (BESSY). (Quelle: [146])

Abb. 5.33 zeigt schematisch die Struktur eines Synchrotrons. Weiter oben wurde bereits festgestellt, dass die Undulatoren an modernen Synchrotrons aus prinzipiellen Gründen nicht in der Lage sind den Fluss des FLASH-Undulators zu produzieren. Ursache hierfür ist weniger der Undulator selbst als die Elektronenstrahleigenschaften wie Emittanz. In den Undulatoren an Synchrotron-Anlagen laufen im Prinzip die gleichen Prozesse ab

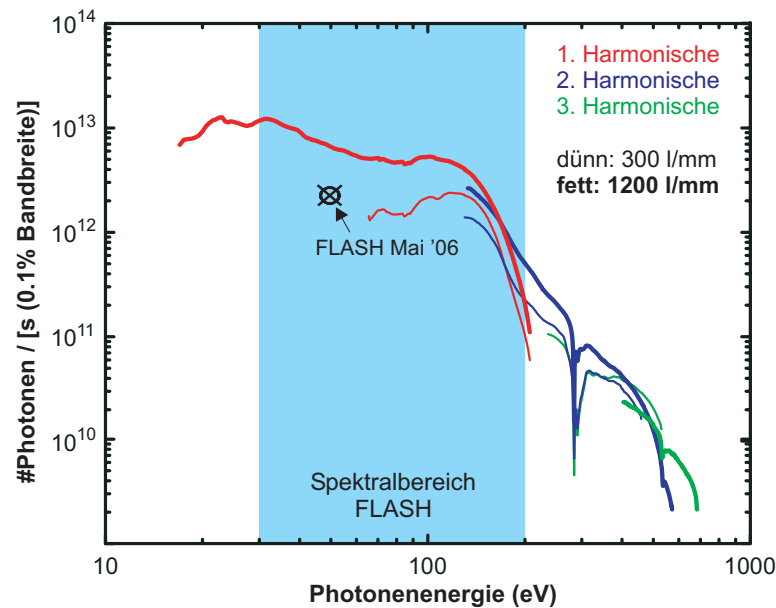


Abbildung 5.34: Photonenfluss am BESSY 125/1-PGM Strahlplatz nach dem Monochromator [164] bei einem Ringstrom von 15 mA (typisch *Single-Bunch*-Betrieb) für die beiden verfügbaren Gitter und verschiedenen Harmonischen des Undulators. Das schwarze Kreuz deutet den Fluss bei FLASH im Mai 2006 auf Grundlage der spektralen Zusammensetzung gemäß Abb. 5.22 an. Außerdem wird 20% Transmission am Gitter und durchschnittlich 15 μ J Energie pro Einzelpuls angenommen.

wie bei FLASH. Allerdings können diese nicht in dem hoch verstärkenden Sättigungsbetrieb wie FLASH gefahren werden. Sie haben eine Länge von nur wenigen Metern und die Elektronenpakete haben eine größere Ausdehnung bei geringerer Gesamtladung. Dennoch bildet sich auch hier eine Mikrostrukturierung aus, allerdings geringerer Ausprägung. BESSY-II in Berlin und ALS (engl. *Advanced Light Source*) in Berkeley stehen für die leistungstärksten Synchrotron-Quellen der Welt im VUV- und weichen Röntgenspektralbereich. Führt man sich noch einmal Abb. 5.5 vor Augen, so scheint es, als sei BESSY in Sachen Brillianz gegenüber FLASH weit im Hintertreffen. In der Tat wird FLASH bei Erreichen der angestrebten Designparameter in Brillianz und Fluss alle anderen derzeit existierenden vergleichbaren Lichtquellen überragen. Bezüglich der Brillianz ist dies auch bereits heuer der Fall. Bei Betrachtung des reinen Photonенflusses egalisiert sich die Diskrepanz von FLASH¹⁸ zu BESSY. Für FLASH wird jedoch ein Potential von rund drei Größenordnungen nach oben angenommen. Die Flüsse bei BESSY sind in Abb. 5.34 dargestellt, und zwar der Fluss pro Sekunde $\Phi = \int_{E-E/2000}^{E+E/2000} \frac{d\Phi}{dE} dE$, also pro Energie und 0.1% Bandbreite, durch den Fokus. Mit dem 300l/mm Gitter in erster Harmonischer ist der Fluss bei BESSY größer als bei FLASH zum Zeitpunkt der weiter oben beschriebenen Messung.

Synchrotron-Quellen wie BESSY laufen sehr stabil und bieten auch von diesem Standpunkt fantastische Bedingungen für den Nutzer. Am 125/1-PGM Strahlplatz ist der Mo-

¹⁸Stand Mai 2006.

nochromator [154] mit der weltweit besten Auflösung installiert, bei dem Auflösungen von $\delta = 100\,000$ und mehr gewählt werden können. Optimale Voraussetzungen also für eine erfolgreiche Spektroskopie hochgeladener Ionen.

Tatsächlich wurde im Rahmen einer Messkampagne im November 2006 versucht, in analogem Messaufbau zum Experiment am FLASH den gleichen Übergang $2\ ^2S_{1/2} - 2\ ^2P_{1/2}$ in Fe²³⁺ zu messen. Dies scheiterte jedoch auf Grund folgender drei Probleme:

Störsignal durch die RF-Kavitäten: Auf Grund eines in der Experimentierhalle durch die RF-Kavitäten erzeugten, extrem starken Störsignal, das einer mit den BESSY-Strahlungspulsen synchron laufenden Zeitstruktur folgt, entstanden ernsthafte Probleme in der zeitlichen Auflösung der Fluoreszenz. Das Signal koppelte dabei direkt über die Anode der MCPs ein und konnte im zeitlichen Rahmen der Strahlzeit nicht entschärft werden. Das Problem ist in Zukunft nur durch verfeinerte Techniken der Abschirmung in den Griff zu bekommen.

Ungünstiger Strahlfokus: Die im Vergleich zu FLASH kürzere Brennweite des Refokussierspiegels am 125/1-PGM Strahlplatz bei BESSY legte den Fokus des Laserstrahls auf Höhe des Kollektors der EBIT und nicht auf Höhe der Falle. Die damit verbundene hohe Divergenz des Strahls nach dem Fokus sorgte in der 700 mm vom Fokus entfernten Ionenwolke für einen zu breiten Strahl, was den Fluss innerhalb des Querschnitts der Ionenwolke um eine Größenordnung reduzierte und überdies durch seine Ausdehnung für zeitlich korrelierten Untergrund sorgte (Streuung an den Elektroden).

Pulsstruktur: Haupthindernis stellte allerdings die Pulsstruktur, oder genauer der Abstand zwischen den BESSY-Einzelpulsen dar. Dieser Sachverhalt wird im Folgenden genauer erörtert.

5.3.1 Die Pulsstruktur

BESSY wird im Wesentlichen unter zwei Arbeitsmodi betrieben: *Multi-Bunch*- und *Single-Bunch*-Betrieb. Abb. 5.35 zeigt die prinzipielle Pulsstruktur bei BESSY. Diese Struktur ist im Vergleich zu FLASH einfacher, besteht sie doch nur aus äquidistanten Einzelpulsen. Das Konzept des Pulszuges entfällt. Der Einzelpuls ist hier wieder Ergebnis der Abstrahlung genau eines Elektronenpaketes, welches im Speicherring zirkuliert.

Das auffälligste Unterscheidungsmerkmal zwischen *Single* und *Multi-Bunch*-Betrieb betrifft die Anzahl der Elektronenpakete und damit die Anzahl der Photonenpulse pro Sekunde. Beim *Single-Bunch*-Modus umläuft nur ein einziges Elektronenpaket den Ring. Dagegen stehen circa 360–400 Pakete beim *Multi-Bunch*-Betrieb zur Verfügung. Tab. 5.35 fasst die Parameter N_γ , τ_{EP} und Δt_{PZ} gemäß Abb. 5.35, sowie zum Vergleich die entsprechenden Werte von FLASH¹⁹, zusammen.

¹⁹Stand Mai 2006.

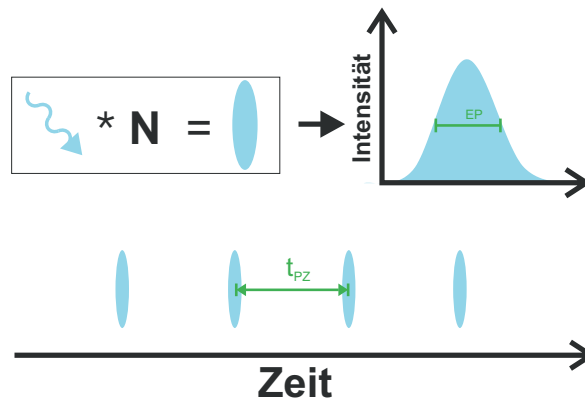


Abbildung 5.35: BESSY Pulsstruktur. Einzelpulse bestehen aus N_γ Photonen. Die Einzelpulse werden im Gegensatz zu FLASH äquidistant gruppiert. N_γ , τ_{EP} und Δt_{PZ} hängen vom Arbeitsmodus ab. Siehe hierzu Tab. 5.35.

Bei annähernd vergleichbarem Gesamtfluss ergeben sich aus dieser Pulsstruktur entscheidende Nachteile für die Realisierung des vorgestellten Fluoreszenz-Experiments am BESSY gegenüber FLASH. Wie sogleich erörtert wird, ist die Anwendung des *Single-Bunch*-Betriebs für ein Fluoreszenzexperiment analog zur Messung bei FLASH schwierig, aber die Anwendung des *Multi-Bunch*-Modus praktisch aussichtslos. Durch Aufteilung des gleichen Flusses auf fast 10 000 mal mehr Einzelpulse reduziert sich die Wahrscheinlichkeit pro Einzelpuls einen resonanten Übergang zu treiben um den gleichen Faktor, jedoch der Untergrund wird erhöht, wie als nächstes gezeigt wird.

| Lichtquelle | Einzelpuls-dauer τ_{EP} (fs) | Wiederholungs-frequenz $1/\Delta t_{PZ}$ (Hz) | Einzelpuls-energie (μJ) |
|---------------------------|-----------------------------------|---|--------------------------------------|
| BESSY <i>Multi-Bunch</i> | 30 000 | 500×10^6 | 10^{-3} |
| BESSY <i>Single-Bunch</i> | 80 000 | 1.25×10^6 | 20×10^{-3} |
| FLASH | 50 | $30 \times 5 = 150$ | 15 |

Tabelle 5.7: Vergleich verschiedener Eigenschaften der Einzelpulse von BESSY und FLASH (Stand Mai 2006).

Konsequenzen aus der Pulsstruktur im *Single-Bunch*-Betrieb: Auf Grundlage des „Datenaufnahmeschemas 2“ (Abb. 5.19) soll wieder die zeitliche Lage der MCP-Signale zum Strahlungspuls bestimmt werden. Der Abstand zweier Einzelpulse liegt am BESSY bei $0.8 \mu\text{s}$. Bei FLASH waren es $1 \mu\text{s}$, so dass von dieser Seite keine Schwierigkeiten zu erwarten sind und sich eine Kopie des Datenaufnahmeschemas anbietet.

Die Brutto-Signalrate des MCPs sei mit realistischen 50 000 Ereignissen pro Sekunde angenommen. Am FLASH gab es 150 Pulse pro Sekunde. Damit konnte es auch nur 150 mal pro Sekunde zu Fluoreszenz-Ereignissen kommen. Da aber der Gesamtfluss von BESSY und FLASH als gleich angenommen wird, braucht die Anzahl der positiven Ereignisse nicht weiter betrachtet werden. Daher wird hier nur betrachtet, wie unterschiedlich stark sich ein dem Betrage nach gleicher absoluter Untergrund am BESSY im Vergleich zu FLASH

auf das Fluoreszenzsignal auswirken kann.

Um alle Fluoreszenzsignale bei FLASH mit Sicherheit detektieren zu können, muss man lediglich für $150 \times 1 \mu\text{s} = 150 \mu\text{s}$ pro Sekunde die Datenaufnahme „öffnen“. Setzt man diese Mikrosekundenintervalle synchron zu FLASH, so kann man alle Signale in den restlichen $850 \mu\text{s}$ unberücksichtigt lassen. Pro Sekunde akkumuliert man damit $150 \mu\text{s} \times 50\,000 \text{ 1/s} = 7.5$ Ereignisse Untergrund. Bildet man die Mikrosekunde mittels eines TDCs in 1000 digitale Kanäle ab, so erhält man z.B. in der Darstellung wie Abb. 5.26 (a) 0.0075 Ereignisse Untergrund pro Kanal und Sekunde Brutto-Messzeit.

Läuft BESSY im *Single-Bunch*-Betrieb, muss man entsprechend der Einzelpulsrate 1.25×10^6 mal pro Sekunde für etwa $0.8 \mu\text{s}$ die Datenaufnahme „öffnen“. Das ergibt aber gerade 1 Sekunde und damit akkumuliert man den ganzen Untergrund von 50 000 Ereignissen pro Sekunde in die 800 digitalen Kanäle. Dies ergibt etwa 68 Ereignisse Untergrund pro Kanal und Sekunde.

Natürlich könnte man statt $0.8 \mu\text{s}$ nur für $0.4 \mu\text{s}$ oder weniger hinschauen, das verringert aber nicht den Untergrund pro Kanal. Um bei BESSY unter diesen Bedingungen gleiches Signal-Rausch-Verhältnis (statistische Signifikanz) wie bei dem Experiment am FLASH zu erhalten, benötigt man $\frac{68}{0.0075} \approx 10\,000$ mal mehr Brutto-Messzeit und aus einer halben Stunde wird ein halbes Jahr. Im *Multi-Bunch*-Betrieb wären 10 Jahre zu veranschlagen, obwohl mit gleichem Fluss gearbeitet wird.

5.3.2 Maßnahmen zur Verbesserung des Signal-Rausch-Verhältnisses

Die Pulsstruktur bei BESSY bringt eine extreme Verschlechterung der Versuchsbedingungen mit sich. Es müssen Wege gefunden werden, diese Situation zu entschärfen. An folgenden Punkten könnte man zur Optimierung ansetzen:

- Erhöhung der „echten“ Signalrate.
- Verkleinerung der zeitlichen Halbwertsbreite des Fluoreszenzsignals.
- Verringerung des Brutto-MCP-Signals — dies reduziert direkt den Untergrund pro Kanal.

Erhöhung der „echten“ Signalrate

Um die „echte“ Signalrate zu erhöhen, liegt es nahe, die Targetdichte zu vergrößern. Dies ist fast nur möglich über die Erhöhung des Elektronenstroms. Die Maschine erreicht aber mit über 500 mA bereits die höchsten Ströme für EBITs weltweit. Hier ist mittelfristig durch Einbau einer größeren Kathode maximal ein Faktor 4 möglich. Bedauerlicherweise skaliert der Untergrund auch mit dem Strom und es bleibt nur ein Faktor von $\sqrt{4}$ bezüglich des Signal-Rausch-Verhältnisses.

Eine Vergrößerung der Detektorfläche würde ebenfalls die „echte“ Signalrate erhöhen, jedoch skaliert auch hier der Untergrund mit. Im Vergleich zur FLASH-Messung wurde

die Detektorfläche bei der BESSY-Messung ohnehin mehr als verdoppelt. Weitere Vergrößerung könnte vielleicht einen zusätzlichen Faktor $\sqrt{2}$ bringen. Mit diesen Punkten zusammen erreicht man eine Verbesserung des Signal-Rausch-Verhältnisses von etwa einem Faktor vier.

Am bequemsten ließe sich die Fluoreszenzrate durch Erhöhen des BESSY-Photonenflusses bewerkstelligen. Statt eines *Single-Bunch*-Modus könnte man sich einen Betrieb vorstellen, bei dem beispielsweise 10 Elektronenpakete im Ring zirkulieren. Der Abstand zwischen zwei Einzelpulsen wäre dann 80 ns. Die Datenaufnahme wäre damit noch zu bewerkstelligen. Technisch stellt diese Erhöhung für den Betrieb des Synchrotrons wohl kein Problem dar. Je mehr Pakete umlaufen, desto geringer muss die elektrische Ladung der einzelnen Pakete sein, damit keine gegenseitige Beeinflussung stattfindet. Daher ist die Ladung und damit auch die Pulsenergie des Einzelpulses im *Multi-Bunch*-Modus auch einen Faktor 20 zum *Single-Bunch*-Modus kleiner, jedoch ist der totale Photonfluss einen Faktor 15 größer. Zehn Pakete von etwa der Ladung des Einzelpakets vermutlich noch keine Probleme bereiten. Im Gegensatz zu FLASH messen bei einem Synchrotron viele Nutzer gleichzeitig. Die Frage ist hier vielmehr, inwieweit andere Nutzer an einem Betrieb mit 10 Paketen interessiert wären. Die Erhöhung des Flusses durch Steigerung der Elektronenpakete schlägt wegen des ebenfalls steigenden Untergrunds auch nur mit der Wurzel der Faktoren zu buche, also $\sqrt{10}$.

Verkleinerung der zeitlichen Halbwertsbreite des Fluoreszenzsignals

Die Halbwertsbreite des Signals hängt nicht nur mit den Eigenschaften des Detektors zusammen, sondern auch mit dem Jitter des Stoppsignals. Das Stoppsignal wird von der BESSY *Masterclock* gegeben. Diese ist äußerst genau, denn an ihr hängen die RF-Kavitäten, und ein Jitter hier würde sich direkt auf den Elektronenstrahl auswirken. Abb. 5.36 zeigt das MCP-Signal bei Streuung des Photonstrahls an den Innenseiten der Fallenelektroden. Unter Einfluss aller signaltechnischer Verbreiterungen und eines etwaigen Jitters der *Masterclock* ergibt sich eine Halbwertsbreite von 0.84(1) ns. Bei der Messung am FLASH betrug die Signalbreite noch etwa 70 ns. Die Verbesserung ist hauptsächlich auf einen schnellen Vorverstärker der Firma *Ortec* zurückzuführen. Bei einem solch zeitlich schmalen Signal gilt es bei Messung der Fluoreszenz die Lebensdauer des Zustandes zu beachten, die beim $2^2S_{1/2}-2^2P_{1/2}$ Übergang in Fe^{23+} mit 0.6 ns vergleichbar groß wird und das Signal wohl etwas verbreitern wird. Bei 0.84 ns Halbwertsbreite summiert man die „echten“ Ereignisse auf nur 1/80 der Kanäle im Vergleich zum Falle von 70 ns beim Experiment am FLASH. Damit reduziert man das Signal-Rausch-Verhältnis um den gleichen Faktor. Das liefert eine Verbesserung von mindestens einer Größenordnung.

Verringerung des Brutto-MCP-Signals

Zur Verringerung des Brutto-MCP-Signals gibt es zwei mögliche Ansatzpunkte. Man kann den Photonuntergrund verringern oder aber dem Detektor stärkere diskriminierende Eigenschaften geben, also z.B. die Akzeptanz von Wellenlängen weiter einschränken.

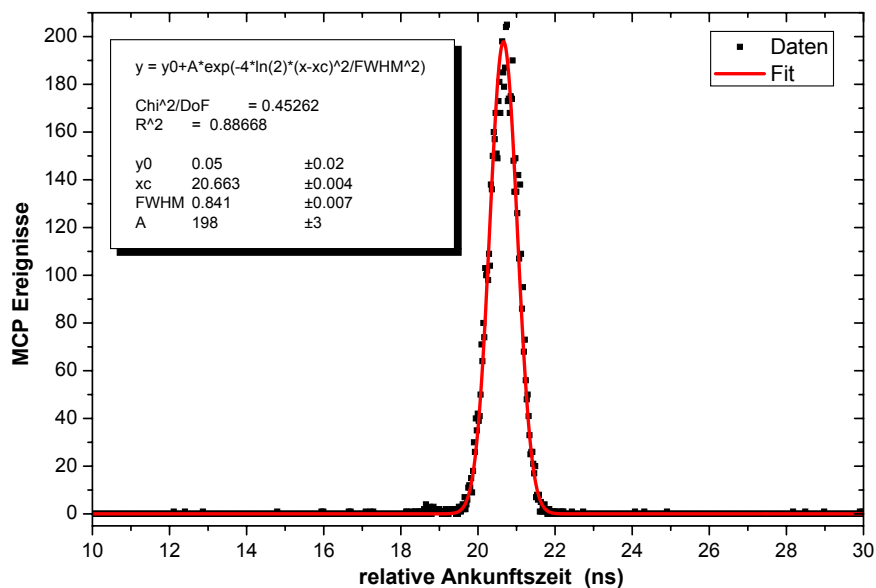


Abbildung 5.36: Zeitsignal des MCP-56 Detektors bei absichtlich herbeigeführtem Streulicht an den Kupferelektroden. Gemessen ist die relative Ankunftszeit zu einem Signal in fester Phase zu den BESSY Einzelpulsen im *Single-Bunch*-Betrieb.

Verringerung des Untergrundes: Im normalen Betrieb erreicht die Tesla-EBIT bei vorliegenden Experimenten binnen Millisekunden einen Gleichgewichtszustand, bei dem die Anzahl der Ionen einer bestimmten Spezies und Ladungszustands eine Konstante darstellt.

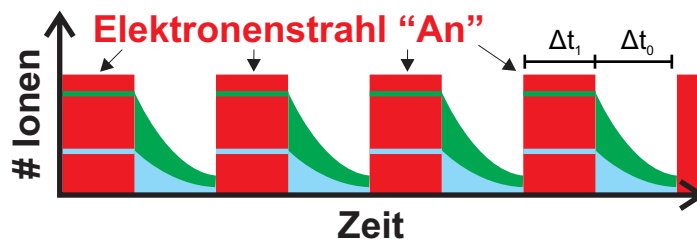


Abbildung 5.37: Schema zur Unterdrückung des Untergrundes. Rot stellt die Phasen eingeschalteten Elektronenstrahls dar. Die Ladungszustände der Ionen befinden sich in einem stationären Zustand. Summe der Ionen (grün), Ladungszustand für Laserspektroskopie (blau). Mit Ausschalten des Strahls stoppt die Produktion neuer Ionen und Elektroneneinfangprozesse sowie Ladungstransfer reduzieren den durchschnittlichen Ladungszustand als Funktion der Zeit.

Von Interesse ist allerdings auch nur der Untergrund während der Zeit, in der man Daten aufnimmt. Entsprechend könnte man also gemäß Abb. 5.37 so arbeiten, dass man zunächst mit angeschaltetem Elektronenstrahl eine stationäre Population der Ionen erzeugt wird, dann der Elektronenstrahl abschaltet und in dieser Phase die Laserspektroskopie durchgeführt wird.

Ohne Elektronenstrahl werden die Ionen radial nur durch das starke Magnetfeld gefangen gehalten, ähnlich einer Penningfalle [100]. Die EBIT befindet sich im so genannten *magnetic trapping mode*, siehe auch Kap. 3. Das schnelle Ausschalten erfolgt mittels eines Hochspannungsverstärkers, der die Spannung der Fokuselektrode auf etwas negatives Potential als die Kathode bringt (Abb. 3.21). Nach ausschalten des Elektronenstrahl finden keine Anregungen mehr statt, wodurch ein Hauptteil des Untergrunds entfällt. Nur noch der Zerfall langlebiger metastabiler Niveaus sowie der Zerfall angeregter Niveaus nach Ladungstransfer oder Elektroneneinfang kann in den „AUS“-Phasen zum Untergrund beitragen.

Die „AN“- und „AUS“-Zeiten Δt_1 , Δt_0 lagen typischerweise im Bereich von 20 ms. Grundsätzlich kann man so etwa nur die Hälfte, vielleicht Zweidrittel²⁰ des BESSY-Flusses nutzen. Eine weitere entscheidende Frage ist natürlich, wie viele der Fluoreszenz fähigen Ionen tatsächlich verloren gehen, zum einen direkt beim Ausschalten, und zum anderen während der „AUS“-Zeit. Es ist allerdings schwierig festzustellen wie sich die Population von Fe^{23+} ohne Elektronenstrahl entwickelt, denn diese Ionen emittieren ohne gibt es ohne Strahl keine Strahlung. Die Li-artige Ionen haben keine metastabilen Niveaus. Eine Möglichkeit dies festzustellen wäre gerade über Messung der Fluoreszenzrate bei Anregung durch BESSY-Strahlung als Funktion der Zeit.

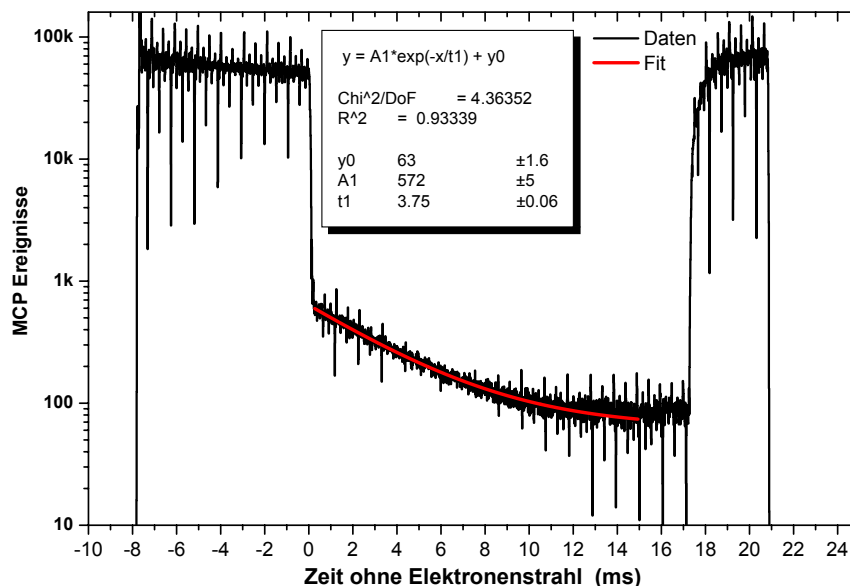


Abbildung 5.38: Ionenpopulation nach dem Ausschalten des Elektronenstrahls am Beispiel von metastabilem He-artigen Stickstoff. Die zahlreichen Zacken auf dem Signal sind ein durch das Störsignal der Kavitäten hervorgerufenen Artefakt.

Abb. 5.38 zeigt am Beispiel von He-artigen Stickstoff die Verhältnisse, die sich beim Schema aus Abb. 5.37 ergeben. Es ist genau eine Periode des Ausschaltvorgangs gezeigt. Un-

²⁰Je nach dem Verhältnis $\Delta t_1/\Delta t_0$.

ter den Einstellung „A“ gemäß Tab. 5.8 wird der Elektronenstrahl bei 0 ms ausgeschaltet. Die Zählrate, und damit der Untergrund, fällt sofort um 2 Größenordnungen ab. Die Elektronenstrahlenergie war dabei so eingestellt, dass der höchste vorkommende Ladungszustand He-artiges N^{5+} sein konnte. He-artige Systeme besitzen bekanntlich einen metastabilen 2^3S_1 -Zustand, der unter M1-Abstrahlung²¹ in den Singulett-Grundzustand zerfallen kann. In diesem Fall kann man nun diese Zerfälle aus dem metastabilen Niveau nutzen, um etwas über die zeitliche Entwicklung des He-artigen Stickstoffs allgemein bei ausgeschaltetem Strahl zu erfahren. Der Ansatz eines exponentiellen Zerfalls des Signals ergibt eine experimentelle Lebensdauer von (3.75 ± 0.005) ms. In der Literatur [165] wird ein Wert von (3.904 ± 0.005) ms angegeben. Der hier experimentell bestimmte Wert liegt etwas niedriger, denn es ist auf Grund der gewählten Einstellungen mit weiteren Verlustkanälen zu rechnen, die die Lebensdauer etwas verkürzen.

Der ausreichend nahe am Literaturwert liegende hier gemessene Wert der Lebensdauer lässt schließen, dass der metastabile He-artige Stickstoff bei ausgeschaltetem Elektronenstrahl in der Falle verbleibt und sich überwiegend radiativ abbaut. Höchstens eine kleine Fraktion der Ionen verlässt innerhalb der 20 ms die Falle. Es ist daher nicht davon auszugehen, dass die Unterdrückung des Untergrunds um 2 Größenordnungen durch das Ausschalten mit einem Verlust der zu untersuchenden Ionenspezies von gleichem Umfange einhergeht.

Im vorliegenden Fall des He-artigen Stickstoffs würde sich eine Verbesserung des Signal-Rausch-Verhältnisses von mindestens einer Größenordnung erwarten lassen.

| Einstellung | Elektronenstrom (mA) | Beschleunigungsspannung (kV) | Falltiefe (V) | Gaseinlass |
|-------------|----------------------|------------------------------|----------------|------------|
| A | 20.5 | 0.66 | $750 + Q_{RL}$ | Stickstoff |

Tabelle 5.8: EBIT-Parameter. Die Beschleunigungsspannung unterscheidet sich von der tatsächlichen Energie der Elektronen um den Betrag der Raumladung. Eine positive Falltiefe meint ein Ionen akkumulierendes Kastenpotential. Q_{RL} ist der Betrag der Raumladung der Elektronen und immer positiv.

Verbesserung der Wellenlängensensivität des Detektors: Die Technik zum Detektieren der Fluoreszenzphotonen, die bisher genutzt wurde, beruhen auf dem Einsatz von nur leicht energiediskriminierenden Elementen, die das Absorptionsvermögen von Si-Spiegeln unter streifendem Einfall oder von dünnen Folien nutzen. Eine weitere Einengung des Spektralbereichs um die Fluoreszenz könnte der Einsatz von *Multilayer*-Spiegeln [142] bringen. Die destruktive Reflexion an Mehrschichten von nur wenigen Nanometern Dicke führt hier zu einer Einschränkung des reflektierten Spektralbereichs. Eine effiziente Unterdrückung störender Strahlung wäre damit möglich. Man benötigt jedoch für jeden Übergang einen speziell gefertigten Spiegel. Die Anschaffungskosten eines solchen Spiegels sind durchaus beträchtlich.

²¹Auch 2E1, jedoch 3–4 Größenordnungen unwahrscheinlicher [8].

5.3. Möglichkeiten der Spektroskopie von HCl's mittels Synchrotron-Quellen

Diesen Abschnitt zusammenfassend lässt sich sagen, dass den auf den ersten Blick riesig erscheinenden, fast vier Größenordnungen betragenden Verlust von Signal-Rausch-Verhältnis ein adäquater Maßnahmenkatalog entgegengestellt werden kann (Tab. 5.9), der zukünftige Messungen am BESSY zum Erfolg verhelfen sollte.

| Maßnahme | mögliche Steigerung des Signal-Rausch-Verhältnisses |
|-----------------|--|
| Signalrate | $2 \times \sqrt{2} \times \sqrt{10}$ |
| Halbwertsbreite | 50 |
| Strahl aus | 50 |
| Filter | 5 |
| | $\approx 100\,000$ |

Tabelle 5.9: Zusammenfassung der Faktoren zur Steigerung des Signal-Rausch-Verhältnisses durch vorgeschlagene Maßnahmen.

Kapitel 6

Diskussion der Ergebnisse

In diesem Kapitel werden die in dieser Arbeit erzielten Resultate diskutiert und mit publizierten theoretischen und experimentellen Werten verglichen. Zunächst werden die Ergebnisse aus der Laserfluoreszenzspektroskopie an Li-artigen Eisen besprochen, danach die Resultate der konventionellen Spektroskopie von Li- wie Be-artigen Eisen.

6.1 Resonante Laserfluoreszenzspektroskopie an Li-artigen Fe^{23+}

Im Rahmen dieser Messung wurde erstmals resonante Ein-Photonen-Laserfluoreszenzspektroskopie eines atomaren Ein-Elektronenübergangs im weichen Röntgenbereich erfolgreich durchgeführt. Die Energiedifferenz des $1s^2 2s^2 S_{1/2} - 1s^2 2p^2 P_{1/2}$ Übergangs in Fe^{23+} wurde dabei zu $(48.6127 \pm 0.0011_{\text{stat.}})$ eV bzw. der korrespondierenden Wellenlänge von $(25.5045 \pm 0.0006_{\text{stat.}})$ nm bestimmt. Derzeit dominiert den Messfehler dieses Wertes noch eine systematische Kalibrationsunsicherheit. Die Präzision, hier der Quotient aus Messgröße über statistischer Unsicherheit, ist um mehr als eine Größenordnung höher. Der größte systematische Fehler ist durch die in diesem ersten Test noch vorhandene Kalibrationsunsicherheit des FLASH-Monochromators bedingt und wird in Zukunft entscheidend verringert werden können (siehe Kap. 7). Daher wird an dieser Stelle auf die Diskussion des gemessenen Absolutwertes verzichtet und nur auf die relative Präzision¹ eingegangen. Diese Genauigkeit $\Delta\lambda/\lambda = \Delta E/E$ der nur effektiv dreißigminütigen Demonstrationsmessung beträgt bereits nur 23 ppm. Bei entsprechender Messzeit und Intensität kann dieser Wert noch wesentlich verbessert werden. Auf Grundlage von Abb. 2.10 (Kap. 2) soll das Potential dieser resonanten Laserfluoreszenzspektroskopie aufgezeigt werden.

In Abb. 6.1 (ähnlich Abb. 2.10) sind hierzu für den Übergang $1s^2 2s^2 S_{1/2} - 1s^2 2p^2 P_{1/2}$ entlang der Li-artigen Sequenz die absoluten QED-Beiträge höherer Ordnung (siehe Legende) in Abhängigkeit der Kernladungszahl aufgetragen. Die einfachen QED-Beiträge und einfachen Abschirmbeiträge (*one loop* Terme) sind der Übersichtlichkeit halber nicht dargestellt

¹Hier der statistische Fehler.

(siehe hierzu Abb. 2.10). Des Weiteren sind die dominierenden (absoluten) theoretischen Unsicherheiten für verschiedene Beiträge gezeigt (durchgezogene Linien). Außerdem sind auch die experimentellen (absoluten) Unsicherheiten der genauesten publizierten Messungen entlang der isoelektronischen Sequenz eingezeichnet (braune Punkte). Zum Vergleich finden sich ebenfalls die absoluten Unsicherheiten der vorgestellten laserspektroskopischen Messung des $1s^2 2s^2 S_{1/2} - 1s^2 2p^2 P_{1/2}$ Übergangs in Fe^{23+} (blaues Dreieck) und der absolute Messfehler der weiter unten diskutierten konventionellen Spektroskopie des gleichen Übergangs (rotes Dreieck).

Zunächst ist festzustellen, dass die Präzision des laserspektroskopischen Experiments bereits die Genauigkeit der besten konventionellen Messungen erreicht. Auf diesem Niveau können bereits Drei-Photonen QED-Terme in der Inter-Elektron-Wechselwirkung bestimmt werden. Die experimentelle Genauigkeit ist dabei höher als die gegebenen theoretischen Unsicherheiten in der Bestimmung des relativistischen Rückstoßes (orange). Eine Steigerung der experimentellen Genauigkeit um mindestens einen Faktor drei würde die

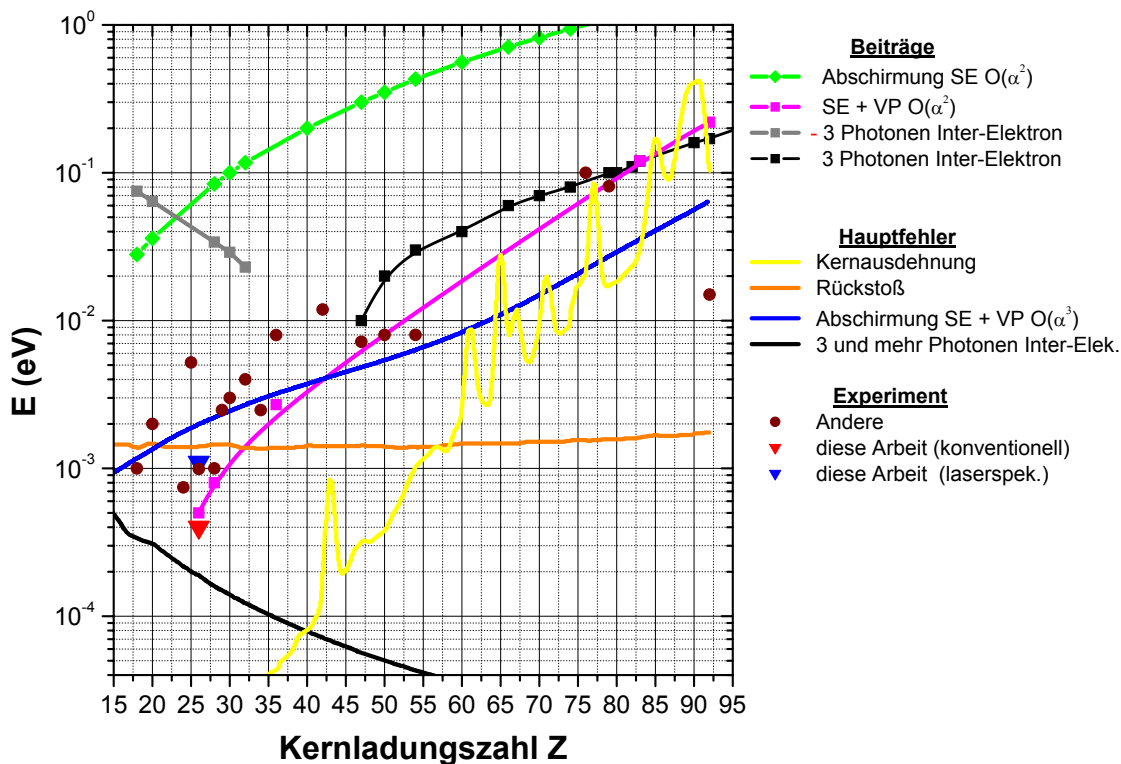


Abbildung 6.1: Für den $1s^2 2s^2 S_{1/2} - 1s^2 2p^2 P_{1/2}$ Übergang sind in Abhängigkeit der Kernladungszahl dargestellt: absolute Korrekturbeiträge höherer Ordnung (siehe auch Abb. 2.10) der QED, die Hauptunsicherheiten in den Berechnungen, die experimentellen Unsicherheiten in der Schwerpunktsenergie von publizierten Messungen entlang der Li-artigen isoelektronischen Sequenz (braune Daten) [40, 81, 166–178] sowie die Messfehler mit denen im Rahmen dieser Arbeit bei der konventionellen Spektroskopie (rotes Dreieck) und der Laserspektroskopie (blaues Dreieck, nur statistischer Fehler) die Übergangsenergie bestimmt werden konnte.

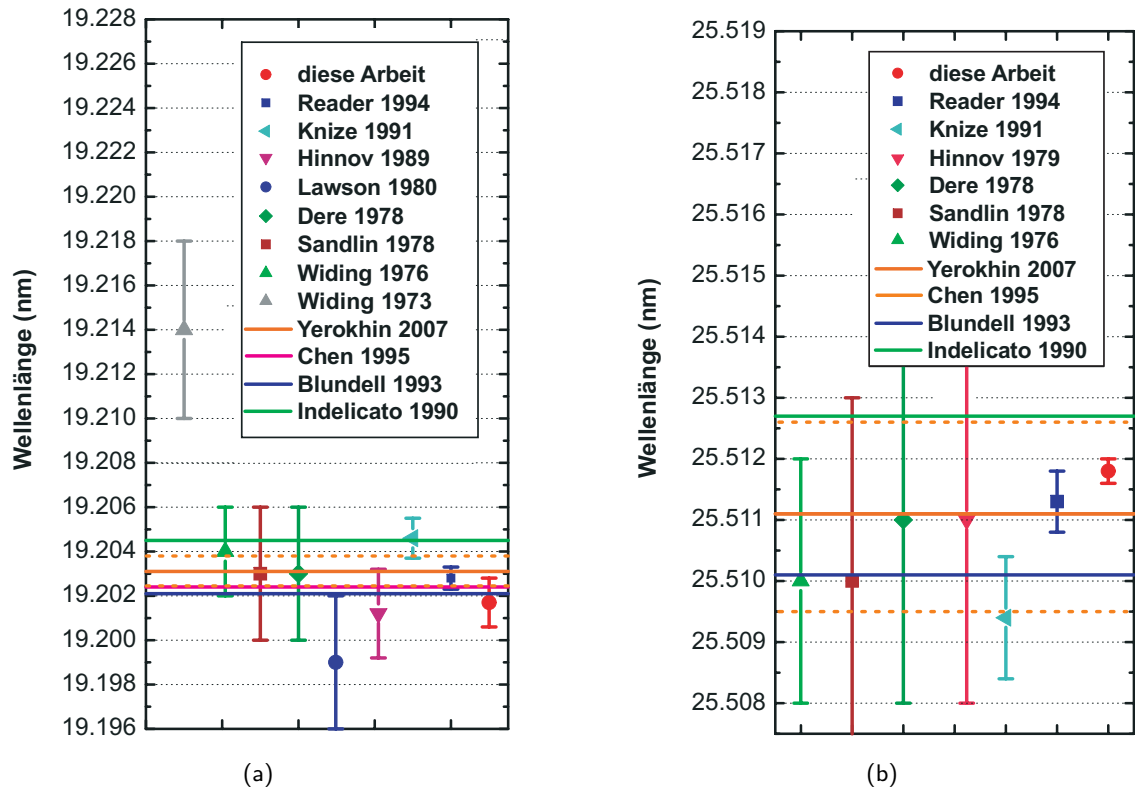


Abbildung 6.2: Vergleich der gemessenen Linien des Li-artigen Eisens mit experimentellen (Datenpunkte) und theoretischen (Linien) Literaturwerten. Die gestrichelten Linien (orange) geben das Fehlerintervall der Berechnungen nach Yerokhin (orange) an. (a) $1s^2 2s^2 \ ^2S_{1/2} - 1s^2 2p^2 \ ^2P_{3/2}$ und (b) $1s^2 2s^2 \ ^2S_{1/2} - 1s^2 2p^2 \ ^2P_{1/2}$.

Auflösung der dominierenden Selbstenergiekorrektur (lila) der „reinen“ H-artigen QED-Strahlungskorrekturen in zweiter Ordnung α gestatten. Um von einer zukünftigen gesteigerten Präzision durch laserspektroskopische Messungen profitieren zu können, muss mindestens einer der theoretischen Hauptfehler, entweder im relativistische Rückstoß (orange, Abb. 6.1) oder in der Abschirmung von Selbstenergie und Vakuumpolarisation (blau), entscheidend reduziert werden, siehe hierzu auch Tab. 2.1.

6.2 Konventionelle Spektroskopie des Li-artigen Eisens

Im Falle des Li-artigen Fe^{23+} wurde sowohl der $1s^2 2s^2 \ ^2S_{1/2} - 1s^2 2p^2 \ ^2P_{3/2}$ als auch der $1s^2 2s^2 \ ^2S_{1/2} - 1s^2 2p^2 \ ^2P_{1/2}$ Übergang konventionell spektroskopiert und dessen Wellenlänge zu $(19.2017 \pm 0.0003_{\text{stat.}} \pm 0.0009_{\text{syst.}})$ nm bzw. $(25.5118 \pm 0.0001_{\text{stat.}} \pm 0.0001_{\text{syst.}})$ nm bestimmt. In Abb. 6.2 ist der Vergleich der an der EBIT gemessenen Werte mit einer reichen Anzahl von sowohl experimentellen als auch theoretischen Ergebnissen, die im Einzelnen in Tab. 6.1 zu finden sind, dargestellt. Hierbei korrespondiert Abb. 6.2 (a) entsprechend mit Tab. 6.1 (a) etc.

Der zunächst betrachtete $1s^2 2s^2 \ ^2S_{1/2} - 1s^2 2p^2 \ ^2P_{3/2}$ Übergang ist in der vorliegender Mes-

sung mit vergleichsweise moderater Genauigkeit von 62 ppm bestimmt worden. Die im Vergleich zum $1s^2 2s \ ^2S_{1/2} - 1s^2 2p \ ^2P_{1/2}$ Übergang (8 ppm) geringere Präzision ist Folge der Entfernung der zugehörigen Spektrallinie zu den nächsten Kalibrationslinien in den ausgewerteten Spektren und der hohen Anzahl an *Blends* in dieser Linie (Kap. 4). In Abb. 6.2 (a) erkennt man eine im Gesamten gute Übereinstimmung sowohl der experimentellen Werte untereinander, als auch in Bezug auf die theoretischen Vorhersagen.

(a)

| Referenz | λ (nm) | $\Delta\lambda$ (nm) | $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$ (ppm) | Methode [†] |
|--|----------------|----------------------|---------------------------------------|----------------------|
| Widing <i>et al.</i> 1973 [179] | 19.214 | 0.004 | 210 | Sonneneruption |
| Widing <i>et al.</i> 1976 [180] | 19.199 | 0.003 | 160 | Sonneneruption |
| Dere <i>et al.</i> 1978 [181] | 19.203 | 0.003 | 160 | Sonneneruption |
| Sandlin <i>et al.</i> 1978 [182] | 19.203 | 0.003 | 160 | Sonneneruption |
| Lawson <i>et al.</i> 1980 [183] | 13.292 | 0.003 | 160 | Tokamak |
| Hinnov <i>et al.</i> 1989 [173] | 19.2012 | 0.002 | 104 | Tokamak |
| Knize <i>et al.</i> 1991 [170] | 19.2046 | 0.0009 | 52 | Tokamak |
| Reader <i>et al.</i> 1994 [169] (NIST) | 19.2028 | 0.0005 | 26 | Tokamak |
| diese Arbeit | 19.2017 | 0.0012 | 62 | EBIT |
| Yerokhin <i>et al.</i> 2007 [85] | 19.2031 | 0.0007 | 36 | Theorie(rig. QED) |
| Chen <i>et al.</i> 1995 [184] | 19.2024 | — | — | Theorie(CI) |
| Blundell <i>et al.</i> 1993 [185] | 19.2021 | — | — | Theorie(RMBT) |
| Indelicato <i>et al.</i> 1990 [79] | 19.2045 | — | — | Theorie(MCDF) |

(b)

| Referenz | λ (nm) | $\Delta\lambda$ (nm) | $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$ (ppm) | Methode [†] |
|--|----------------|----------------------|---------------------------------------|----------------------|
| Widing <i>et al.</i> 1973 [179] | 25.529 | 0.004 | 160 | Sonneneruption |
| Sandlin <i>et al.</i> 1978 [182] | 25.510 | 0.003 | 120 | Sonneneruption |
| Dere <i>et al.</i> 1978 [181] | 25.511 | 0.003 | 120 | Sonneneruption |
| Hinnov <i>et al.</i> 1979 [186] | 25.511 | 0.003 | 120 | Tokamak |
| Knize <i>et al.</i> 1991 [170] | 25.5094 | 0.001 | 40 | Tokamak |
| Reader <i>et al.</i> 1994 [169] (NIST) | 25.5113 | 0.0005 | 20 | Tokamak |
| diese Arbeit | 25.5118 | 0.0002 | 8 | EBIT |
| Yerokhin <i>et al.</i> 2007 [85] | 25.5111 | 0.0015 | 36 | Theorie(rig. QED) |
| Chen <i>et al.</i> 1995 [184] | 25.5111 | — | — | Theorie(CI) |
| Blundell <i>et al.</i> 1993 [185] | 25.5101 | — | — | Theorie(RMBT) |
| Indelicato <i>et al.</i> 1990 [79] | 25.5127 | — | — | Theorie(MCDF) |

Tabelle 6.1: Übersicht der in Abb. 6.2 dargestellten Daten. Die zweite Spalte gibt die Wellenlänge λ des Übergangs, die dritte die absolute Unsicherheit $\Delta\lambda$, die vierte die relative Genauigkeit $\Delta\lambda/\lambda$ und die letzte Spalte das Verfahren wie der Wert gewonnen wurde an. (a) $1s^2 2s \ ^2S_{1/2} - 1s^2 2p \ ^2P_{3/2}$ und (b) $1s^2 2s \ ^2S_{1/2} - 1s^2 2p \ ^2P_{1/2}$. [†]Sonneneruption: spektrale Untersuchungen von Sonneneruptionen; Laserplasma: Spektroskopie von durch gepulste hochenergetische Laser erzeugter Plasmen; Tokamak: Spektroskopie von Plasmen in einem Tokamak; EBIT: Spektroskopie in einer EBIT; Theorie: theoretische Berechnung.

Der Wert dieser Arbeit entspricht innerhalb der Fehlergrenzen dem experimentellen Referenzwert der NIST-Datenbank, welcher durch Reader *et al.* in einem Tokamak mit 26 ppm Genauigkeit vermessen wurde. Der Wert von Knize *et al.* ist mit 52 ppm von vergleichbarer Präzision, stimmt jedoch innerhalb der Fehlergrenzen weder mit dem aktuellen Ergebnis noch mit dem Wert von Reader *et al.* überein. Abgesehen von der Diskrepanz bezüglich der Werte von Widing *et al.* und Knize *et al.*, stimmt das vorliegende Messergebnis mit allen experimentellen Werten innerhalb der Fehlergrenzen überein.

Eine bemerkenswerte Konsistenz ist auch hinsichtlich der theoretisch berechneten Werte zu verzeichnen. Innerhalb der Fehlergrenzen stimmen die theoretischen Vorhersagen bis auf die von Indelicato *et al.* (MCDF) mit dem Ergebnis dieser Arbeit überein. Für die älteren Berechnungen von Indelicato *et al.*, Blundell *et al.* und Chen *et al.* muss angemerkt werden, dass diese gerade höhere QED-Korrekturen wie beispielsweise die Abschirmung der Selbstenergie nur approximativ behandeln. Yerokin *et al.* (Tab. 2.1), der die QED auf rigorose Weise in allen Ordnungen $Z\alpha$ einbezieht (Kap. 2), gibt als einziger eine belastbare Unsicherheit für seine Berechnungen an. Mit 36 ppm relativem Fehler ist das theoretische Resultat anderthalb mal genauer als das experimentelle dieser Arbeit.

Für den $1s^2 2s \ ^2S_{1/2} - 1s^2 2p \ ^2P_{1/2}$ Übergang (Abb. 6.2b) ist abermals Übereinstimmung innerhalb der Fehlergrenzen mit dem in der NIST-Datenbank gegebenen Wert von Reader *et al.* vorhanden. Der in dieser Arbeit gegebene Fehler beträgt nur 8 ppm und erreicht somit etwa eine doppelte Genauigkeit im Vergleich zum Referenzwert. Auch bei diesem Übergang stimmt das Resultat dieser Arbeit und jenes von Reader *et al.* nicht mit den Angaben von Knize *et al.* überein. Mit den weiteren dargestellten experimentellen Werten ist Übereinstimmung gegeben.

Der Fehler in der theoretischen Berechnung von Yerokhin *et al.* ist für den $1s^2 2s \ ^2S_{1/2} - 1s^2 2p \ ^2P_{1/2}$ Übergang größer als für den zuvor diskutierten $1s^2 2s \ ^2S_{1/2} - 1s^2 2p \ ^2P_{3/2}$ Übergang. Innerhalb der gegebenen Genauigkeit vom 36 ppm stimmt dieses theoretische Resultat mit allen berichteten experimentellen Werten überein.

Mittels der konventionellen Spektroskopie des $1s^2 2s \ ^2S_{1/2} - 1s^2 2p \ ^2P_{1/2}$ Übergangs ist man bereits sensitiv auf die Beiträge in zweiter Ordnung von α bezüglich Vakuumpolarisation und Selbstenergie und erreicht fast die nötige Genauigkeit, um die theoretischen Unsicherheiten in der drei und mehr Photonen Inter-Elektron-Wechselwirkung auflösen zu können. Um in Zukunft, wie bereits erwähnt, tatsächlich z.B. die drei und Mehr-Photonen Inter-Elektron-Wechselwirkung mit diesem Verfahren testen zu können, müssen von theoretischer Seite unbedingt die hohen Fehlerbeiträge im relativistischen Elektronen-Rückstoß (orange, Abb. 6.1) und in der Abschirmung der Strahlungskorrekturen (blau) beseitigt werden. In diesem Zusammenhang möge man Tab. 2.1 beachten. Die theoretische Rückstoßkorrektur im Falle des $2 \ ^2S_{1/2} - 2 \ ^2P_{1/2}$ Übergangs in Fe^{23+} beträgt $-0.0121(19)$ eV, für den ebenfalls gemessenen $2 \ ^2S_{1/2} - 2 \ ^2P_{3/2}$ Übergang sehr ähnliche $-0.0123(20)$ eV. In einer naiven, allzu klassischen Vorstellung könnte man sich dieser Korrektur, samt ihres Fehlers, durch Vergleich der Differenz der beiden Übergänge entledigen versuchen. Sprich man betrachtet die Feinstrukturaufspaltung $2 \ ^2P_{1/2} - 2 \ ^2P_{3/2}$ und vergleicht diese mit der entsprechenden theoretischen Differenz. Genau dies ist diesem Fall nicht möglich, die Korrektur

hebt sich nicht auf. Selbiges gilt z.B. auch für die Unsicherheit in der Abschirmung der Zwei-Elektronen QED-Korrektur (blau, Abb. 6.1). Wohl aber heben sich zahlreiche Ein-Elektron-Beiträge (H-artig) samt Fehler auf, so dass eine Betrachtung der Feinstruktur prinzipiell Sinn machen kann, falls man einen expliziten Fokus auf Elektronenkorrelationen und damit einhergehender QED-Beiträge legen möchte.

6.3 Konventionelle Spektroskopie des Be-artigen Eisens

Mittels konventioneller Spektroskopie wurden auch die beiden Grundzustandsübergänge $1s^2 2s^2 \ ^1S_0 - 1s^2 2s 2p \ ^1P_1$ und $1s^2 2s^2 \ ^1S_0 - 1s^2 2s 2p \ ^3P_1$ in Be-artigen Fe^{22+} analysiert (siehe hierzu auch Abb. 2.12), wobei deren Übergangswellenlängen zu $(13.29087 \pm 0.00004_{\text{stat.}} \pm 0.0001_{\text{syst.}})$ nm bzw. $(26.3739 \pm 0.0002_{\text{stat.}} \pm 0.0001_{\text{syst.}})$ nm bestimmt werden konnten. Diese Resultate werden in Abb. 6.3 mit experimentellen wie auch theoretischen Literaturwerten verglichen, siehe hierzu auch Tab. 6.2.

Für den $1s^2 2s^2 \ ^1S_0 - 1s^2 2s 2p \ ^1P_1$ Übergang, dargestellt in Abb. 6.3 (a), findet sich eine gute Übereinstimmung mit den drei Messungen, welche unter Verwendung eines Tokamaks

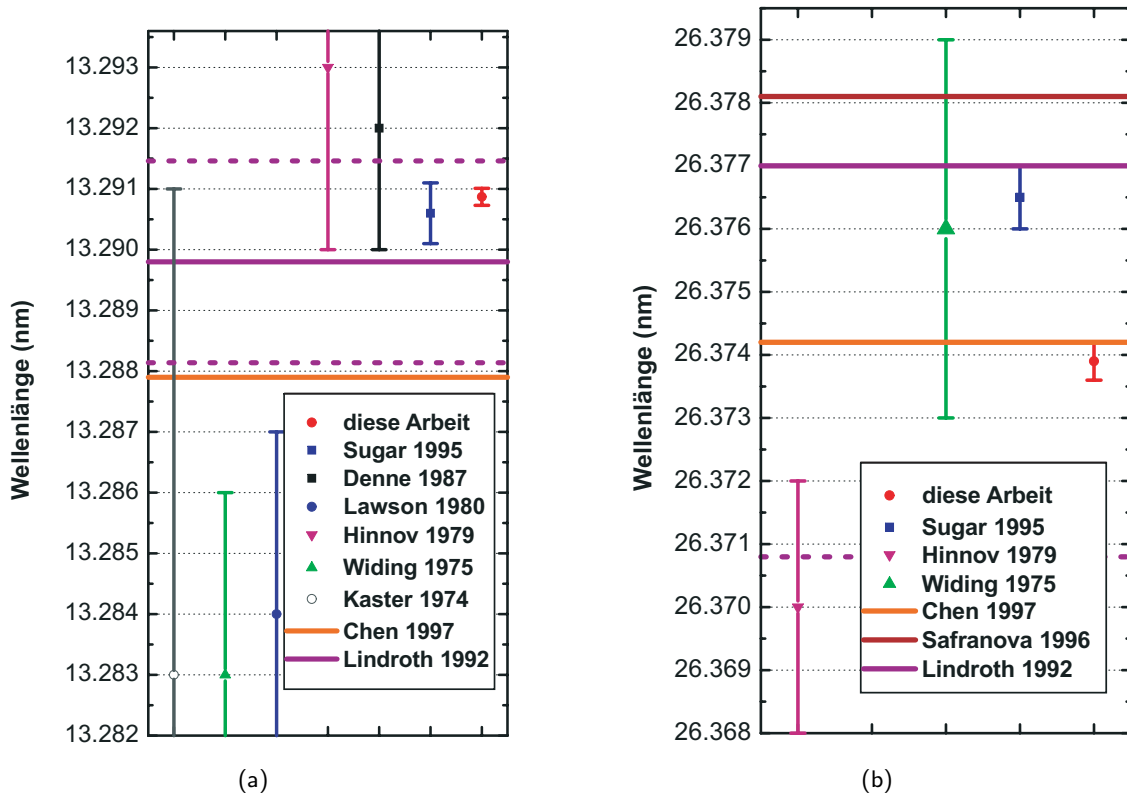


Abbildung 6.3: Vergleich der gemessenen Übergänge des Be-artigen Eisens mit experimentellen (Datenpunkte) und theoretischen (Linien) Literaturwerten. Die gestrichelten Linien (lila) geben das Fehlerintervall der Berechnungen nach Lindroth (lila) an. (a) $1s^2 2s^2 \ ^1S_0 - 1s^2 2s 2p \ ^1P_1$ entsprechend Tab. 6.2 (a) und (b) $1s^2 2s^2 \ ^1S_0 - 1s^2 2s 2p \ ^3P_1$ entsprechend Tab. 6.2 (b).

6.3. Konventionelle Spektroskopie des Be-artigen Eisens

durchgeführt wurden (Tab. 6.2). Insbesondere bestätigt der an der EBIT gemessene Wert das bislang präziseste, in der NIST-Datenbank [96] geführte Ergebnis von Sugar *et al.*, welches zu (13.2906 ± 0.0005) nm mit einer Genauigkeit von 38 ppm angegeben wird. Allerdings weist der in dieser Arbeit bestimmte Wert mit 11 ppm einen drei mal kleineren Fehler auf. Ältere Messungen, welche auf der spektralen Untersuchung von Sonneneruptionen bzw. Laserplasmen fußen, liegen im Widerspruch zur vorliegenden Messung bzw. lassen aufgrund der großen Messunsicherheit keine verlässliche Aussage zu.

Ein Vergleich der gemessenen Übergangsenergie mit theoretischen Vorhersagen ist schwierig, erreicht der gemessene Wert doch eine Präzision, bei der eine rigorose Betrachtung der QED-Effekte unbedingt notwendig wäre. Der von Chen *et al.* mit Hilfe der relativistischen *Configuration Interaction* (CI) Methode unter Einbeziehung von QED- und Massenpolarisationskorrekturen berechnete Wert (Abb. 6.3 (a), orange) berücksichtigt die gegebenen QED-Effekte jedoch nicht in der erforderlichen Tiefe. So werden beispielsweise die QED-

(a)

| Referenz | λ (nm) | $\Delta\lambda$ | $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$ (ppm) | Methode [†] |
|---------------------------------------|-----------------|-----------------|---------------------------------------|----------------------|
| Kastner <i>et al.</i> 1974 [187] | 13.283 | 0.008 | 600 | Sonneneruption |
| Widing <i>et al.</i> 1975 [188] | 13.283 | 0.003 | 225 | Sonneneruption |
| Lawson <i>et al.</i> 1980 [183] | 13.284 | 0.003 | 225 | Laserplasma |
| Hinnov <i>et al.</i> 1979 [186] | 13.293 | 0.003 | 225 | Tokamak |
| Denne <i>et al.</i> 1987 [189] | 13.292 | 0.002 | 150 | Tokamak |
| Sugar <i>et al.</i> 1995 [190] (NIST) | 13.2906 | 0.0005 | 38 | Tokamak |
| diese Arbeit | 13.29087 | 0.00014 | 11 | EBIT |
| Chen <i>et al.</i> 1997 [191] | 13.2879 | — | — | Theorie(CI) |
| Lindroth <i>et al.</i> 1992 [93] | 13.2898 | 0.0015 | 110 | Theorie(All-order) |

(b)

| Referenz | λ (nm) | $\Delta\lambda$ | $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$ (ppm) | Methode [†] |
|---------------------------------------|----------------|-----------------|---------------------------------------|----------------------|
| Widing <i>et al.</i> 1975 [188] | 26.376 | 0.003 | 115 | Sonneneruption |
| Hinnov <i>et al.</i> 1979 [186] | 26.370 | 0.002 | 170 | Tokamak |
| Sugar <i>et al.</i> 1995 [190] (NIST) | 26.3765 | 0.0005 | 19 | Tokamak |
| diese Arbeit | 26.3739 | 0.0003 | 11 | EBIT |
| Chen <i>et al.</i> [191] 1997 | 26.3742 | — | — | Theorie(CI) |
| Safranova <i>et al.</i> 1996 [94] | 26.3781 | — | — | Theorie(MBPT) |
| Lindroth <i>et al.</i> 1992 [93] | 26.377 | 0.006 | 230 | Theorie(All-order) |

Tabelle 6.2: Übersicht der in Abb. 6.3 dargestellten Daten. Die zweite Spalte gibt die Wellenlänge λ des Übergangs, die dritte die absolute Unsicherheit $\Delta\lambda$, die vierte die relative Genauigkeit $\Delta\lambda/\lambda$ und die letzte Spalte das Verfahren wie der Wert gewonnen wurde an. (a) $1s^22s^2\ ^1S_0-1s^22s2p\ ^1P_1$ und (b) $1s^22s^2\ ^1S_0-1s^22s2p\ ^3P_1$. [†]Sonneneruption: spektrale Untersuchungen von Sonneneruptionen; Laserplasma: Spektroskopie von durch gepulste hochenergetische Laser erzeugter Plasmen; Tokamak: Spektroskopie von Plasmen in einem Tokamak; EBIT: Spektroskopie in einer EBIT; Theorie: theoretische Berechnung.

Beiträge des gesamten Be-artigen Elektronensystems nur aus den Korrekturen der jeweiligen Einzelelektronen summiert. Dies vernachlässigt aber Beiträge aus der Korrelation der Elektronen untereinander. Lindroth *et al.* berücksichtigen bei ihrem All-Order-Ansatz (Abb. 6.3 (a), lila) die Abschirmung der QED-Korrekturen nur approximativ und schätzt diese anhand der für Li-artige Systeme vorhergesagten ab, woraus sich die dominierende Unsicherheit dieses Ergebnisses ergibt. Nichtsdestoweniger lässt sich feststellen, dass der von Lindroth *et al.* vorhergesagte Wert insgesamt eine bessere Übereinstimmung mit den diversen experimentellen Werten aufweist und überdies innerhalb der angegebenen Unsicherheiten (lila, gestrichelt) sehr gut mit den beiden genauesten Messungen von Sugar *et al.* und dieser Arbeit übereinstimmt.

Bezüglich des $1s^2 2s^2 \ ^1S_0 - 1s^2 2s 2p \ ^3P_1$ Übergangs (Abb. 6.3 (b), Tab. 6.2 (b)) ergibt sich eine deutliche Diskrepanz zwischen dem gemessenen Wert und dem ebenfalls durch Sugar *et al.* publizierten NIST-Standardwert von (26.3765 ± 0.0005) nm. Bei einem relativen Fehler von 11 ppm in dieser Arbeit und 19 ppm berichteter Präzision des NIST-Wertes, liegen diese etwa 10 Standardabweichungen² auseinander³. Die beiden älteren Messungen von Widing *et al.* und Hinnov *et al.* zeigen deutlich größere Unsicherheiten. Während Widings Resultat auf Grund der großen Fehler sowohl mit Sugar *et al.*, als auch mit dem hier vorgestellten Resultat übereinstimmt, liegt Hinnovs Wert außerhalb des Fehlerbereichs bei kürzeren Wellenlängen, allerdings deutlich näher bei dem an der EBIT gemessenen Wert. Eine Erklärung für die Diskrepanz des hier vorgelegten genauen Resultats zu dem von Sugar *et al.* steht aus. Diese Diskrepanz ist insbesondere überraschend, da dieser Übergang aus dem Triplett mit etwa 26.374 nm Wellenlänge in den Spektren sehr nahe an der zweiten Ordnung des zuvor diskutierten Singulett-Zustands bei etwa 26.582 nm liegt und letzterer sehr gut mit dem Wert von Sugar *et al.* übereinstimmt. Eine solche Diskrepanz wäre durch einen unbekanntes *Blend* der Triplett-Linie denkbar. Eine unabhängige experimentelle Bestätigung wäre hier wünschenswert.

Der berechnete Wert von Lindroth *et al.* stimmt innerhalb der theoretischen Unsicherheiten sowohl mit dem dieser Arbeit als auch mit dem von Sugar *et al.* überein. Allerdings gilt es festzustellen, dass auf Grund der kleineren Übergangsenergie dieses Übergangs die energetische Unsicherheit sich in einer ± 0.006 nm Unbestimmtheit der Wellenlänge ausdrückt. Obwohl Chen *et al.* keine Unsicherheit angibt, sollte diese grob von gleicher Größenordnung wie im Falle von Lindroth *et al.* sein, so dass die bessere Übereinstimmung des Wertes von Chen mit dem dieser Messung mehr zufallsbedingt erscheint. Insgesamt wäre es wünschenswert, wenn in naher Zukunft die Rechnungen in Be-artigen Ionen unter anderem durch Einbeziehung einer rigorosen QED-Betrachtung der Elektronenkorrelation auf das Niveau derer in Li-artigen Systeme gebracht werden könnten.

²Bezogen auf den statistischen Fehler des Wertes dieser Arbeit von ± 0.0002 nm.

³Bis erreichen des 1σ -Bereichs (Fehlerbalken) des NIST-Wertes.

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

Das Ziel dieser Arbeit war die erstmalige Anwendung laserspektroskopischer Methoden bei der Vermessung eines atomaren Ein-Elektronenübergangs in einem Bereich jenseits von 21 eV Photonenenergie. Als Untersuchungsgegenstand wurde der im Li-artigen Fe^{23+} vorkommende Übergang $1s^2 2s^2 S_{1/2} - 1s^2 2p^2 P_{1/2}$ bei etwa 48.6 eV gewählt, der auf Grund seiner hohen, QED-bedingten Beiträge zur Übergangsenergie von ungefähr 1% als einer der aussichtsreichsten Kandidaten angesehen wird, QED in starken Feldern kritischen experimentellen Tests zu unterziehen [52]. Daher zählt dieser Übergang zu den am genauesten gemessenen wie berechneten in diesem Wellenlängenbereich.

Um dieses Experiment durchführen zu können, war der Einsatz neuer Technologien nötig. Zum einen stand mit der Inbetriebnahme von FLASH (Freie-Elektronen-Laser in Hamburg) erstmals eine neuartige, hoch brillante und kohärente Strahlungsquelle in dem benötigten Spektralbereich zur Verfügung, die es prinzipiell ermöglichen sollte, diesen Übergang resonant anzuregen. Zum anderen wurde für die Bereitstellung des Fe^{23+} Iontargets eine in dieser Arbeit konzipierte, aufgebaute und schließlich erfolgreich eingesetzte neuartige EBIT, die Tesla-EBIT, eingesetzt. Diese Maschine sollte dabei nicht nur ganz allgemein die hohen Leistungsanforderungen einer EBIT erfüllen, sondern insbesondere auch an die spezifischen Anforderungen beim Einsatz an der neuen Lichtquelle angepasst sein, sowie darüber hinaus kompakt und transportabel ausgeführt werden, so dass mit dieser Apparatur Experimente an externen Forschungsanlagen möglich sind. Das Design wurde dabei hauptsächlich auf die Durchführung von Laserspektroskopie an hochgeladenen Ionen ausgelegt. Nach dem erfolgreichen Aufbau dieser Maschine wurde selbige am FLASH in Hamburg eingesetzt. Als das Hauptergebnis dieser Arbeit konnte dort erstmalig resonante Laserspektroskopie, die im optischen so vielfältig und erfolgreich eingesetzte präziseste bekannte Spektroskopietechnik, im weichen Röntgenbereich durch die Vermessung des obigen Übergangs demonstriert werden. Die Konsequenzen dieser Pionierarbeit sind vielfältig, wie in der entsprechenden Veröffentlichung zu dieser Arbeit [36] ausgeführt wird. Durch Kombination beider Technologien war es möglich, die $1s^2 2s^2 S_{1/2} - 1s^2 2p^2 P_{1/2}$ Aufspaltung in Fe^{23+} mit einer Genauigkeit von 22 ppm zu bestimmen. Innerhalb von nur einer halben Stunde effektiver Messzeit konnte so ein Ergebnis für die Übergangsenergie

von $E_0 = (48.6127 \pm 0.0011_{\text{stat.}})$ eV erreicht werden, welches bereits die Genauigkeit der besten je durchgeführten konventionellen Messungen¹ an hochgeladenen Ionen erreicht, bzw. meist übertrifft und überdies genauer als die derzeitigen theoretischen Vorhersagen [85] ist. Auf Grund einer momentan noch vorhandenen systematischen Kalibrationsunsicherheit des Monochromators am FLASH konnte zwar kein belastbarer unabhängiger Beitrag zur Atomstrukturphysik geleistet werden, aber dennoch der Weg zur resonanten Laserspektroskopie an hochgeladenen Ionen in einem Energiebereich geebnet werden, in dem Dipolübergänge in HCIs bevorzugt liegen — dem Röntgenbereich. Mit etwa 48.6 eV Übergangsenergie wurde bei dieser Messung der bei weitem energiereichste, je durch resonante Laserspektroskopie untersuchte Elektronenübergang in einem Ion oder Atom vermessen.

Über die Laserspektroskopie hinaus konnten im Rahmen der an der aufgebauten EBIT vorgenommenen konventionellen Gitterspektroskopie im weichen Röntgenbereich von Be wie auch Li-artigen Eisenionen hoch präzise Resultate für einige physikalisch interessante Übergänge erzielt werden. So wurde die Wellenlänge des $1s^2 2s^2 \ ^1S_0 - 1s^2 2s 2p \ ^1P_1$ Übergangs in Be-artigen Eisen mit einer Genauigkeit von 11 ppm zu (13.29087 ± 0.00014) nm bestimmt und liegt damit in sehr guter Übereinstimmung mit dem bisherigen Referenzwert [96, 169] von (13.29060 ± 0.00050) nm, welcher mit einer Genauigkeit von 38 ppm allerdings einen drei mal größeren Fehler aufweist. Der Vergleich des in dieser Arbeit sehr präzise vermessenen Wertes mit theoretischen Vorhersagen gestaltet sich derzeit schwierig, da hier von theoretischer Seite für die Be-artigen Systeme Rechnungen, die in rigoroser Weise die QED-Effekte mit einbeziehen, wie sie beispielsweise für Li-artige Systeme bereits vorliegen, noch fehlen. Die experimentell erreichte Genauigkeit liegt weit über derjenigen, die zurzeit theoretisch erreicht werden kann, was durchaus Anlass gibt, die Rechenmethoden der Theorie hier zu verfeinern. Allgemein ist die verbesserte Präzision hinsichtlich der Energie dieses Übergangs sowohl für die Analyse und Modellierung astrophysikalischer Plasmen [4, 193], als auch solcher in Fusionsreaktoren [189] von Bedeutung.

Hauptaugenmerk lag bei der Gitterspektroskopie von hochgeladenem Eisen ebenfalls auf den in der Literatur [194] sowohl theoretisch als auch experimentell intensiv behandelten Li-artigen Übergängen $1s^2 2s \ ^2S_{1/2} - 1s^2 2p \ ^2P_{1/2}$ und $1s^2 2s \ ^2S_{1/2} - 1s^2 2p \ ^2P_{3/2}$ aus dem Grundzustand. Der wegen seiner höheren QED-Anteile interessantere $2 \ ^2S_{1/2} - 2 \ ^2P_{1/2}$ Übergang wurde mit einer bisher unerreichten Genauigkeit von 8 ppm zu (25.5118 ± 0.0002) nm bestimmt. Auch in diesem Fall ist gute Übereinstimmung mit den berichteten Referenzwerten gegeben [96, 169]. Bei einer Genauigkeit von 8 ppm bzw. 0.0004 eV (bei 48.6 eV Übergangsenergie) lassen sich bereits Korrekturen der Abschirmung von Vakuumpolarisation und Selbstenergie in dritter Ordnung ($\mathcal{O}(\alpha^3)$) der Feinstrukturkonstanten auf einem 10% Fehlerniveau erschließen. Effekte der Drei- und Mehr-Photonen Inter-Elektron-Wechselwirkung sowie der reinen *two loop* QED-Beiträge liegen ebenfalls im Bereich der experimentellen Genauigkeit. Um diese Sensitivität wirklich nutzen zu können, bedarf es jedoch zunächst weiterer Anstrengungen von Seiten der Theorie, da vergleichs-

¹z. B. Laserplasma [183], Tokamakplasma [169], Speicherring [192], *Beam-Foil* [174] oder EBIT [178].

weise hohe Fehlerbeiträge im relativistischen Inter-Elektron-Rückstoßeﬀekt von 0.0020 eV derzeit einen aussagekräftigen Test obiger Beiträge nicht erlauben.

Von experimenteller Seite sollen die hier präsentierten Ergebnisse höchster Genauigkeit in Zukunft weiter verbessert werden und zwar auf konventionellem wie auch auf laserspektroskopischem Wege. Hierzu befindet sich zur Zeit ein neues Spektrometer im Aufbau [195], welches mit einer relativen Auflösung (FWHM) von weniger als 1000 ppm die bisher erreichte Genauigkeit verdoppeln sollte. Bei einer relativen Auflösung des hier eingesetzten Spektrometers von 2000 ppm wurde der Linienschwerpunkt insgesamt auf 8 ppm Genauigkeit bestimmt. Dazu war es notwendig, eine umfassende Betrachtung der Beimischungen anderer Spektrallinien (*Blends*) zu den zu vermessenden Linien in den Spektren durchzuführen. Eine Verdopplung der Auflösung würde den „unbekannten“ Bereich innerhalb der Spektrallinien halbieren, der trotz aller Sorgfalt in der vorliegenden Betrachtung noch als eine mögliche Quelle unbekannter systematischer Fehler angesehen werden muss.

Obwohl das mittels konventioneller Spektroskopie in dieser Arbeit erzielte Ergebnis noch um einen Faktor drei genauer ist als das durch Laserspektroskopie gewonnene, ist bei letzterem der Vorteil auf Grund der resonanten Anregung enorm. Das Auflösungsvermögen von bis zu 10 ppm (FWHM) der bei dieser Art der Laserspektroskopie einsetzbaren Monochromatoren kann durch ein Spektrometer, wie es bei der konventionellen Spektroskopie eingesetzt wurde, unter realistischen Bedingungen niemals erreicht werden. Die bei diesem Experiment — bei noch nicht optimalen Betriebsbedingungen von FLASH — zur Vermeidung allzu großer Photonenflussverluste zunächst noch moderat gewählte Auflösung des Monochromators von etwa 600 ppm, welche zu einer Genauigkeit von 22 ppm in der Bestimmung der Übergangsenergie führte, lässt bei möglichen 30 ppm Auflösung² (FWHM) erwarten, dass mittelfristig eine Steigerung der Genauigkeit von einer bis drei Größenordnungen für die Bestimmung der Energie solcher Übergänge in hochgeladenen Ionen erreichbar sein wird. Zusätzlich muss allerdings auch die absolute Wellenlängen-Kalibration des Monochromators deutlich verbessert werden. Letztendlich wird dies vermutlich nur mit Hilfe der EBIT selbst ausreichend genau möglich sein. Hierfür sollen in Zukunft theoretisch hoch genau bekannte Übergänge $2s-3p$, $4p$, $5p\dots$ des metastabilen $2S$ -Zustands leichter (B, C, N) H-artiger Ionen ausgenutzt werden. Diese Ionen werden in der EBIT sehr eﬃzient erzeugt, so dass dann der Monochromator mittels resonanter Laserspektroskopie der entsprechenden Übergänge kalibriert werden kann. Unter Anbetracht der Tatsache, dass gut handhabbare, präzise Wellenlängenstandards im Röntgenbereich weitgehend fehlen, wird davon ausgegangen, dass diese Methode langfristig genutzt werden wird, um einerseits einen Frequenzstandard zu deﬁnieren und andererseits als optimale Möglichkeit hochauﬂösende Monochromatoren an FEL- oder Synchrotron-Anlagen zu kalibrieren. Diese weisen zwar häufig eine sehr hohe relative Auflösung (FWHM) auf, doch die Unsicherheit in der absoluten Wellenlängezeichnung über Absorptionskanten [196] er-

²Mit dem FLASH-Monochromator.

reicht in der Regel bei weitem nicht das Niveau der relativen Auflösung. Somit könnte eine Vielzahl typischer Experimente an solchen Anlagen in Zukunft auf eine akkurate Wellenlängeneichung zurückgreifen.

Eine weitere Steigerung der Energieschärfe und insbesondere der Brillianz des Röntgen-FELs wird die Anwendung der so genannten *Seeding*-Technik bringen, die durch das gezielte Einsetzen des Verstärkungsprozesses im FEL bei einer vorgegebenen Wellenlänge eines im Undulator überlagerten „Seed-Lichtstrahls“ erreicht wird, wodurch sowohl die intrinsische spektrale Breite als auch insbesondere das Fluktuieren der Wellenlänge im ansonsten chaotisch beeinflussten Entstehungsprozess der FEL-Strahlung erheblich reduziert wird. Der Seed-Lichtstrahl kann dabei entweder ein monochromatisierter Anteil der FEL-Strahlung sein, der dann in den Undulator eingefüttert wird, oder aber hohe harmonische Strahlung eines sichtbaren, konventionellen Lasers. In letzterem Fall kann man, wie durch Udem [197] angeregt, durch mögliche Übertragung der Frequenzkamm-Technik in den weichen Röntgenbereich hoffen, ultimative Präzision zu erreichen.

Ein weiterer deutlicher Vorteil der viel höheren Auflösung (FWHM) der geschilderten Laserspektroskopie ergibt sich durch das erleichterte Trennen von *Blends* zu einer Spektrallinie. Hinzu kommt in diesem Fall, dass *Blends* nur dann entstehen können, wenn es neben dem zu messenden Übergang einen weiteren Grundzustandsübergang bzw. einen Übergang aus einem langlebigen metastabilen Zustand heraus gibt, der innerhalb der gewählten Auflösung mit Letzterem übereinstimmt. Dies bedeutet mit anderen Worten insbesondere, dass Übergänge, die Teil einer Kaskade nach einer Anregung sind, zwar die konventionelle Spektroskopie durch *Blends* beeinflussen können, jedoch nicht die resonante Laserspektroskopie.

Das kurzfristige nächste Ziel wird eine sorgfältige absolute Kalibration des Monochromators mittels Laserspektroskopie H-artiger Ionen sein. Mit der so erreichten Verbesserung der Genauigkeit sollen dann zunächst modellabhängige Kern- und Polarisierungseffekte anhand der Vermessung verschiedener Isotope Li- und Be-artiger Ionen untersucht werden, die momentan eine weitere Steigerung der Genauigkeit von Tests der „reinen“ QED nicht nur in hochgeladenen Ionen, sondern auch im Wasserstoff verhindern. So werden Untersuchungen an Isotopenketten helfen, einen der Hauptfehlerbeiträge aktueller Rechnungen systematisch unter Kontrolle zu bringen. Die Spezifikationen von FLASH erlauben es zudem, einen weiten Abschnitt der Li-artigen isoelektronischen Sequenz laserspektroskopisch zu untersuchen und damit die *Z*-Abhängigkeit der QED-Beiträge höherer Ordnung in starken Feldern zu bestimmen.

Das in dieser Arbeit erstmalig vorgestellte Konzept, die Wechselwirkung hochgeladener Ionen in einer Falle mit hochenergetischem, neuartigem FEL-Licht zu untersuchen — hier demonstriert anhand der Laserspektroskopie von HCI im weichen Röntgenbereich — ebnet den Weg für eine ganze Reihe weiterer grundlegender Experimente zur Photon-Ion-Wechselwirkung, für die bis dato keine oder nur wenige Daten vorliegen, wie z.B.:

-
- Laserspektroskopische Experimente zur Photoionisation von leichten hochgeladenen Ionen [198], welche eine absolute Bestimmung der Bindungsenergie ermöglichen werden. Der Nachweis einer solchen Ionisation kann äußerst untergrundfrei durch Extraktion der Ionen aus der EBIT und anschließender magnetischer Analyse des Ladungszustands durchgeführt werden.
 - Die durch Extraktion von Ionen aus der EBIT und Kreuzen dieses Ionenstrahls mit dem FEL-Licht in einem Reaktionsmikroskop [148,199] voraussichtlich erstmals ermöglichte differentielle Untersuchung der Ionisation von Ionen über den winkel- und energieaufgelösten Nachweis der Photoelektronen. Diese Ionisationswirkungsquerschnitte sind für die Theorie astrophysikalischer Plasmen von grundlegender Bedeutung [4,28,200].
 - Die Durchführung von Absorptionsmessungen an hochgeladenen Ionen, welche sich in astrophysikalischen Plasmen wiederfinden und durch die EBIT im Labor erzeugt werden können. Diese Messungen sind von großer Wichtigkeit für die Interpretation der von Röntgen-Satelliten aufgenommenen Spektren astronomischer Objekte.
 - Die Beobachtung von Multi-Photon-Absorption und so die eventuelle Bevölkung von Zuständen mit hohen Drehimpulsen, welche auf Grund der hohen Spitzenleistung der FEL-Pulse möglich sein sollte.
 - Die gezielte, resonante Anregung innerer Elektronen auf unbesetzte äußere Schalen in Ionen mittlerer Ladungszustände, welche neue Einblicke in Elektronen-Korrelationseffekte geben kann.
 - Lebensdauermessungen [201–203] von angeregten hochgeladenen Ionen mit einer Auflösung von wenigen Femtosekunden, welche in den Bereich des Möglichen zu rücken scheinen. Durch die hohe Sensitivität der Lebensdauer auf Details der involvierten Wellenfunktionen liefern solche Untersuchungen, die es im Femtosekundenbereich an HCI bisher kaum gibt [105], komplementäre Information zur Struktur von Ionen im Vergleich zu Übergangsenergiemessungen.

Mit Inbetriebnahme der im Bau befindlichen Röntgen-FELs, wie XFEL in Hamburg und LCLS in Stanford, wird die direkte resonante Fluoreszenzspektroskopie im keV Energiebereich an hochgeladenen Ionen mittels der vorgestellten Technik in wenigen Jahren möglich sein. Das enorme Leistungspotential wird sich so auch auf Übergänge im Sub-Ångström Bereich ausweiten, womit laserspektroskopische Messungen der $1S$ Lamb-*Shift* in schweren H-artigen Ionen möglich werden. Die Lamb-*Shift* in H-artigem Uran ist derzeit mit 4.6 eV Genauigkeit [50] gemessen; die QED-Korrekturen in zweiter Ordnung von α werden jedoch mit 1 eV angenommen und liegen so noch außerhalb der Messgenauigkeit. Diesbezüglich wäre mit der resonanten Laserspektroskopie ein beachtlicher Fortschritt möglich.

Literaturverzeichnis

- [1] T. T. Fang, C. R. Canizares, *Astrophys. J.* **539**, 532 (2000).
- [2] P. Swings, *Scientia* **65**, 72 (1939).
- [3] B. Edlén, *Z. Astrophys.* **22**, 30 (1943).
- [4] D. G. Hummer *et al.*, *Astro. Astrophys.* **279**, 298 (1993).
- [5] E. Anders, N. Grevesse, *Geochim. Cosmochim. Acta* **53**, 197 (1989).
- [6] J. D. Gillaspy, *J. Phys. B* **34**, R93 (2001).
- [7] M. Koenig *et al.*, *Plasma Phys. Control. Fusion* **47**, B441 (2005).
- [8] H. F. Beyer, H.-J. Kluge, V. P. Shevelko, *X-Ray Radiation of Highly Charged Ions*, Springer Series on Atoms and Plasmas (Springer, Heidelberg, 1997).
- [9] I. Bednyakov, L. Labzowsky, G. Plunien, G. Soff, V. Karasiev, *Phys. Rev. A* **61**, 012103 (2000).
- [10] P. J. Mohr, B. N. Taylor, *Rev. Mod. Phys.* **293**, 227 (1998).
- [11] O. Y. Andreev, L. N. Labzowsky, G. Plunien, G. Soff, *Phys. Rev. Lett* **94**, 243002 (2005).
- [12] S. Schiller, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 180801 (2007).
- [13] P. J. Mohr, G. Plunien, G. Soff, *Phys. Rep.* **293**, 227 (1998).
- [14] W. E. Lamb, R. C. Retherford, *Phys. Rev.* **72**, 241 (1947).
- [15] H. A. Bethe, *Phys. Rev.* **72**, 339 (1947).
- [16] S. S. Schweber, *QED and the Men Who Made It: Dyson, Feynman, Schwinger, and Tomonaga* (Princeton Univ. Press, 1994).
- [17] W. J. Marciano, *J. Phys. G* **29**, 225 (2003).
- [18] M. Niering *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5496 (2000).

- [19] U. D. Jentschura, S. Kotochigova, E.-O. L. Bigot, P. J. Mohr, B. N. Taylor, *Phys. Rev. Lett* **95**, 163003 (2005).
- [20] L. Labzowsky, G. Plunien, V. Shabaev, *Physica Scripta* **73**, C119 (2006).
- [21] W. Demtröder, *Laser Spectroscopy* (Springer, Heidelberg, 2003), 3. Aufl.
- [22] T. W. Hänsch, H. Walther, *Rev. Mod. Phys.* **71**, S242 (1999).
- [23] K. Hosaka *et al.*, *Phys. Rev. A* **69**, 011802 (2004).
- [24] P. Seelig *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4824 (1998).
- [25] K. S. E. Eikema *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1216 (1996).
- [26] I. Klaft *et al.*, *Phys. Rev. Lett* **73**, 2425 (1994).
- [27] I. Martinson, *Rep. Prog. Phys.* **52**, 157 (1989).
- [28] P. Beiersdorfer, *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* **41**, 343 (2003).
- [29] J. Braun, *Absolute Wellenlängenmessungen an elektronischen Übergängen in Heliumartigen Ionen*, Dissertation, Universität Heidelberg & Max-Planck-Institut für Kernphysik (2006).
- [30] R. C. Elton, *X-RAY LASERS* (Academic Press, Boston, 1990).
- [31] P. Salières, A. L’Huillier, P. Antoine, M. Lewenstein, *Adv. At. Mol. Phys.* **41**, 83 (1999).
- [32] J. M. J. Madey, *J. Appl. Phys.* **42**, 1906 (1971).
- [33] 1975: H.W. Kugel *et al.* [46], 1982: O. R. Wood *et al.* [43], P. Pellegrin *et al.* [47], 1984: H. D. Sträter *et al.* [204], 1991: T.P. Dinneen *et al.* [205], 1993: T. J. Scholl *et al.* [206], 1994: I. Klaft *et al.* [26], 1996: E.G. Myers *et al.* [207], 1998: P. Seelig *et al.* [24], 1999: E.G. Myers *et al.* [129], 2002: M. Redshaw *et al.* [208], 2004: K. Hosaka *et al.* [23].
- [34] 1975: T. W. Hänsch *et al.* [209], 1988: S. Chu *et al.* [210], 1993: K. S. E. Eikema *et al.* [25], 1998: S. D. Bergeson *et al.* [211], 2000: M. Niering *et al.* [18].
- [35] J. A. R. Samson, *Techniques of Vacuum Ultra Violet Spectroscopy* (Pied Publications, Lincoln, Nebraska, 1980), 2. Aufl.
- [36] S. W. Epp *et al.*, *Phys. Rev. Lett* **98**, 183001 (2007).
- [37] V. Ayvazyan *et al.*, *Eur. Phys. J. D* **37**, 297 (2006).
- [38] J. Arthur *et al.*, LCLS Conceptual Design Report SLAC-R-593 UC-414, *Tech. Rep.*, Stanford Linear Accelerator Center (2002).

- [39] E. L. Saldin, E. A. Schneidmiller, M. V. Yurkov, TESLA FEL Report No. 2004-02, *Tech. Rep.*, DESY, Hamburg (2004).
- [40] G. D. Sandlin, G. E. Brueckner, V. E. Scherrer, R. Tousey, *Astrophys. Jour.* **205**, L47 (1976).
- [41] S. R. Lundeen, F. M. Pipkin, *Phys. Rev. Lett* **46**, 232 (1981).
- [42] V. Zacek *et al.*, *Z. Phys. A* **318**, 7 (1984).
- [43] O. R. Wood *et al.*, *Phys. Rev. Lett* **48**, 398 (1982).
- [44] H. Gould, R. Marrus, *Phys. Rev. Lett* **41**, 1457 (1978).
- [45] E. W. Hagley, F. M. Pipkin, *Phys. Rev. Lett* **72**, 1172 (1994).
- [46] H. W. Kugel *et al.*, *Phys. Rev. Lett* **35**, 647 (1975).
- [47] P. Pellegrin, Y. El Masri, L. Palffy, R. Prieels, *Phys. Rev. Lett* **49**, 1762 (1982).
- [48] P. Dirac, *Proc. Roy. Soc.* **A117**, 610 (1928).
- [49] T. Stöhlker *et al.*, *Phys. Rev. Lett* **85**, 3109 (2000).
- [50] A. Gumberidze, *Phys. Rev. Lett* **94**, 223001 (2005).
- [51] P. Beiersdorfer, *Rad. Phys. Chem.* **75**, 1757 (2006).
- [52] V. M. Shabaev *et al.*, *Int. Jour. Mass. Spec.* **251**, 109 (2006).
- [53] C. T. Munger, H. Gould, *Phys. Rev. Lett* **57**, 2927 (1986).
- [54] A. N. Artemyev, V. Shabaev, V. Yerokhin, G. Plunien, G. Soff, *Phys. Rev. A* **71**, 062104 (2005).
- [55] E. Schroedinger, *Phys. Rev.* **28**, 1049 (1926).
- [56] A. Wachter, H. Hoerber, *Springer* **1998**.
- [57] H. Haken, C. Wolf, *The Physics of Atoms and Quanta* (Springer, 1996).
- [58] F. Schwabl, *Quantenmechanik* (Springer, 2005).
- [59] H. Friedrich, *Theoretische Atomphysik* (Springer, 1994), 2. Aufl.
- [60] J. Reinhardt, W. Greiner, *Rep. Prog. Phys.* **40**, 219 (1977).
- [61] E. A. Uehling, *Phys. Rev.* **48**, 55 (1935).
- [62] T. Beier *et al.*, *Phys. Lett.* **236**, 329 (1997).
- [63] P. J. Mohr, G. Soff, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 158 (1993).

- [64] P. J. Mohr, *Phys. Rev. A* **46**, 4421 (1992).
- [65] G. Soff, P. J. Mohr, *Phys. Rev. A* **38**, 5066 (1988).
- [66] H. Persson, I. Lindgren, S. Salomonson, P. Sunnergren, *Phys. Rev. A* **48**, 2772 (1993).
- [67] J. Schweppe *et al.*, *Phys. Rev. Lett* **66**, 1434 (1991).
- [68] V. A. Yerokhin, P. Indelicato, V. M. Shabaev, *J. Exp. Theo. Phys.* **101**, 280 (2005).
- [69] V. A. Yerokhin, P. Indelicato, V. M. Shabaev, *Phys. Rev. Lett* **97**, 253004 (2006).
- [70] V. A. Yerokhin, P. Indelicato, V. M. Shabaev, *Eur. Phys. J. D* **25**, 203 (2003).
- [71] T. Franosch, *Z. Phys. D* **18**, 219 (1991).
- [72] V. Shabaev, *J. Phys. B* **26**, 1103 (1993).
- [73] O. Y. Andreev, L. N. Labzowsky, G. Plunien, G. Soff, *Phys. Rev. A* **67**, 012503 (2003).
- [74] V. A. Yerokhin *et al.*, *Phys. Rev. A* **64**, 032109 (2001).
- [75] A. N. Artemyev, V. Shabaev, V. Yerokhin, *Phys. Rev. A* **52**, 1884 (1995).
- [76] G. Plunien, G. Soff, *Phys. Rev. A* **53**, 4614 (1996).
- [77] A. V. Nefiodov, L. N. Labzowsky, G. Plunien, G. Soff, *Phys. Lett. A* **222**, 227 (1996).
- [78] W. R. Johnson, S. A. Blundell, J. Sapirstein, *Phys. Rev. A* **37**, 2764 (1988).
- [79] P. Indelicato, J. P. Desclaux, *Phys. Rev. A* **42**, 5139 (1990).
- [80] O. Y. Andreev, L. N. Labzowsky, G. Plunien, G. Soff, *Phys. Rev. A* **64**, 042513 (2003).
- [81] V. A. Yerokhin *et al.*, *Phys. Rev. A* **64**, 032109 (2003).
- [82] J. Sapirstein, K. T. Cheng, *Phys. Rev. A* **64**, 022502 (2001).
- [83] A. N. Artemyev *et al.*, *Phys. Rev. A* **67**, 062506 (2003).
- [84] O. M. Zharebtsov, V. M. Shabaev, V. A. Yerokhin, *Phys. Lett. A* **277**, 227 (2000).
- [85] V. A. Yerokhin, A. N. Artemyev, V. M. Shabaev, *zu veröffentlichen* (2007).
- [86] A. N. Artemyev, V. M. Shabaev, V. A. Yerokhin, *Phys. Rev. A* **56**, 3529 (1997).
- [87] A. N. Artemyev, *et al.*, *Phys. Rev. A* **60**, 45 (1999).
- [88] V. A. Yerokhin, *et al.*, *Phys. Rev. A* **60**, 3522 (1999).

- [89] V. A. Yerokhin, A. N. Artemyev, V. M. Shabaev, G. Plunien, G. Soff, *Opt. Spectroscopy* **99**, 17 (2005).
- [90] V. A. Yerokhin, *private Kommunikation* (2007).
- [91] K. T. Cheng, C. F. Fischer, Y.-K. Kim, *J. Phys. B* **15**, 181 (1982).
- [92] A. Ynnerman, C. Froese Fischer, *Phys. Rev. A* **51**, 2020 (1995).
- [93] E. Lindroth, J. Hvarfner, *Phys. Rev. A* **45**, 2771 (1992).
- [94] M. S. Safronova, W. R. Johnson, U. I. Safranova, *Phys. Rev. A* **53**, 4036 (1996).
- [95] K. T. Cheng, Y.-K. Kim, *At. Data. Nucl. Data Tables* **24**, 111 (1979).
- [96] J. Reader *et al.*, Atomic spectra database (National Institute of Standards and Technologie).
- [97] E. D. Donets, V. I. Ilyushchenko, V. A. Alpert, *Proceedings of the first international conference on ion sources* (Saclay, Frankreich, 1969), p. 635.
- [98] M. A. Levine *et al.*, *Nucl. Instrum. Meth. B* **43**, 431 (1989).
- [99] B. E. O'Rourke, *Interactions between Electrons and Highly Charged Ions*, Dissertation, Queens University Belfast (2003).
- [100] P. K. Ghosh, *Ion Traps* (Oxford Science Publication, 1995).
- [101] R. E. Marrs, P. Beiersdorfer, D. Schneider, *Phys. Today* **47**, 27 (1994).
- [102] J. Gillaspy, *Trapping Highly Charged Ions: Fundamentals and Applications* (Nova Science, New York, 2001).
- [103] F. J. Currell, *The physics of Multiply and Highly Charged Ions* (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Boston, London, 2003).
- [104] F. Currell, *IEEE Transactions on Plasma Science* **33**, 1763 (2005).
- [105] P. Beiersdorfer, A. L. Osterheld, V. Decaux, K. Widmann, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 5353 (1996).
- [106] M. B. Shah, D. S. Elliott, H. B. Gilbody, *J. Phys. B* **20**, 3501 (1987).
- [107] W. R. Thompson, M. B. Shah, H. B. Gilbody, *J. Phys. B* **28**, 1321 (1995).
- [108] W. Lotz, *Z. Physik* **220**, 466 (1969).
- [109] K. L. Wong *et al.*, *Phys. Rev. A* **48**, 2850 (1993).
- [110] M. Uddin *et al.*, *Phys. Rev. A* **72**, 032715 (2005).

- [111] L. H. Andersen, J. Bolko, *J. Phys. B* **23**, 3167 (1990).
- [112] A. J. González Martínez, *Quantum interference in the dielectronic recombination of heavy highly charged ions*, Dissertation, Universität Heidelberg & Max-Planck-Institut für Kernphysik (2005).
- [113] V. I. Fisher *et al.*, *Phys. Rev. A* **56**, 3726 (1997).
- [114] V. I. Fisher *et al.*, *Phys. Rev. A* **55**, 329 (1997).
- [115] M. Kimura *et al.*, *J. Phys. B* **28**, L643 (1995).
- [116] B. M. Penetrante, J. N. Bradsley, D. DeWitt, M. Clark, D. Schneider, *Phys. Rev. A* **43**, 4861 (1991).
- [117] G. Zschornack, *Nucl. Instrum. Meth. B* **235**, 160 (2005).
- [118] T. Harada, K. Takahashi, H. Sakuma, A. Osyczka, *Appl. Opt.* **38**, 2743 (1999).
- [119] A. Lapierre *et al.*, *Rev. Sci. Instrum.* (eingereicht) (2007).
- [120] E. G. Loewen, E. Popov, *DIFFRACTION GRATINGS AND APPLICATIONS* (MARCEL DEKKER, New York, 1997).
- [121] J. R. Pierce, *J. Appl. Phys.* **11**, 548 (1940).
- [122] G. Herrmann, *J. Appl. Phys.* **29**, 127 (1958).
- [123] K. Hübner, *Einführung in die Plasmaphysik* (Wissenschaftliche Buchgesellschaft, Darmstadt, 1982).
- [124] R. E. Marrs, S. R. Elliott, D. A. Knapp, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 4082 (1994).
- [125] J. D. Gillaspay *et al.*, *Phys. Scr.* **T 59**, 392 (1995).
- [126] C. A. Morgan *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 1716 (1995).
- [127] H. Kuramoto *et al.*, *Rev. Sci. Instrum.* **71**, 687 (2000).
- [128] X. Zhu, *J. Phys. : Conf. Ser.* **2**, 65 (2004).
- [129] E. G. Myers *et al.*, *Phys. Rev. Lett* **82**, 4200 (1999).
- [130] C. Biedermann, A. Förster, G. Fussmann, R. Radtke, *Phys. Scr.* **T 73**, 360 (1997).
- [131] C. Coriss, J. Sugar, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **11**, 135 (1982).
- [132] A. Siegman, *LASERS* (University Science Books, 1986), 1. Aufl.
- [133] J. Li, *Anal. Chem.* **69**, 4452 (1997).

- [134] J. R. Taylor, *Fehleranalyse: eine Einführung in die Untersuchung von Unsicherheiten in physikalischen Messungen* (VCH, Weinheim, 1988).
- [135] G. Nürnberger, *Approximation by Spline Functions* (Springer, Heidelberg, 1989).
- [136] T. Shirai, J. Sugar, A. Musgrove, W. L. Wiese, *J. Phys. Chem. Ref. Data, Monograph No. 8* (J. Phys. Chem. Ref. Data, 2000).
- [137] R. Zurmühl, *Praktische Mathematik* (Springer, Heidelberg, 1965).
- [138] H. P. Wynn, *Biometrika* **71**, 375 (1984).
- [139] STUDENT, *Biometrika* **6**, 1 (1908).
- [140] DESY-TESLA-FEL-2002-01, SASE FEL at the TESLA Facility, Phase2, *Tech. Rep.*, DESY, Hamburg (2002).
- [141] J. J. Thomson, *Phil. Mag.* **44**, 293 (1897).
- [142] A. C. Thompson, D. Vaughan, *X-RAY DATA BOOKLET* (Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkely, California, 2001).
- [143] J. D. Jackson, *CLASSICAL ELECTRODYNAMICS* (Wiley, 1998), 3. Aufl.
- [144] K.-J. Kim, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **250**, 396 (2002).
- [145] K. Wille, *Physik der Teilchenbeschleuniger und Synchrotronstrahlungsquellen* (B. G. Teubner, 1996).
- [146] R. Treusch, private Kommunikation (2007).
- [147] H. N. Chapman *et al.*, *Nature Physics* **2**, 839 (2006).
- [148] R. Moshhammer *et al.*, *Phys. Rev. Lett* **98**, 203001 (2007).
- [149] E. L. Saldin, E. A. Schneidmiller, M. Yurkov, TESLA FEL 2004-06, *Tech. Rep.*, DESY, Hamburg (2004).
- [150] A. A. Michelson, E. W. Morley, *Am. J. Sci.* **134**, 333 (1887).
- [151] J. Feldhaus, E. L. Saldin, J. R. Schneider, E. A. Schneidmiller, M. V. Yurkov, *Opt. Commun.* **140**, 341 (1997).
- [152] S. Duesterer, *private Kommunikation* (2006).
- [153] M. Martins *et al.*, *Rev. Sci. Instrum.* **77**, 115108 (2006).
- [154] R. Follath, F. Senf, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **390**, 388 (1997).
- [155] M. Wellhöfer, M. Martins, W. Wurth, A. A. Sorokin, M. Richter, *zu veröffentlichen* (2007).

- [156] V. Mäckel, Spektroskopische Untersuchung dielektronischer Resonanzen von hochgeladenen Ionen, Diplomarbeit, Universität Heidelberg & Max-Planck-Institut für Kernphysik (2006).
- [157] Z. Hamann, *private Kommunikation* (2007).
- [158] P. Zeeman, *Phil. Mag.* **46**, 226 (1897).
- [159] T. Mayer-Kuckuck, *Atomphysik* (Teubner, 1994), 4. Aufl.
- [160] I. Sobelmann, *Atomic Spectra and Radiative Transitions* (Springer, Heidelberg, 1979).
- [161] R. Soria Orts, *Isotopic effect in B-like and Be-like argon ions*, Dissertation, Universität Frankfurt & Max-Planck-Institut für Kernphysik (2005).
- [162] W. Bothe, H. Geiger, *Zeitschrift für Physik* **36**, 174 (1924).
- [163] H. Kuramoto *et al.*, *Physica scripta* **T92**, 351 (2001).
- [164] O. Schwarzkopf, *private Kommunikation* (2007).
- [165] W. R. Johnson, D. R. Plante, J. Sapirstein, *Adv. At. Mol. Opt. Phys.* **35**, 255 (1995).
- [166] B. Edlén, *Phys. Scr.* **28** (1983).
- [167] J. Sugar, C. Corliss, *J. Phys. Chem. Ref. Data Suppl.* **14**, 2 (1985).
- [168] J. Sugar, V. Kaufman, W. L. Rowan, *J. Opt. Soc. Am. B* **9**, 344 (1992).
- [169] J. Reader, J. Sugar, N. Acquista, R. Bahr, *J. Opt. Soc. Am. B* **11**, 1930 (1994).
- [170] R. J. Knize, *Phys. Rev. A* **43**, 1637 (1991).
- [171] U. Staude *et al.*, *Phys. Rev. A* **58**, 3516 (1998).
- [172] S. Madzunkov, *et al.*, *Phys. Rev. A* **65**, 032505 (2002).
- [173] E. Hinnov *et al.*, *Phys. Rev. A* **40**, 4357 (1989).
- [174] P. Bosselmann *et al.*, *Phys. Rev. A* **59**, 1874 (1999).
- [175] D. Feili *et al.*, *Phys. Rev. A* **62**, 022501 (2000).
- [176] S. Martin *et al.*, *Europhys. Lett.* **10**, 645 (1989).
- [177] C. Brandau *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 073202 (2003).
- [178] P. Beiersdorfer, H. Chen, D. B. Thorn, E. Trabert, *Phys. Rev. Lett* **95**, 233003 (2005).
- [179] K. G. Widing, *Nucl. Instrum. Methods* **110**, 361 (1973).

- [180] K. G. Widing, J. Purcell, *Astrophys. J.* **204**, L151 (1976).
- [181] K. P. Dere, *Astrophys. J.* **221**, 1062 (1978).
- [182] G. D. Sandlin, G. E. Brueckner, V. E. Scherrer, R. Tousey, *Astrophys. J.* **205**, L47 (1976).
- [183] K. D. Lawson, N. Peacock, *J. Phys. B* **13**, 3313 (1980).
- [184] M. H. Chen, K. T. Cheng, W. R. Johnson, J. Sapirstein, *Phys. Rev. A* **52**, 266 (1995).
- [185] S. A. Blundell, *Phys. Rev. A* **47**, 1790 (1993).
- [186] E. Hinnov, *Astrophys. J.* **230**, L197 (1979).
- [187] S. O. Kastner, *Astrophys. J.* **191**, 261 (1974).
- [188] K. G. Widing, *Astrophys. J.* **197**, L33 (1975).
- [189] B. Denne, E. Hinnov, *Phys. Scr.* **35**, 811 (1987).
- [190] J. Sugar, W. L. Rowan, *J. Opt. Soc. Am. B* **12**, 1403 (1995).
- [191] M. H. Chen, K. T. Cheng, *Phys. Rev. A* **55**, 166 (1997).
- [192] C. Brandau *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 053201 (2002).
- [193] G. Del Zanna, M. C. Chidichimo, H. Mason, *A&A* **432**, 1137 (2005).
- [194] P. H. Mokler, *Rad. Phys. Chem.* **75**, 1730 (2006).
- [195] T. Baumann, *Titel unbekannt*, Diplomarbeit, Universität Heidelberg & Max-Planck-Institut für Kernphysik (2008).
- [196] Y. F. Song *et al.*, *Rev. Sci. Instrum.* **77**, 085102 (2006).
- [197] T. Udem, *Science* **307**, 364 (2005).
- [198] J. B. West, *J. Phys. B* **34**, R45 (2001).
- [199] J. Ullrich, *Rep. Prog. Phys.* **66**, 1463 (2003).
- [200] M. J. Seaton, *J. Phys. B.* **20**, 6363 (1987).
- [201] A. Lapierre *et al.*, *Phys. Rev. Lett* **73**, 052507 (2006).
- [202] G. Brenner, *Quantenelektrodynamische Einflüsse auf die Lebensdauer metastabiler Zustände*, Dissertation, Universität Heidelberg & Max-Planck-Institut für Kernphysik (2007).
- [203] G. Brenner, J. R. Crespo López-Urrutia, Z. Harman, P. H. Mokler, J. Ullrich, *Phys. Rev. A* **75**, 032504 (2007).

- [204] H. D. Sträter *et al.*, *Phys. Rev. A* **29**, 1596 (1984).
- [205] T. P. Dinneen, N. Berrah-Mansour, H. G. Berry, L. Young, R. C. Pardo, *Phys. Rev. Lett* **66**, 2859 (1991).
- [206] T. J. Scholl *et al.*, *Phys. Rev. Lett* **71**, 2188 (1993).
- [207] E. G. Myers, D. J. H. Howie, J. K. Thompson, J. D. Silver, *Phys. Rev. Lett* **76**, 4899 (1996).
- [208] M. Redshaw, E. G. Myers, *Phys. Rev. Lett* **88**, 023002 (2002).
- [209] T. W. Hänsch, S. A. Lee, R. Wallenwein, C. Wieman, *Phys. Rev. Lett* **34**, 307 (1975).
- [210] S. Chu *et al.*, *Phys. Rev. Lett* **60**, 101 (1988).
- [211] S. D. Bergeson *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3475 (1998).

Erklärung

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

Heidelberg, den 4. Juni 2007

Sascha W. Epp