

Inaugural - Dissertation

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

Vorgelegt von

Dipl.-Phys. René Friedrich Steinbrügge

aus Malsch

Tag der mündlichen Prüfung: 21.01.2015

**Bestimmung von absoluten
Auger- und radiativen Zerfallsraten
K-Schalen-angeregter hochgeladener
Eisenionen**

Gutachter: PD Dr. José R. Crespo López-Urrutia
PD Dr. Kai Schweda

Kurzzusammenfassung

Bestimmung von absoluten Auger- und radiativen Zerfallsraten K-Schalen-angeregter hochgeladener Eisenionen

Die Emissions- und Absorptionslinien von K-Schalen-Übergängen in hochgeladenen Eisenionen gehören zu den bedeutendsten Charakteristika in den Röntgenspektren vieler astronomischer Objekte. Sie werden verwendet, um Eigenschaften und Dynamik heißer astrophysikalischer Plasmen zu bestimmen, wozu eine genaue Kenntnis der Übergangsraten, und insbesondere des Verhältnisses von radiativem und autoionisierendem Zerfall, benötigt wird. Diese waren bisher jedoch nur aus theoretischen Berechnungen bekannt.

In der vorliegenden Arbeit wurden erstmals absolute Zerfallsraten von radiativen und autoionisierenden Übergängen in lithiumartigen, berylliumartigen und kohlenstoffartigen Eisenionen experimentell bestimmt. Dazu wurden die Ionen in einer Elektronenstrahlionenfalle erzeugt und durch Röntgenstrahlung des Synchrotrons PETRA III resonant angeregt. Durch Anwendung einer neu entwickelten Messmethode, bei der gleichzeitig der Auger- und der radiative Zerfall beobachtet wurden, konnten systematische Unsicherheiten stark reduziert werden, wodurch Genauigkeiten besser als 10 % erreicht wurden.

An absolute measurement of Auger and radiative rates in K-shell excited highly charged iron ions

The emission and absorption lines of K-shell transitions in highly charged iron ions are among the most prominent features in the x-ray spectra of many astronomical objects. They are used to determine the properties and dynamics of hot astrophysical plasmas. Therefore, accurate knowledge of transition rates, especially of the ratio of radiative and autoionizing decay, is required. Until now these were only known from theoretical calculations.

Within this thesis, absolute decay rates of radiative and autoionizing transitions in lithiumlike, berylliumlike and carbonlike iron ions are experimentally determined for the first time. For this purpose, ions were created in an electron beam ion trap and resonantly excited by x-rays from the PETRA III synchrotron. By applying a novel method of simultaneously detecting Auger and radiative decays, systematic uncertainties could be reduced, yielding an accuracy better than 10 %.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	11
2	Grundlagen	17
2.1	Atomstruktur	17
2.1.1	Ein-Elektron-Systeme	18
2.1.2	Mehr-Elektronen-Systeme	22
2.1.3	Hochgeladene Ionen	25
2.2	Elektronische Prozesse in hochgeladenen Ionen	25
2.2.1	Stöße mit Elektronen	27
2.2.2	Absorption von Photonen	29
2.2.3	Abregungsprozesse	30
2.2.4	Linienbreiten	33
2.2.5	Mehrstufige Prozesse	36
2.2.6	Einfluss der Polarisierung	38
2.3	Elektronenstrahlionenfallen	39
2.3.1	Funktionsprinzip einer EBIT	39
2.3.2	Eigenschaften des Elektronenstrahls	41
2.4	Synchrotronstrahlung	43
2.4.1	Abstrahlung beschleunigter Ladungen	43
2.4.2	Undulatoren	44
2.4.3	Charakterisierung von Strahlungsquellen	48
2.4.4	Röntgenstreuung an Kristallen	48
3	Aufbau des Experiments	51
3.1	Die FLASH-EBIT	51
3.1.1	Elektronenstrahl	52
3.1.2	Fallenregion	54
3.1.3	Injektion in die Falle	55
3.1.4	Photonendetektoren	55

3.2	Synchrotronstrahlungsquelle PETRA III	57
3.2.1	Speicherring	57
3.2.2	Strahlrohr P01	59
3.2.3	Überlapp zwischen Photonenstrahl und Ionenwolke	63
3.3	Nachweis der Photoionisation	65
3.3.1	Elektrostatischer Ablenker	68
3.3.2	Elektrostatische Linsen	68
3.3.3	Blenden	69
3.3.4	Wienfilter	69
3.3.5	Positionempfindlicher Detektor	70
3.3.6	Identifikation der Ionen	72
3.4	Datenaufnahme	73
4	Messung und Datenauswertung	77
4.1	Betriebsparameter	78
4.1.1	EBIT	78
4.1.2	Extraktion	81
4.2	Bestimmung der Zerfallsraten	84
4.2.1	Herleitung der absoluten Zerfallsraten	85
4.2.2	Einfluss von Messunsicherheiten	87
4.3	Photonenenergiescans	90
4.3.1	Normierung der Daten	90
4.3.2	Bestimmung von Linienstärke und Linienbreite	93
4.4	Einfluss verschiedener Zerfallskanäle	94
4.4.1	Änderung der Linienstärke	94
4.4.2	Änderung der Abstrahlcharakteristik	95
4.4.3	Messung der Verzweigungsverhältnisse	96
5	Ergebnisse	99
5.1	Lithiumartiges Fe^{23+}	99
5.1.1	Bestimmung der Zerfallsraten aus der Fluoreszenz	100
5.1.2	Bestimmung der Zerfallsraten mithilfe der Photoionisation	103
5.1.3	Kombination beider Methoden	105
5.1.4	Vergleich mit bisherigen experimentellen Daten	109
5.2	Berylliumartiges Fe^{22+}	110
5.2.1	Bestimmung der radiativen Verzweigungsverhältnisse	110
5.2.2	Bestimmung der Zerfallsraten	112
5.3	Kohlenstoffartiges Fe^{20+}	116

5.3.1	Bestimmung der radiativen Verzweungsverhältnisse	116
5.3.2	Bestimmung der Zerfallsraten	118
5.3.3	Ermittelte Zerfallsraten	119
5.4	Diskussion der Ergebnisse	121
5.4.1	Vergleich mit theoretischen Berechnungen	121
5.4.2	Zusammensetzung der Messunsicherheiten	122
6	Zusammenfassung	125
	Symbolverzeichnis	129
	Literaturverzeichnis	133

Kapitel 1

Einleitung

Die Beobachtung der Sterne fasziniert die Menschen bereits seit tausenden von Jahren. Neben dem praktischen Nutzen, wie zum Beispiel bei der Navigation auf See, beeinflussen die dabei gewonnenen Erkenntnisse auch stets die Vorstellung von der Rolle der Erde im Universum. So konnte *Johannes Kepler* aufgrund der genauen Beobachtungen *Tycho Brahes* zeigen, dass sich die Planeten – und auch die Erde – auf Ellipsenbahnen um die Sonne bewegen und somit die bis dahin anerkannte Theorie einer fixen Erde als Zentrum des Universums widerlegen [1]. Zudem gelang es *Isaac Newton* die Kepler'schen Bahnen auf das von ihm entdeckte Gravitationsgesetz zurückzuführen. Somit wurde erstmals die bis dahin rein empirische Betrachtung des Weltalls mit einer physikalischen Theorie verknüpft. Neben der Position der Sterne lässt sich auch das Spektrum des von ihnen ausgesandten Lichts untersuchen. Hierbei wurden erstmals 1802 von *William Hyde Wollaston* [2] und unabhängig davon 1814 von *Joseph Fraunhofer* dunkle Linien im Sonnenspektrum entdeckt [3], welche später nach letzterem benannt wurden. Eine Erklärung dieser Linien wurde jedoch erst 1860 durch die Experimente von *Gustav Robert Kirchhoff* und *Robert Bunsen* möglich. Sie erhitzen in ihrem Heidelberger Labor verschiedene Salze und stellten fest, dass jedes Element dabei Licht charakteristischer Wellenlängen emittiert. Ferner konnten sie zeigen, dass die erhitzten Dämpfe bei Beleuchtung ebendiese Wellenlängen auch absorbieren. Somit konnten sie aus den Fraunhoferlinien auf die in der Sonne vorkommenden Elemente schließen [4].

Mit seiner Arbeit legte Kirchhoff die Grundlagen für die Astrophysik. Die grundlegende Methode, die Beobachtung und Interpretation von Sternspektren, hat sich seitdem kaum geändert. Da das von den Sternen ausgestrahlte Licht oft die einzige die Erde erreichende Information ist, müssen alle physikalischen Eigenschaften hieraus abgeleitet werden. Jedoch wurden sowohl die Aufnahme der Spektren als auch die Modelle zu ihrer Interpretation ständig verbessert. So konnte durch die Verwendung von Photoplatten und später elektronischen Photosensoren die Empfindlichkeit der Aufnahmen drastisch erhöht werden.

Auch der beobachtete Wellenlängenbereich wurde erweitert, zunächst auf Radiowellen [5], mit dem Aufkommen der Raketentechnik konnten mit Messungen außerhalb der Erdatmosphäre auch Spektren im Infrarot-, Ultraviolett- und Röntgenbereich aufgenommen werden, was aufgrund der Absorption der Atmosphäre mit erdgebundenen Teleskopen nicht möglich ist. Die Deutung der Spektren wurde durch die Einführung der modernen Physik Anfang des letzten Jahrhunderts stark beeinflusst. Die Lösungen der allgemeinen Relativitätstheorie erlauben ein expandierendes Universum [6], welches durch Messungen von *Edwin Hubble* experimentell bestätigt wurde [7]. Diese Expansion verursacht eine Verschiebung der auf der Erde beobachteten Spektrallinien zu größeren Wellenlängen. Die Messung dieser Verschiebung ermöglicht eine Bestimmung der Zeit, die das Licht unterwegs war, und somit der Entfernung des beobachteten Objekts. Einen entscheidenden Schritt stellt die Entwicklung der Quantenmechanik dar. Mit der aus ihr resultierenden Beschreibung der Atomstruktur war es möglich die bisher rein empirisch beobachteten Spektrallinien auch theoretisch durch Übergänge zwischen verschiedenen Elektronenkonfigurationen zu beschreiben. Dies führte dazu, dass heute eine Vielzahl von Spektrallinien beobachtet und identifiziert werden kann, wodurch sich immer tiefere Einblicke in die beobachteten Objekte gewinnen lassen.

Ein besonderes Augenmerk liegt hierbei auf den Spektren von hochgeladenen Ionen. Dies sind Atome, denen im Vergleich zum neutralen Zustand ein große Anzahl an Elektronen fehlt. Erste Beobachtungen von hochgeladenen Ionen wurden Mitte der dreißiger Jahren an durch Funkenstrecken erzeugten Plasmen gemacht. Jedoch wurden diese nicht weiter verfolgt, da man nicht glaubte, dass es irgendwo sonst auf der Erde oder im All derartige Ionen gäbe [8]. Dies änderte sich jedoch durch die Entdeckungen von *Bengt Edlén*, der verschiedene Spektrallinien der Sonne als Übergänge in 9- bis 15-fach geladenem Kalzium, Eisen und Nickel identifizieren konnte [9]. Heutige Messungen legen nahe, dass ein Großteil der baryonischen Materie aus hochgeladenen Ionen besteht [10].

Die Bindungsenergien von hochgeladenen Ionen skalieren quadratisch mit der Kernladungszahl Z . Dies führt dazu, dass in sehr heißen Plasmen nur noch Ionen schwerer Elemente Elektronen besitzen, während die leichten Elemente vollständig ionisiert sind. Da zum Entstehen von Spektrallinien jedoch der Übergang eines Elektrons notwendig ist, sind diese schweren hochgeladenen Ionen oft die einzige Informationsquelle. Sie sind daher von besonderer Relevanz als Diagnoseinstrument in künstlich erzeugten Fusionsplasmen sowie bei der Untersuchung extraterrestrischer Plasmen.

In der Astrophysik ist dabei vor allem Eisen von Bedeutung, da es, als Endprodukt der Kernfusionsprozesse in Sternen, wesentlich häufiger vorkommt als andere schwere Elemente. Die durch $1s-2p$ -Übergänge entstehenden K_α -Linien von Eisen mit Energien zwischen 6,4 keV und 6,7 keV gehören daher im Röntgenbereich zu den markantesten Charakteristika aufgenommener Spektren. Sie wurden erstmals anhand von Messungen mit Detektoren an

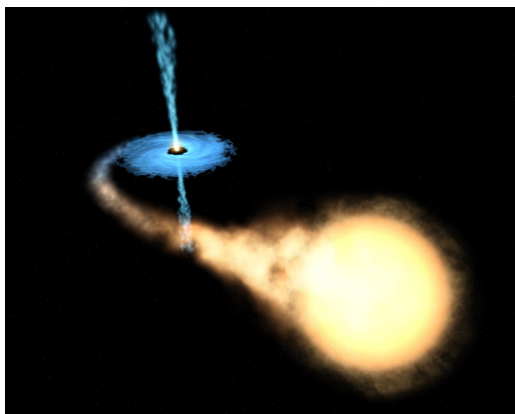


Abbildung 1.1: Künstlerische Darstellung eines Röntgendoppelsterns. Materie aus dem Stern im Vordergrund bildet eine Akkretionsscheibe um ein schwarzes Loch. Diese erhitzt sich dabei stark und sendet daher Röntgenstrahlung aus. Ein Teil der Materie wird in Jets mit relativistischen Geschwindigkeiten entlang der Rotationsachse wieder ausgestoßen. (Bild: NASA/ESA)

Bord ballistischer Raketen bei Supernova-Überresten nachgewiesen [11] und anschließend auch bei Röntgendoppelsternen [12, 13] und Galaxienhaufen [14].

In Röntgendoppelsternsystemen umkreisen sich ein sehr kompaktes Objekt, zum Beispiel ein Neutronenstern oder ein schwarzes Loch, und ein Stern, wobei der kompakte Partner ständig Materie von seinem Begleiter absaugt (Abbildung 1.1). Aufgrund der Drehimpulserhaltung stürzt die Materie nicht direkt auf das kompakte Objekt, sondern bildet eine Akkretionsscheibe um dieses. Durch die freigesetzte gravitative Energie erhitzt sich das Innere der Scheibe auf mehrere Millionen Kelvin, so dass sie Schwarzkörperstrahlung im Röntgenbereich aussendet. Teile der Materie werden entlang der Rotationsachse in stark kollimierten relativistischen Jets wieder ausgestoßen, wobei der diesem Phänomen zugrunde liegende Mechanismus noch nicht abschließend geklärt ist. Ähnlich aufgebaut, jedoch noch energiereicher, sind aktive galaktische Kerne (AGN, von engl. *active galactic nuclei*), die aus einem supermassiven schwarzen Loch bestehen, um das sich eine Akkretionsscheibe gebildet hat. Bei der Untersuchung dieser Objekte spielen die Eisen- K_α -Linien aus oben genannten Gründen eine wichtige Rolle [15–18]. Insbesondere seit dem Start der Weltraumröntgenteleskope *Chandra* und *XMM-Newton* konnten sie in einer Vielzahl von Quellen gemessen werden [19–22].

Die spektrale Auflösung der Teleskope ist jedoch bisher nicht ausreichend, um die Linien einzelner Übergänge zu trennen. Einzig für Sonneneruptionen gibt es eine derart genaue Messung [23]. Deshalb wird in den meisten Modellen lediglich „die“ K_α -Linie betrachtet oder nur eine Unterscheidung zwischen den energetisch weiter auseinander liegenden Linien von Fe^{24+} und Fe^{25+} getroffen. Jedoch gibt es bei einigen Beobachtungen Hinweise auf niedrigere Ladungszustände [19, 24–26]. Ein adäquates Modell erfordert also auch die Berücksichtigung von Übergängen in Ionen mit teilbesetzter L-Schale, da diese ebenfalls zur Intensität und Linienform der nicht aufgelösten K_α -Linie beitragen. Eine Schwierigkeit hierbei ist, dass die K-Schalen-angeregten Zustände dieser Ionen sich auch strahlungslos über einen Augerzerfall abregen können, was dazu führt, dass der Übergang in der Beob-

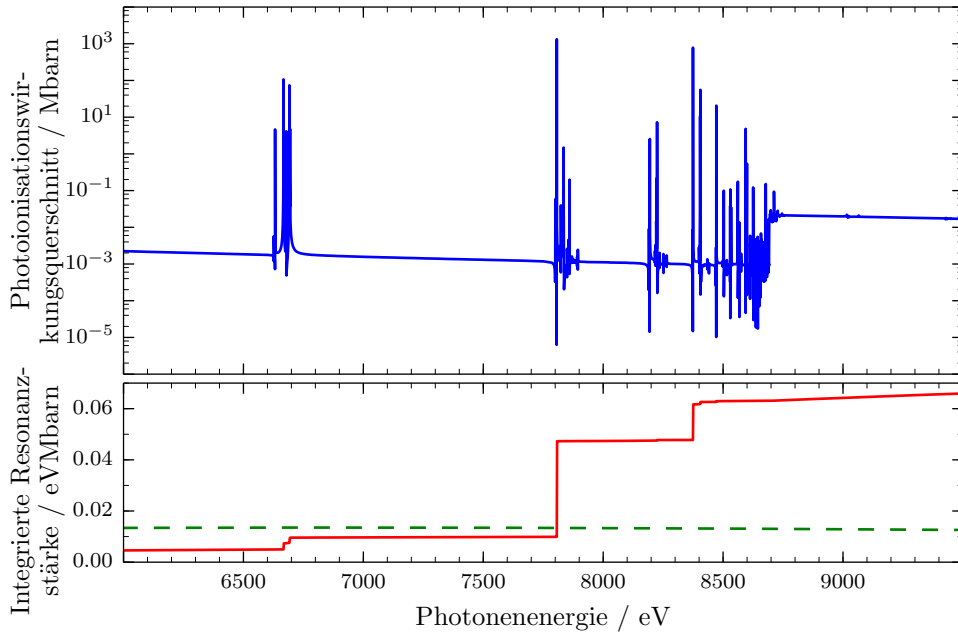


Abbildung 1.2: Photoionisation von lithiumartigem Eisen. Oben ist eine theoretische Berechnung des Wirkungsquerschnitts dargestellt [33], die Gruppen von Resonanzen gehören zu den K_{α} -, K_{β} -, usw. Übergängen. Unten ist die über die Photonenenergie integrierte Resonanzstärke (rot) aufgetragen, wobei eine Energieverteilung der Photonen entsprechend einer Temperatur von 50 MK angenommen wurde (grüne Linie). Anhand der Sprünge erkennt man, dass der Beitrag der Resonanzen größer ist als jener der direkten Photoionisation.

achtung schwächer erscheint als er in Wirklichkeit ist. Die Zerfallsraten sind dabei in der gleichen Größenordnung wie die des radiativen Zerfalls, so dass für die Bestimmung der Ionenhäufigkeiten eine genaue Kenntnis ihres Verhältnisses notwendig ist. Die Ladungszustandsverteilung in der Akkretionsscheibe ist aufgrund der von ihr ausgehenden intensiven Röntgenstrahlung vollständig durch Photoionisation bestimmt. Wie in Abbildung 1.2 dargestellt, hat die resonante Photoionisation, die gerade dem Augerzerfall der K-Schalenangeregten Ionen entspricht, auch hier einen großen Einfluss. Aus diesen Gründen gibt es umfangreiche theoretische Berechnungen der entsprechenden Zerfallsraten [27–32].

Eine experimentelle Bestimmung der Zerfallsraten war hingegen bisher nicht möglich. Die entsprechenden angeregten Zustände lassen sich zwar in Tokamaks [34, 35] oder Elektronenstrahlionenfallen [36, 37] erzeugen, und auch deren Übergangsenergien können mit Kristallspektrometern sehr präzise vermessen werden. Die Anregung erfolgt hierbei jedoch über Elektronenstöße oder dielektronische Rekombination und die ungenaue Kenntnis dieser Elektron-Ion-Wechselwirkung verhindert eine absolute Bestimmung der Zerfallsraten. Es existiert lediglich eine Messung, bei der absolute Resonanzstärken der dielektronischen Rekombination in lithiumartige Eisenionen durch einen Intensitätsvergleich mit der radia-

tiven Rekombination bestimmt werden konnten [38]. Die Resonanzstärke stellt allerdings eine Kombination aus radiativer und Augerzerfallsrate dar und ermöglicht zwar deren Verhältnis zu bestimmen, aber nicht ihre absoluten Werte. Eine Anregung der Übergänge durch Photonen wurde erst durch die Verfügbarkeit von ultrabrillanten Röntgenstrahlungsquellen möglich [39].

Ziel dieser Arbeit war es auf Basis dieser Photonenanregung absolute Zerfallsraten für K-Schalen-angeregte Eisenionen zu bestimmen. Dazu wurde eine Elektronenstrahlionenfalle an das Hamburger Synchrotron PETRA III angeschlossen. Der radiative Zerfall wurde mit Photonendetektoren vermessen, während die auf dem Augerzerfall beruhende Photoionisation durch den Nachweis der Photoionen registriert wurde. Durch eine neue Messmethode, bei der beide Zerfallskanäle gleichzeitig beobachtet wurden, war es möglich die systematischen Unsicherheiten der Absolutbestimmung der Zerfallsraten größtenteils zu beseitigen. Damit konnten für sieben Übergänge in lithiumartigem, berylliumartigem und kohlenstoffartigem Eisen die Raten des radiativen und Augerzerfalls absolut bestimmt werden.

In dem folgenden Kapitel werden die physikalischen Grundlagen dargestellt, ausgehend von der fundamentalen Physik hin zu den Konzepten der wichtigsten verwendeten Instrumente. Anschließend werden die Eigenschaften des experimentellen Aufbaus und der verwendeten Geräte beschrieben. Darauf folgt die Schilderung der durchgeführten Messungen, und es wird erläutert, wie aus den gemessenen Daten die Zerfallsraten bestimmt wurden. Die so gewonnenen Ergebnisse werden zunächst für jeden untersuchten Ladungszustand präsentiert, bevor eine gemeinsame Analyse der Messunsicherheiten erfolgt. Den Schluss bildet eine kurze Zusammenfassung der Arbeit sowie ein Ausblick auf weitere Anwendungsmöglichkeiten des entwickelten Messverfahrens.

Kapitel 2

Grundlagen

In diesem Kapitel werden die für diese Arbeit relevanten grundlegenden Konzepte beschrieben. Um die untersuchten Prozesse zu verstehen, wird zuerst die Struktur von Atomen und Ionen beschrieben. Anschließend werden mögliche Wechselwirkungen mit Photonen und Elektronen betrachtet, wobei besonders auf die Bedeutung von Auger- und radiativen Zerfallsraten eingegangen wird. Zuletzt werden experimentelle Methoden zur Erzeugung hochgeladener Ionen sowie die Funktionsweise von Synchrotronstrahlungsquellen beschrieben.

2.1 Atomstruktur

Seit den Experimenten von Rutherford zur Streuung von Alphateilchen an Goldatomen ist bekannt, dass Atome einen kleinen positiv geladenen Kern besitzen, der fast ihre gesamte Masse ausmacht [40]. Die Rolle der Elektronen war allerdings weiterhin unklar. Würden sie – wie die Planeten die Sonne – den Atomkern umkreisen, so müssten sie aufgrund ihrer beschleunigten Bewegung ständig elektromagnetische Strahlung emittieren. Dies würde jedoch zu einem Energieverlust und damit zu keiner stabilen Bahn führen. Niels Bohr postulierte 1913, dass sich die Elektronen auf bestimmten Bahnen strahlungsfrei bewegen können und Strahlung nur beim Übergang zwischen diesen Bahnen aussenden [41]. Als Kriterium für stabile Bahnen quantisierte er den Drehimpuls des Elektrons auf Vielfache des Planck'schen Wirkungsquantums \hbar . Mit diesem Modell konnten bekannte Eigenschaften des Wasserstoffatoms, wie seine Größe sowie sein Spektrum, sehr gut beschrieben werden, was ihm und den zugrunde liegenden Postulaten eine hohe Akzeptanz verschaffte. Ein tiefer gehendes Verständnis der Ursachen der Quantisierung wurde jedoch erst mit der Entwicklung der Quantenmechanik geschaffen.

Aufbauend auf den Überlegungen Louis de Broglies, der vorschlug, auch Teilchen eine von ihrem Impuls abhängige Wellenlänge $\lambda = h/p$ zuzuordnen [42], entwickelte Erwin

Schrödinger eine Wellenmechanik [43–47]. Ihr zentraler Bestandteil ist die Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t). \quad (2.1)$$

Die Teilchen werden hierbei durch ihre Wellenfunktion Ψ beschrieben. Im Gegensatz zur klassischen Mechanik kann nicht mehr der exakte Ort eines Teilchens bestimmt werden, sondern nur noch eine Wahrscheinlichkeit $p = |\psi(\vec{r}, t)|^2$ das Teilchen zur Zeit t am Ort \vec{r} anzutreffen. Messbare Größen lassen sich als Eigenwerte von Operatoren darstellen. Die Dynamik des Systems wird durch den Hamilton-Operator

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

beschrieben, dessen Eigenwerte die möglichen Gesamtenergien des Systems angeben. Der Term $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r$ beschreibt die kinetische Energie des Teilchens, während $V(\vec{r}, t)$ das Potential darstellt, in dem es sich bewegt.

Für ein von der Zeit unabhängiges Potential $V(\vec{r})$ lässt sich die Wellenfunktion in einen zeitabhängigen und einen zeitunabhängigen Teil separieren

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

Hierbei ist E die Energie des Systems, welche sich ebenso wie die ortsabhängige Wellenfunktion $\psi(\vec{r})$ aus der Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (2.4)$$

ergibt.

2.1.1 Ein-Elektron-Systeme

Für ein einzelnes Elektron im Coulomb-Potential $V = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}|}$ eines Kerns mit der Ordnungszahl Z lässt sich die Schrödinger-Gleichung analytisch lösen¹. Gebundene Elektronen ($E < 0$) können nur noch diskrete Energien annehmen:

$$E_n = -R_y\frac{Z^2}{n^2}, \quad R_y = \frac{m_e e^4}{8h^2\epsilon_0^2} \quad (2.5)$$

Die Hauptquantenzahl n kann nur ganzzahlige positive Werte annehmen ($n = 1, 2, 3, \dots$). Diese Energien entsprechen denen des Bohr'schen Atommodells, der Unterschied wird

¹Eine Herleitung der Lösung findet sich zum Beispiel in [48].

jedoch anhand der zugehörigen Wellenfunktionen deutlich. Diese werden neben n durch die Bahndrehimpulsquantenzahl $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ und die magnetische Quantenzahl $m = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$ charakterisiert, welche den Betrag $|L| = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ und die z -Komponente $L_z = \hbar m$ des Bahndrehimpulses angeben. In Polarkoordinaten lauten sie:

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

$$R_{nl}(r) = D_{nl}e^{-\frac{Zr}{na_0}} \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right) \quad (2.7)$$

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$$

Hierbei sind Y_{lm} die Kugelflächenfunktionen und L_{n+l}^{2l+1} die zugeordneten Laguerre-Polynome, D_{nl} ist eine von n , l und Z abhängige Konstante zur Normierung und a_0 der Bohr'sche Radius. Diese räumlichen Wellenfunktionen werden auch als Orbitale bezeichnet. Zwar sind sie zeitlich konstant, dies heißt jedoch nicht, dass auch die Elektronen „stillstehen“, vielmehr enthalten die Wellenfunktionen auch eine Wahrscheinlichkeitsverteilung des Impulses der Elektronen. Aufgrund der inhärenten Unschärfe der Quantenmechanik [49, 50] ist es nicht möglich dem Elektron eine konkrete Bahn zuzuordnen. Die von den Orbitalen beschriebenen Aufenthaltswahrscheinlichkeiten unterscheiden sich deutlich von den Kreisbahnen des Bohr'schen Atommodells (siehe Abbildung 2.1), lediglich für große Quantenzahlen n , l , m ergeben sich in Übereinstimmung mit dem Korrespondenzprinzip [51] kreisförmige Orbitale.

Die Schrödingergleichung (2.1) enthält unterschiedliche Ordnungen von Ableitungen in Ort und Zeit, ihre Lösungen sind daher im Rahmen der speziellen Relativitätstheorie [52] nicht Lorentz-invariant. Somit ist sie nur für nichtrelativistische Teilchengeschwindigkeiten gültig. Deshalb entwickelte Dirac eine Theorie, bei der der Hamilton-Operator linear vom Impuls abhängt [53]. Für ein freies Teilchen mit der Ruhemasse m_0 lautet er

$$\hat{H} = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m_0 c^2. \quad (2.8)$$

Dieser Operator muss zudem die relativistische Energie-Impuls-Beziehung $E^2 = \vec{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4$ erfüllen. Dies ist nur möglich, wenn sowohl die Komponenten des Vektors $\vec{\alpha}$ als auch der Koeffizient β durch 4×4 -Matrizen dargestellt werden. Dementsprechend sind auch die Eigenfunktionen Ψ von \hat{H} vierdimensionale Vektoren. Sie bilden jeweils zweidimensionale Unterräume zu den Eigenwerten $E_{\pm} = \pm\sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4}$, wobei die Lösungen mit negativer Energie als Zustände des Antiteilchens interpretiert werden. Die zweifache Entartung der Energieeigenwerte lässt sich auf die zwei Einstellungsmöglichkeiten des Elektronenspins zurückführen, welcher somit eine direkte Folge der relativistischen Behandlung des Elektrons ist.

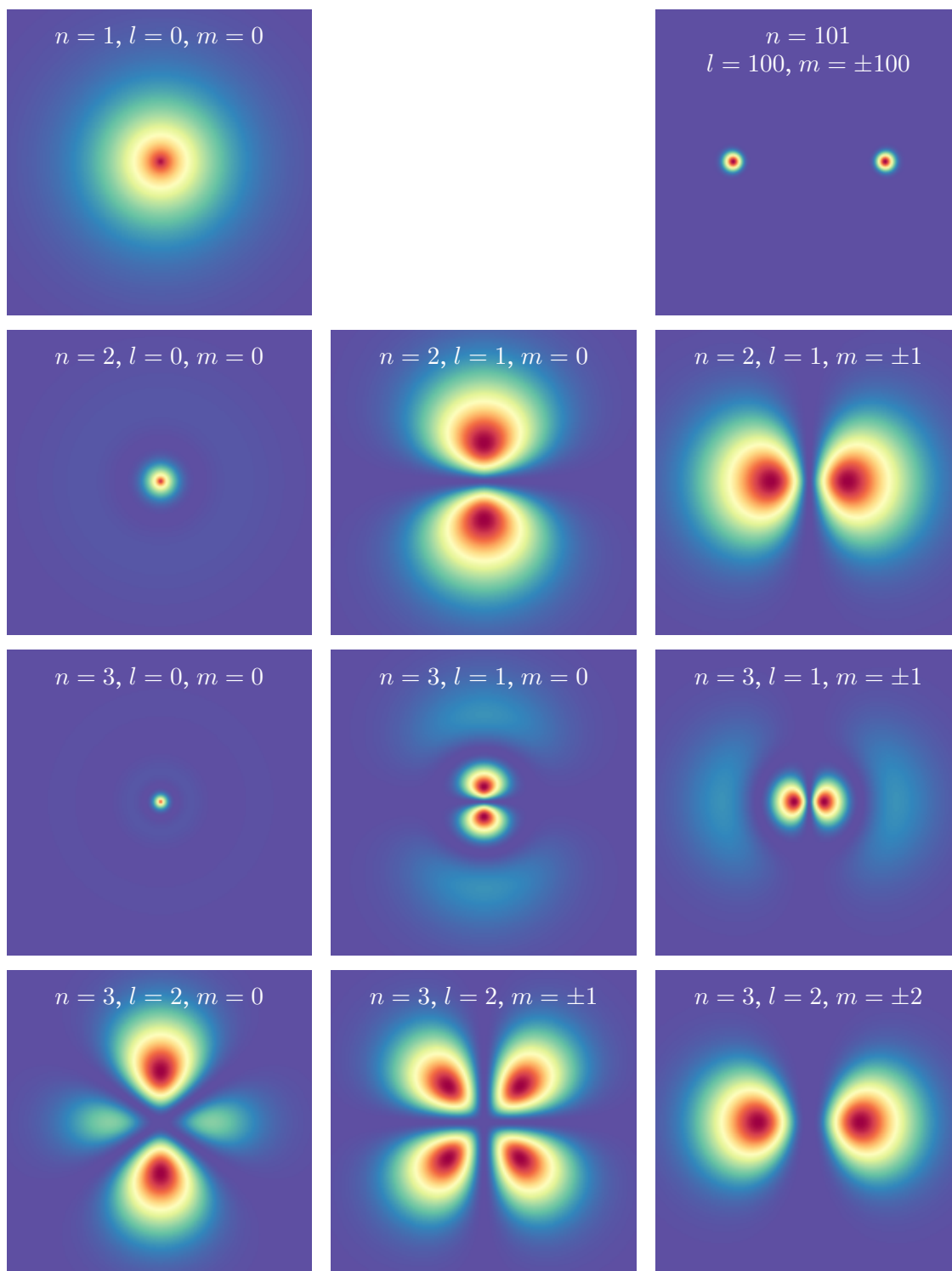


Abbildung 2.1: Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\Psi|^2$ des Elektrons im Wasserstoffatom für verschiedene Quantenzahlen n, l, m . Dargestellt ist ein Schnitt durch die xz -Ebene, die Wahrscheinlichkeiten sind rotationssymmetrisch zur z -Achse. Die Ausschnitte haben jeweils eine Breite von $4n^2 a_0$.

Um das Elektron in einem Atom relativistisch zu beschreiben, fügt man dem Hamilton-Operator (2.8) einen zusätzlichen Term mit dem Potential des Kerns hinzu. Hieraus ergibt sich die Dirac-Gleichung

$$\left(c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m_e c^2 - \frac{Z\alpha}{|\vec{r}|} \right) \psi = E\psi, \quad (2.9)$$

welche sich ebenfalls analytisch lösen lässt. Für die positiven Energien gilt:

$$E_{nj} = m_e c^2 \left[1 + \left(\frac{Z\alpha}{n - j - \frac{1}{2} - \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2}} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}}. \quad (2.10)$$

Die Entartung der Zustände wird durch eine zusätzliche Abhängigkeit vom Gesamtdrehimpuls $J = L + S$ teilweise aufgehoben. Dieser setzt sich aus Bahndrehimpuls und Spin zusammen und wird durch die Quantenzahl $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, n - \frac{1}{2}$ beschrieben. Ein besseres Verständnis ergibt sich, wenn man die Energien nach Potenzen von $Z\alpha$ entwickelt:

$$E_{nj} = m_e c^2 \left[1 - \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} - \frac{(Z\alpha)^4}{2n^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) + \dots \right]. \quad (2.11)$$

Der erste Term ist die Ruheenergie des Elektrons, der zweite stimmt mit der nichtrelativistischen Bindungsenergie (2.5) überein. Der dritte Term enthält als erster relativistische Korrekturen, welche durch die Massenzunahme des Elektrons und die Wechselwirkung des Bahndrehimpulses mit dem Spin des Elektrons erklärt werden können. Sie sind um einen Faktor $\frac{(Z\alpha)^2}{n}$ kleiner als die nichtrelativistischen Bindungsenergien. Diese j -abhängige Aufspaltung wird daher als Feinstruktur bezeichnet.

Eine noch genauere Behandlung der Wechselwirkung zwischen Elektron und Atomkern erlaubt die Theorie der Quantenelektrodynamik. Hierbei wird das elektrische Feld ebenfalls quantisiert. Dies führt zu Effekten wie der Selbstenergie, bei der das Elektron über ein virtuelles Photon mit sich selbst interagiert oder der kurzzeitigen Erzeugung von Elektron-Positron-Paaren (Vakuumpolarisation). Hierdurch werden weitere Korrekturen der Elektronenenergie hervorgerufen, welche mit $\frac{(Z\alpha)^4}{n^3}$ skalieren und zudem eine Abhängigkeit vom Bahndrehimpuls L einführen. Diese Abweichung von der Dirac-Theorie wurde erstmals experimentell von Lamb und Retherford gefunden [54], weshalb diese Korrekturen, zusammen mit weiteren, welche durch Kerneffekte verursacht werden, als Lamb-Verschiebung bezeichnet werden. Eine Übersicht der verschiedenen Effekte und der daraus resultierenden Verschiebungen und Aufspaltungen der Energieniveaus ist in Abbildung 2.2 dargestellt.

Zur Bezeichnung der verschiedenen Elektronenzustände wird die Notation nl_j benutzt.

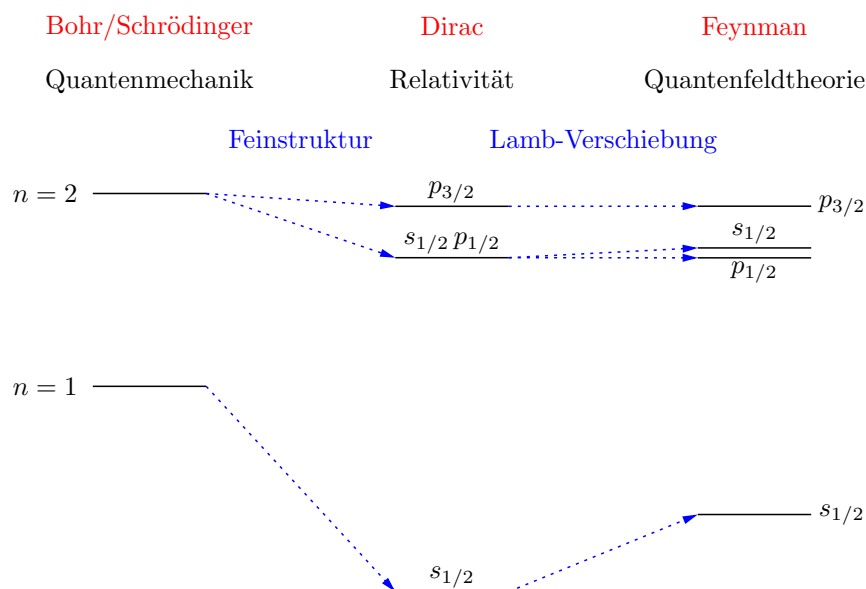


Abbildung 2.2: Termschema des Grundzustands ($n = 1$) sowie des ersten angeregten Niveaus ($n = 2$) des Wasserstoffatoms. Dargestellt ist die Aufspaltung und Verschiebung der Zustände durch Berücksichtigung von relativistischen und quantenfeldtheoretischen Effekten. Die Feinstruktur ist dabei um einen Faktor 10000 und die Lamb-Verschiebung um einen Faktor 20000 vergrößert dargestellt.

Die Quantenzahlen n und j werden dabei als Zahlen angegeben, während der Wert von l durch Buchstaben kodiert ist. Die Zuordnung ($0 \hat{=} s$, $1 \hat{=} p$, $2 \hat{=} d$, $3 \hat{=} f$ und alphabetisch fortgesetzt) ergibt sich aus der historischen Bezeichnung der entsprechenden Spektrallinien (sharp, principal, diffuse und fundamental). Bei der Angabe der Energie der Zustände wird oft nicht die absolute Bindungsenergie angegeben, sondern lediglich die relative Differenz zum Grundzustand, dem Zustand mit der niedrigsten Energie.

2.1.2 Mehr-Elektronen-Systeme

Betrachtet man Atome mit mehreren Elektronen, so muss neben der Wechselwirkung mit dem Kern auch die der Elektronen untereinander berücksichtigt werden. Der Hamilton-Operator erweitert sich dadurch zu

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left(\hat{H}_i + \sum_{j>i}^N \hat{W}_{ij} \right). \quad (2.12)$$

Hierbei sind \hat{H}_i die Einteilchen-Hamiltonoperatoren (2.2) und \hat{W}_{ij} beschreibt die Wechselwirkung zwischen den Elektronen. Nichtrelativistisch wird diese durch die Coulomb-

Wechselwirkung beschrieben

$$\hat{W}_{ij}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \frac{\alpha^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}, \quad (2.13)$$

im relativistischen Fall müssen weitere Effekte, wie die Spin-Spin-Wechselwirkung berücksichtigt werden. Die zugehörige Wellenfunktion Ψ setzt sich aus Produkten der Ein-Elektron-Wellenfunktionen ψ_i zusammen. Aufgrund der Ununterscheidbarkeit der einzelnen Elektronen darf ein Vertauschen der Elektronen in der Wellenfunktion keine physikalischen Auswirkungen haben. Das Spin-Statistik-Theorem [55, 56] konkretisiert dies, indem es vorschreibt, dass für Teilchen mit halbzahligen Spin – wie Elektronen –, die Wellenfunktion antisymmetrisch unter Vertauschung sein muss. Diese Forderung wird erfüllt, indem man die Gesamtwellenfunktion als Determinante von Einteilchenfunktionen darstellt, welche als Slater-Determinante bezeichnet wird [57]:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1) & \psi_2(\vec{r}_1) & \cdots & \psi_N(\vec{r}_1) \\ \psi_1(\vec{r}_2) & \psi_2(\vec{r}_2) & \cdots & \psi_N(\vec{r}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1(\vec{r}_N) & \psi_2(\vec{r}_N) & \cdots & \psi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix}. \quad (2.14)$$

Hieraus lässt sich leicht das Pauli-Prinzip [58] ableiten. Haben zwei Elektronen die gleichen Quantenzahlen und damit die gleiche Wellenfunktion, so ist die Slater-Determinante null, der Zustand daher nicht existent. Die Elektronen müssen sich also in mindestens einer Quantenzahl unterscheiden, weshalb es mit zunehmender Anzahl auch Elektronen in energetisch höheren Zuständen geben muss. So hat etwa ein Kohlenstoffatom je zwei Elektronen (mit unterschiedlicher Spin-Ausrichtung) in den Orbitalen $1s$, $2s$, und $2p$. Neben den Ein-Elektron-Zuständen wird der Gesamtzustand auch durch seinen Bahndrehimpuls, Spin und Gesamtdrehimpuls definiert

$$\vec{L} = \sum_i \vec{l}_i, \quad \vec{S} = \sum_i \vec{s}_i, \quad \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}, \quad (2.15)$$

welcher sich aus den Drehimpulsen \vec{l}_i und Spins \vec{s}_i der Elektronen zusammensetzt. Diese Größen werden durch die Quantenzahlen L , S , J und M_J beschrieben, mit denen sie wie folgt zusammenhängen:

$$|\vec{L}| = \hbar\sqrt{L(L+1)}, \quad |\vec{S}| = \hbar\sqrt{S(S+1)}, \quad |\vec{J}| = \hbar\sqrt{J(J+1)}, \quad J_z = \hbar M_J. \quad (2.16)$$

Zur Beschreibung eines Mehr-Elektron-Zustands wird folgende Notation verwendet

$$[\text{Ein-Elektron-Zustände}]^{2S+1}L_J, \quad (2.17)$$

wobei bei den Ein-Elektron-Zuständen meistens auf die Angabe des Gesamtdrehimpulses j verzichtet und mehrfach besetzte Zustände durch einen Exponenten angegeben werden. Die Kodierung des Gesamtbahndrehimpulses L erfolgt analog zu der des Bahndrehimpulses. Der Grundzustand des Kohlenstoffatoms ($L = 1, S = 1, J = 0$) lässt sich somit durch $1s^2 2s^2 2p^2 {}^3P_0$ beschreiben.

Die Wellenfunktionen lassen sich aufgrund der Wechselwirkungen zwischen den Elektronen nicht mehr analytisch bestimmen. Auch eine direkte numerische Lösung ist mit den heutigen Möglichkeiten nicht durchführbar. Deshalb werden Näherungsverfahren zur Berechnung verwendet. Im Hartree-Fock-Verfahren [59] wird bei der Berechnung der Ein-Elektron-Wellenfunktionen die Wechselwirkung mit den anderen Elektronen durch ein effektives radiales Potential genähert. Da das effektive Potential wiederum von den Elektronen-Wellenfunktionen abhängt, muss dieses Verfahren mehrfach iteriert werden. Da hierbei jedoch Elektronenkorrelationen unberücksichtigt bleiben, lässt sich hiermit prinzipiell nicht die richtige Wellenfunktion finden. Eine weiterer Ansatz ist es, die Gesamtwellenfunktion als eine Linearkombination von N_s Slater-Determinanten zu beschreiben:

$$\Psi = \sum_{\nu=1}^{N_s} c_{\nu} \Psi_{\nu}. \quad (2.18)$$

Die einzelnen Komponenten Ψ_{ν} können dabei durchaus unterschiedliche Elektronenkonfigurationen beschreiben, so lange die sich hieraus ergebenden „guten“ Quantenzahlen (L, S, J , sowie die Parität π) des Gesamtsystems gleich sind. Zur Ermittlung der Lösung werden nun die Koeffizienten c_{ν} variiert. Dabei kann man der exakten Lösung prinzipiell beliebig nahe kommen, indem man die Anzahl der berücksichtigten Konfigurationen erhöht. Dieses als Configuration-Interaction (CI) bezeichnete Verfahren lässt sich mit dem Hartree-Fock-Verfahren zur Berechnung der Ein-Teilchen-Wellenfunktionen kombinieren, man bezeichnet es dann als Multi-Configuration-Hartree-Fock [60]. Für Atome mit großer Kernladung empfiehlt sich die Verwendung der Dirac- anstelle der Schrödinger-Gleichung, um auch relativistische Effekte zu berücksichtigen. Dies wird dann als Multi-Configuration-Dirac-Fock-Verfahren (MCDF) bezeichnet. Mit ihm lassen sich die Energieniveaus mit einer Genauigkeit unter 0,1% bestimmen. Eine genauere Beschreibung dieser Verfahren findet sich in [61–63, 60].

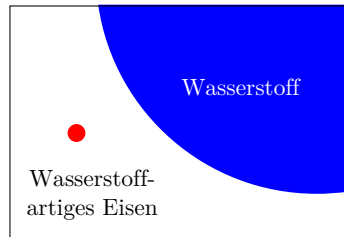


Abbildung 2.3: Größenvergleich der mittleren Ausdehnung der Elektronenwellenfunktion eines Wasserstoffatoms und eines wasserstoffartigen Eisenions ($Z = 26$).

2.1.3 Hochgeladene Ionen

Entfernt man von einem neutralen Atom ein oder mehrere Elektronen, so erhält man ein Ion. Ab welchem Ladungszustand man es als hochgeladen bezeichnet, ist nicht einheitlich definiert. Als Anhaltspunkte hierfür gelten eine hohe Anzahl entfernter Elektronen sowie die Menge der bei vollständiger Rekombination freiwerdenden Energie [64]. Hochgeladene Ionen lassen sich wie Atome als System aus Atomkern und Elektronen beschreiben. Aufgrund der Vielzahl an stabilen Elementen und möglichen Ionisationsgraden, insgesamt über 3000, bieten sie ein riesiges Forschungsfeld, insbesondere, da es in jedem System wiederum eine Vielzahl an Energieniveaus und Übergängen zwischen diesen gibt. Experimentell werden hochgeladene Ionen in der Regel durch schrittweise Ionisation erzeugt, so dass hier besonders einfach Studien zu einem Element mit ansteigendem Ionisationsgrad durchgeführt werden können. Dies wird als isonukleare Reihe bezeichnet. Wie in Abschnitt 2.1.1 dargestellt, ist die Kernladungszahl Z ein wichtiger Parameter bei der Beschreibung der Atomstruktur. Deshalb sind für die Theorie insbesondere die isoelektronischen Reihen von Interesse, bei denen bei gleicher Elektronenzahl die Kernladungszahl verändert wird. Da sich bei gleichbleibender Elektronenzahl in erster Näherung die Elektronenkonfiguration nicht ändert, werden alle Ionen einer isoelektronischen Reihe nach dem neutralen Element benannt. So hat zum Beispiel 20-fach positiv geladenes Eisen (Fe^{20+}) sechs Elektronen und wird daher kohlenstoffartig, oder kurz C-artig, genannt.

Wie in Tabelle 2.1 gezeigt, unterscheidet sich das Skalierungsverhalten verschiedener Effekte. Sie haben somit je nach Kernladungszahl einen unterschiedlich starken Einfluss auf die Atomstruktur. Dies kann dazu führen, dass sich zwei im neutralen Zustand entfernte Energieniveaus mit zunehmenden Z annähern und sogar kreuzen können. Durch dieses als „level-crossing“ bezeichnete Phänomen liegen die Übergänge zwischen diesen Zuständen teilweise im optischen Bereich, so dass sie zukünftig als Basis für optische Uhren dienen könnten, die besonders sensitiv auf Änderungen der Feinstrukturkonstante α wären [65].

2.2 Elektronische Prozesse in hochgeladenen Ionen

Neben dem im letzten Abschnitt beschriebenen Aufbau von hochgeladenen Ionen ist das Verständnis von dynamischen Prozessen von Bedeutung. Erst durch sie lassen sich die

Tabelle 2.1: Auflistung der Skalierungsverhalten verschiedener atomarer Größen in Bezug auf die Kernladungszahl Z [66].

Atomradius	Z^{-1}
Ionisationspotential	Z^2
Übergangsenergie	Z^2
Feinstrukturaufspaltung	Z^4
Hyperfeinstrukturaufspaltung	Z^3
Lamb-Verschiebung	Z^4
Oszillatorstärke	Z^0
Radiative Übergangswahrscheinlichkeit	Z^4
Autoionisationswahrscheinlichkeit	Z^0
Wirkungsquerschnitt Photoionisation	Z^{-2}
Wirkungsquerschnitt Elektronenstoß-Anregung und -Ionisation	Z^{-4}

Ionen experimentell untersuchen und ermöglichen dadurch Rückschlüsse auf ihre Struktur.

Um Übergänge zwischen den stationären Zuständen eines Ions beschreiben zu können, muss man in das Gesamtsystem zusätzliche Freiheitsgrade einführen, zum Beispiel die eines elektrischen Feldes oder eines freien Elektrons. Die Wechselwirkung mit diesen Freiheitsgraden wird dann durch einen zusätzlichen Operator \hat{W} im Hamilton-Operator beschrieben

$$\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{W}, \quad (2.19)$$

wobei \hat{H}_A der atomare Hamiltonoperator (2.12) ist. Die Lösungen der zugehörigen Schrödingergleichung kann man mit Hilfe der zeitabhängigen Störungstheorie annähern, indem man den Operator \hat{W} als Störung betrachtet². Für die Wahrscheinlichkeit eines Übergangs von einem Zustand Ψ_a in einen Zustand Ψ_e ergibt sich dann

$$P_{a \rightarrow e} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \Psi_e | \hat{W} | \Psi_a \rangle \right|^2 \rho(E_a = E_e). \quad (2.20)$$

Diese Formel ist auch als *Fermis Goldene Regel* bekannt³. Der Term $\langle \psi_e | \hat{W} | \psi_a \rangle$ wird auch als Übergangsmatrixelement M_{ea} bezeichnet. $\rho(E)$ ist die Dichte der Endzustände, wobei durch die Bedingung $E_a = E_e$ ausgedrückt wird, dass nur solche Übergänge erlaubt sind, bei denen die Gesamtenergie erhalten bleibt. Normiert man diese Übergangswahrscheinlichkeit auf die im Anfangszustand Ψ_a enthaltene Projektilsdichte, so erhält man den Wirkungsquerschnitt σ .

Die für hochgeladene Ionen bedeutendsten Prozesse lassen sich in zwei Kategorien

²Eine detaillierte Beschreibung findet sich zum Beispiel in [48].

³Da Fermi sie in seinem Lehrbuch als „Golden Rule No. 2“ bezeichnet hat [67]. Entwickelt wurde die störungstheoretische Behandlung von Dirac [68] und Wentzel [69].

einteilen: Stöße mit freien Elektronen und Wechselwirkung mit Photonen⁴. Die wichtigsten Prozesse werden in diesem Abschnitt dargestellt.

2.2.1 Stöße mit Elektronen

Elektronenstoßanregung

Stößt ein Elektron mit einem Ion, so kann es das Ion aus dem Zustand i in einen angeregten Zustand f versetzen, in dem sich mindestens ein Elektron auf einem höheren Energieniveau befindet.



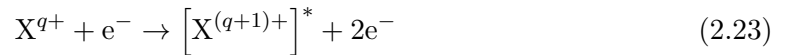
Dafür muss die kinetische Energie E_e des Elektrons vor dem Stoß größer sein als die Anregungsenergie $\Delta E = E_f - E_i$, die Elektronenenergie nach dem Stoß beträgt $E'_e = E_e - \Delta E$. Der Wirkungsquerschnitt für diese Reaktion lässt sich mit Hilfe der Bethe-Näherung [74] darstellen als

$$\sigma_{\text{EA}} = \frac{8\pi^2}{\sqrt{3}} \frac{a_0^2 I_{\text{H}}^2}{E_e \Delta E} f_{ij} g(E_e, E'_e), \quad (2.22)$$

wobei I_{H} die Ionisationsenergie von Wasserstoff und f_{ij} die Oszillatorstärke des Elektronenübergangs ist. Der Gaunt-Faktor $g(E_e, E'_e)$ gibt die quantenmechanische Wahrscheinlichkeit dafür an, dass das stoßende Elektron seine Energie von E_e nach E'_e ändert. Der Wirkungsquerschnitt ist direkt an der Schwelle ΔE am größten und fällt danach monoton ab.

Elektronenstoßionisation

Ist die kinetische Energie eines stoßenden Elektrons größer als das Ionisationspotential des Ions, so kann es ein Elektron aus der Hülle des Ions ins Kontinuum entfernen.



Wird das Elektron aus einer inneren Schale herausgelöst, so befindet sich das Ion danach in einem angeregten Zustand. Der Wirkungsquerschnitt für diesen Prozess lässt sich mit der empirischen Lotz-Formel [75] annähern:

$$\sigma_{\text{EI}} = \sum_i a_i N_i \frac{\ln E_e - \ln E_{\text{B},i}}{E_e E_{\text{B},i}} \left(1 - b_i e^{-c_i \left(\frac{E_e}{E_{\text{B},i}} - 1 \right)} \right). \quad (2.24)$$

⁴Wie zuerst Fermi [70] und später Weizsäcker [71] und Williams [72] gezeigt haben, lässt sich auch die Wechselwirkung mit Elektronen durch den Austausch von virtuellen Photonen beschreiben [73].

Die Summe geht hierbei über alle Schalen, in denen die Bindungsenergie der Elektronen E_B kleiner ist als die kinetische Energie E_e des stoßenden Ions. N_i ist die Anzahl der Elektronen in der entsprechenden Schale. Die Parameter a_i, b_i, c_i müssen empirisch für jedes Ion bestimmt werden, wobei es in den meisten Fällen ausreichend ist, diese Parameter für alle Schalen gleich zu setzen. Der Wirkungsquerschnitt ist unterhalb der Ionisationsenergie E_B Null, steigt ab Erreichen dieser schnell an, erreicht sein Maximum beim zwei- bis dreifachen von E_B und fällt danach langsam gegen Null ab. Eine ausführlichere Theorie findet sich zum Beispiel in [76].

Radiative Rekombination

Trifft ein Elektron auf ein Ion, so kann es von diesem eingefangen werden, so dass sich der Ladungszustand des Ions um eins verringert. Die dabei frei werdende Energie wird von einem emittierten Photon aufgenommen



Die Energie E_γ ist dabei die Summe aus kinetischer E_e des freien Elektrons plus die Bindungsenergie E_B des Levels, auf das das Elektron eingefangen wurde. Da dieses Level nicht notwendigerweise der Grundzustand ist, kann sich das Ion nach der Rekombination in einem angeregten Zustand befinden. Der Wirkungsquerschnitt für diesen Prozess lässt sich nach Kim und Pratt [77] annähern durch

$$\sigma_{RR} = \frac{8\pi}{3\sqrt{3}} \frac{\alpha^5}{n^3} \frac{Z_{\text{eff}}^4}{E_e E_\gamma}, \quad (2.26)$$

wobei n die Hauptquantenzahl des Niveaus ist, in das das Elektron eingefangen wird. Z_{eff} ist eine durch Abschirmung von inneren Elektronen erzeugte effektive Kernladung, welche für jedes Ion bestimmt werden muss. Die radiative Rekombination hat keinen Schwellwert für die Elektronenenergie, dafür hat die Photonenenergie eine Schwelle bei E_B , was genutzt werden kann um die Bindungsenergie des Ions zu bestimmen.

Resonante Rekombination

Neben der Emission eines Photons kann die beim Einfang eines Elektrons frei werdende Energie auch dazu genutzt werden ein bereits im Ion gebundenes Elektron auf ein höheres Energieniveau anzuheben



Dies ist ein resonanter Prozess, der nur stattfindet, wenn folgende Resonanzbedingung für die Elektronenenergie erfüllt ist

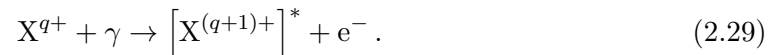
$$E_e = \Delta E - E_B, \quad (2.28)$$

wobei ΔE die Übergangsenergie des gebundenen Elektrons ist. Dieser Prozess ist die Zeitumkehr des Auger-Zerfalls (2.46) und endet stets in einem mehrfach angeregten Zustand, der, wie in Abschnitt 2.2.5 beschrieben, mehrere Zerfallskanäle haben kann.

2.2.2 Absorption von Photonen

Direkte Photoionisation

Trifft ein Photon auf ein Ion, so kann es von diesem absorbiert werden und ein Elektron herauslösen, falls seine Energie E_γ größer ist als die Bindungsenergie des Elektrons



Dieser Prozess ist Grundlage des äußeren Photoeffekts, welcher erstmals von Hertz und Hallwachs beobachtet [78, 79], jedoch erst durch Einstein theoretisch beschrieben werden konnte, indem er das Photon als Lichtquant einführte [80]. Wird bei der Photoionisation ein Elektron aus einer inneren Schale entfernt, so befindet sich das Ion danach in einem angeregten Zustand⁵. Das freie Elektron hat die Energie $E_e = E_\gamma - E_B$. Die direkte Photoionisation ist der Zeitumkehrprozess der radiativen Rekombination (2.25), ihr Wirkungsquerschnitt ist daher über das Prinzip des detaillierten Gleichgewichts mit dem der Rekombination (2.26) verknüpft [82, 83]

$$\sigma_{\text{DPI}} = \frac{m_e c^2 E_e}{E_\gamma^2} \frac{2g_{q+1}}{g_q} \sigma_{\text{RR}}. \quad (2.30)$$

Hierbei sind g_q und g_{q+1} die statistischen Gewichte der jeweiligen Ionenzustände. Der Faktor $2 = g_e$ berücksichtigt die zwei möglichen Spinstellungen des freien Elektrons. Der Wirkungsquerschnitt ist Null unterhalb der Ionisationsenergie, macht beim Überschreiten selbiger einen Sprung (Ionisationskante), um mit höherer Photonenenergie wieder abzufallen, unterbrochen von den Ionisationskanten von weiter innen liegenden Schalen.

⁵Die direkte Photoionisation von $1s$ Elektronen ist in leichten Elementen eine effektive Methode zur Erzeugung hoher Ladungszustände, da beim Auger-Zerfall des angeregten Zustands ein weiteres Elektron entfernt wird. So konnte zum Beispiel an der *Linac Coherent Light Source* (LCLS) nacktes Neon innerhalb eines einzigen Laserpulses erzeugt werden [81].

Photoanregung

Durch die Absorption eines Photons kann das Ion in einen angeregten Zustand übergehen



Dies ist ein resonanter Prozess, da die Energie des Photons komplett vom Ion aufgenommen wird und somit der Übergangsenergie entsprechen muss

$$E_\gamma = h\nu = E_2 - E_1 , \quad (2.32)$$

wobei E_2 und E_1 die Energien von angeregtem und Ausgangszustand sind. Diese Resonanzbedingung erlaubt es mit einem monochromatischen Photonenstrahl selektiv einzelne Zustände in einem Ion anzuregen, was mittels Elektronenstoßanregung nicht möglich ist. Diese Eigenschaft ist entscheidend für die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Experimente. Betrachtet man das Photon als Besetzung einer Mode des elektromagnetischen Strahlungsfeldes, so ist die Anregungsrate P_{12} proportional zur spektralen Energiedichte $\rho(\nu)$ dieses Feldes

$$P_{12} = B'_{12}\rho(\nu) . \quad (2.33)$$

Die Proportionalitätskonstante B'_{12} wird dabei als Einstein-Koeffizient der Absorption bezeichnet [84]. Der Wirkungsquerschnitt $\sigma(E)$ ist abhängig von der Linienbreite (siehe Abschnitt 2.2.4), weshalb zur Quantifizierung der Stärke eines Übergangs die Linienstärke

$$S_{12} = \int \sigma(E)dE \quad (2.34)$$

verwendet wird.

2.2.3 Abregungsprozesse

Spontane Abregung

Befindet sich ein Ion in einem angeregten Zustand, so kann es unter Aussendung eines Photons in einen energetisch niedrigeren Zustand übergehen



Die Energie des Photons entspricht dabei der Energiedifferenz der beteiligten Zustände $E_\gamma = h\nu = E_2 - E_1$. Die Übergangsrate A_{21} , auch Einstein-Koeffizient der spontanen

Emission genannt, hängt dabei nur von den Eigenschaften des Ions ab

$$A_{21} = \frac{1}{g_2} \frac{16\pi^3 \nu^3}{3\epsilon_0 h c^3} |M_{12}|^2. \quad (2.36)$$

Hierbei ist M_{12} das Matrixelement des Übergangs und g_i sind die statistischen Gewichte der Zustände. Ist die Wellenlänge des emittierten Lichts groß im Vergleich zur Ausdehnung des Ions, so lässt sich das Matrixelement in Dipolnäherung darstellen als [85]

$$M_{12} = \langle \Psi_1 | \vec{r} | \Psi_2 \rangle. \quad (2.37)$$

Anhand von symmetrischen Überlegungen lassen sich hieraus Auswahlregeln für die Änderungen der Quantenzahlen des Ions herleiten

$$\Delta L = \pm 1 \quad (2.38)$$

$$\Delta M = \begin{cases} 0 & \text{für linear polarisiertes Licht} \\ \pm 1 & \text{für zirkular polarisiertes Licht} \end{cases} \quad (2.39)$$

$$\Delta J = 0, \pm 1 \quad (J = 0 \not\leftrightarrow 0) \quad (2.40)$$

Durch A_{21} lassen sich auch der Einsteinkoeffizient der Absorption sowie die zugehörige Linienstärke ausdrücken [84]:

$$B_{12} = \frac{g_2}{g_1} \frac{c^3}{8\pi h \nu^3} A_{21} \quad (2.41)$$

$$S_{12} = \frac{g_2}{g_1} \frac{h c^2}{8\pi \nu^2} A_{21} \quad (2.42)$$

Die spontane Abregung wird im Folgenden auch als radiativer Zerfall bezeichnet.

Induzierte Emission

Neben der spontanen Abregung kann ein Übergang auch durch ein Photon induziert werden, wenn dieses die gleiche Energie hat wie das beim Übergang ausgesandte



Das neu entstandene Photon hat dabei die gleichen Eigenschaften wie das induzierende, insbesondere gleiche Richtung, Frequenz, Polarisation und Phase. Diese Verdopplung von Photonen ist der entscheidende Prozess bei der Funktionsweise eines Lasers. Die Abre-

gungsrates ist wie bei der Photoanregung linear abhängig von der spektralen Energiedichte

$$P_{21} = B_{21}' \rho(\nu), \quad (2.44)$$

wobei B_{21}' als Einstein-Koeffizient der induzierten Emission bezeichnet wird. Da An- und Abregung des Ions durch Photonen mit gleicher Energie erfolgen, konkurrieren beide Prozesse miteinander. Mit statistischen Überlegungen lässt sich folgender Zusammenhang mit dem Koeffizienten der Absorption zeigen [84]

$$B_{21} = \frac{g_1}{g_2} B_{12}. \quad (2.45)$$

Bei den in dieser Arbeit untersuchten Übergängen ist die induzierte Übergangsrates bei den verwendeten Energiedichten jedoch um mehrere Größenordnungen kleiner als die der spontanen Emission oder die des Auger-Zerfalls, weshalb dieser Prozess im Folgenden nicht weiter betrachtet wird. Bei sehr intensiven Photonenpulsen, wie sie zum Beispiel bei freien Elektronenlasern erreicht werden, kann er jedoch zu einer signifikanten Abschwächung der Anregung führen [86].

Auger-Zerfall

Ionen mit mehr als einem Elektron können sich in einem doppelt angeregten Zustand befinden, dessen Anregungsenergie größer ist als die Ionisationsenergie des Ions. Dann ist es möglich, dass die bei der Abregung frei werdende Energie auf ein Elektron übertragen wird, welches dadurch nicht mehr an den Kern gebunden ist



Die Energie des freien Elektrons $E_e = \Delta E - E_B$ ist dabei charakteristisch für den jeweiligen Übergang. Dieser Prozess wurde unabhängig von Meitner [87] und Auger [88] entdeckt und später nach Letzterem benannt. Die Energieübertragung auf das Elektron erfolgt durch die Coulomb-Wechselwirkung unter den Elektronen

$$\hat{W} = \sum_{i < j=1}^N \frac{\alpha^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}. \quad (2.47)$$

Die Zerfallsrate lässt sich demnach mit Fermis goldener Regel (2.20) berechnen

$$A_A = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \Psi_f(E_e) | \hat{W} | \Psi_a \rangle \right|^2 \rho_f(E_e), \quad (2.48)$$

wobei $\Psi_f(E_e)$ sowohl das Ion $X^{(q+1)+}$ als auch das freie Elektron beschreibt und $\rho_f(E_e)$ die Zustandsdichte des freien Elektrons angibt. Der Auger-Zerfall wird auch als Autoionisation bezeichnet, da die Ionisation ohne äußere Einwirkung erfolgt.

Verzweungsverhältnisse

Befindet sich ein Ion in einem mehrfach angeregtem Zustand Ψ_e , so kann es sich sowohl radiativ als auch durch einen Auger-Zerfall abregen. Die Wahrscheinlichkeiten für die beiden Zerfallswege hängen dabei nur von den Zerfallsraten der Übergänge ab

$$\begin{aligned} B_\gamma &= \frac{A_\gamma}{A_A + A_\gamma}, \\ B_A &= \frac{A_A}{A_A + A_\gamma}. \end{aligned} \tag{2.49}$$

A_γ und A_A sind hierbei die Summen der Zerfallsraten aller radiativen beziehungsweise autoionisierenden Übergänge mit Ψ_e als Ausgangszustand. Die Größen B_γ und B_A werden als Verzweungsverhältnis bezeichnet. In vielen Fällen ist eine Rate sehr viel größer als die andere, so dass effektiv nur ein Zerfallskanal betrachtet werden muss. Wie in Tabelle 2.1 aufgeführt, ist jedoch die Z -Abhängigkeit von radiativen Übergängen und Autoionisationsprozessen unterschiedlich, so dass sich auch die Verzweungsverhältnisse mit Z ändern. Für kleine Z ist die Autoionisation dominant, während für große Z der radiative Zerfall überwiegt. Dazwischen gibt es einen Bereich, in dem beide Prozesse vergleichbar stark sind, in diesem liegt auch das in dieser Arbeit untersuchte Eisen.

2.2.4 Linienbreiten

Lebensdauer angeregter Zustände

Aufgrund der Möglichkeit der spontanen Abregung oder des Auger-Zerfalls können angeregte Zustände ohne äußere Einwirkung in einen anderen Zustand übergehen. Die zeitliche Entwicklung der Besetzung $n(t)$ eines angeregten Zustands lässt sich daher durch einen exponentiellen Abfall beschreiben

$$n(t) = n(0)e^{-A_{\text{ges}}t} = n(0)e^{-t/\tau}. \tag{2.50}$$

Die Zeit $\tau = 1/A_{\text{ges}}$ gibt die mittlere Lebensdauer des Zustands an. Für die Gesamtzerfallsrate A_{ges} gilt

$$A_{\text{ges}} = \sum_i A_{\gamma,i} + \sum_j A_{A,j}, \tag{2.51}$$

wobei über alle Zustände i (j) summiert wird, in die der angeregte Zustand radiativ (autoionisierend) zerfallen kann.

Natürliche Linienbreite

Die Wellenfunktion eines zum Zeitpunkt $t = t_0$ angeregten Zustands mit Energie E_A lässt sich unter Verwendung von (2.3) schreiben als

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_A (t-t_0)} \frac{1}{\sqrt{\tau}} e^{-(t-t_0)/2\tau} \Theta(t-t_0), \quad (2.52)$$

wobei Θ die Heaviside-Stufenfunktion ist. Führt man hierfür eine Fourier-Transformation von der Zeit- in die Energiedarstellung durch, so erhält man

$$\chi(E) = \psi \frac{-i}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{\hbar/\tau}}{E_A - E - i(\hbar/2\tau)} e^{-i\frac{t_0}{\hbar} E}. \quad (2.53)$$

Die Energieverteilung ist das Betragsquadrat der Wellenfunktion

$$|\chi(E)|^2 = \frac{1}{2\pi} \frac{\hbar/\tau}{(E_A - E)^2 + (\hbar/2\tau)^2}, \quad (2.54)$$

sie entspricht einer Lorentz-Verteilung um die Resonanzenergie E_A mit der Breite

$$\Gamma = \frac{\hbar}{\tau} = \hbar \cdot A_{\text{ges}}. \quad (2.55)$$

Die Energie des angeregten Zustands ist also nicht mehr exakt definiert, sondern wird durch die obige Verteilung bestimmt. Somit unterliegt auch die Resonanzenergie bei der An- und Abregung (2.32) dieser Verteilung. Da diese Verbreiterung des Übergangs nicht von der experimentellen Auflösung abhängt, wird Γ als natürliche Linienbreite bezeichnet.

Experimentelle Verbreiterung

Neben der natürlichen Linienbreite haben auch experimentelle Beschränkungen einen Einfluss auf die gemessene Energieverteilung der Übergänge.

Dopplerverbreiterung In der Regel wird nicht ein einzelnes Ion, sondern ein Ensemble vieler Ionen untersucht. Befindet sich dieses im thermischen Gleichgewicht, so wird die Geschwindigkeit der Ionen durch eine Maxwell-Boltzmann-Verteilung beschrieben. Aufgrund der Bewegung der Ionen kommt es zu einer Dopplerverschiebung der Resonanzenergie. Betrachtet man einen ansonsten scharfen Übergang ($I = I_A \delta(E_A)$), so folgt hieraus eine

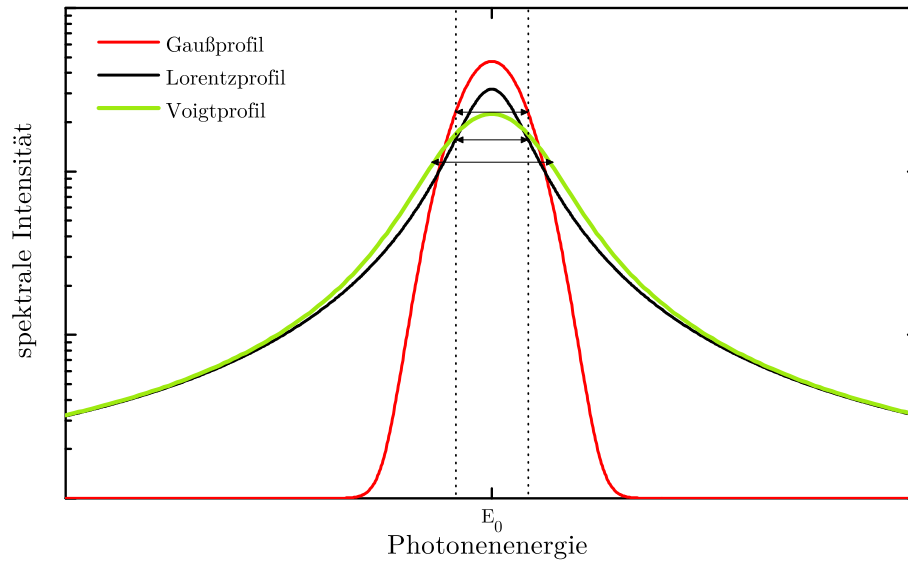


Abbildung 2.4: Vergleich der verschiedenen Linienprofile, dargestellt sind Lorentz- und Gaußverteilung gleicher Halbwertsbreite, sowie die aus deren Faltung entstehende Voigtverteilung. Die Lorentzverteilung unterscheidet sich insbesondere an den Flügeln deutlich von der Gaußverteilung. (Bild aus [89])

Gaußverteilung der gemessenen Intensität

$$I(E) = \frac{I_A}{\sqrt{2\pi\sigma_D^2}} \exp\left(-\frac{(E - E_A)^2}{2\sigma_D^2}\right). \quad (2.56)$$

Die Dopplerbreite σ_D ist abhängig von der Temperatur T des Ensembles sowie von der Masse m der Ionen

$$\sigma_D = \frac{E_A}{c} \sqrt{\frac{k_B T}{m}}. \quad (2.57)$$

Instrumentelle Auflösung Die zur Energiebestimmung eines emittierten Photons verwendeten Spektrometer haben ein endliches Auflösungsvermögen. Ebenso ist es nicht möglich einen komplett monochromatischen Photonenstrahl zur Anregung von Übergängen zu erzeugen. Deshalb wird selbst bei der Vermessung eines scharfen Übergangs stets eine Energieverteilung gemessen. Diese wird in der Regel als gaußförmig mit einer Breite σ_I genähert.

Gemessenes Linienprofil

Zur Bestimmung des gemessenen Linienprofils müssen die verschiedenen Energieverteilungen miteinander gefaltet werden. Die gaußförmigen Verteilungen können dabei zu einer

Tabelle 2.2: Resultierende Gesamtprozesse für verschiedene Arten der An- und Abregung.

Anregung	Abregung		
		radiativ	Augerzerfall
Elektronenstoß		Fluoreszenz	Ionisation
Resonante Rekombination	dielektronische Rekombination		Elektronenstreuung
Photoanregung		Photonenstreuung	Photoionisation

Gaußverteilung mit der Breite $\sigma_g = \sqrt{\sigma_D^2 + \sigma_I^2}$ zusammengefasst werden. Die verbleibende Faltung einer Lorentzverteilung L_Γ und einer Gaußverteilung G_σ wird durch die Voigtverteilung V beschrieben

$$V(E) = (L * G)(E) = \int L(\epsilon)G(E - \epsilon)d\epsilon. \quad (2.58)$$

Das Faltungsintegral lässt sich nicht analytisch lösen, jedoch kann es durch die Faddeeva-Funktion $w(z)$ ausgedrückt werden

$$V(E) = \text{Re} \left[w \left(\frac{E + i\Gamma/2}{\sigma\sqrt{2}} \right) \right] / \sigma\sqrt{2}, \quad (2.59)$$

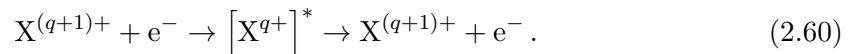
für die sehr gute numerische Näherungen existieren [90].

2.2.5 Mehrstufige Prozesse

Wird ein Ion durch Wechselwirkung mit Elektronen oder Photonen angeregt, so zerfällt dieser Zustand in der Regel schnell wieder. Deshalb ist es sinnvoll, die Anregung und die anschließende Abregung gemeinsam als einen Prozess zu betrachten. In Tabelle 2.2 sind die resultierenden Prozesse für die verschiedenen Arten der An- und Abregung dargestellt. Da bei den Prozessen mit resonanter Anregung nur ein Zustand angeregt wird, lässt sich aus der Beobachtung der unterschiedlichen Gesamtprozesse direkt auf das Verzweigungsverhältnis dieses Zustands schließen. Deshalb werden diese Prozesse hier ausführlicher dargestellt.

Resonante Rekombination

Zerfällt ein durch resonante Rekombination angeregtes Ion durch einen Augerzerfall, so entspricht dieser Prozess dem einer resonanten Elektronenstreuung



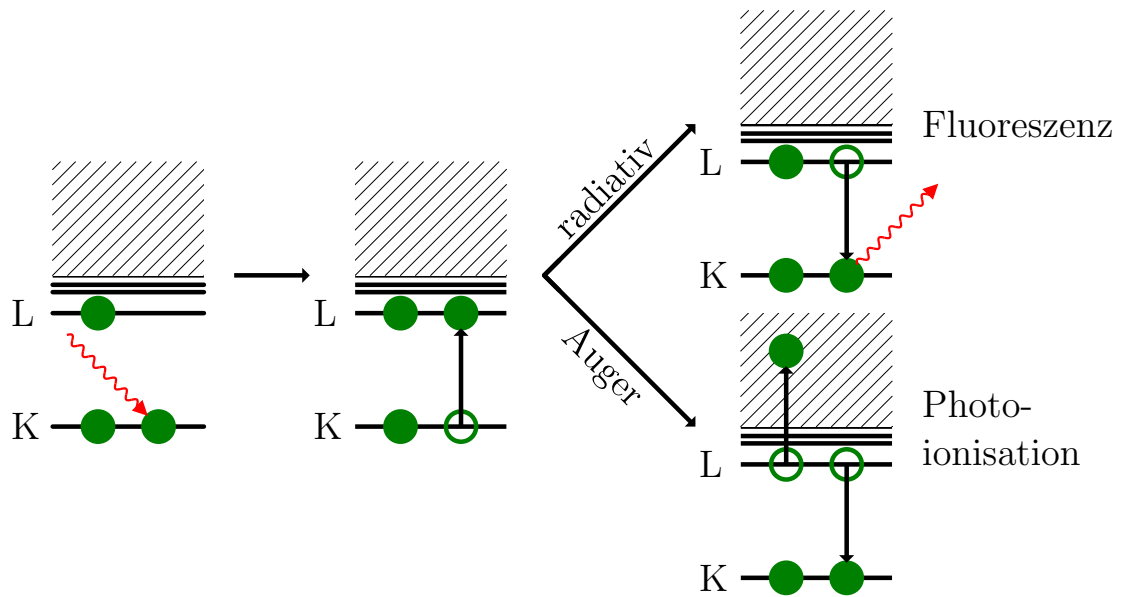
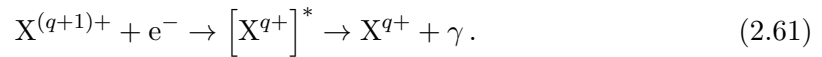


Abbildung 2.5: Darstellung der K-Schalen-Photoanregung und der anschließenden Zerfallsmöglichkeiten am Beispiel eines Li-artigen Ions. Bei Be- bis F-artigen Ionen sind die Prozesse analog, jedoch befinden sich entsprechend mehr Elektronen in der L-Schale.

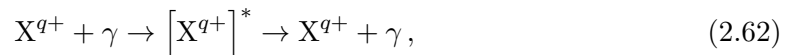
Regt es sich jedoch radiativ ab, so bleibt die Ladungsänderung erhalten und die beim Einfang frei werdende Energie wird wiederum als Photon ausgesandt



Dieser Prozess wird als dielektronische⁶ Rekombination bezeichnet. Aufgrund des resonanten Charakters ist die dielektronische Rekombination ein sehr effizienter Prozess zur Umwandlung von freien Elektronen in Photonen in einem Plasma und kann somit einen starken Einfluss auf dessen Eigenschaften haben. Aus diesem Grund und da sie sich durch die entstehenden Photonen gut nachweisen lässt, ist die dielektronische Rekombination Gegenstand zahlreicher Untersuchungen [91–94].

Photoanregung

Ein durch ein Photon angeregtes Ion kann stets radiativ zerfallen



dies entspricht einer resonanten Photonenstreuung und wird im Weiteren auch als Fluoreszenz bezeichnet. Ist der angeregte Zustand autoionisierend, so ist auch folgender Prozess

⁶Sind im angeregten Zustand mehr als zwei Elektronen angeregt, so spricht man von tri-, quadru-, usw. elektronischer Rekombination.

möglich

$$X^{q+} + \gamma \rightarrow [X^{q+}]^* \rightarrow X^{(q+1)+}, \quad (2.63)$$

welcher einer resonanten Photoionisation entspricht. Diese hat einen starken Einfluss in strahlungsdominierten Plasmen, da ihre Wirkungsquerschnitte meistens wesentlich größer als die der direkten Photoionisation sind. Da in der Astrophysik nur Photoabsorption oder Fluoreszenz beobachtet wird, lässt sich die Photoionisation nur indirekt nachweisen, wenn das Verzweigungsverhältnis beider Kanäle bekannt ist. Dieses Verhältnis lässt sich für die untersuchten Ionen aus den in dieser Arbeit gemessenen Raten bestimmen.

2.2.6 Einfluss der Polarisation

Die radiative Zerfallsrate (2.36) gibt eine totale Übergangswahrscheinlichkeit an. Beobachtet man den Zerfall mit einem endlich ausgedehnten Detektor, so muss die Winkelverteilung der Abstrahlung berücksichtigt werden. Wird der angeregte Zustand durch Photoabsorption erzeugt, so ist sie abhängig von der Polarisation des Photons und von den Gesamtdrehimpulsen der beteiligten Zustände [95]. Für den Übergang

$$|\alpha_A, J_A\rangle + \gamma \rightarrow |\alpha_Z, J_Z\rangle \rightarrow |\alpha_E, J_E\rangle + \gamma, \quad (2.64)$$

mit den Drehimpulsen J und den weiteren Quantenzahlen α und bei Absorption eines Photons aus z -Richtung lässt sich die Winkelverteilung beschreiben durch

$$W(\theta, \phi) = \frac{W_0}{4\pi} \left[1 - 3\sqrt{\frac{2\pi}{15}}\beta \sum_q \rho_{2q}^{\gamma_0} Y_{2q}(\theta, \phi) \right], \quad (2.65)$$

wobei ρ ein die Polarisation des Photons beschreibenden statistischer Tensor und Y_{lm} die Kugelflächenfunktionen sind. Der Anisotropiekoeffizient β lässt sich mit den Wigner'schen 6j-Symbolen $\{\dots\}$ darstellen als

$$\beta = 3(-1)^{1+J_A-J_E} (2J+1) \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & 2 \\ J_Z & J_Z & J_E \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & 2 \\ J_Z & J_Z & J_A \end{matrix} \right\}. \quad (2.66)$$

Für ein vollständig linear polarisiertes Photon vereinfacht sich (2.65) zu

$$W(\theta, \phi) = \frac{W_0}{4\pi} \left(1 + \frac{\beta}{2} (3 \cos^2 \theta - 1) \right). \quad (2.67)$$

Die Anisotropiekoeffizienten und Abstrahlcharakteristiken für die in dieser Arbeit untersuchten Übergänge sind in Tabelle 2.3 und Abbildung 2.6 dargestellt.

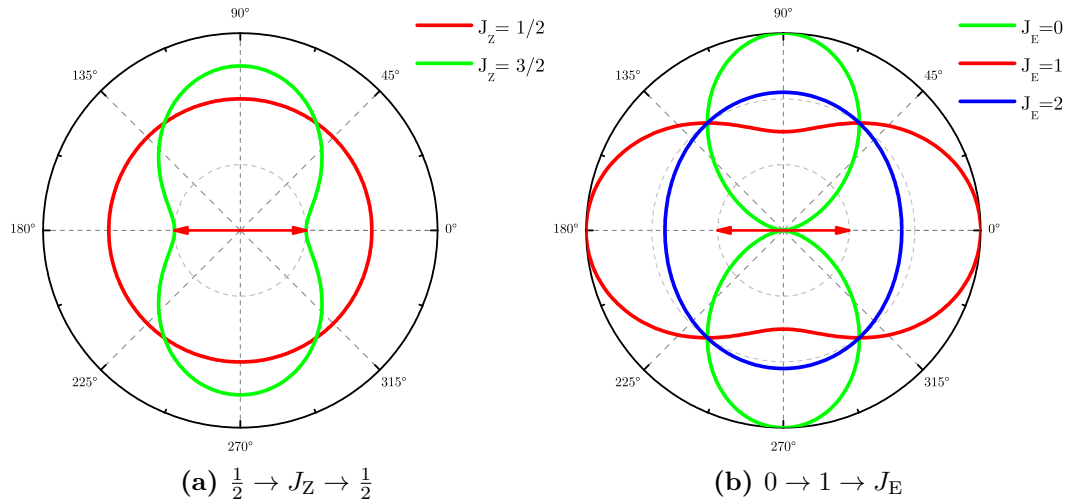


Abbildung 2.6: Abstrahlcharakteristik der Fluoreszenz. Die roten Pfeile zeigen die Polarisationsrichtung des anregenden Photons an. Der Photonenstrahl steht senkrecht zur Bildebene, die Verteilungen sind rotationssymmetrisch um die 90°-Achse.

2.3 Elektronenstrahlionenfallen

Die Elektronenstrahlionenfalle (EBIT, von engl. *electron beam ion trap*) wurde am *Lawrence Livermore National Laboratory* (LLNL) entwickelt und 1986 erstmals in Betrieb genommen [96]. Sie basiert auf dem Konzept der in *Dubna* erfundenen Elektronenstrahlionenquellen [97]. In einer EBIT lassen sich die Ionen länger speichern, so dass höchste Ladungszustände (einschließlich nacktem Uran U^{92+} [98]) erreicht werden können. Seitdem haben sich Elektronenstrahlionenfallen bei der Erzeugung und Untersuchung von hochgeladenen Ionen als vielseitiges Instrument bewährt [99, 100].

2.3.1 Funktionsprinzip einer EBIT

In einer EBIT werden Ionen durch Elektronenstoßionisation erzeugt. Dazu wird von einer Elektronenkanone ein Elektronenstrahl erzeugt, welcher die Fallenregion durchquert und anschließend von einem Kollektor aufgefangen wird. Um hinreichend hohe Stromdichten

J_A	J_Z	J_E	β
0	1	0	-1
0	1	1	$\frac{1}{2}$
0	1	2	$-\frac{1}{10}$
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0
$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$

Tabelle 2.3: Anisotropiekoeffizienten für die in dieser Arbeit untersuchten Übergänge, berechnet mit Gleichung 2.66.

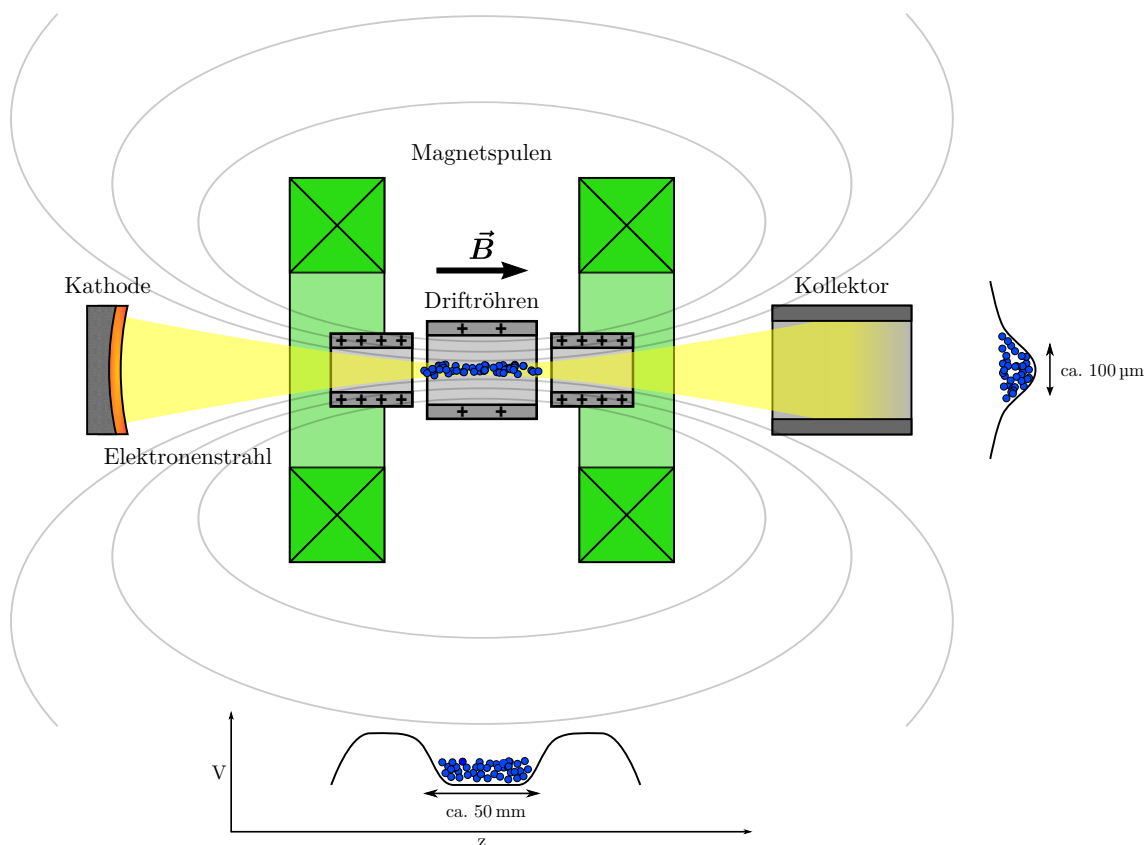


Abbildung 2.7: Funktionsprinzip einer EBIT: Der durch ein Magnetfeld stark komprimierte Elektronenstrahl ionisiert die Atome und bindet die Ionen aufgrund seiner Raumladung radial. Axial werden die Ionen durch ein von Driftröhren erzeugten elektrostatischen Potentialtopf gefangen. (Bild nach [101])

zu erreichen, muss der Elektronenstrahl stark komprimiert werden. Dies erfolgt durch ein starkes magnetischen Feld, welches im Fallenbereich homogen und parallel zum Strahl sowie an den Orten von Kanone und Kollektor möglichst klein sein sollte. Zur Erzeugung des Magnetfelds wird meistens ein Helmholtz-Spulenpaar verwendet, wodurch ein optischer Zugang zum Fallenzentrum ermöglicht wird.

Durch die hohe negative Raumladungsdichte des Elektronenstrahls werden die positiv geladenen Ionen von diesem angezogen und somit radial gefangen. Um die Ionen auch in axialer Strahlrichtung zu fangen, werden in der Fallenregion mehrere (mindestens drei) zylindrische Elektroden, genannt Driftröhren, um den Elektronenstrahl angeordnet. Durch Anlegen eines ausreichend positiven elektrischen Potentials an die äußeren Driftröhren wird im Fallenzentrum ein axialer Potentialtopf erzeugt, und die Ionen können die Falle nicht mehr verlassen.

Die in der Falle gefangenen Ionen stoßen ständig mit dem Elektronen aus dem Strahl, wodurch sie ständig weiter ionisiert werden. Da die Ionen jedoch auch durch Rekombination von Elektronen und Ladungsaustausch mit neutralen Atomen ihren Ladungszustand verringern können, stellt sich nach einiger Zeit ein Gleichgewicht ein, welches Ionen verschiedener Ladungszustände enthält. Der maximale Ladungszustand ist dabei derjenige, dessen zur Erzeugung benötigte Ionisationsenergie noch niedriger ist als die Elektronenstrahlenergie.

2.3.2 Eigenschaften des Elektronenstrahls

Strahldurchmesser

Die Kompression des Elektronenstrahls durch ein Magnetfeld lässt sich in erster Näherung durch die Gyrationbewegungen der Elektronen beschreiben. Hat ein Elektron eine Geschwindigkeitskomponente in der Ebene senkrecht zum Magnetfeld, so führt es in dieser Ebene Kreisbewegungen mit einem Radius r_g aus. Der auf dieser Kreisbahn eingeschlossene magnetische Fluss

$$\Phi = \pi r_g^2 B \quad (2.68)$$

ist eine Erhaltungsgröße. Für Radius r an einem Ort mit Magnetfeld B gilt somit

$$r_g = r_{g,K} \sqrt{\frac{B_K}{B}}, \quad (2.69)$$

wobei $r_{g,K}$ der Strahlradius und B_K das Magnetfeld am Ort der Kathode ist. Hieran lässt sich erkennen, dass es für einen kleinen Strahldurchmesser notwendig ist, dass sich die Kathode an einem möglichst magnetfeldfreien Ort befindet.

Bei thermionischen Kathoden hat zudem die Temperatur T_K der Kathode einen Einfluss auf die Strahlgröße. Eine ausführliche Beschreibung für solche Elektronenstrahlen liefert die *optische Theorie* von Herrmann [102]. Aus ihr ergibt sich der Herrmann-Radius r_H , der einen zeitlich gemittelten Radius des Elektronenstrahls beschreibt, innerhalb dessen sich 80 % aller Elektronen befinden [103, 96]

$$r_H = \sqrt{\frac{m_e I}{\pi \epsilon_0 v_e B^2} + \sqrt{\left(\frac{m_e I}{\pi \epsilon_0 v_e B^2}\right)^2 + \frac{8kT_K m_e}{e^2 B^2} r_K^2 + \frac{B_K^2}{B^2} r_K^4}}. \quad (2.70)$$

Hierbei ist r_K der Radius der Kathode, I der Elektronenstrahlstrom und v_e die Elektronengeschwindigkeit im Strahl.

Raumladung

Die Raumladung des Elektronenstrahls sorgt für den radialen Einschluss der Ionen. Das aus ihr folgende elektrische Potential lässt sich quantifizieren, wenn man den Elektronenstrahl als unendlich langen Zylinder mit Radius r_H annimmt, in dem die Elektronen gleichmäßig verteilt sind. Dann ergibt sich innerhalb des Strahls eine Ladungsdichte von

$$\rho = \frac{I}{\pi r_H^2 v_e}. \quad (2.71)$$

Das Potential Φ_e erhält man durch Lösen der Poisson-Gleichung $\Delta \Phi_e = -\rho/\epsilon_0$, wobei man als Randbedingung $\Phi(r_D) = 0$ benutzt, da der Einfluss des Elektronenstrahls an den auf einem festen Potential liegenden Driftröhren mit Radius r_D verschwinden muss.

$$\Phi_e(r) = \begin{cases} \Phi_0 \left(\left(\frac{r}{r_H} \right)^2 + 2 \ln \left(\frac{r_H}{r_D} \right) - 1 \right) & r \leq r_H \\ \Phi_0 \cdot 2 \ln \left(\frac{r}{r_D} \right) & r > r_H \end{cases}. \quad (2.72)$$

Das charakteristische Potential Φ_0 ist abhängig von der Ladungsdichte des Elektronenstrahls, unter Verwendung von (2.71) erhält man

$$\Phi_0 = \frac{I}{4\pi \epsilon_0 v_e} = \frac{I}{4\pi \epsilon_0} \sqrt{\frac{m_e}{2E_e}}, \quad (2.73)$$

wobei im letzten Schritt die Geschwindigkeit der Elektronen durch die experimentell besser zugängliche Energie ersetzt wurde.

Strahlenergie

Damit der Elektronenstrahl den Kollektor erreicht, muss das elektrische Potential im gesamten Strahlverlauf höher sein als am Ort seiner Entstehung. Deshalb wird die Kathode

auf ein negatives Potential U_K gelegt. Um die Elektronenstrahlenergie weiter zu erhöhen wird ein positives Potential an die Driftröhren U_D angelegt, so dass für die Gesamtenergie

$$E_e = e(-U_K + U_D + \Phi_e + \Phi_I + \Phi_A) \quad (2.74)$$

gilt. Das Potential Φ_I wird dabei durch die positive Raumladung der in der Falle gespeicherten Ionen verursacht. Durch die Austrittsarbeiten von Kathoden- und Driftröhrenmaterial ergibt sich zudem eine weitere Potentialverschiebung Φ_A von wenigen Volt.

2.4 Synchrotronstrahlung

Für die Untersuchung der im letzten Abschnitt beschriebenen Photoabsorptionsprozesse werden möglichst intensive Strahlungsquellen benötigt. Im optischen Bereich lassen sich dafür Laser verwenden [84]. Dessen Prinzip der Besetzungsinversion kann jedoch mangels geeigneter atomarer Übergänge nicht auf den Röntgenbereich ausgedehnt werden, weshalb hier Synchrotronstrahlung genutzt wird.

Ein Synchrotron ist ein ringförmiger Teilchenbeschleuniger, dessen Ablenkmagnete *synchron* mit der Strahlenergie hochgefahren werden, so dass sich die Teilchen stets auf der gleichen Bahn bewegen. Die Ablenkung in den Magneten entspricht einer Beschleunigung senkrecht zur Bewegungsrichtung, weshalb die geladenen Teilchen elektromagnetische Strahlung aussenden. Nachdem diese Strahlung zunächst parasitär an bestehenden Beschleunigern genutzt wurde, werden mittlerweile speziell als Strahlungsquelle konzipierte Synchrotrone verwendet, da sich die Anforderungen an einen Beschleuniger – möglichst wenig Energieverlust – und an eine Strahlungsquelle – möglichst viel Abstrahlung – widersprechen. Einen großen Fortschritt stellt die Nutzung von Undulatoren und Wigglern dar. Diese lenken die Teilchen auf eine spezielle Slalombahn, so dass sie besonders stark abstrahlen.

2.4.1 Abstrahlung beschleunigter Ladungen

Wird eine Ladung q mit der Geschwindigkeit $\vec{v} = \vec{\beta}c$ beschleunigt, so folgt aus den Maxwell-Gleichungen, dass sie elektromagnetische Strahlung aussendet [73, 66]. Die Strahlungsleistung, beobachtet aus der Richtung \vec{e}_r , wird dabei beschrieben durch

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{q^2}{16\pi^2\epsilon_0c} \frac{\left| \vec{e}_r \times \left[(\vec{e}_r - \vec{\beta}) \times \dot{\vec{\beta}} \right] \right|^2}{(1 - \vec{e}_r \cdot \vec{\beta})^5}. \quad (2.75)$$

Betrachtet man eine Beschleunigung senkrecht zur Bewegungsrichtung $\vec{\beta} = \beta \vec{e}_z \perp \dot{\vec{\beta}} = \dot{\beta} \vec{e}_y$, so lässt sich (2.75) schreiben als

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{q^2}{16\pi^2\epsilon_0 c} \dot{\beta}^2 \frac{(\cos\theta - \beta)^2 + (1 - \beta^2) \sin^2\theta \cos^2\phi}{(1 - \beta \cos\theta)^5}, \quad (2.76)$$

wobei θ und ϕ Polar- und Azimutwinkel der Beobachtungsrichtung \vec{e}_r sind. Im Ruhesystem der Ladung ($\beta = 0$) hat die Abstrahlung eine Dipolcharakteristik, bei relativistischen Geschwindigkeiten erfolgt, wie in Abbildung 2.8 dargestellt, die Emission fast ausschließlich kegelförmig in Vorwärtsrichtung. Der Öffnungswinkel des Strahlungskegels lässt sich durch folgende Überlegung abschätzen [104]: Im Ruhesystem der Ladung habe ein in x -Richtung abgestrahltes Photon den Impuls $\vec{p}' = p'_0 \vec{e}_x$. Durch die Lorentztransformation ins Laborsystem erhält es zusätzlich eine Impuls in z -Richtung $\vec{p} = p'_0 \vec{e}_x + \beta\gamma p'_0 \vec{e}_z$, wobei

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} \quad (2.77)$$

der Lorentz-Faktor ist. Somit ergibt sich für den Winkel Θ des Photons zur Flugrichtung der Ladung

$$\Theta \approx \tan\Theta = \frac{p_x}{p_z} = \frac{p'_0}{\beta\gamma p'_0} \approx \frac{1}{\gamma}, \quad (2.78)$$

wobei Θ dem halben Öffnungswinkel des Strahlungskegels entspricht. In einem Synchrotron werden Ladungen typischerweise durch ein Magnetfeld B auf eine Bahn mit Radius ρ gelenkt. Integriert man (2.76) und verwendet die Beziehungen $\dot{\beta} = \beta^2 c / \rho$ und $\rho = mc\beta\gamma / Bq$, so erhält man für die totale abgestrahlte Leistung

$$P = \frac{2}{12\pi\epsilon_0} \frac{B^4 \rho^2}{c^3} \frac{q^6}{m^4}. \quad (2.79)$$

Aufgrund der q^6/m^4 Skalierung ist die Synchrotronstrahlung für schwere Teilchen stark unterdrückt ($P(\text{H}^+)/P(\text{e}^-) \approx 10^{-13}$), weshalb für Strahlungsquellen ausschließlich Elektronen verwendet werden.

2.4.2 Undulatoren

Die Strahlungsleistung lässt sich erhöhen, indem man mehrere Dipolmagnete mit alternierender Polarisation direkt hintereinander anordnet [105]. Hierdurch werden die Elektronen auf einen „Slalom“-Kurs gebracht, auf dem sie ihre mittlere Flugrichtung beibehalten, während sie in jedem Magneten erneut abstrahlen (siehe Abbildung 2.9). Das Magnetfeld

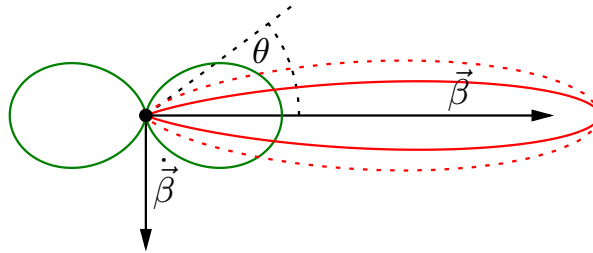


Abbildung 2.8: Abstrahlcharakteristik einer beschleunigten Ladung gemäß Gleichung (2.76). Die durchgehenden Linien zeigen die Verteilung in der yz -Ebene ($\phi = \frac{\pi}{2}$) für $\beta = 0$ (grün) und $\beta = 0.9$ (rot). Im Ruhesystem ist die Verteilung rotations-symmetrisch um die Beschleunigungsrichtung, während sie für relativistische Geschwindigkeiten nahezu rotations-symmetrisch um die Bewegungsrichtung ist. Die rote gestrichelte Linie zeigt die Verteilung für $\beta = 0.9$ in der xz -Ebene ($\phi = 0$). Die Verteilungen für $\beta = 0.9$ sind um einen Faktor 300 verkleinert dargestellt.

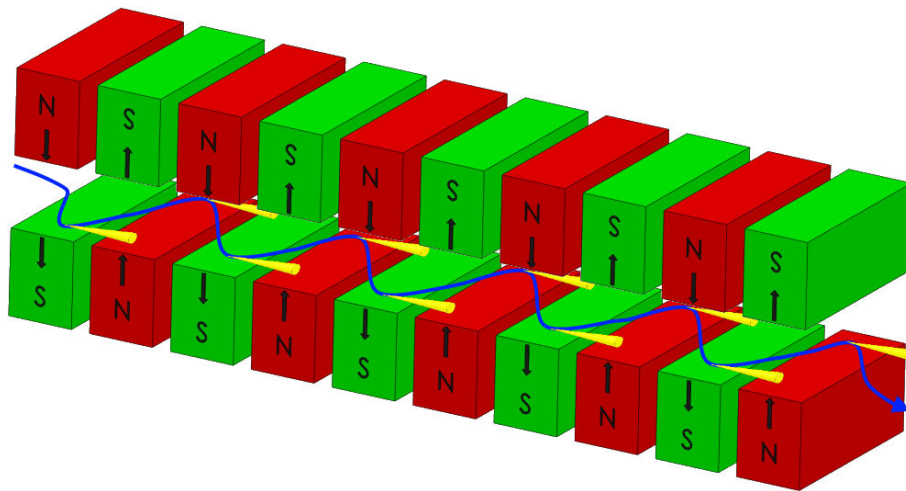


Abbildung 2.9: Schematische Zeichnung eines Undulators, bestehend aus Dipolmagneten mit alternierender Polarisation. Blau dargestellt ist zudem die Bahn eines Elektrons, welches den Undulator axial durchquert, wobei die Auslenkung stark vergrößert dargestellt ist. An den Umkehrpunkten der Bahn ist die Beschleunigung maximal, hier sind die Strahlungskegel der emittierten Photonen eingezeichnet, welche alle in Vorwärtsrichtung zeigen (Bild aus [89]).

dieser Struktur lässt sich beschreiben durch [106]

$$\vec{B}(z) = B_0 \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_u} z\right) \vec{e}_y, \quad (2.80)$$

wobei λ_u die Periodenlänge der Magnetanordnung ist. Auf das Elektron wirkt somit die Lorentzkraft

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt} = e \left(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B} \right). \quad (2.81)$$

Unter der Annahme, dass die Geschwindigkeitsänderung durch die Auslenkung minimal ist ($\vec{v} \approx v_z \vec{e}_z$) und dass das erzeugte elektrische Feld so klein ist, dass es keinen Einfluss auf die Bahn hat, vereinfacht sich (2.81) zu

$$\dot{p}_x = m\gamma \dot{v}_x = -e v_z B_0 \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_u} z\right). \quad (2.82)$$

Integration über die Zeit und umstellen nach v_x liefert

$$v_x = -\frac{c}{\gamma} \frac{e B_0 \lambda_u}{\underbrace{2\pi m_e c}_{\equiv K}} \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_u} z\right). \quad (2.83)$$

Die hier definierte dimensionslose Größe K wird als Undulatorfeld-Parameter bezeichnet. Sie ist ein Maß dafür, wie stark die Teilchen von ihrer geradlinigen Bahn abgelenkt werden. Ist $K \leq 1$, so bezeichnet man die Magnetanordnung als Undulator, ist $K > 1$ als Wiggler. Mit (2.83) lässt sich der maximale Ablenkwinkel abschätzen

$$\phi \approx \tan \phi = \frac{v_x}{v_z} = -\frac{K}{\gamma} \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_u} z\right) \quad \longrightarrow \quad \phi_{\max} = \frac{K}{\gamma}. \quad (2.84)$$

In einem Undulator ist ϕ_{\max} kleiner als der Öffnungswinkel des Strahlungskegels, und es kommt zur Interferenz der emittierten Strahlung. Hierdurch wird das abgestrahlte Spektrum schmalbandiger und die Intensität der Strahlung wird proportional zum Quadrat der Periodenanzahl N_u^2 . Die Interferenzbedingung ist in Abbildung 2.10 skizziert. Das Elektron bewegt sich in z -Richtung mit der mittleren Geschwindigkeit $\langle v_z \rangle$ und benötigt daher für den Durchlauf einer Periode die Zeit $\tau = \lambda_u / \langle v_z \rangle$. In dieser Zeit legen die emittierten Photonen die Strecke $c\tau$ zurück. Beobachtet man die Abstrahlung unter einem Winkel θ , so gilt für den Gangunterschied

$$\Delta = c\tau - \lambda_u \cos \theta \quad (2.85)$$

$$\stackrel{!}{=} n\lambda_\gamma, \quad (2.86)$$

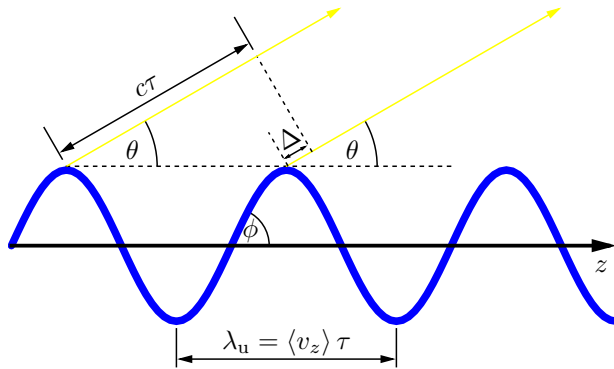


Abbildung 2.10: Skizze der Interferenzbedingung. Die Abstrahlung aus benachbarten Magnetperioden weist einen Gangunterschied Δ auf.

wobei die zweite Gleichung die Bedingung für konstruktive Interferenz von Photonen mit Wellenlänge λ_γ ist. Verwendet man $v_z = \sqrt{v^2 - v_x^2}$ und Gleichung 2.83, so erhält man für $\langle v_z \rangle$ näherungsweise [106]

$$\langle v_z \rangle \approx c \left[1 - \frac{1}{2\gamma^2} \left(1 + \frac{K^2}{2} \right) \right]. \quad (2.87)$$

Setzt man dies in (2.86) ein, so erhält man nach weiteren Näherungen⁷ und für $n = 1$ die Undulatorgleichung

$$\lambda_\gamma = \frac{\lambda_u}{2\gamma^2} \left[1 + \frac{1}{2}K^2 + (\theta\gamma)^2 \right]. \quad (2.88)$$

Mit ihr lässt sich aus den Parametern des Undulators auf die Wellenlänge des Lichts schließen, welches resonant verstärkt wird. In der Regel wird die Abstrahlung direkt in Strahlrichtung ($\theta = 0$) genutzt, die Resonanzbedingung führt dann zu einer spektralen Auflösung von

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{1}{N_u}. \quad (2.89)$$

In einem Wiggler findet dagegen keine konstruktive Interferenz statt, so dass diese ein breiteres Spektrum haben und die Intensität lediglich proportional zu N_u ist.

Aufgrund der lineare Auslenkung der Elektronen ist die emittierte Strahlung vollständig linear polarisiert. Durch spezielle Anordnungen der Undulatormagnete lassen sich jedoch auch beliebig polarisierte Strahlen erzeugen [107].

⁷Für einen kleinen Winkel θ gilt $\cos\theta \approx 1 - \theta^2/2$ und da $x = (1 + K^2/2)/2\gamma^2$ bei großem γ sehr klein ist, lässt sich $\frac{1}{1-x}$ durch $1 + x$ nähern.

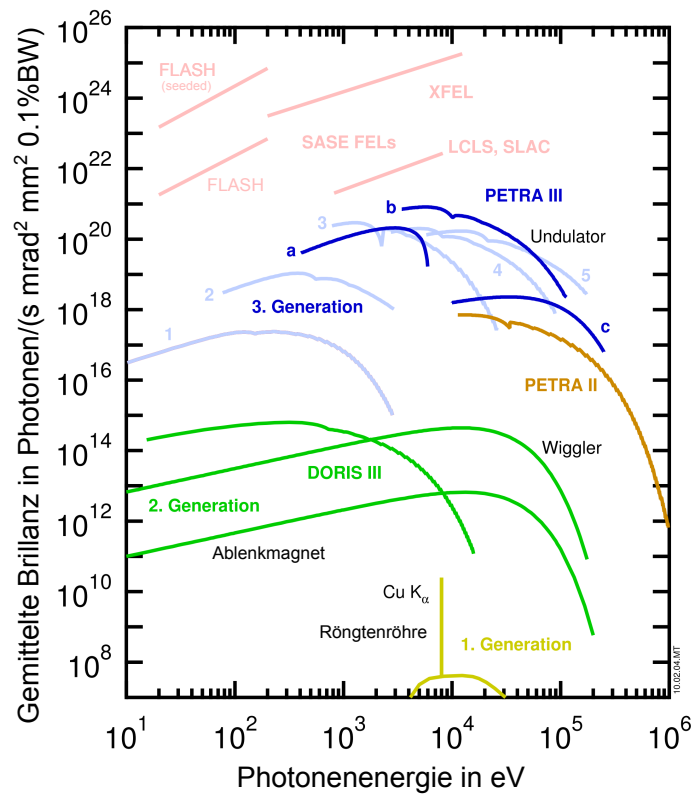


Abbildung 2.11: Übersicht der Brillanz verschiedener Strahlungsquellen. In hellblau eingezeichnet sind weitere Synchrotronstrahlungsquellen: 1. BESSY II, 2. Advanced Light Source, 3. ESRF, 5. SPring-8. (Abbildung aus [108])

2.4.3 Charakterisierung von Strahlungsquellen

Als Maß zur quantitativen Beschreibung von Strahlungsquellen wird die Brillanz verwendet. Sie gibt die Anzahl der emittierten Photonen N pro Zeit, Fläche A , Raumwinkel $\Delta\Omega$ und innerhalb einer bestimmten Bandbreite $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$ (meistens 0,1 %) um die zentrale Wellenlänge an.

$$B = \frac{N}{tA\Delta\Omega\frac{\Delta\lambda}{\lambda}} \quad (2.90)$$

Sie ist besser geeignet als die Intensität, da sie zusätzlich Informationen über die strahlenoptischen Eigenschaften enthält und es bei den meisten Anwendungen wichtig ist möglichst viele Photonen einer Wellenlänge auf einen kleinen Bereich zu fokussieren.

2.4.4 Röntgenstreuung an Kristallen

Trifft ein Röntgenstrahl auf eine Kristalloberfläche, so wirken die einzelnen Atome des Kristalls als Streuzentren. Aufgrund der fixierten Positionen der Atome im Gitter ha-

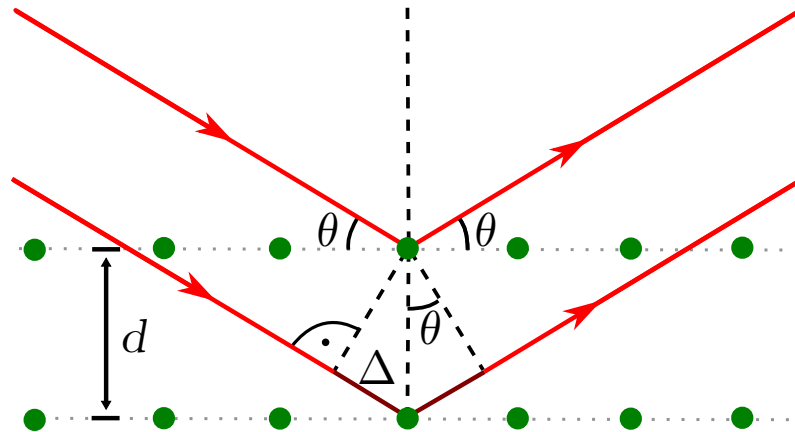


Abbildung 2.12: Einfallende Röntgenstrahlen werden an den Atomen eines Kristalls gestreut. Die an unterschiedlichen Gitterebenen gestreuten Strahlen haben dabei einen Gangunterschied von 2Δ , was zur Interferenzbedingung (2.91) führt.

ben die reflektierten Strahlen eine feste Phasenbeziehung zueinander. Wie in Abbildung 2.12 dargestellt, beträgt der Gangunterschied zwischen Strahlen, die an unterschiedlichen Gitterebenen gestreut werden $2\Delta = 2d \sin \theta$. Hieraus ergibt sich eine Bedingung für die konstruktive Interferenz beider Strahlen, welche die Wellenlänge mit dem Einfallswinkel und dem Gitterabstand d verknüpft

$$n \cdot \lambda = 2d \sin \theta. \quad (2.91)$$

Diese Beziehung wurde erstmals von W. L. Bragg beschrieben [109], weswegen der Winkel θ , wenn er diese Bedingung erfüllt, auch als Bragg-Winkel bezeichnet wird. Bei bekannter Gitterkonstante ermöglicht sie, durch Einstellen des Braggwinkels die Wellenlänge der reflektierten Strahlung festzulegen. Dieses Prinzip wird an Synchrotronstrahlungsquellen angewandt, um die Bandbreite des vom Undulator erzeugten Strahls zu verringern und somit die Energieauflösung zu erhöhen.

Kapitel 3

Aufbau des Experiments

Ein Experiment zur Untersuchung der Photoionisation hochgeladener Ionen lässt sich in drei Schritte unterteilen. Zuerst erzeugt man die gewünschten hochgeladenen Ionen, anschließend werden diese mit einem Photonenstrahl in Wechselwirkung gebracht, und abschließend weist man die Photoionisation durch Detektion der Photoionen oder Photoelektronen nach.

Der in der vorliegenden Arbeit verwendete Aufbau ist in Abbildung 3.1 dargestellt. Zur Erzeugung der Ionen wurde die Elektronenstrahlionenfalle FLASH-EBIT verwendet, die Anregung erfolgte mit einem monochromatisierten Strahl des Synchrotrons PETRA III. Zum Nachweis der Photoionisation wurden die Ionen aus der EBIT extrahiert und ihre Ladungsänderung beobachtet. Um auch die radiative Abregung zu erfassen, wurde die Fluoreszenz der Ionen mit mehreren Röntgendetektoren gemessen.

In diesem Kapitel werden die verwendeten Komponenten detailliert beschrieben.

3.1 Die FLASH-EBIT

Die FLASH-EBIT wurde am Max-Planck-Institut für Kernphysik entwickelt und 2005 in Betrieb genommen. Ihr Design basiert auf dem der Heidelberg-EBIT [110], wurde jedoch speziell auf die Bedürfnisse eines Einsatzes an externen Strahlungsquellen optimiert. Sie ist möglichst kompakt gehalten, so dass sich der gesamte Aufbau in einem Standardcontainer transportieren lässt. Nach der Ankunft am Zielort ist sie innerhalb von drei Tagen einsatzbereit. Mit einer Elektronenstrahlenergie von bis zu 25 kV und einem Strahlstrom von bis zu 500 mA ist sie dennoch leistungsfähig genug, um Ionen aller Elemente in fast allen Ladungszuständen in hinreichender Menge zu erzeugen. So wurde sie in der Vergangenheit erfolgreich bei Experimenten an Freien-Elektronen-Lasern, wie dem namensgebenden FLASH [111, 112], der LCLS in Stanford [113] und an den Synchrotronstrahlungsquellen BESSY II [114, 115] und PETRA III [39] eingesetzt.

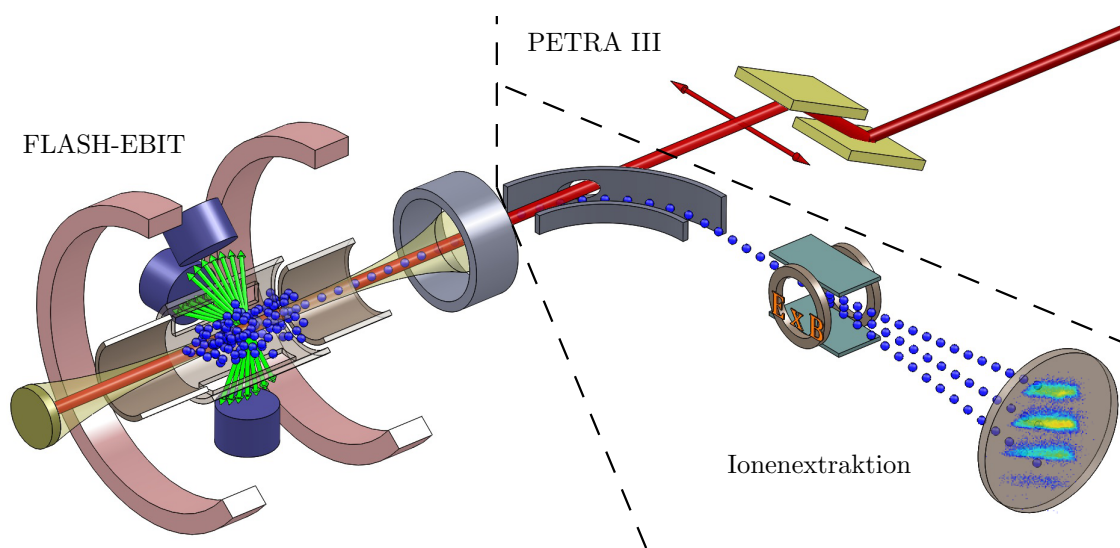


Abbildung 3.1: Schematischer Aufbau des Experiments. In der FLASH-EBIT werden hochgeladene Eisenionen (blaue Kugeln) erzeugt. Diese werden durch einen Photonenstrahl (rot) des Synchrotrons PETRA III angeregt. Fluoreszenzphotonen (grün) werden mit drei Detektoren gemessen. Zudem werden die Ionen kontinuierlich aus der EBIT extrahiert und ladungszustandsselektiv detektiert. (3D-Modell erstellt von J. Rudolph)

Im folgenden werden die für diese Arbeit wichtigen Elemente der FLASH-EBIT erläutert, eine ausführliche Beschreibung der EBIT findet sich in [116].

3.1.1 Elektronenstrahl

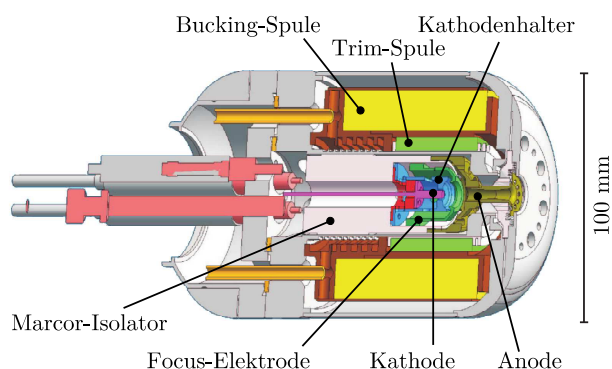


Abbildung 3.2: Schnittansicht der Elektronenkanone der FLASH-EBIT (nach [116]).

Der Elektronenstrahl wird in der Elektronenkanone (Abbildung 3.2) erzeugt. Die aus einer mit Bariumoxid dotierten Wolfram-Matrix bestehende Kathode wird dazu auf eine Temperatur von über 1200 K aufgeheizt. Bei diesen Temperaturen haben die Elektronen

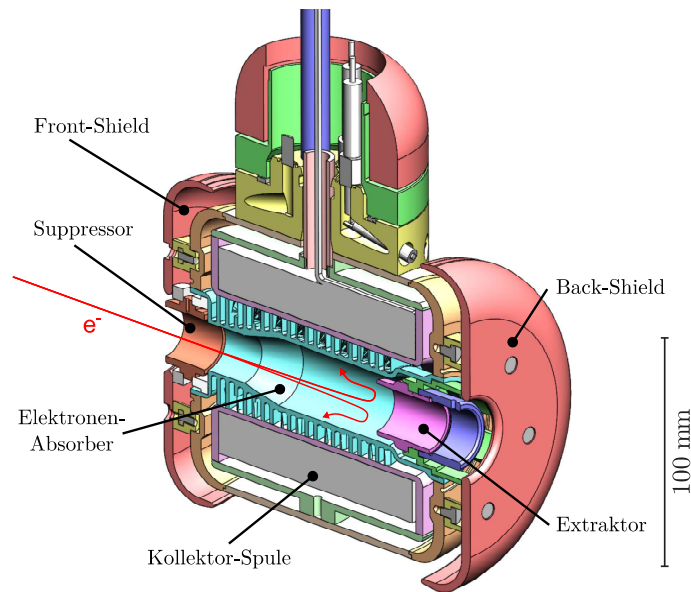


Abbildung 3.3: Schnittansicht des Elektronenkollektors der FLASH-EBIT (nach [116]).

eine thermische Energie, die ausreichend ist, um die Austrittsarbeit des Bariumoxids von 1,2 eV zu überwinden. Die ausgetretenen Elektronen werden durch die Anodenelektrode abgesaugt und bilden den Elektronenstrahl. Zur Beschleunigung der Elektronen ist die Kathode auf ein negatives Potential gelegt. Durch die Focus-Elektrode zwischen Kathode und Anode lässt sich der Strahlstrom regulieren. Die Kathode ist von der Trim-Spule und der Bucking-Spule umgeben, mit denen das Restmagnetfeld des supraleitenden Magneten der EBIT kompensiert wird, damit durch ein minimales Magnetfeld am Ort der Kathode ein kleiner Strahldurchmesser möglich wird (siehe Gleichung 2.70). Nach dem Verlassen der Kanone läuft der Elektronenstrahl durch die Fallenregion. In dieser wird er durch ein 6 T-Magnetfeld auf einen Durchmesser von unter 50 μm komprimiert. Anschließend werden die Elektronen vom Kollektor (Abbildung 3.3) aufgefangen. Dieser besteht im Wesentlichen aus einem Kupferrohr, welches von einer Spule umgeben ist. Die Spule kompensiert das Magnetfeld der EBIT, so dass sich der Elektronenstrahl aufweitet und auf das Kupferrohr trifft. Die Elektronen können den Kollektor nicht durchqueren, da sie durch die Extraktor-Elektrode, welche auf einem niedrigeren Potential liegt als die Kathode, reflektiert werden. Durch dieses Design besteht eine direkte Sichtachse durch den Kollektor ins Fallenzentrum, welche verwendet wird, um den Photonenstrahl einzukoppeln. Zudem ist es möglich Ionen durch den Kollektor aus der Falle zu extrahieren, da sie aufgrund ihrer positiven Ladung den Extraktor passieren können. Dazu dienen auch die Elektroden Front- und Back-Shield, mit denen sich die Ionen fokussieren lassen. Der Kollektor ist elektrisch isoliert montiert, jedoch über einen 10 Ω -Widerstand geerdet. Aus dem Spannungsabfall über diesen Widerstand lässt sich somit der Elektronenstrahlstrom bestimmen.

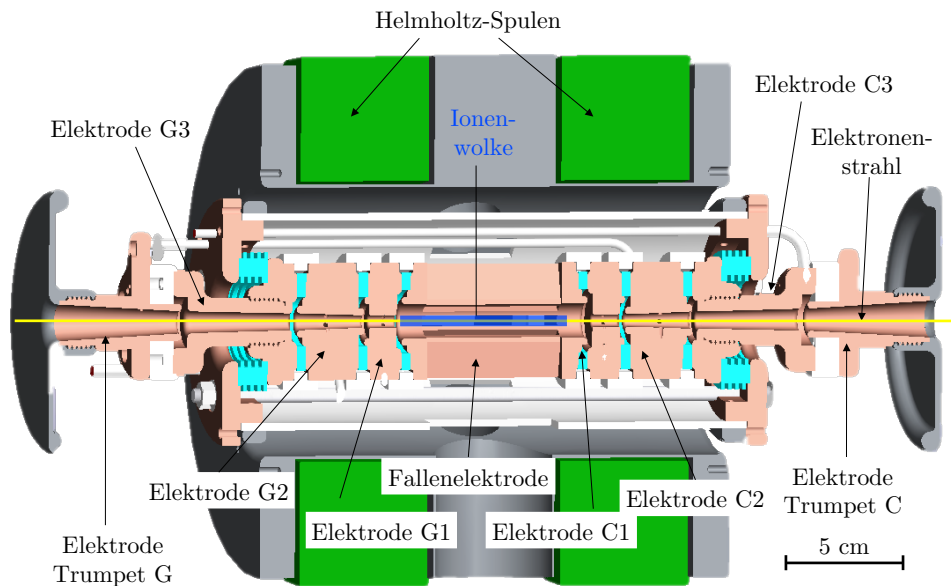


Abbildung 3.4: Axiale Schnittansicht der Fallenregion und des supraleitenden Magnets.

3.1.2 Fallenregion

In der Fallenregion (Abbildung 3.4) werden die Ionen erzeugt und gespeichert. Sie besteht aus neun symmetrisch entlang der Elektronenstrahlachse angeordneten Elektroden, genannt Driftröhren. Mit ihnen wird ein Potentialtopf erzeugt, der die Ionen in der zentralen Fallenelektrode gefangen hält. Zudem kann das gesamte Driftröhren-Ensemble auf ein positives Potential gelegt werden. Dadurch lässt sich zum einen die Elektronenstrahlenergie erhöhen, zum anderen lassen sich die Ionen besser extrahieren, da sie beim Verlassen der Falle beschleunigt werden. Zur Beobachtung der Ionenwolke hat die zentrale Fallenelektrode sieben radiale Schlitze. Um die Driftröhren herum befindet sich das Helmholtz-Spulenpaar zur Erzeugung des für die Kompression des Elektronenstrahls benötigten Magnetfelds. Dieses besteht aus dem Supraleiter Nb_3Sn , welcher eine Sprungtemperatur von 17 K hat. Deshalb werden die Spulen mit einem auf Helium-Kompression basierenden Kältekopf gekühlt, wodurch eine Temperatur von 6 K erreicht wird. Die Driftröhren sind ebenfalls an den Kältekopf angeschlossen, so dass auch sie diese Temperatur erreichen, wodurch der Restgasdruck im Inneren der Falle stark reduziert wird.

Durch einen der Schlitze lässt sich ein scheibenförmiger Cr:YAG-Kristall (Yttrium-Aluminium-Granat) mit einem Durchmesser von 10 mm in die Falle einführen. Dort kann er um 90° gedreht werden, so dass er fast die gesamte Querschnittsfläche der Fallenregion

ausfüllt. Der Kristall wird benötigt, um den Photonenstrahl auf die Ionenwolke ausrichten zu können, was in Abschnitt 3.2.3 näher beschrieben wird.

3.1.3 Injektion in die Falle

Das zu untersuchende Element wird als Gas durch einen der Schlitze der zentralen Drift-
röhre in die Falle eingebracht. Um den niedrigen Druck in der Falle zu erhalten, erfolgt die Injektion über zwei differentiell gepumpte Stufen. Durch mehrere Blenden wird ein Atomstrahl erzeugt, der die Falle radial durchquert und anschließend von einer Turbomolekularpumpe abgepumpt wird. Sobald ein Atom vom Elektronenstrahl ionisiert wird, ist es aufgrund seiner Ladung in der Falle gefangen und wird weiter ionisiert.

Da Eisen erst bei sehr hohen Temperaturen verdampft, wird es als Bestandteil der organometallischen Verbindung Eisenpentacarbonyl ($\text{Fe}(\text{CO})_5$) injiziert. Diese hat bei Raumtemperatur einen Dampfdruck von etwa 50 mbar. In der Falle wird das Molekül durch Elektronenstoß aufgespalten, so dass Eisen-, Kohlenstoff- und Sauerstoffionen erzeugt werden.

3.1.4 Photonendetektoren

Zur Messung der von der Ionenwolke ausgehenden Fluoreszenz wurden drei Germaniumdetektoren verwendet. Diese bestehen aus einem zylinderförmigen Germanium-Einkristall, welcher auf den Grundflächen eine p- beziehungsweise n-dotierte Schicht besitzt. Legt man an die n-dotierte Seite eine Spannung an, so erhält man eine in Sperrrichtung betriebene Diode. Wird nun ein Photon im Kristall absorbiert, so regt es ein Elektron vom Valenzins Leitungsband an. Hierbei übergibt es seine Energie komplett an das Elektron, welches weitere Sekundärelektronen erzeugt. Diese freien Elektron-Loch-Paare wandern im angelegten Feld zu den Elektroden und erzeugen einen Strompuls, welcher verstärkt und gemessen werden kann. Die Intensität des Pulses hängt von der Anzahl der erzeugten Ladungsträger und damit von der Energie des absorbierten Photons ab. Um die thermische Anregung von Elektronen ins Valenzband zu unterdrücken, muss der Kristall mit flüssigem Stickstoff (77 K) gekühlt werden.

Die Anordnung der in diesem Experiment verwendeten Detektoren ist in Abbildung 3.5 dargestellt. Um die Abstrahlcharakteristik der Fluoreszenz zu vermessen, wurden drei Detektoren unter verschiedenen Winkeln zur Polarisationsachse des Photonenstrahls angebracht, wobei die Zugänge zum Fallenzentrum nur eine Beobachtung senkrecht zum Strahl erlauben. Unter Winkeln von 180° und 270° wurden Detektoren vom Typ *ORTEC GLP 36360/13* verwendet. Diese haben einen Kristall mit einem Durchmesser von 36 mm und einer Dicke von 10 mm, welcher sich in einer eigenen Vakuumkammer befindet. Deshalb wurden sie außerhalb des Vakuums der EBIT angebracht. Zur Trennung von Vakuum und

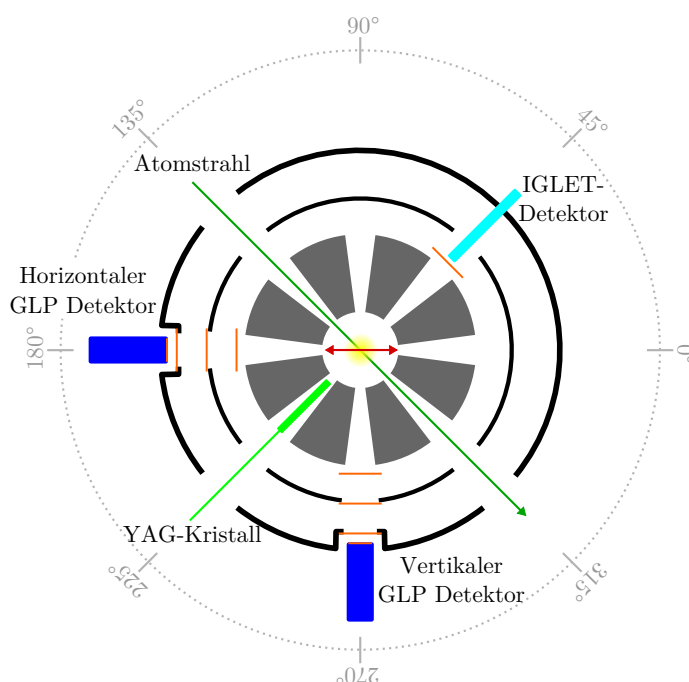


Abbildung 3.5: Schematische Darstellung der Detektorkonfiguration. Abgebildet sind neben den Detektoren die Berylliumfolien (orange) und die Polarisationsrichtung des anliegenden Photonenstrahls (rot).

Tabelle 3.1: Vergleich der Eigenschaften der verwendeten Germaniumdetektoren.

Position	Typ	Aktive Fläche	Raumwinkel	Auflösung bei 6,5 keV	Transmission Be-Folien
180°, 270°	GLP	1000 mm ²	$1,4 \cdot 10^{-3}$ sr	400 eV	82 %
45°	IGLET-X	28 mm ²	$7 \cdot 10^{-5}$ sr	200 eV	99 %

Umgebungsdruck wurden 250 μm dicke Berylliumfenster verwendet. Des Weiteren befinden sich auf dem Magneten und dem Hitzeschild im Inneren der EBIT weitere 20 μm dicke Berylliumfolien zur Abschirmung von Wärmestrahlung. Bei Photonenergien um 6,5 keV haben die Folien eine Gesamttransmission von etwa 82 %, dies wird jedoch durch die auf diese Weise ermöglichten großen Detektorflächen mehr als kompensiert. Die diagonalen Beobachtungspore der EBIT sind kleiner ausgeführt, deshalb konnte unter einem Winkel von 45° kein GLP Detektor installiert werden. Stattdessen wurde ein *ORTEC IGLET-X 06150* Detektor verwendet. Dieser hat zwar nur einen Kristalldurchmesser von 6 mm, jedoch kann er innerhalb des EBIT-Vakuums betrieben werden. Hierdurch ist ein geringerer Abstand zum Fallenzentrum möglich, und es wird nur noch eine 20 μm -Berylliumfolie zur thermischen Abschirmung benötigt. Zudem ist aufgrund des kleineren Kristalls das Ausleserauschen geringer, was eine höhere Energieauflösung ermöglicht.

3.2 Synchrotronstrahlungsquelle PETRA III

Die Strahlungsquelle PETRA III befindet sich in Hamburg auf dem Gelände des DESY. Sie ist die dritte Verwendung des Speicherrings der Positron-Elektron-Tandem-Ring-Anlage (PETRA). Dieser wurde Ende der siebziger Jahre als Teilchenbeschleuniger gebaut, in dem Elektronen und Positronen mit Schwerpunktsenergien von bis zu 2×23 GeV zur Kollision gebracht wurden. Anhand dabei auftretender „Drei-Jet-Ereignisse“ gelang der erste Nachweis des Gluons [117]. Später wurde er unter dem Namen PETRA II als Vorbeschleuniger für den größeren Ringbeschleuniger HERA verwendet, in dem Elektron-Proton- und Positron-Proton-Kollisionen untersucht wurden. Bereits 1995 wurden in PETRA II Undulatoren eingebaut, um Untersuchungen mit harter Röntgenstrahlung durchführen zu können. Nach dem Abschalten von HERA wurde PETRA zu einer reinen Synchrotronstrahlungsquelle umgebaut. Dazu wurde ein Achtel des Rings komplett neu errichtet, um mehrere Undulatoren und zugehörige Strahlrohre aufnehmen zu können (siehe Abbildung 3.6). Seit der Eröffnung 2009 ist PETRA III die weltweit brillanteste Speicherring-Strahlungsquelle. Aufgrund der hohen Nachfrage nach dieser Strahlung werden derzeit zwei weitere Experimentierhallen gebaut, wodurch die Anzahl der Strahlrohre von 14 auf 24 erhöht werden wird [118].

Im folgenden Abschnitt wird zunächst allgemein der Speicherring PETRA III beschrieben, anschließend werden die Details des im Experiment verwendeten Strahlrohres P01 dargestellt. Eine ausführliche Beschreibung von PETRA III findet sich in [108].

3.2.1 Speicherring

Der PETRA III-Speicherring hat einen Umfang von 2304 m. Er besteht aus 214 Dipol-, 365 Quadrupol- und 140 Sextupolmagneten. Die Dipolmagnete in dem neu errichteten Abschnitt sind dabei 8-mal stärker (0,87 T) als im restlichen Ring, da hier ein kleinerer Ablenkradius nötig ist, um gerade Strecken für die Undulatoren zu ermöglichen. In dem Ring werden bis zu $4,8 \cdot 10^{12}$ Positronen bei einer Energie von 6 GeV gespeichert, was einem Strahlstrom von 100 mA entspricht. Die Positronen werden dabei in 40 oder 960 Pakete aufgeteilt, wobei ersteres aufgrund des größeren Abstands zwischen zwei Paketen eine höhere Zeitauflösung ermöglicht. Durch die größeren Pakete sinkt allerdings auch die Lebensdauer des Strahls von 24 h auf 2 h. Der Ring wird jedoch im „Top-Up“-Modus betrieben, bei dem während des Betriebs durch regelmäßige Injektion von neuen Positronen die Verluste ausgeglichen werden, wodurch die Abweichung vom Nominalstrom auf etwa 1 % begrenzt wird.

Zur Erzeugung der Positronen werden mit einer Wiederholrate von 50 Hz Elektronenpakete in einem Linearbeschleuniger auf 450 MeV beschleunigt und anschließend auf ein Wolframtarget geschossen. Die dabei entstehenden Positronen werden in einem kleinen



Abbildung 3.6: Luftbild der Max-von-Laue-Experimentierhalle, in der die Undulatoren und Strahlrohre, sowie die zugehörigen Experimentierstationen von PETRA III untergebracht sind. Die Halle hat eine Länge von fast 300 m. (Bild: *DESY* [119])

(29 m Umfang) Speicherring aufgefangen und akkumuliert. Aus diesem werden sie in Paketen von $3 \cdot 10^{10}$ Positronen in das Synchrotron DESY II transferiert. Dieses beschleunigt sie auf 6 GeV, womit sie in den PETRA III Speicherring injiziert werden können.

Der Strahl des PETRA III-Speicherrings zeichnet sich durch eine besonders niedrige Emittanz aus, horizontal beträgt sie 1 nm rad und vertikal, in der Auslenkrichtung der Undulatoren, sogar nur 0,01 nm rad. Diese geringe Strahlaufweitung erlaubt sehr hohe Brillanzen der erzeugten Photonstrahlen. Erreicht wird dies durch den Einsatz von 20 je 4 m langen „Damping“-Wiggeln, die in zwei geraden Abschnitten des Speicherrings aufgestellt sind [120]. Diese Wiggler sind so konzipiert, dass sie möglichst viel Strahlung erzeugen. Dabei ändern die Positronen ihren Impuls entgegengesetzt zu ihrer Flugrichtung. Zusammen mit einer anschließenden Beschleunigung in einer Kavität, welche ausschließlich in Strahlrichtung erfolgt, ergibt sich eine Reduktion der Transversalimpulse und somit der Emittanz. Die dabei abgegebene Strahlungsleistung von 351 kW ist für drei Viertel des Gesamtenergieverlustes des Rings verantwortlich.

3.2.2 Strahlrohr P01

Das Strahlrohr P01 wird auch als „High Resolution Dynamics Beamline“ bezeichnet. Forschungsschwerpunkte dieses Strahlrohres sind die Kernresonanzstreuung (englisch: *nuclear resonant scattering*, NRS) und die inelastische Röntgenstreuung (englisch: *inelastic x-ray scattering*, IXS) [121], wobei das Strahlrohr auf einen Nutzerbetrieb ausgelegt ist, bei dem externe Nutzer ihre eigenen Proben mitbringen können. Die Experimentierkammern sind jedoch teilweise flexibel nutzbar, so dass ausreichend Platz vorhanden war, um die FLASH-EBIT an dem Ende des Strahlrohres aufzubauen. Das Strahlrohr zeichnet sich durch einen hohen Photonenfluss, der von zwei Undulatoren erzeugt wird, sowie hochauflösende Monochromatoren aus. Sie erzeugen einen Röntgenstrahl mit Energien von 5-70 keV bei Auflösungen von bis zu 1 meV.

Undulatoren

Das Strahlrohr P01 besitzt derzeit zwei hintereinander gestellte Undulatoren, die je eine Länge von 5 m haben. Es ist das einzige PETRA-III-Strahlrohr mit mehr als 5 m Undulatorlänge, und ein Ausbau auf vier 5-m-Undulatoren ist vorgesehen. Die Undulatoren haben je 157 Perioden mit einer Länge von 32 mm. Der Abstand zwischen den Polen der Dipolmagnete ist variabel, wodurch die Stärke des Magnetfelds so angepasst werden kann, dass die Undulatorgleichung (2.88) für die gewünschte Wellenlänge erfüllt ist. In Abbildung 3.7 ist die Brillanz des Undulators in Abhängigkeit von der Photonenenergie dargestellt. Die in diesem Experiment verwendeten Photonenenergien von 6,5-6,7 keV liegen sehr nah an der maximalen Brillanz von $8 \cdot 10^{20}$ Photonen/(s mm mrad² 0,1 % BW).

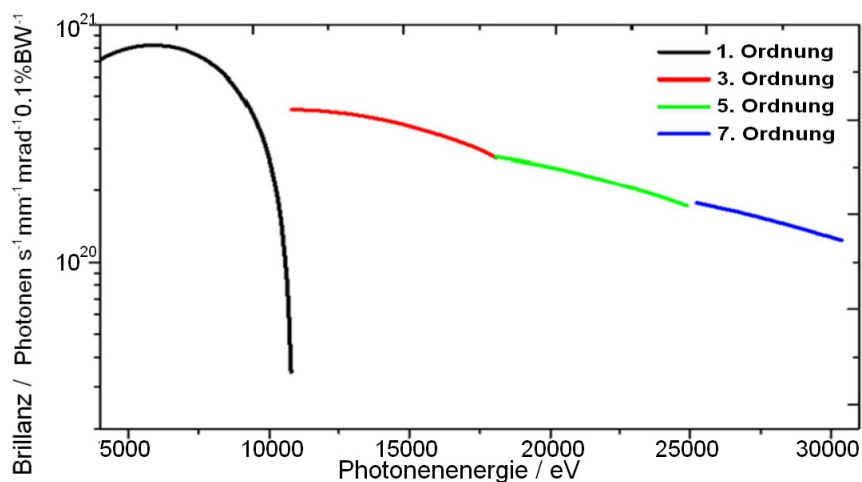


Abbildung 3.7: Brillanz des Undulators des Strahlrohres P01 in Abhängigkeit der Photonenenergie. Für Energien über 11 keV werden höhere Ordnungen der Synchrotronstrahlung verwendet. (Abbildung aus [89], nach [122].)

Monochromator

Zur Erhöhung der Energieauflösung des vom Undulator kommenden Strahls wird ein Zwei-Kristall-Monochromator verwendet. Dieser besteht aus zwei Silizium-Einkristallen (siehe Abbildung 3.8), an deren Gitterstruktur der Photonenstrahl energieselektiv reflektiert wird. Der zweite Kristall ist gegenüber dem ersten um 180° gedreht und etwas versetzt montiert. Die Kristalle lassen sich gemeinsam um eine Achse drehen, welche durch den Auftreffpunkt des Photonenstrahls und parallel zur Oberfläche des ersten Kristalls verläuft. Dadurch können Braggwinkel von 5 bis 50 Grad erreicht werden. Der zweite Kristall wird während der Drehung so parallel verschoben, dass er von dem vom ersten Kristall reflektierten Strahl getroffen wird. Durch diese Kristallanordnung verlässt der vom zweiten Kristall reflektierte Photonenstrahl den Monochromator immer auf der gleichen Höhe. Somit ist es möglich, die Photonenstrahlenergie durch Drehen der Kristalle zu ändern, ohne die folgende Strahlführung anpassen zu müssen. Der Monochromator kann mit in (111)-Richtung oder in (311)-Richtung geschnittenen Siliziumkristallen betrieben werden. Mit dem (111)-Reflex lassen sich bei einer Photonenenergie von 6,6 keV Auflösungen von 1 eV erreichen, während der (311)-Reflex aufgrund der kleineren Gitterkonstante eine intrinsische Auflösung von 192 meV hat. Aufgrund der hohen Brillanz des Undulators müssen die Siliziumkristalle gekühlt werden, da die auf sie auftreffenden Photonen einen Wärmeeintrag von 240 W erzeugen. Hierzu werden die aus Kupfer bestehenden Kristallhalter von flüssigem Stickstoff durchströmt.

Die gewünschte Photonenenergie lässt sich in der Steuersoftware des Monochromators vorgeben. Daraufhin wird der entsprechende Bragg-Winkel angefahren und gegebenenfalls

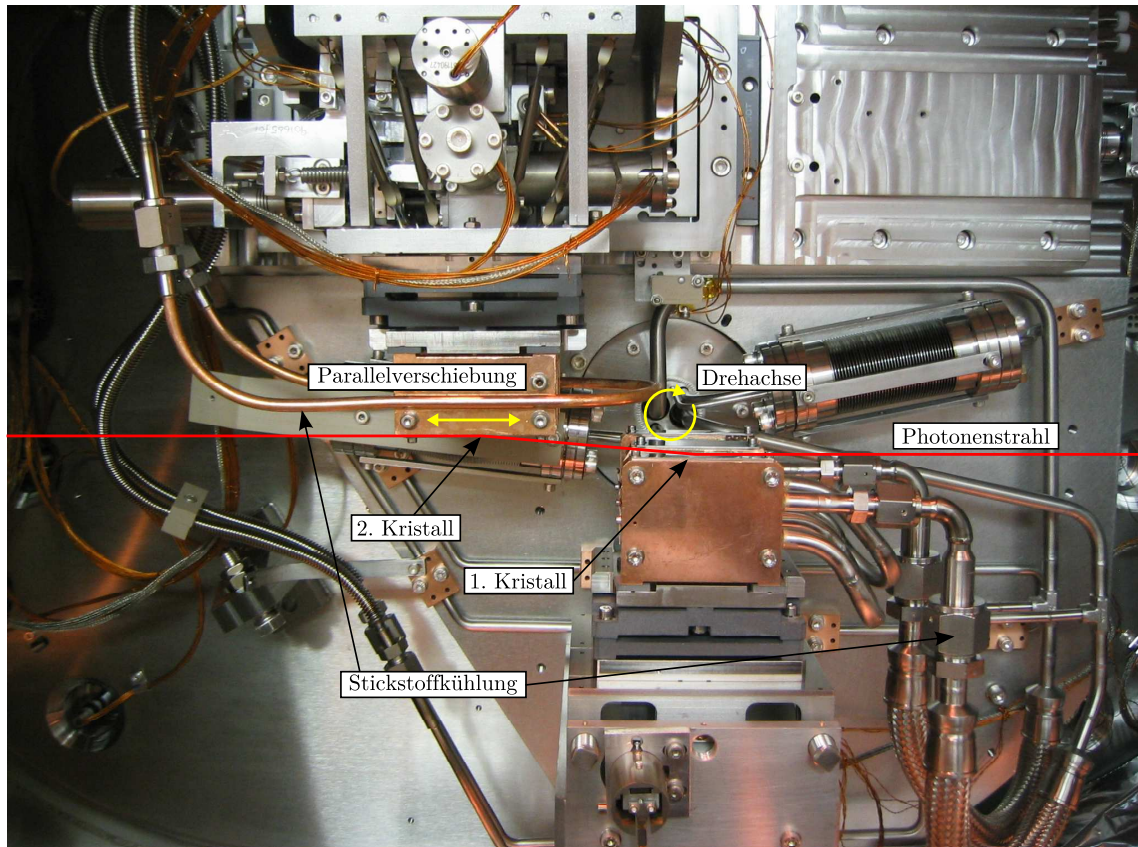


Abbildung 3.8: Foto des Monochromators des Strahlrohres P01. Die reflektierende Oberfläche des ersten Kristalls ist sichtbar, während der zweite Kristall in dem kupfernen Kristallhalter verborgen ist. Der gesamte Aufbau lässt sich um eine Achse drehen, die durch den Auftreffpunkt des Photonenstrahls auf dem ersten Kristall verläuft. (Foto: *H.-C. Wille*)

auch der Abstand der Undulatormagnete angepasst. Zudem erlaubt die Software Scans der Photonenenergie durchzuführen. Der gewünschte Bereich wird dabei mit einer einstellbaren Schrittgröße abgefahren, wobei der Monochromator bei jeder Energie eine bestimmte Zeit verweilt. Zu jedem Scan wird eine Logdatei angelegt, in der zu jedem Energieschritt der Bragg-Winkel, der PETRA-Strahlstrom sowie weitere in das Datenaufnahmesystem des Strahlrohres eingespeiste Parameter geschrieben werden.

Zum Erreichen der höchsten Auflösung von 1 meV besitzt das Strahlrohr einen weiteren Monochromator, der aus einem speziell geschnittenem Silizium-Einkristall besteht, in dem der Photonenstrahl vier Mal an der (1064)-Gitterebene reflektiert wird. Dieser Monochromator wurde jedoch in diesem Experiment nicht verwendet, da er nur für einen Energiebereich von 100 eV um die ^{57}Fe Mößbauerlinie bei 14,4125 keV ausgelegt ist.

Fokussierung des Strahls

Röntgenstrahlung lässt sich nur unter streifendem Einfall an Spiegeln reflektieren. Zur Fokussierung des Photonenstrahls nach dem Monochromator wurde deshalb eine *Kirkpatrick-Baez*-Optik verwendet [123]. Diese besteht aus zwei aufeinander folgenden elliptisch gekrümmten Zylinderspiegeln mit gleichen Brennpunkten. Der zweite Spiegel steht im rechten Winkel zum ersten, so dass ein Spiegel vertikal und der andere horizontal fokussierend wirkt. Hiermit wurde eine Strahlgröße von etwa $200 \times 200 \mu\text{m}$ am Ort der FLASH-EBIT erreicht.

Intensitätsmessung

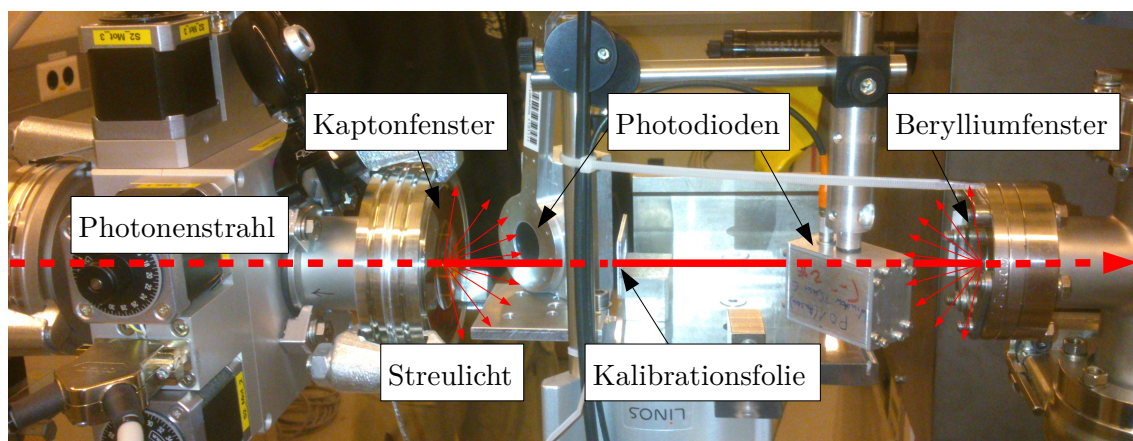


Abbildung 3.9: Anordnung der zur Intensitätsmessung verwendeten Photodioden. Die Intensität wird durch Messung der an den Ein- und Austrittsfenstern gestreuten Photonen bestimmt. Auf dieser Aufnahme ist zudem eine Kalibrationsfolie zu sehen, die während der Messungen entfernt wurde.

Zur Messung der Intensität des Photonenstrahls wurden zwei Avalanche-Photodioden verwendet. Mit diesen Photodioden wurde der gestreute Anteil des Photonenstrahls an dem Kaptonfenster des Strahlrohrendes sowie des Berylliumfensters am Eingang der EBIT gemessen (siehe Abbildung 3.9). Zwar wird an diesen Folien nur ein minimaler Anteil des Strahls gestreut, dieser ist jedoch stets proportional zu dessen Intensität. Durch die hohe Nachweiseffizienz der Avalanche-Photodioden lassen sich mit diesem Signal zuverlässig Intensitätsänderungen feststellen. In den Strahlengang zwischen den beiden Photodioden kann eine Kalibrationsfolie eingebracht werden. Verfährt man nun die Photonenenergie, so kann man durch Vergleich der Intensitätsverläufe vor und hinter dieser Folie deren Transmission bestimmen. Befindet sich im gescannten Energiebereich eine Absorptionskante der Folie, so lässt sich diese zur Kalibration der Photonenenergie verwenden, da diese Kanten für viele Elemente sehr genau vermessen sind [124]. Das Signal der Photodioden wird mit dem Datenaufnahmesystem des Strahlrohres aufgenommen. Da die Photodioden ebenfalls zum Strahlrohr gehören, war dieses problemlos möglich, ein Einlesen mit den *MPA-3*-Systemen wäre hingegen aufwändiger gewesen, da die Photodioden als Signal Pulse ausgeben, deren Anzahl proportional zur gemessenen Intensität ist, das *MPA-3*-System jedoch keine direkte Option zur Zählratenmessung hat.

Transmission des Strahlrohres

Im Strahlengang des Strahlrohres P01 befinden sich mehrere Luftstrecken. Es wird hauptsächlich für Messungen im Energiebereich von 14 keV verwendet. Bei dieser Energie hat Luft eine Transmission von 85 %/m, so dass die Absorption auf kleineren Strecken vernachlässigt werden kann. Bei den in diesem Experiment verwendeten Energien von 6,6 keV beträgt die Transmission allerdings nur noch 20 % m⁻¹. Deshalb wurde der Strahlengang soweit möglich durch gepumpte Rohre geführt. An einigen Stellen ließen sich kurze Luftstrecken jedoch nicht vermeiden. An den Übergängen von Vakuum zu Luft wurden die Rohre durch Kaptonfolien abgeschlossen. Zudem befindet sich hinter dem Monochromator ein Diamantfenster, welches das Vakuum des PETRA III-Rings von dem Vakuum des Strahlrohres trennt. Als Eintrittsfenster der FLASH-EBIT wurde ein Berylliumfenster verwendet. Diese Fenster reduzieren ebenfalls die bei der Ionenwolke ankommende Intensität. Somit ergibt sich eine Gesamttransmission des Strahlrohres von 28 %. Eine Übersicht der Transmission der einzelnen Elemente ist in Abbildung 3.10 dargestellt.

3.2.3 Überlapp zwischen Photonenstrahl und Ionenwolke

Eine experimentelle Herausforderung stellt das Herstellen des Überlapps von Photonenstrahl und Ionenwolke dar, da deren Durchmesser nur jeweils circa 200 µm beträgt. Zudem muss der Photonenstrahl, um ins Fallenzentrum zu gelangen, durch ein 4 mm großes Loch

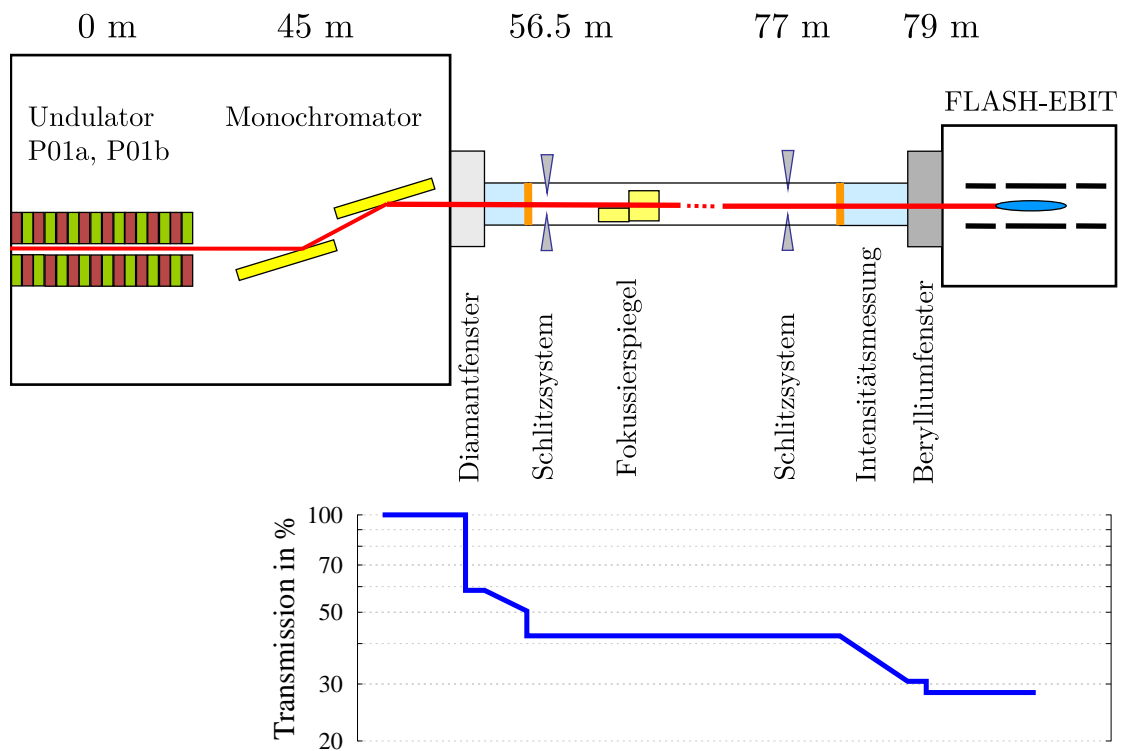


Abbildung 3.10: Schematischer Aufbau des Strahlrohres P01 bei PETRA III. Die sich im Strahlengang befindenden Luftstrecken sind hellblau, die Kaptonfolien orange dargestellt. Der untere Graph zeigt den Verlauf der Transmission entlang des Strahlengangs.

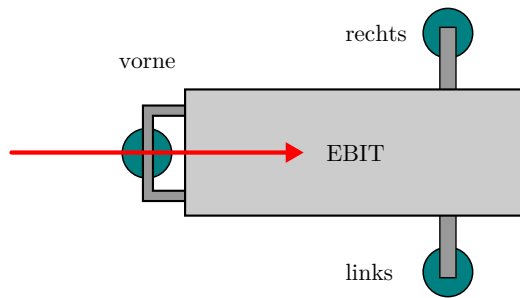


Abbildung 3.11: Positionen der Füße (blaugrün) an der EBIT. Der Photonenstrahl (rot) kommt von links in die EBIT.

im Ablenker sowie durch die Driftröhre C1 mit dem gleichen Durchmesser gefädelt werden. Da sich der Photonenstrahl nicht bewegen lässt, muss zur Justage die gesamte EBIT mit ihrem Gewicht von etwa 1,5 Tonnen bewegt werden. Dazu steht die EBIT auf drei Füßen, die jeweils über ein Spindelhubgetriebe höhenverstellbar sind [125]. Ein Fuß befindet sich dabei auf der Kollektorseite der Falle zentral auf der Strahlachse in etwa unter dem Ablenker, die anderen beiden sind auf Höhe der Kanone seitlich angebracht sind (siehe Abbildung 3.11). Dadurch sind neben der vertikalen Bewegung auch ein Rollen um die Strahlachse sowie eine Neigung um die zur Strahlachse senkrechte Horizontale möglich. Aufgrund des langen Hebels der seitlichen Füße entsprechen kleine Rollbewegungen im Fallenzentrum einer horizontalen Verschiebung. Da bei eingeschaltetem Photonenstrahl aus Sicherheitsgründen ein Aufenthalt in der Experimentierhütte nicht gestattet ist, wurden die Füße durch ferngesteuerte Elektromotoren verfahren.

Zum Bestimmen der Strahlposition in der Falle wird der YAG-Kristall in die Fallenregion der EBIT eingebracht. Wird der Kristall vom Photonenstrahl getroffen, so fluoresziert er grünlich. Hinter dem Kollektor lässt sich ein Spiegel mit einem zentralen Loch für den Photonenstrahl in einem Winkel von 45° zur Strahlachse einbringen, über den sich diese Fluoreszenz beobachten lässt. Um auch schwache Intensitäten des Strahls wahrnehmen zu können wird hierzu eine Kamera vom Typ *ANDOR LUCA* verwendet, die einen gekühlten CCD-Chip mit eingebautem Elektronenvervielfacher besitzt. Ein so aufgenommenes Bild des Photonenstrahls ist in Abbildung 3.12 zu sehen. Zudem lassen sich auf diesen Bildern durch den Widerschein des Kathodenleuchtens die Umrisse der Driftröhren erkennen. Da sich der Elektronenstrahl, und damit auch die Ionenwolke, aufgrund des Magnetfelds der EBIT stets in der Mitte der Driftröhren befindet, lässt sich somit eine Zielposition für den Photonenstrahl festlegen, welche anschließend durch entsprechendes Verfahren der EBIT-Füße erreicht wird.

3.3 Nachweis der Photoionisation

Die Photoionisation wird über die dabei entstehenden Photoionen nachgewiesen. Der dazu verwendete Aufbau ist in Abbildung 3.13 dargestellt. Die Ionen werden kontinuierlich aus

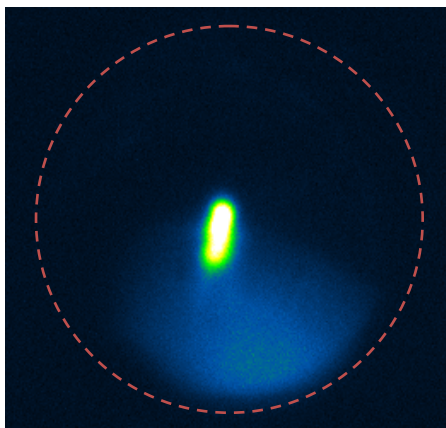


Abbildung 3.12: Nachträglich eingefärbte Aufnahme des Photonenstrahls (grün) auf dem YAG-Kristall. Das blaue Leuchten unterhalb des Photonenstrahls ist die (in Echtfarben rot) glühende Kathode der Elektronenkanone. Rot eingezeichnet ist der Umriss der Driftröhren, bei genauem Hinsehen lässt sich oben rechts innerhalb dieses Kreises eine weitere Kreisstruktur erkennen, die von einer schmaleren Driftröhre hinter der Fallenregion stammt.

der Falle extrahiert und nach Ladungszuständen getrennt detektiert. Die Extraktion der Ionen erfolgt dabei, indem auf die Driftröhren auf der Kollektorseite der Falle ein niedrigeres Potential angelegt wird als auf die der Kanonenseite. Dadurch verlassen die Ionen die Falle bevorzugt in Richtung des Kollektors. Da dieser zylindrisch aufgebaut ist, können sie durch dessen Öffnung die EBIT verlassen. Durch diese Öffnung wird jedoch auch der Photonenstrahl in die EBIT geführt, daher ist es notwendig, zur weiteren Analyse die Ionen aus dieser Strahlachse herauszulenken. Hierzu werden die Ionen elektrostatisch um 90° abgelenkt. Anschließend werden sie von einem Wien'schen Geschwindigkeitsfilter nach ihrem Ladung-zu-Masse-Verhältnis aufgespalten und auf einem positionsempfindlichen Detektor nachgewiesen.

Diese Methode zur Messung der Photoionisation mit der FLASH-EBIT wurde von *Martin Simon* im Rahmen seiner Dissertation entworfen und umgesetzt [126]. Auf Basis der bei diesen Messungen gewonnenen Erfahrungen wurde der Aufbau weiter verbessert. So wurde das Leistungsvermögen des Wienfilters für hochgeladene Ionen optimiert [127] und ein neuer Ablenker gebaut [89], der in dieser Messung das erste Mal erfolgreich verwendet wurde. In diesem Abschnitt werden die einzelnen Komponenten des Aufbaus beschrieben. Während der Ablenker und die ersten zwei Einzellinsen fest an die Vakuumkammer der EBIT angebaut werden, befinden sich die restlichen Elemente in einer separaten Kammer, die über einen Balg mit dem Ablenker verbunden ist. Dies ist notwendig, da die großen Ausmaße dieser Kammer ein festes Verschrauben an der EBIT-Kammer verhindern, welches die Transportfähigkeit der EBIT beeinträchtigen würde. Da die Ausrichtung dieser Kammer relativ zur EBIT nicht exakt reproduzierbar ist, müssen bei jedem Aufbau die Parameter der Ionenoptik angepasst werden.

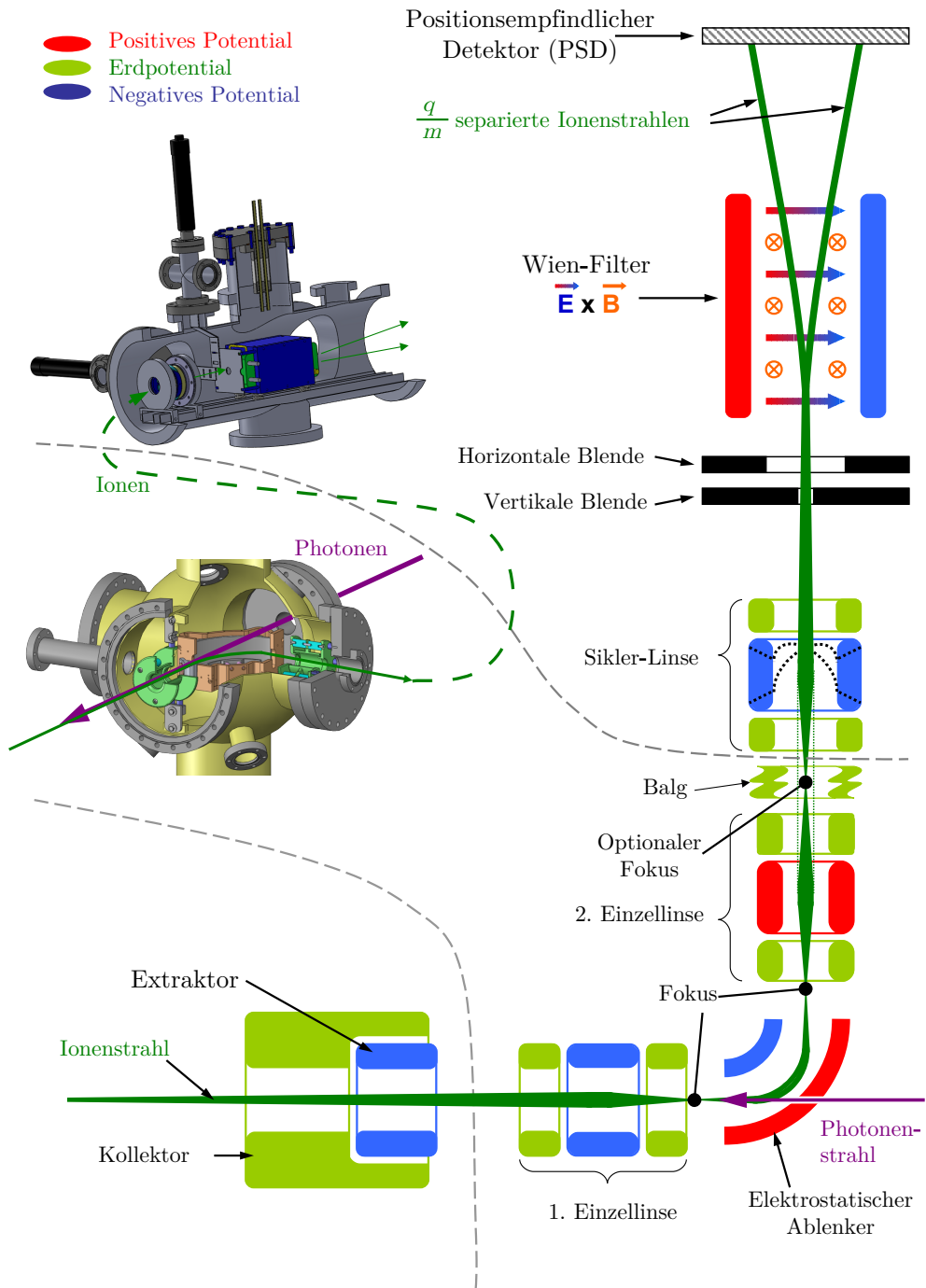


Abbildung 3.13: Schematische Darstellung der zur Extraktion der Ionen verwendeten ionenoptischen Elemente.

3.3.1 Elektrostatischer Ablenker

Der Ablenker hat die Aufgabe, die aus der EBIT kommenden Ionen um 90° abzulenken. Durch die Verwendung von elektrostatischen Potentialen ist die Ablenkung nur abhängig von der kinetischen Energie der Ionen und nicht von ihrem Ladung-zu-Masse-Verhältnis. Dadurch ist es möglich, alle aus der Falle kommenden Ionensorten gleich abzulenken. Zudem wirkt der Ablenker somit als Filter, da Ionen, die nicht aus der Falle kommen und daher eine unterschiedliche kinetische Energie haben, anders abgelenkt werden und den Ablenker nicht passieren können.

Der Ablenker wurde von *Jan Rudolph* während seiner Doktorarbeit entworfen und gebaut [89]. Er besteht aus zwei konzentrisch angeordneten zylindrischen Platten unterschiedlicher Höhe, die als Elektroden verwendet werden. Das von ihnen erzeugte elektrische Feld bewirkt neben der Ablenkung auch eine horizontale und vertikale Fokussierung im Bereich der Strahlachse. Im Vergleich zu dem bisher verwendeten von *M. Simon* entwickelten Ablenker wurde hier ein größerer Ablenkradius von 80 mm gewählt, um eine größere Transmission und höhere Ionenenergien zu ermöglichen. Bei vorherigen Messungen hatte sich herausgestellt, dass das Restmagnetfeld der EBIT im Bereich des Ablenkens eine unerwünschte Aufspaltung der Ladungszustände bewirkt. Deshalb befindet sich der Ablenker in einem Gehäuse aus magnetischem Stahl, wodurch das Magnetfeld um den Ablenker herum geführt wird. Zusätzlich wird der gesamte ionenoptische Aufbau außerhalb der Vakuumkammern durch μ -Metallbleche abgeschirmt.

Da die in dieser Arbeit durchgeführten Photoionisationsmessungen die erste Verwendung des neuen Ablenkens darstellen, wurden als Vorbereitung auf die Strahlzeit Messungen zur dielektronischen KLL-Rekombination von hochgeladenem Eisen durchgeführt¹, um die Eigenschaften des Ablenkens zu testen. Anschließend wurden, ausgehend von diesen Messungen, Einstellungen für verschiedene Ionenenergien bestimmt, da diese bei Photoionisationsmessungen für jede Ionensorte unterschiedlich und wesentlich niedriger als bei der Rekombinationsmessung ist. Somit war es während der Messungen bei PETRA möglich ohne großen Zeitverlust zwischen den Einstellungen für die jeweils untersuchte Ionensorte zu wechseln.

3.3.2 Elektrostatische Linsen

Zur Führung des Ionenstrahls werden drei elektrostatische Linsen verwendet. Die erste ist eine Einzellinse, befindet sich vor dem Ablenker und fokussiert den Ionenstrahl auf dessen Eintrittsfokuspunkt. Eine zweite Einzellinse fokussiert die aus dem Ablenker kommenden

¹Nach der PETRA III-Strahlzeit hatte die Auswertung der Photoionisationsdaten Priorität, so dass bisher leider keine genauere Analyse der dabei gewonnenen Daten erfolgen konnte. Es konnten jedoch erstmals gleichzeitig Resonanzen von helium- bis borartigem Eisen in der Extraktion beobachten werden. Eine Beschreibung der angewandten Messmethode findet sich in [127].

Ionen durch den Balg in die Vakuumkammer des Wienfilters. In dieser befindet sich eine dritte Linse, welche die Ionen auf den Wienfilter lenkt. Da die Ausrichtung des Balgs nicht immer gleich ist, muss diese Linse neben fokussierenden Eigenschaften auch die Möglichkeit bieten, den Strahl abzulenken. Deshalb ist sie als Sikler-Linse ausgeführt. Dieser Typ Linse wurde von *Günther Sikler* in dieser Arbeitsgruppe entwickelt. Sie ist eine Weiterentwicklung der Einzellinse, bei der die mittlere Elektrode durch zwei Schnitte in vier Segmente geteilt wird (siehe Abbildung 3.14). Durch Anlegen einer Fokusspannung U_{fok} an alle Elektroden wirkt diese wie eine Einzellinse, jedoch können zusätzlich noch Spannungsdifferenzen $U_{\text{r/l}}$ und $U_{\text{o/u}}$ auf die sich gegenüberliegenden Elektroden gegeben werden,

$$\begin{aligned} U_{\text{oben}} &= U_{\text{fok}} + U_{\text{o/u}} & , & & U_{\text{links}} &= U_{\text{fok}} + U_{\text{r/l}} \\ U_{\text{unten}} &= U_{\text{fok}} - U_{\text{o/u}} & , & & U_{\text{rechts}} &= U_{\text{fok}} - U_{\text{r/l}} \end{aligned} \quad (3.1)$$

wodurch der Ionenstrahl zusätzlich horizontal und vertikal abgelenkt wird. Durch das Addieren einer weiteren Spannung $U_{\text{ast}}/2$ zu U_{oben} und U_{unten} sowie $-U_{\text{ast}}/2$ zu U_{links} und U_{rechts} lassen sich zudem astigmatische Fehler der Linsen korrigieren.

3.3.3 Blenden

Vor dem Wienfilter befinden sich zwei senkrecht zueinander stehende Schlitzblenden. Jede Blende besitzt drei rechteckige Schlitze mit einer Breite von 18 mm und einer Höhe von 6 mm, 3 mm und 1,5 mm. Über Linearmanipulatoren kann zwischen den verschiedenen Schlitzgrößen gewechselt werden. Durch diese Konstruktion erhält man mit nur zwei Manipulatoren eine zweidimensional bewegliche Blende in neun verschiedenen Größen. Mit diesen Blenden werden Ionen, die sich zu weit von der Strahlachse entfernt haben, abgeschnitten. Hierdurch verringert sich zwar die Zählrate der Ionen, durch die Unterdrückung von schlecht fokussierten Ionen wird jedoch die Auflösung erheblich verbessert.

3.3.4 Wienfilter

Der Wienfilter basiert auf dem *Model 600-B* der Firma *Colutron Research Corporation*, wurde jedoch durch umfangreiche Änderungen an die Anforderungen, die sich bei der Untersuchung hochgeladener Ionen stellen, angepasst. Eine detaillierte Beschreibung des Wienfilters und der Änderungen findet sich in der Diplomarbeit des Autors [127], weshalb hier nur kurz das Funktionsprinzip erläutert wird.

In dem Wienfilter wird durch zwei Spulen ein homogenes Magnetfeld B erzeugt, während durch eine Anordnung von Elektroden ein senkrecht dazu stehendes elektrisches Feld E entsteht. Der Ionenstrahl wird nun senkrecht zu beiden Feldern in den Wienfilter geführt. Hat ein Ion dabei gerade die Geschwindigkeit $v_w = E/B$, so heben sich magnetische

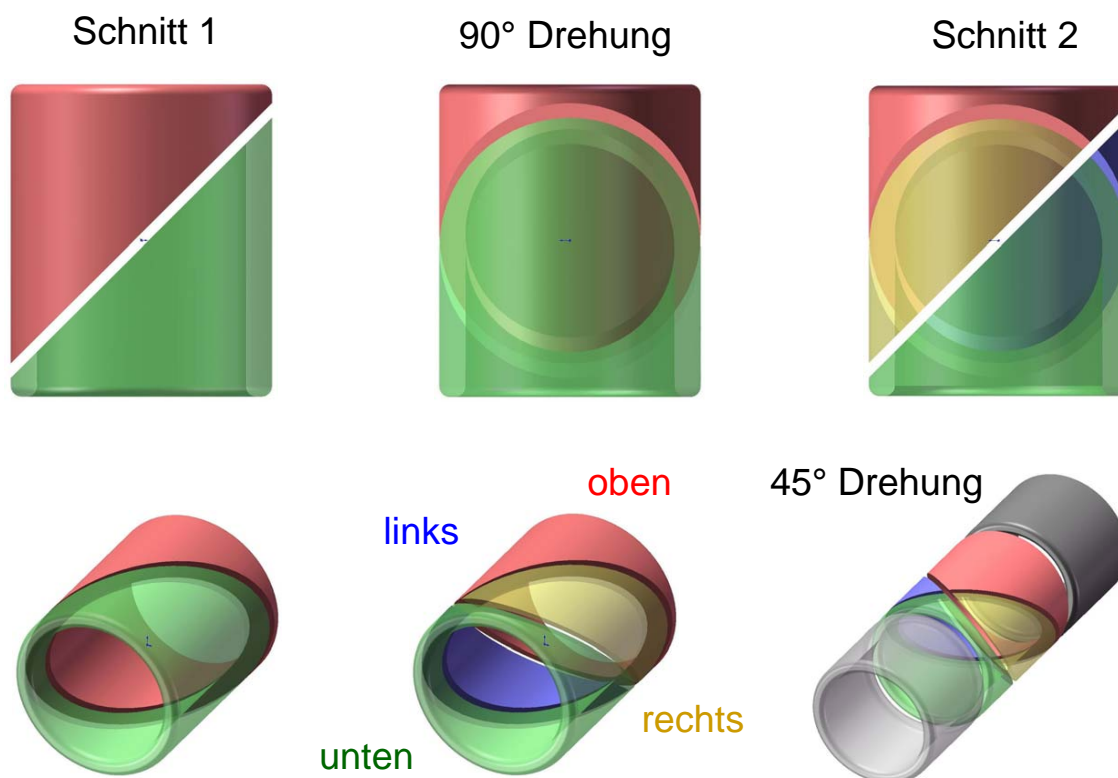


Abbildung 3.14: Konstruktionsverfahren einer Siklerlinse. Ein Rohr wird durch einen um 45° schrägen Schnitt in zwei Hälften geteilt, anschließend wird es um 90° gedreht und der gleiche Schnitt erneut durchgeführt (oben). Dadurch entstehen vier Elektroden; baut man diese mit einer 45° -Drehung zu den Schnittlagen ein (rechts unten), so lassen sich die einzelnen Segmente wie zwei horizontale beziehungsweise vertikale Ablenkplattenpaare ansteuern. (Bild aus [126])

und elektrische Kraft auf, und das Ion kann den Wienfilter ohne Ablenkung passieren. Weicht die Geschwindigkeit um Δv von v_w ab, so hat das Ion beim Austritt aus dem Wienfilter eine Geschwindigkeitskomponente parallel zum elektrischen Feld

$$v_E \propto \Delta v \cdot \frac{q}{m} \frac{B^2}{E}. \quad (3.2)$$

Da die Geschwindigkeit der Ionen ebenfalls von ihrem Ladung-zu-Masse-Verhältnis q/m abhängt, ist der Ionenstrahl nach dem Wienfilter somit aufgespalten in Ionen mit gleichem q/m .

3.3.5 Positionempfindlicher Detektor

Um die Aufspaltung des Ionenstrahls durch den Wienfilter messen zu können, wird ein positionempfindlicher Detektor (PSD, von engl. *position sensitive detector*) benötigt, der

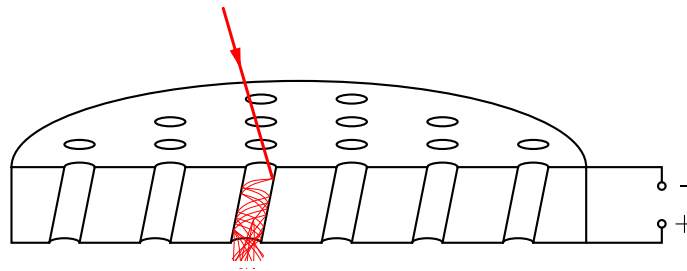


Abbildung 3.15: Funktionsprinzip einer MCP. Die Platte ist von kleinen Kanälen durchsetzt (nicht maßstabsgetreu dargestellt). Trifft ein Ion auf die Innenwand eines Kanals, so löst es eine Kaskade an Sekundärelektronen aus. Durch die angelegte Spannung werden die Elektronen zur Unterseite der Platte beschleunigt. (Bild aus [128])

einzelne Ionen nachweisen kann. Hierfür wird der *RoentDek DLD40* verwendet. Dieser besteht aus einer Kombination von zwei Mikrokanalplatten (MCP, von engl. *micro channel plate*) und einer positionsempfindlichen „delay-line“-Anode. Bei den MCPs handelt es sich um 1,5 mm dicke Halbleiter-Scheiben mit einem Durchmesser von 40 mm. Sie sind mit feinen Kanälen durchzogen, welche einen Durchmesser von 25 μm haben und 7° gegen die Oberfläche geneigt sind. Die Neigungswinkel der Kanäle der zweiten MCP sind gegenüber der ersten um etwa 180° gedreht („Chevron-Konfiguration“), wodurch eine Rückkopplung zwischen beiden Platten vermieden wird. Trifft ein Teilchen mit ausreichender Energie auf die Innenseite eines Kanals, so löst es dort Sekundärelektronen aus. Durch das Anlegen einer Spannung zwischen Ober- und Unterseite der Scheiben werden diese Elektronen in dem Kanal beschleunigt. Dabei treffen sie wiederum auf dessen Wände, so dass die Kanäle wie Elektronenvervielfacher wirken, an deren Ende eine Elektronenlawine austritt (siehe Abb. 3.15). Dadurch kommt es zu einer Verstärkung des Signals um einen Faktor von bis zu 10^7 . Die nominell anzulegende Spannung beträgt 2400 V, allerdings wurde der MCP bei niedrigerer Spannung betrieben, um die Elektronenverstärkung abzuschwächen. Dadurch werden nur noch von energiereichen Ionen Signale erzeugt, wobei hier neben der kinetischen Energie insbesondere auch die bei der Rekombination der Ionen in den neutralen Zustand freiwerdende Energie einfließt, so dass die relative Empfindlichkeit für hochgeladene Ionen stark erhöht wird.

Die aus den MPCs austretenden Elektronen treffen auf die „delay-line“-Anode, welche auf einem positiven Potential liegt. Diese besteht aus zwei senkrecht zueinander verlaufenden flachen Drahtwindungen. Treffen die Elektronen auf die Signaldrähte, so lösen sie an diesem Punkt einen Spannungspuls aus, der sich durch die Drähte ausbreitet. Parallel zu den Signaldrähten verlaufen Referenzdrähte, welche auf niedrigerem Potential liegen und daher ein schwächeres Elektronensignal erhalten. Bildet man die Differenz aus Signal- und Referenzdraht, so lassen sich elektromagnetische Störsignale unterdrücken. Aus der Differenz der Ankunftszeit der Pulse an den beiden Enden eines Drahtes lässt sich der En-

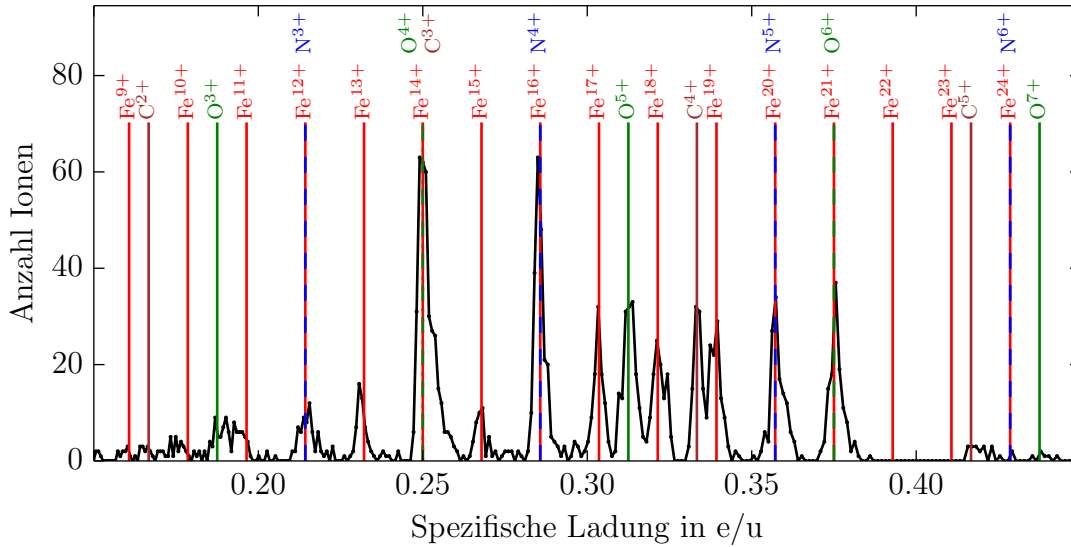


Abbildung 3.16: Gemessene Verteilung der spezifischen Ladung $\frac{q}{m}$. Die EBIT-Einstellungen entsprechen denen der Messungen der kohlenstoffartigen Übergänge. (Diese Ladungsverteilung lässt sich auch in Abbildung 4.2 erkennen.)

stehungsort des Pulses bestimmen. Da die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Pulse in den Drähten nahe an der Lichtgeschwindigkeit liegt, wird hierfür die effektive Ausbreitungsgeschwindigkeit quer zu den Windungen genutzt, welche bei diesem Modell 0,73 ns/mm beträgt. Dadurch lässt sich mit einem Draht die Position quer zu seinen Wicklungen bestimmen, durch die Verwendung von zwei Drähten erhält man beide Koordinaten. Durch diese Anordnung wird eine Ortsauflösung von unter 100 μm bei Zählraten bis zu 1 MHz erreicht.

3.3.6 Identifikation der Ionen

Die spezifische Ladung q/m der Ionen, die den Wienfilter ohne Ablenkung durchqueren, beträgt

$$\frac{q}{m} = \frac{1}{2U} \left(\frac{E}{B} \right)^2, \quad (3.3)$$

wobei U die Spannung ist, mit der die Ionen beschleunigt wurden. Die Größen auf der rechten Seite der Gleichung sind jedoch nicht genau genug bekannt, um aus ihnen direkt das Ladung-zu-Masse-Verhältnis zu bestimmen. Zur Identifikation der Ionen wird daher das elektrische Feld variiert und die Ionenzählrate in einem kleinen Bereich in der Mitte des Detektors aufgenommen. Ein derart gewonnenes Spektrum ist in Abbildung 3.16 dargestellt. Zur Kalibration der q/m -Achse verwendet man nun die bekannten Verhältnisse

der erwarteten Ionen. Dies sind, neben den untersuchten Eisenionen, die Ionen der gemeinsam mit dem Eisen injizierten Sauerstoff- und Kohlenstoffatome, sowie aus dem Restgas stammende Stickstoffionen. Das Maximum des Spektrums gehört dabei in der Regel zu dem Wert $\frac{1}{4}$, da hier mehrere Ionensorten (C^{3+} , O^{4+} , Fe^{14+}) zusammentreffen. Anschließend wird die q/m -Achse derart gestaucht oder gestreckt, dass die gemessenen Maxima möglichst gut mit den erwarteten Positionen übereinstimmen. Anschließend stellt man das elektrische Feld des Wienfilters auf den Wert des gewünschten Ions ein, welches sich dann in der Mitte des Detektors befindet.

3.4 Datenaufnahme

In diesem Experiment wurden drei Datenaufnahmesysteme verwendet, je eins für die Detektoren der Fluoreszenzphotonen und Photoionen, sowie ein zum Strahlrohr gehörendes zur Aufzeichnung der Eigenschaften des Photonenstrahls. Diese Aufteilung wurde vorgenommen, um die Extraktion der Ionen auch während einer laufenden Fluoreszenzmessung optimieren zu können. Zur Aufzeichnung der Fluoreszenz und der Photoionen wurden dabei Systeme vom Typ *MPA-3* der Firma *FAST ComTec* verwendet. Diese ermöglichen die Digitalisierung von bis zu 16 Parametern mit Signalfrequenzen von bis zu 6 MHz und einer Auflösung von 13 Bit. Zudem ist es möglich, zwischen den Kanälen beliebige Koinzidenzbedingungen zu definieren. Die Analog-Digital-Wandler befinden sich dabei paarweise in NIM-Einschüben und können in verschiedenen Modi betrieben werden:

SVA (engl. *sampling voltage analyser*) Die am Eingang anliegende Spannung (0 – 10 V) wird digitalisiert, sobald am „Gate“-Eingang ein Puls eintrifft. Dieser Modus wurde verwendet, um von der Steuersoftware bereitgestellte Spannungen zu digitalisieren, in denen beispielsweise die aktuelle Photonenenergie kodiert ist. Durch eine entsprechende Triggerung des „Gates“ ließ sich somit sicherstellen, dass diese Parameter für jedes gemessene Ereignis zur Verfügung stehen.

TDC (engl. *time to digital converter*) Die Zeit zwischen zwei NIM-Pulsen (Start- und Stoppsignal) wird gemessen und digitalisiert. Dieser Modus wurde benutzt, um die Signallaufzeiten im positionsempfindlichen Detektor zu messen und somit ein Bild der auftreffenden Ionen zu erhalten.

PHA (engl. *puls height analysis*) Trifft am Eingang ein Spannungspuls ein, so wird dessen Höhe gemessen (0,025 – 10 V) und digitalisiert. Gleichzeitig wird ein TTL-Signalspuls erzeugt, welcher verwendet werden kann, um eine SVA-Messung auszulösen. Mit diesem Modus wurden die Signale der Photonendetektoren aufgenommen. Dazu wurden die Rohsignale durch „Spectroscopy Amplifier“ differenziert und verstärkt. Der re-

sultierende Puls ist proportional zur Energie des detektierten Photons und wird eingelesen.

Die so aufgenommenen Daten lassen sich mit der zugehörigen Software *MPANT* in Echtzeit darstellen. Dazu lassen sich vor Beginn der Messung ein- und zweidimensionale Histogramme erstellen, welche auch durch Bedingungen voneinander abhängig sein können. Diese Histogramme werden dann während der Messung mit Ereignissen gefüllt. Da hierbei jedoch die Zeitinformation verloren geht und sich auch die gesetzten Bedingungen im Nachhinein nicht mehr ändern lassen, ist diese Darstellung nur für eine grobe Analyse und insbesondere für das Optimieren und Überwachen des Experiments geeignet. Zur ausführlichen Analyse wird deshalb zusätzlich eine Protokolldatei („Listfile“) angelegt. Diese enthält in einem eigenen Binärformat eine Liste aller gemessenen Ereignisse, wobei die zugehörigen Zeit- und Koinzidenzinformationen mit abgespeichert werden. Diese Listfiles wurden nach der Messung mithilfe der *Lua*-Bibliothek *lualst2* [129] in ein einfacher einzulesendes Format umgewandelt.

Das Datenaufnahmesystem des P01-Strahlrohres ist in das Programm zur Steuerung des Monochromators integriert. Es legt für jeden Energiescan eine Textdatei an, in der für jeden Schritt die Photonenenergie sowie weitere Strahleigenschaften eingetragen werden. Zusätzlich lassen sich in dieses System auch Daten weiterer Instrumente hinzufügen. Hier von wurde bei der Messung des Photonenflusses Gebrauch gemacht. Da die verwendeten Photodioden zum Strahlrohr gehörten, konnten sie unkompliziert in das Datenaufnahmesystem integriert werden, was für die *MPA-3*-Systeme nicht der Fall gewesen wäre.

Anhand der in allen Datenaufnahmesystemen klar identifizierbaren Schritte in der Photonenenergie konnten in der Auswertung die Daten aus allen drei Aufnahmesystemen zusammengeführt werden.

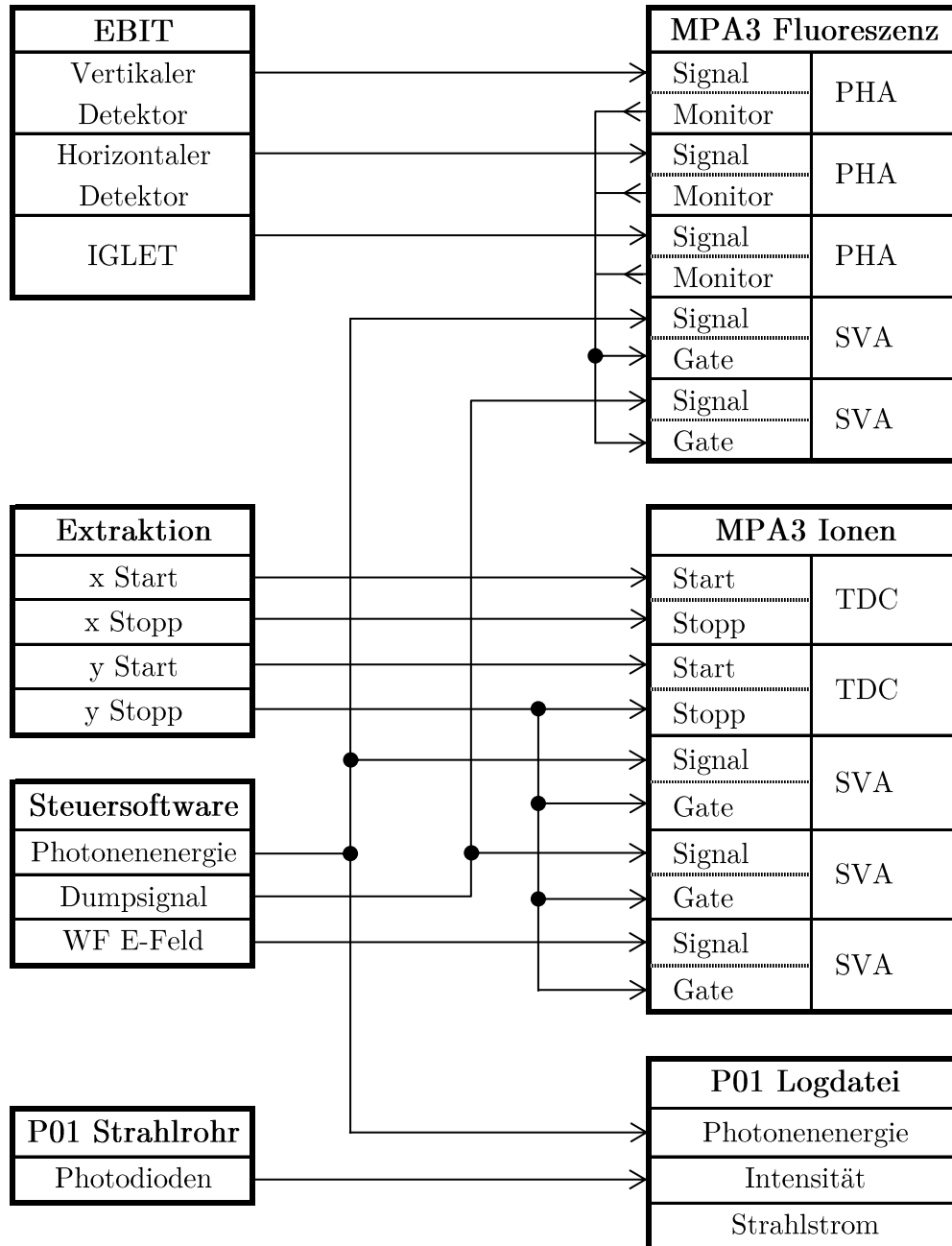


Abbildung 3.17: Flussdiagramm der Datenaufnahme. Auf der linken Seite befinden sich die datenerzeugenden Elemente, rechts die drei verwendeten Datenaufnahmesysteme.

Kapitel 4

Messung und Datenauswertung

Die in dieser Arbeit beschriebenen Messungen wurden während einer 11-tägigen Strahlzeit der FLASH-EBIT am PETRA III-Strahlrohr P01 durchgeführt. Im Rahmen dieser Strahlzeit wurden zudem umfangreiche Messungen der Fluoreszenz von K-Schalen-Übergängen in He- bis F-artigem Eisen durchgeführt, aus denen Übergangsenergien und natürliche Breiten bestimmt wurden [39, 89]. Des Weiteren wurden die Übergangsenergien der Resonanz- und der Interkombinationslinie in He-artigem Krypton mit einer Genauigkeit von 11 ppm vermessen [130], um eine viel diskutierte postulierte Z-abhängige Abweichung zwischen Theorie und Experiment [131–133] bei möglichst großer Kernladung zu untersuchen. Insgesamt wurden ungefähr 2,5 Tage explizit für Messungen der Photoionisation verwendet.

Im Rahmen dieser Messungen wurden die in Tabelle 4.1 aufgelisteten Übergänge untersucht. Zur Bestimmung der Zerfallsraten wurden zwei Arten von Messungen vorgenommen. Zunächst wurden Scans der Photonenenergie durchgeführt und dabei die Signalstärke und das Linienprofil der Fluoreszenz und Photoionisation vermessen. Da bei diesen Messungen das Photoionisationssignal sehr schwach war, wurden zusätzlich Messungen bei konstanter Photonenenergie auf dem Maximum der Resonanz durchgeführt. Hierbei wurde das relative Verzweigungsverhältnis zwischen Photoionisation und Fluoreszenz bestimmt.

In diesem Kapitel werden diese Messungen ausführlich beschrieben sowie dargestellt, wie aus den gewonnenen Daten die Zerfallsraten bestimmt werden können. Zuerst werden jedoch die in diesen Messungen verwendeten Parameter von EBIT und Ionenextraktion beschrieben.

Tabelle 4.1: Liste der in dieser Arbeit untersuchten Übergänge in hochgeladenen Eisenionen. Die angegebenen Übergangsenergien wurden anhand der während dieser Strahlzeit ebenfalls durchgeführten Fluoreszenzspektroskopie ermittelt [39]. Im borartigen Fe^{21+} liegen die beiden Übergänge energetisch so dicht beieinander, dass sie mit der im Experiment erreichten Auflösung nicht getrennt werden konnten.

Ion	Übergang	Grundzustand	angeregter Zustand	Übergangsenergie in eV
Li-artig Fe^{23+}	<i>t</i>	$1s^2 2s \ ^2S_{1/2}$	$1s 2s 2p \ ^2P_{1/2}$	6676.202 (3) (69)
Li-artig Fe^{23+}	<i>q</i>	$1s^2 2s \ ^2S_{1/2}$	$1s 2s 2p \ ^2P_{3/2}$	6662.240 (6) (69)
Li-artig Fe^{23+}	<i>r</i>	$1s^2 2s \ ^2S_{1/2}$	$1s 2s 2p \ ^2P_{1/2}$	6652.826 (3) (69)
Li-artig Fe^{23+}	<i>u</i>	$1s^2 2s \ ^2S_{1/2}$	$1s 2s 2p \ ^4P_{3/2}$	6616.629 (4) (68)
Be-artig Fe^{22+}	<i>E1</i>	$1s^2 2s^2 \ ^1S_0$	$1s 2s^2 2p \ ^1P_1$	6628.804 (5) (68)
Be-artig Fe^{22+}	<i>E2</i>	$1s^2 2s^2 \ ^1S_0$	$1s 2s^2 2p \ ^3P_1$	6597.858 (3) (67)
B-artig Fe^{21+}	<i>B</i>	$1s^2 2s^2 2p \ ^2P_{1/2}$	$1s 2s^2 2p^2 \ ^2P_{1/2}$ $1s 2s^2 2p^2 \ ^2D_{3/2}$	$\langle 6586.085 (3) (67) \rangle$
C-artig Fe^{20+}	<i>C1</i>	$1s^2 2s^2 2p^2 \ ^3P_0$	$1s 2s^2 2p^3 \ ^3D_1$	6544.225 (4) (66)
C-artig Fe^{20+}	<i>C2</i>	$1s^2 2s^2 2p^2 \ ^3P_0$	$1s 2s^2 2p^3 \ ^3S_1$	6556.879 (16) (66)

4.1 Betriebsparameter

4.1.1 EBIT

Eine Schwierigkeit der Photoionisationsmessung liegt darin, dass sich die Photoionen nur als solche nachweisen lassen, wenn nicht auch durch Stoßionisation in der EBIT Ionen des gleichen Ladungszustands erzeugt werden. Gleichzeitig muss natürlich in der EBIT eine möglichst große Anzahl der zu untersuchenden Ion erzeugt werden. Diese Anforderungen lassen sich nur in einem kleinen Bereich der Elektronenstrahlenergie erfüllen, welcher für jeden Ladungszustand unterschiedlich ist.

Falleneinstellungen

Die in den Messungen verwendeten Einstellungen der FLASH-EBIT sind in Tabelle 4.2 aufgelistet. Die nominell an die Fallenelektrode angelegte Spannung ist zwar höher als an den angrenzenden Driftröhren, durch die Raumladung des Elektronenstrahls ist das Potential in der Falle jedoch geringer, und die Ionen werden gefangen. Damit die Ionen die Falle bevorzugt in Richtung Kollektor und damit in Richtung der Extraktion verlassen, liegt

Tabelle 4.2: Übersicht der EBIT-Einstellungen für die Messungen an den verschiedenen Ladungszuständen. DT ist die an das gesamte Driftensemble angelegte Spannung. Die Benennung der Driftröhren ist in Abbildung 3.4 angegeben (Tr.: Trumpet). Extr. und Kath. bezeichnen Extraktor und Kathode.

Ion	DT	Kanonenseite (G)				Falle	Kollektorseite (C)				Extr.	Kath.	Strom
		Tr.	3, 2	1			1	2	3	Tr.			
	V	V	V	V	V	V	V	V	V	kV	V	mA	
Fe ²⁰⁺	700	5	50	400	459	270	40	20	5	-1,40	-912	100	
Fe ²¹⁺	705	5	50	400	459	270	40	20	5	-1,41	-1040	100	
Fe ²²⁺	720	5	50	400	470	270	40	20	5	-1,57	-1200	108	
Fe ²³⁺	720	5	50	400	470	270	40	20	5	-1,55	-1300	106	

die Elektrode C1 auf einem niedrigeren Potential als G1. Die weiteren Fallenelektroden sind so eingestellt, dass sie von der Falle weg einen monotonen Potentialverlauf erzeugen. Hierdurch wird verhindert, dass in einem weiteren Potentialminimum Ionen gefangen werden.

Um die Strahleigenschaften der extrahierten Ionen nicht zu beeinflussen, wurde beim Übergang zum nächsthöheren Ladungszustand die Elektronenstrahlenergie hauptsächlich durch eine Änderung des Kathodenpotentials erhöht. Da sich hierbei jedoch auch die Raumladung verändert, wurden zur Optimierung der Extraktionseigenschaften auch kleine Änderungen am Fallenpotential vorgenommen. Zudem wurde der Extraktor an die höheren Kathodenspannungen angepasst, um weiterhin zu garantieren, dass keine Elektronen den Kollektor passieren können.

Dump

Die Kathode der Elektronenkanone sondert im Betrieb geringe Mengen von Wolfram und Barium ab. Kommen diese Atome in die Fallenregion, so werden sie dort ionisiert und ebenfalls gefangen. Wegen ihrer im Vergleich zu den Eisenionen höheren Ladung sind sie stärker in der Falle gebunden. Mit der Zeit verdrängen sie somit mehr und mehr Eisenionen aus der Falle. Um dies zu unterbinden, wird die Falle in regelmäßigen Abständen durch Anheben des Potentials an der zentralen Driftröhre ausgeleert. Dieser Vorgang wird als „Dump“ bezeichnet (von englisch *to dump*, leeren, abladen). Da ständig Eisenatome in die Falle injiziert werden, sammeln sich diese wesentlich schneller wieder in der Falle an. Es kann jedoch je nach Falleneinstellungen mehrere Sekunden dauern, bis sich wieder die gewünschte Ladungsverteilung einstellt.

Um das Ausleeren der Falle in der Datenauswertung berücksichtigen zu können, wurde von dem Computer, welcher das Ausleeren der Falle steuerte, eine Spannung ausgegeben,

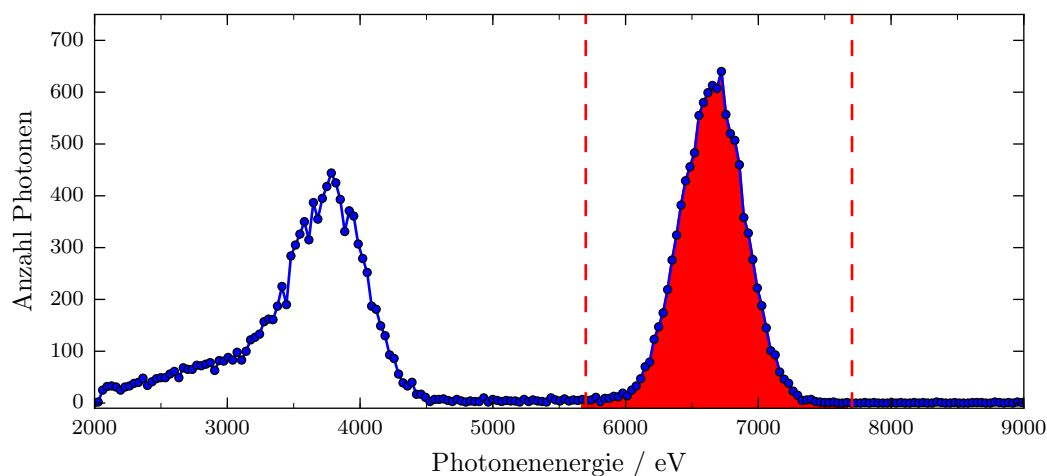


Abbildung 4.1: Beispielhaftes Spektrum der gemessenen Photonenergien, wie es mit den Germaniumdetektoren aufgenommen wurde. Die rot eingefärbten Fluoreszenzphotonen sind deutlich von dem durch die EBIT erzeugten Untergrund getrennt.

welche die Zeit seit dem letzten Dump angibt. Diese wurde dann im Datenaufnahmesystem wieder digitalisiert.

Identifikation der Fluoreszenzphotonen

In der EBIT werden durch Elektronenstoßanregung und radiative Rekombination ständig Photonen erzeugt. Die energiereichsten Photonen entstehen dabei durch die radiative Rekombination, da hierbei zusätzlich die Bindungsenergie des Elektrons freigesetzt wird. Diese kann maximal der Elektronenstrahlenergie entsprechen, da die rekombinierenden Ionen zuvor vom Elektronenstrahl erzeugt werden. Somit ist die Energie der Photonen auf die zweifache Elektronenstrahlenergie begrenzt. Wählt man die Elektronenstrahlenergie niedriger als die halbe Anregungsenergie der untersuchten Resonanzen, so kann man die Fluoreszenzphotonen auch bei geringerer Energieauflösung des Detektors von den durch die EBIT erzeugten Photonen unterscheiden.

Abbildung 4.1 zeigt ein mit dem vertikalen Detektor aufgenommenes Photonenspektrum, wobei der Photonenstrahl auf die Resonanzenergie der Linie q eingestellt war. Da die Elektronenstrahlenergie während der Messung bei circa 2 keV lag, ist die Fluoreszenz um 6,7 keV deutlich vom Untergrund getrennt. In der weiteren Datenauswertung wurden daher alle registrierten Photonen im Bereich 5,7–7,7 keV der Fluoreszenz zugeordnet, während die restlichen Photonen als von der EBIT erzeugt betrachtet wurden.

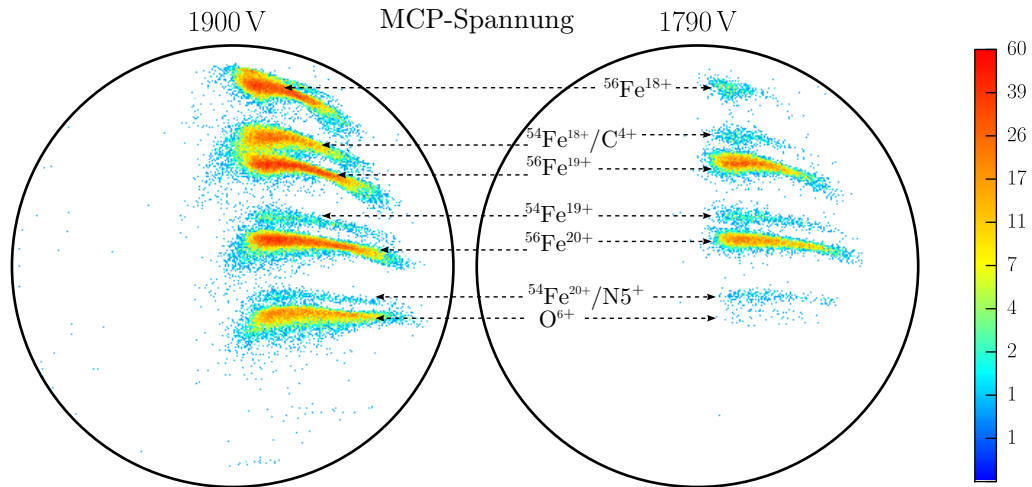


Abbildung 4.2: Vergleich der mit dem positionsempfindlichen Detektor aufgenommenen Bilder für unterschiedliche Spannungen der MCP. Die Detektion von O^{6+} , N^{5+} und C^{4+} wird fast vollständig unterdrückt, während sich die Zählrate der Eisenionen lediglich um einen Faktor drei verringert.

4.1.2 Extraktion

Die Eigenschaften der Ionenextraktion hängen von der Energie ab, mit der die Ionen die Falle verlassen. Da diese für jeden Ladungszustand unterschiedlich ist, mussten auch die Einstellungen der Extraktion für jeden Ladungszustand neu optimiert werden. Kriterium sind dabei neben einer möglichst hohen Ionenzählrate vor allem die eindeutige Trennung der Ladungszustände auf dem PSD-Bild. Dabei wurde so vorgegangen, dass zuerst die Einstellung für die Photoionisation von kohlenstoffartigem Eisen optimiert wurde. Hierbei ließ sich die ansonsten hinderliche Koinzidenz des Ladungs-zu-Masse-Verhältnisses von Fe^{21+} und O^{6+} ausnutzen, indem zunächst O^{6+} als Marker für erwartete Position der Photoionen verwendet wurde. Anschließend wurde die MCP-Spannung stark reduziert, so dass die Empfindlichkeit für O^{6+} abnahm und somit die geringe Zählrate von Fe^{21+} messbar war (siehe Abbildung 4.2). Für die Messung des nächsthöheren Ladungszustands wurde nun die Elektronenstrahlenergie in kleinen Schritten erhöht, wobei die Parameter der Extraktion stets so angepasst wurden, dass sich das Bild auf dem PSD möglichst wenig veränderte. Beim Erreichen der Ionisationsenergie erschien das neue Mutterion somit am Platz des alten Photoions (da beide identisch sind). Anschließend wurde das elektrische Feld des Wienfilters so erhöht, dass das neue Mutterion wieder ungefähr die Position wie bei der vorherigen Messung hatte. Dadurch sollte nun auch der Bereich, in dem das neue Photoion zu erwarten war, in einer ähnlichen Region wie bei der vorherigen Messung liegen.

Mit dieser Methode wurden die in Tabelle 4.3 aufgeführten Extraktionseinstellungen

Tabelle 4.3: Übersicht der Einstellungen der Ionenextraktion für die Messungen der verschiedenen Ladungszustände. L1 und L2 bezeichnen die an die Einzellinsen angelegten Spannungen. WF E ist das an die Ablenkplatten des Wienfilters angelegte Potential, WF B der Strom durch die Spulen des Wienfilters. MCP gibt die an die Mikrokanalplatten des positionsempfindlichen Detektors angelegte Spannung an.

Ion	L1	Ablenker	L2	Sikler-Linse				WF E	WF B	MCP
				Fokus	t/b	l/r	ast.			
	V	V	V	V	V	V	V	V	A	V
Fe ²⁰⁺	21	±296	144	140	20	25	91	±103	4	1790
Fe ²¹⁺	0	±296	144	140	20	21	91	±103	4	1790
Fe ²²⁺	0	±296	144	140	20	21	91	±107	4	1790
Fe ²³⁺	0	±296	144	140	20	21	91	±110	4	1790

für die Ionen Fe²⁰⁺-Fe²³⁺ ermittelt, Abbildung 4.3 zeigt die zugehörigen Bilder des positionsempfindlichen Detektors. Auf diesen ist auch das Eisenisotop ⁵⁴Fe zu erkennen, welches entsprechend seinem natürlichen Anteil von 5,8% im injizierten Eisen vorhanden ist. Aufgrund der unterschiedlichen Masse hat es ein anderes q/m -Verhältnis und trifft daher an einer vom Hauptisotop ⁵⁶Fe verschiedenen Position auf den Detektor.

Zur Bestimmung der Zählraten wurden für Mutterion und Photoion Bereiche auf dem Detektor definiert, innerhalb derer alle gemessenen Ereignisse als zu dem jeweiligen Ion gehörig betrachtet wurden. Diese werden im Folgenden für jeden Ladungszustand kurz charakterisiert.

Kohlenstoffartiges Fe²⁰⁺ Sowohl das Mutterion ⁵⁶Fe²⁰⁺ als auch das Photoion ⁵⁶Fe²¹⁺ sind von den benachbarten Isotopen getrennt. Hierdurch lassen sich die jeweiligen Bereiche sehr genau definieren. Jedoch hat das Photoion die gleiche spezifische Ladung wie O⁶⁺, welches einen konstanten Untergrund verursacht, wie in Abbildung 4.3a rechts zu erkennen ist.

Borartiges Fe²¹⁺ Die Auflösung der einzelnen Ionen hat sich im Vergleich zum kohlenstoffartigem etwas verschlechtert, so sind die Flecken des Isotops ⁵⁴Fe nicht mehr eindeutig von denen des ⁵⁶Fe getrennt. Aufgrund der hohen Zählrate des Mutterions kann man hier den Bereich an der Grenze zum Isotop sehr eng wählen, so dass sichergestellt ist, dass kein ⁵⁴Fe²⁰⁺ gezählt wird. Selbiges gilt für das Photoion, hier lässt sich der Bereich zum Isotop anhand der Messung abseits der Resonanz gut abgrenzen, da hier im Bereich des Photoions keine Ereignisse auftreten.

Berylliumartiges Fe²²⁺ Hier gilt Ähnliches wie für das borartige Eisen. Jedoch gibt es hier beim Photoion auch abseits der Resonanz einen geringen Untergrund, der vom

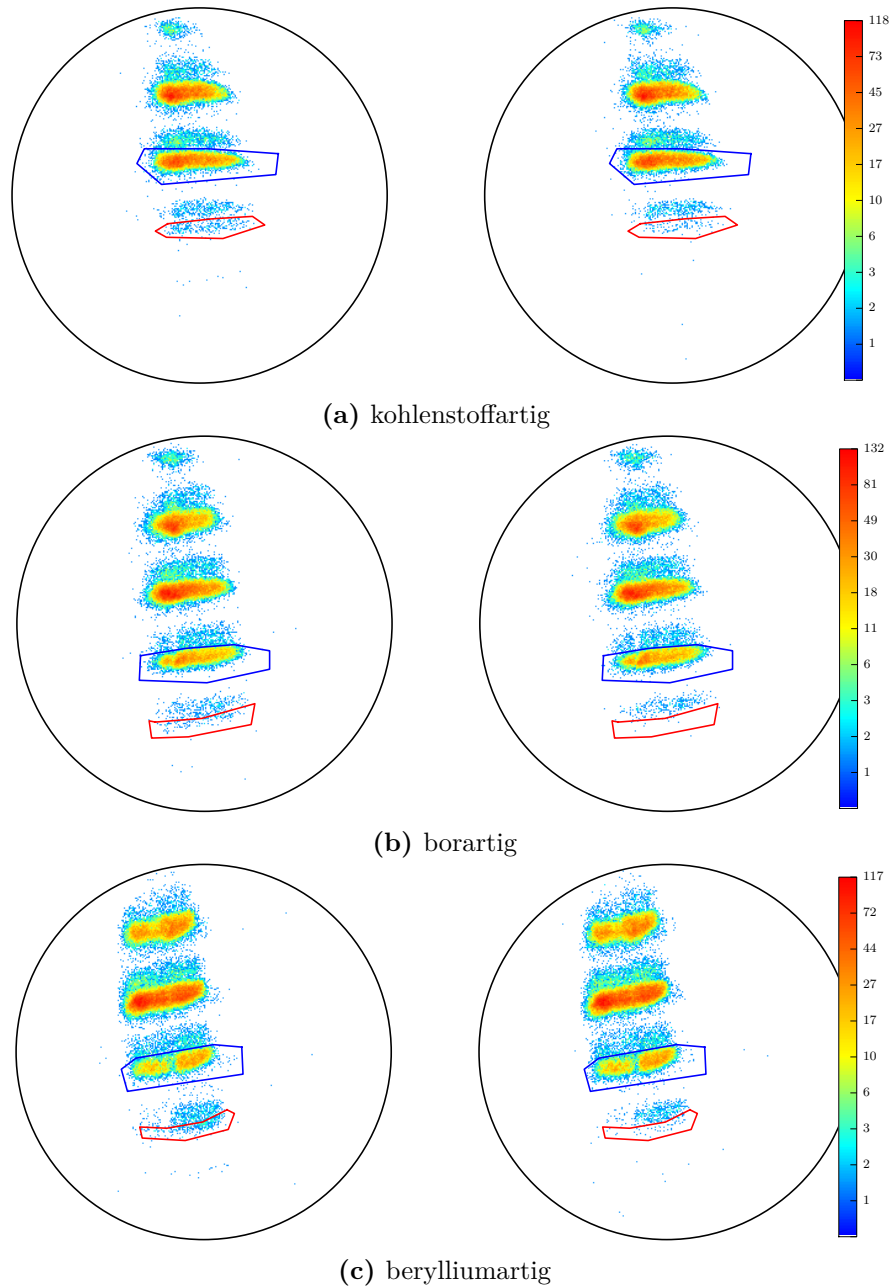
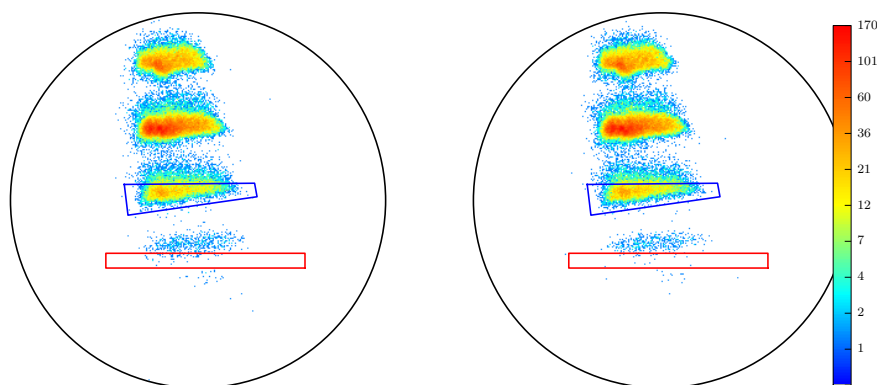


Abbildung 4.3: Aufnahmen des positionsempfindlichen Detektors jeweils für die Einstellungen der unterschiedlichen Ladungszustände. Die Bilder auf der linken Seite wurden auf der Resonanz aufgenommen, während bei den auf der rechten Seite dargestellten Messungen die Photonenstrahlenergie ausserhalb der Resonanz war. Der Bereich, der in der Auswertung den Photoionen zugeordnet wurde, ist rot umrandet, jener der Mutterionen blau.



(d) lithiumartig

Abbildung 4.3: (Fortsetzung)

in der Nähe liegenden C^{5+} stammen könnte. Die Form des Bereichs wurde daher anhand des Unterschieds zwischen den Messungen auf und abseits der Resonanz festgelegt.

Lithiumartiges Fe^{23+} Mit zunehmender Ladung werden die q/m -Unterschiede zwischen den Ionen $^{56}Fe^{q+}$ und $^{54}Fe^{(q-1)+}$ kleiner, eine Trennung dieser Zustände ist mit der erreichten Auflösung nicht mehr möglich. Der gewählte Bereich für die Photoionen enthält daher vermutlich nur einen Bruchteil aller Photoionen. Erschwerend kommt zudem ein leichter Untergrund von N^{6+} sowie die ohnehin geringe Augerzerfallsrate dieser Übergänge hinzu.

4.2 Bestimmung der Zerfallsraten

Eine relativ große Unsicherheit bei bisherigen Absolutbestimmungen von Photoionisations-Wirkungsquerschnitten von Ionen liegt in der ungenauen Kenntnis der Anzahl miteinander wechselwirkender Ionen und Photonen. In „Merged-Beam“-Experimenten lassen sich zwar Ionen- und Photonenfluss gut bestimmen, jedoch befinden sich oftmals Teile des Ionenstrahls in einem metastabilen Zustand und stehen daher nicht als Ziel für die resonante Anregung zur Verfügung. Zudem muss das Volumen, in dem sich die beiden nur Mikrometer breiten Strahlen überlappen, genau bekannt sein. In der bisher einzigen EBIT-Messung an Fe^{14+} waren ebenfalls die nicht genau bekannte Anzahl der Zielionen sowie ein unzureichend kalibrierter Photonenfluss die Hauptfehlerquellen. Deshalb wurde in der hier dargestellten Messung ein Verfahren angewandt, welches unabhängig von der absoluten Anzahl der Ionen und Photonen ist. Ermöglicht wurde dies durch die hohe Auflösung des PETRA-III-Monochromators, die es erlaubt, die Linienprofile der Übergänge so genau zu vermessen, dass sich daraus deren natürliche Linienbreiten ableiten lassen [39].

Kombiniert man diese Linienbreiten mit relativen Messungen von Linienstärken und Verzweigungsverhältnissen, so lassen sich wie im Folgenden dargestellt absolute Zerfallsraten bestimmen.

4.2.1 Herleitung der absoluten Zerfallsraten

Für die in diesem Experiment verwendete Methode benötigt man Messungen an zwei Übergängen des gleichen Ladungszustands. Die Zählraten der gemessenen Photoionen Y_A und Fluoreszenzphotonen sind abhängig von den Verzweigungsverhältnissen B_A, B_γ (2.49) des angeregten Zustands, sowie von der Anzahl der sich in der Falle befindenden Ionen N_{Ion} , dem Wirkungsquerschnitt σ der resonanten Photoanregung, dem Fluss des anregenden Photonenstrahls und den Nachweiswahrscheinlichkeiten der Ionenextraktion P_A und der Germaniumdetektoren P_γ

$$\begin{aligned} Y_A &= B_A \sigma N_{\text{Ion}} N_\gamma P_A \\ Y_\gamma &= B_\gamma \sigma N_{\text{Ion}} N_\gamma P_\gamma. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Hierbei ist $\sigma N_{\text{Ion}} N_\gamma$ die Rate, mit der die Ionen angeregt werden. Misst man Fluoreszenz und Photoionen gleichzeitig, so ist diese Rate für beide Zählraten identisch. Ihr Verhältnis wird unabhängig von der Anregungsrate

$$\frac{Y_\gamma}{Y_A} = \frac{B_\gamma P_\gamma}{B_A P_A}. \quad (4.2)$$

Da sich Messungen an zwei verschiedenen Übergängen des gleichen Ladungszustands nur durch die anregende Photonenenergie unterscheiden, sind die Nachweiswahrscheinlichkeiten bei beiden Messungen gleich. Der nachfolgend definierte Parameter c ist daher nicht mehr abhängig von den spezifischen Eigenschaften des experimentellen Aufbaus

$$c := \frac{Y_{\gamma,1}/Y_{A,1}}{Y_{\gamma,2}/Y_{A,2}} = \frac{B_{\gamma,1}/B_{A,1}}{B_{\gamma,2}/B_{A,2}} = \frac{A_{\gamma,1} A_{A,2}}{A_{A,1} A_{\gamma,2}}. \quad (4.3)$$

Hierbei werden durch die Indizes 1 und 2 die beiden gemessenen Übergänge gekennzeichnet. Durch Messung der vier Zählraten $Y_{A,1}, Y_{\gamma,1}, Y_{A,2}, Y_{\gamma,2}$ lässt sich somit eine Größe bestimmen, die nur noch von den Zerfallsraten A der vermessenen Übergänge abhängt.

Ein weiterer Parameter mit diesen Eigenschaften lässt sich aus den gemessenen Linienstärken S_{exp} ableiten. Hierzu stellt man die Gleichungen 4.1 um und führt anschließend

eine Integration über die Photonenenergie E durch

$$\begin{aligned}
 \frac{Y(E)}{N_\gamma(E) \cdot N_{\text{Ion}}(E)} &= B \cdot P \cdot \sigma(E) \\
 S_{\text{exp}} &:= \int \frac{Y(E)}{N_\gamma(E) \cdot N_{\text{Ion}}(E)} dE = B \cdot P \int \sigma(E) dE \\
 &\stackrel{(2.34)}{=} B \cdot P \cdot S \stackrel{(2.42)}{=} B \cdot P \cdot \frac{g_2}{g_1} \frac{hc^2}{8\pi\nu^2} \cdot A. \tag{4.4}
 \end{aligned}$$

Die Linienstärken lassen sich sowohl für die Fluoreszenz als auch für die Photoionisation bestimmen, weshalb in obiger Formel die jeweiligen Indizes (γ , A) bei den Größen Y , B , P und A nicht angegeben wurden. In den hier beschriebenen Messungen war jedoch die Nachweiswahrscheinlichkeit der Fluoreszenz wesentlich höher als die der Photoionen. Deshalb wurde nur die Linienstärke der Fluoreszenz betrachtet, welche mit einem viel geringeren statistischen Fehler bestimmt werden konnte. Beim Berechnen der gemessenen Linienstärke muss auf den Photonenfluss $N_\gamma(E)$ und die Ionenanzahl N_{Ion} normiert werden. Der Photonenfluss ändert sich während der Dauer eines Scans aufgrund der Schwankungen des Synchrotronstroms, zudem ist die Transmission des Strahlrohres geringfügig energieabhängig. Auch die Anzahl der Ionen in der Falle ist zeit- und damit energieabhängig. Der zur Intensitätsmessung verwendete Aufbau erlaubt nur relative Intensitätsvergleiche, so dass man wiederum das Verhältnis der Linienstärken zweier Übergänge betrachten muss. Dieses wird als Parameter d definiert

$$d := \frac{S_{\text{exp},\gamma,1}}{S_{\text{exp},\gamma,2}} = \frac{A_{\gamma,1}^2 (A_{\gamma,2} + A_{A,2}) \nu_2^2 g_{2,1}}{A_{\gamma,2}^2 (A_{\gamma,1} + A_{A,1}) \nu_1^2 g_{2,2}}. \tag{4.5}$$

Hierbei wurde das Verzweigungsverhältnis gemäß Gleichung 2.49 durch die Zerfallsraten dargestellt. Da die untersuchten Übergänge beide aus dem Grundzustand angeregt werden, ist $g_{1,1} = g_{1,2}$ und diese Faktoren heben sich ebenfalls auf. Die statistischen Gewichte $g_{2,1}$ und $g_{2,2}$ ergeben sich aus den Drehimpulsen sowie aus Überlegungen zu der Polarisierung der angeregten Zustände. Die Übergangsenergien $h\nu$ sind experimentell wesentlich genauer bestimmt als die in diesem Experiment angestrebte Auflösung der Zerfallsraten [39, 37, 36].

Zur Bestimmung der absoluten Zerfallsraten müssen neben diesen relativen Messungen auch absolute Größen bestimmt werden. Hierzu werden die natürlichen Linienbreiten Γ verwendet. Diese lassen sich bei hinreichend hoher Auflösung der Photonenstrahlenergie aus den Linienprofilen der Resonanzen bestimmen, indem man diese an eine Voigtfunktion anpasst. Dies wurde anhand von Fluoreszenzscans für alle hier betrachteten Übergänge durchgeführt [89]. Diese gemessenen natürlichen Linienbreiten Γ geben einen absoluten Wert für die Summe der radiativen (A_γ) und autoionisierenden (A_A) Zerfallsraten eines

angeregten Zustands an

$$\begin{aligned}\frac{\Gamma_1}{\hbar} &= A_{\text{ges},1} = A_{\gamma,1} + A_{\text{A},1} \\ \frac{\Gamma_2}{\hbar} &= A_{\text{ges},2} = A_{\gamma,2} + A_{\text{A},2}.\end{aligned}\tag{4.6}$$

Die Gesamtzerfallsraten $A_{\text{ges},1}$, $A_{\text{ges},2}$ bilden zusammen mit den Parametern c und d ein System von vier unabhängigen Größen, aus denen sich die Zerfallsraten berechnen lassen:

$$A_{\gamma,1} = \left(c \cdot A_{\text{ges},1} - \sqrt{A_{\text{ges},1} A_{\text{ges},2} \frac{g_{2,2}}{g_{2,1}} d \frac{\nu_1}{\nu_2}} \right) / (c - 1)\tag{4.7a}$$

$$A_{\gamma,2} = A_{\gamma,1} \frac{\nu_2}{\nu_1} / \sqrt{\frac{A_{\text{ges},1} g_{2,2}}{A_{\text{ges},2} g_{2,1}} d}\tag{4.7b}$$

$$A_{\text{A},1} = A_{\text{ges},1} - A_{\gamma,1}\tag{4.7c}$$

$$A_{\text{A},2} = A_{\text{ges},2} - A_{\gamma,2}\tag{4.7d}$$

4.2.2 Einfluss von Messunsicherheiten

Die in diesem Experiment gemessenen Größen sind Zählraten von Ionen und Photonen. Aufgrund der stochastischen Natur der An- und Abregungsprozesse haben diese Zählraten eine Messungenauigkeit gemäß der Poisson-Statistik. Die daraus folgenden Wahrscheinlichkeitsverteilungen müssen bei der Berechnung aus ihnen abgeleiteter Größen berücksichtigt werden.

Notwendigkeit nicht-gauß'scher Verteilungen

Bei einer hinreichend hohen Anzahl N gezählter Ereignisse geht die Poisson-Verteilung in eine Gauß-Verteilung mit Standardabweichung $\sigma = \sqrt{N}$ über. Diese Näherung ist ab etwa 20 Ereignissen brauchbar und somit für alle gemessenen Zählraten anwendbar. Problematisch ist jedoch die Fehlerfortpflanzung bei der Berechnung von Quotienten. Da die relativen Fehler der Zählraten teilweise sehr groß sind, haben diese eine stark asymmetrische Verteilung, welche nicht mehr durch eine Gauß-Verteilung genähert werden kann. Da wie im vorherigen Abschnitt gezeigt zur Berechnung der absoluten Raten mehrmals Verhältnisse verschiedener Größen gebildet werden, müssen deren Verteilungen ermittelt und in der weiteren Rechnung berücksichtigt werden.

Zur Berechnung dieser Wahrscheinlichkeitsverteilungen wurde ein Monte-Carlo-Verfahren angewendet. Hängt ein Parameter $X = f(Y_1, \dots, Y_N)$ von N Werten Y_i mit bekannter Verteilung ab, so werden für jeden dieser Werte n zufällige Realisierungen $y_{i,1}, \dots, y_{i,n}$

ermittelt. Aus diesen Werten werden n Realisierungen des Parameters X berechnet

$$x_j = f(y_{1,j}, \dots, y_{N,j}). \quad (4.8)$$

Wählt man N ausreichend groß, so lässt sich aus diesen Werten ein Histogramm mit einer hinreichend großen Anzahl an Klassen erstellen. Dieses wird zum Abschätzen der Wahrscheinlichkeitsverteilung P_X von X verwendet, wobei die Klassenhäufigkeiten als Stützstellen für eine lineare Interpolation dienen.

Einschränkung des Parameterraums

Die zur Berechnung der Zerfallsraten verwendeten Parameter $A_{\text{ges},1}$, $A_{\text{ges},2}$, c und d sind zwar mathematisch unabhängig voneinander, jedoch wird durch die physikalische Bedingung, dass die Zerfallsraten nicht negativ sind, der Parameterraum eingeschränkt. So ergibt sich beispielsweise aus (4.7a) und $A_{\gamma,1} \geq 0$ folgende Bedingung für den Parameter c :

$$c \geq \sqrt{\frac{A_{\text{ges},2}}{A_{\text{ges},1}}} d \frac{\nu_1}{\nu_2}. \quad (4.9)$$

Da in dieser Bedingung wiederum die anderen Parameter auftreten, ist es nicht möglich eine allgemeine Einschränkung für die einzelnen Parameter festzulegen. Die gemessenen Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Parameter sind jedoch unabhängig von den jeweils anderen Parametern, so dass bei der Berechnung der Zerfallsraten mit der im letzten Unterabschnitt beschriebenen Methode (Gleichung 4.8) durchaus negative Werte auftreten können. Aus diesem Grund wurde hier ein anderes Verfahren angewandt, welches im nächsten Absatz beschrieben wird.

Berechnung der Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Raten

Ziel ist es die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Raten $P_{\gamma,1}(A_{\gamma,1})$, $P_{\gamma,2}(A_{\gamma,2})$, $P_{A,1}(A_{A,1})$, $P_{A,2}(A_{A,2})$ aus den gemessenen Verteilungen $P_{\text{ges},1}(A_{\text{ges},1})$, $P_{\text{ges},2}(A_{\text{ges},2})$, $P_c(c)$, $P_d(d)$ der Gesamtzerfallsraten und der Parameter c und d zu bestimmen. Die Raten und die Messparameter werden jeweils in einem Vektor zusammengefasst.

$$\vec{A} = (A_{\gamma,1}, A_{\gamma,2}, A_{A,1}, A_{A,2})^T \quad (4.10)$$

$$\vec{M} = (A_{\text{ges},1}, A_{\text{ges},2}, c, d)^T \quad (4.11)$$

Die Verteilungsfunktionen der gemessenen Parameter sind unabhängig voneinander, somit lässt sich die Verteilungsfunktion von \vec{M} darstellen als

$$P_M(\vec{M}) = \frac{1}{N} P_{\text{ges},1}(A_{\text{ges},1}) \cdot P_{\text{ges},1}(A_{\text{ges},1}) \cdot P_c(c) \cdot P_d(d), \quad (4.12)$$

wobei N die entsprechende Konstante zur Normierung ist. Da die Zerfallsraten nicht-negativ sind, ist der von allen Vektoren \vec{A} aufgespannte Vektorraum gerade $(\mathbb{R}_0^+)^4$. Mithilfe der Gleichungen (4.3, 4.5, 4.6) lässt sich eine Funktion g definieren, welche aus gegebenen Zerfallsraten die Messparameter bestimmt

$$g : (\mathbb{R}_0^+)^4 \rightarrow \Omega, \quad \vec{A} \mapsto \vec{M}. \quad (4.13)$$

Die Menge $\Omega = g\left((\mathbb{R}_0^+)^4\right)$ ist dabei gerade die der physikalisch möglichen Kombinationen der Messparameter. Die zugehörige Umkehrfunktion g^{-1} wird durch die Gleichungen 4.7 angegeben. Die Wahrscheinlichkeit für eine Kombination \vec{A} von Zerfallsraten entspricht der der entsprechenden Messparameter

$$P_A(\vec{A}) = P_M\left(g\left(\vec{A}\right)\right). \quad (4.14)$$

Um die Verteilungen der einzelnen Zerfallsraten zu erhalten, muss über die jeweils anderen Raten integriert werden.

$$P_{\gamma,1}(A_{\gamma,1}) = \iiint P_A(\vec{A}) dA_{\gamma,2} dA_{A,1} dA_{A,2}, \quad (4.15)$$

$$P_{\gamma,2}(A_{\gamma,2}), P_{A,1}(A_{A,1}), P_{A,2}(A_{A,2}) \text{ entsprechend.}$$

Praktisch wurden diese Integrale numerisch gelöst, indem für die Zerfallsraten jeweils Intervalle $[A_{\min}, A_{\max}]$ abgeschätzt wurden, in denen die jeweilige Rate erwartet wurde. Anschließend wurden diese Intervalle durch n äquidistante Stützstellen a_i eingeteilt.

$$a_i = A_{\min} + i \cdot \frac{A_{\max} - A_{\min}}{n - 1} \quad (4.16)$$

Für jede dieser Stützstellen wurden nun die Integrale (4.15) berechnet, wobei die Stützstellen der jeweils anderen Raten zur Näherung des Integrals verwendet wurden.

$$P_{\gamma,1}(a_i^{\gamma,1}) = \frac{1}{N} \sum_{j,k,l} P_A\left(\left(a_i^{\gamma,1}, a_j^{\gamma,2}, a_k^{A,1}, a_l^{A,2}\right)^T\right) \quad (4.17)$$

Anhand der so gewonnenen diskreten Wahrscheinlichkeitsverteilungen wurde überprüft, ob die Intervallgrenzen richtig gewählt wurden ($P(A_{\min}) = P(A_{\max}) \stackrel{!}{=} 0$). War dies nicht

der Fall oder war das Intervall zu groß geschätzt, so wurden die Rechnungen mit neuen Intervallgrenzen wiederholt. Anschließend wurden die Rechnungen mit einer möglichst hohen Anzahl von Stützstellen durchgeführt, da der Rechenaufwand jedoch mit $\mathcal{O}(n^4)$ steigt, wurde hier maximal $n = 151$ gewählt. Die hieraus resultierenden Abstände zwischen den Stützstellen sind jedoch bereits wesentlich kleiner als die Standardabweichung der Verteilung, so dass dies als ausreichend betrachtet werden kann.

Erwartungswert und Standardabweichung lassen sich anschließend aus der diskreten Wahrscheinlichkeitsverteilung einfach bestimmen.

$$\langle A \rangle = \sum_i P(a_i) a_i \quad (4.18)$$

$$\sigma_A = \sqrt{\sum_i P(a_i) (a_i - \langle A \rangle)^2} \quad (4.19)$$

4.3 Photonenenergiescans

Bei den Photonenenergiescans wird die hohe Auflösung des P01-Monochromators genutzt, um Spektren der Photoionisation und Fluoreszenz aufzunehmen. Dazu wird die Photonenstrahlenergie schrittweise geändert und die Photoionen sowie die Fluoreszenzphotonen detektiert. In der anschließenden Datenauswertung wurden die Monochromatorschritte anhand der in den Listfiles mitgeschriebenen Photonenenergie rekonstruiert, so dass jedes gemessene Photoion beziehungsweise Fluoreszenzphoton einer Monochromatoreinstellung und damit einer Energie zugeordnet werden konnte. Eine Übersicht der so gewonnenen Spektren ist in Abbildung 4.4 dargestellt.

4.3.1 Normierung der Daten

Wie in Abschnitt 4.2.1 gezeigt, muss zur Berechnung der experimentellen Linienstärken die Photoionen- und Fluoreszenz-Zählrate auf den Photonenfluss und die Anzahl der Ionen normiert werden. Die Normierung auf die Intensität ist für beide Zählraten gleich, die Ionenanzahl wurde jedoch für beide Zählraten unterschiedlich bestimmt.

Intensitätsnormierung

Die Intensität des Photonenstrahls wurde während der Messung mit der vor dem Beryllium-Eintrittsfenster der FLASH-EBIT montierten Photodiode gemessen. Sie liefert ein zur Intensität proportionales Signal

$$I_\gamma(E) \propto N_\gamma(E), \quad (4.20)$$

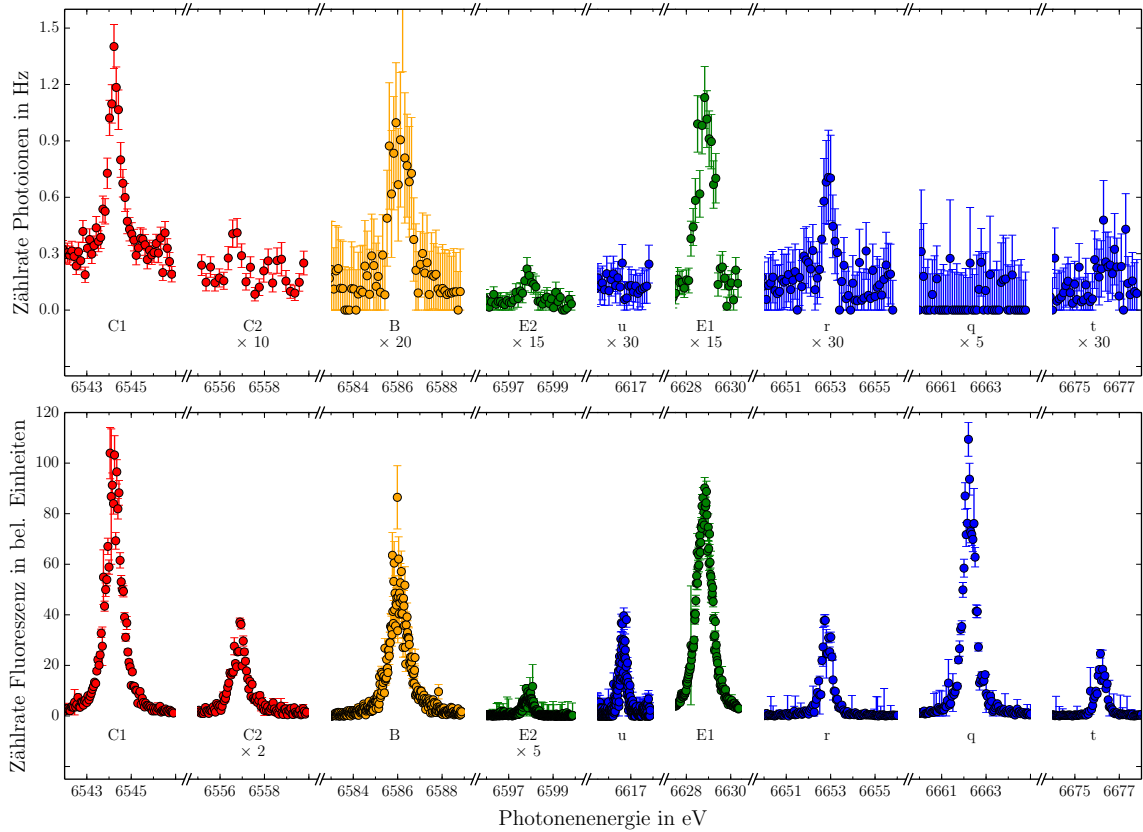


Abbildung 4.4: Übersicht der in diesem Experiment gemessenen Spektren der Photoionisation (oben) und Fluoreszenz (unten). Die Farben geben den Ladungszustand des untersuchten Ions an, rot: kohlenstoffartig Fe^{20+} , gelb: borartig Fe^{21+} , grün: berylliumartig Fe^{22+} , blau: lithiumartig Fe^{23+} . Soweit angegeben wurden die Daten um den Faktor unter der Linienbezeichnung vergrößert abgebildet. Die Intensitäten der Fluoreszenzspektren sind nur innerhalb eines Ladungszustands miteinander vergleichbar, da hier keine einheitliche Normierung erfolgte.

welches für jeden Energieschritt des Monochromators in die Logdatei der Monochromatorsteuerung eingetragen wurde. Die Normierung erfolgte nun, indem für jeden Energieschritt die gemessene Zählrate durch dieses Signal geteilt wurde. Die Messunsicherheit dieses Signals wurde dabei auf 14 % geschätzt [134], wobei hier neben dem Messfehler der Photodiode auch weitere systematische Fehler, wie etwa ein sich ändernder Überlapp von Photonenstrahl und Ionenwolke berücksichtigt wurden.

Bestimmung der Ionenzahl anhand der extrahierten Ionen

Während der Photoionisationsmessungen wurden nicht nur Photoionen auf dem PSD detektiert, sondern auch die niedriger geladenen Mutterionen. Somit muss in der Verarbeitung der PSD-Daten lediglich ein weiterer Bereich definiert werden, in dem die Ereignisse

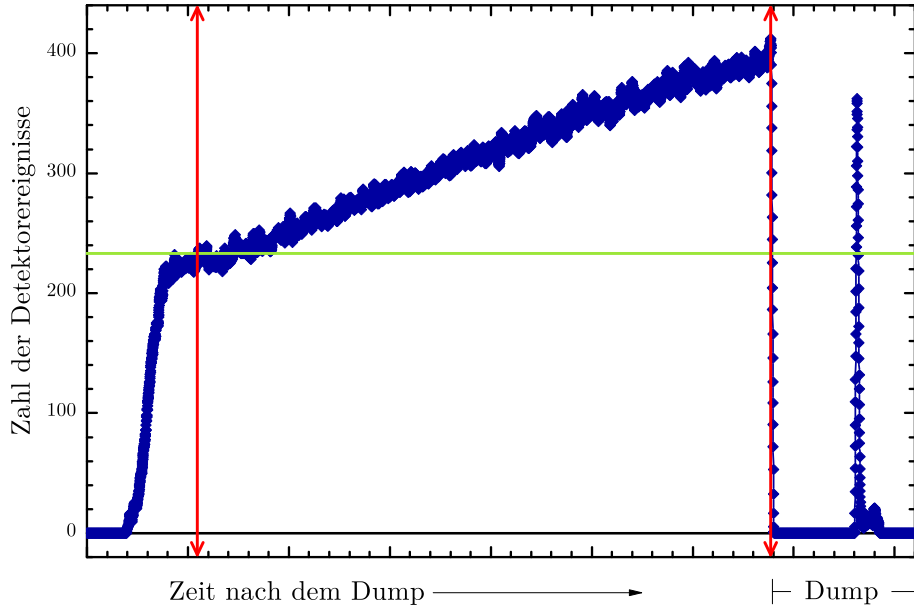


Abbildung 4.5: Zeitlicher Verlauf der Anzahl detektierter Untergrundphotonen während eines Dumpzyklus. In dem mit den roten Pfeilen markierten Bereich wird die Ladungszustandsverteilung als konstant betrachtet und dieses Signal zur Normierung auf die Ionenanzahl verwendet. Zur Bestimmung der Position der unteren Grenze wird das erstmalige Erreichen des über den gesamten Zyklus berechneten Mittelwerts (grün eingezeichnet) verwendet. Die obere Grenze ist der Zeitpunkt des Dumps. (Bild aus [89])

gezählt werden. Das Verhältnis von gemessenen Ionen und der Anzahl der Ionen in der Falle wird durch die Nachweiswahrscheinlichkeit $P_{\text{Ion},M}$ der Extraktion bestimmt

$$Y_{\text{Ion},M} = P_{\text{Ion},M} \cdot N_{\text{Ion}}. \quad (4.21)$$

Diese Nachweiswahrscheinlichkeit ist während der gesamten Messung konstant. Zudem ist die Zählrate der Mutterionen wesentlich höher als die der Photoionen, so dass hier nur ein geringer statistischer Fehler auftritt.

Bestimmung der Ionenanzahl anhand der Fluoreszenz

Die in den hier vorgestellten Messungen aufgenommenen Fluoreszenzspektren eignen sich prinzipiell auch zur Bestimmung der Resonanzenergie. Deshalb wurden sie in dieser Hinsicht bereits von *Jan Rudolph* im Rahmen seiner Dissertation [89] analysiert. Die dazu von ihm vorgenommene Normierung wurde dabei für diese Auswertung übernommen.

Als Maß für Ionenanzahl in der Falle wurde dabei die Rate $Y_{\gamma,U}$ der detektierten Photonen aus dem von der EBIT erzeugten Untergrund verwendet. Dieser Untergrund wird jedoch von allen $N_{\text{Ion,ges}}$ in der Falle gespeicherten Ionen erzeugt, eine Unterscheidung

nach Ladungszuständen ist somit nicht möglich.

$$Y_{\gamma,U} = P_{\gamma} A_U \cdot N_{\text{Ion,ges}} = P_{\gamma} A_U \cdot \frac{N_{\text{Ion}}}{f_{\text{Ion}}} \quad (4.22)$$

A_U gibt dabei die Rate der pro Ion erzeugten Untergrundphotonen an, f_{Ion} den Anteil der untersuchten Ionen an der Gesamtionenzahl. Um $Y_{\gamma,U}$ zur Normierung verwenden zu können, muss also der Faktor f_{Ion} konstant sein. Dies ist im statischen Betrieb der Fall, jedoch muss die EBIT, wie in Abschnitt 4.1.1 beschrieben, regelmäßig ausgeleert werden. Während des Wiederauffüllens der Falle verändert sich dabei die Ladungszustandsverteilung, da die höher geladenen Ionen aufgrund der sequentiellen Ionisation erst später erzeugt werden können. Der zeitliche Verlauf der Untergrundzählrate über einen Dumpzyklus ist in Abbildung 4.5 aufgetragen. Nach einem steilen Anstieg nach dem Dump erhöht sie sich nur noch langsam. In diesem Bereich kann die Ladungszustandsverteilung als konstant angenommen werden, so dass $Y_{\gamma,U}$ zur Normierung verwendet werden kann. Für die außerhalb dieses Bereiches aufgenommenen Fluoreszenzphotonen ist es hingegen nicht möglich eine Normierung vorzunehmen, diese Ereignisse können daher in der weiteren Auswertung nicht berücksichtigt werden. Durch mehrmaliges Durchfahren der Photonenstrahlenergie wird sichergestellt, dass dennoch für alle Messpunkte Daten vorliegen.

4.3.2 Bestimmung von Linienstärke und Linienbreite

Führt man die oben beschriebene Normierung für die durchgeführten Energiescans aus, so erhält man die in Abbildung 4.4 dargestellten Spektren. Zur Ermittlung von Linienstärke und Linienbreite müssen an die Resonanzen in diesen Spektren Voigtfunktionen angepasst werden. Da, wie in Abschnitt 4.2.2 beschrieben, die Kenntnis der genauen Wahrscheinlichkeitsverteilungen dieser Größen notwendig ist, wurde auch hierbei ein Monte-Carlo-Ansatz verfolgt.

Für jeden Punkt des Spektrums wird aus den gemessenen Werten ($Y_{\text{Ion}}, I_{\gamma}, Y_{\text{Ion,M}}$ für die Photoionen beziehungsweise $Y_{\gamma}, I_{\gamma}, Y_{\gamma,U}$ für die Fluoreszenz) eine Verteilung für diese Größen bestimmt. Für die Zählraten sind das die entsprechenden Poisson-Verteilungen, für die Intensität eine Gaußverteilung. Gemäß diesen Verteilungen werden nun N zufällige Werte gezogen, aus denen sich N Spektren bilden lassen. An jedes dieser Spektren wird mit der Methode der kleinsten Quadrate eine Voigtfunktion angepasst, und man erhält somit N Werte für Linienstärke und Linienbreite. Durch das Erstellen von Histogrammen lassen sich aus diesen Werten die gewünschten Verteilungen konstruieren.

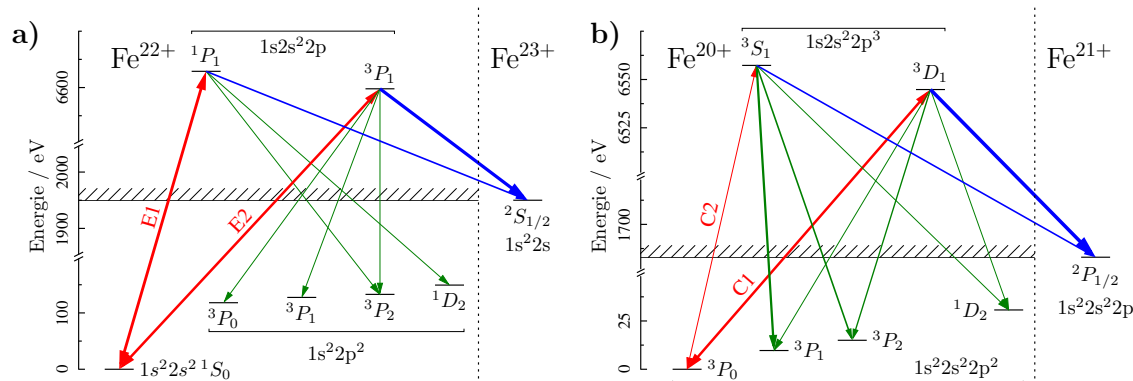


Abbildung 4.6: Termschema der untersuchten berylliumartigen (a) und kohlenstoffartigen (b) Ionen. Dargestellt sind nur die Zustände mit Bedeutung für die durchgeführten Messungen. Die roten Übergänge werden mit dem Photonenstrahl angeregt, die angeregten Zustände können jedoch neben dem Zerfall zurück in den Grundzustand auch in metastabile Zustände übergehen (grün). Der Augerkanal ist in blau dargestellt, wobei hier der Übersicht halber nur der wichtigste Kanal angegeben ist. Die Dicke der Pfeile deutet die relative Stärke der Übergänge an.

4.4 Einfluss verschiedener Zerfallskanäle

In den bisherigen Betrachtungen wurde implizit angenommen, dass es jeweils nur einen radiativen und autoionisierenden Zerfallskanal gibt. Dies stimmt jedoch nur für die betrachteten Zustände im lithiumartigen Eisen. Wie in den Termschemata in Abbildung 4.6 dargestellt, haben die berylliumartigen und kohlenstoffartigen Ionen auch radiative Zerfallskanäle in diverse metastabile Zustände¹. Deren Energiedifferenz zum Grundzustand beträgt dabei maximal 150 eV, daher können die verschiedenen Zerfallskanäle nicht mit den Germaniumdetektoren aufgelöst werden.

Die daraus folgenden Auswirkungen werden in den nächsten beiden Abschnitten beschrieben, bevor ein Verfahren zur Bestimmung der radiativen Verzweungsverhältnisse B_γ^i vorgestellt wird.

4.4.1 Änderung der Linienstärke

Sei A_γ^i die Zerfallsrate eines angeregten Zustands in den Zustand i . Die radiativen Verzweungsverhältnisse sind wie folgt definiert

$$B_\gamma^i = \frac{A_\gamma^i}{\sum_j A_\gamma^j} = \frac{A_\gamma^i}{A_\gamma}, \quad (4.23)$$

¹Sie haben auch mehrere autoionisierende Zerfallskanäle, das Photoion wird jedoch in allen Fällen gleichermaßen detektiert, so dass die Vereinfachung einer Gesamtzerfallsrate gerechtfertigt ist.

wobei die Summe über alle möglichen radiativen Zerfallskanäle geht und A_γ die Gesamtzerfallsrate angibt. Bezeichne A_γ^g die Zerfallsrate in den Grundzustand, so ist dies auch die für die Anregung des Zustands maßgebliche Übergangsrate. Für die Linienstärke ergibt sich somit

$$\begin{aligned} S'_{\text{exp},\gamma} &= B_\gamma \cdot P_\gamma \cdot \frac{g_2}{g_1} \frac{hc^2}{8\pi\nu^2} \cdot A_\gamma^g \\ &= B_\gamma \cdot P_\gamma \cdot \frac{g_2}{g_1} \frac{hc^2}{8\pi\nu^2} \cdot B_\gamma^g \cdot A_\gamma = S_{\text{exp},\gamma} \cdot B_\gamma^g. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Das Verzweigungsverhältnis B_γ bleibt unverändert, da es das Verhältnis von radiativen und autoionisierenden Gesamtraten beschreibt. Um aus der gemessenen Linienstärke $S'_{\text{exp},\gamma}$ die Linienstärke gemäß der Definition in Gleichung 4.4 zu erhalten, muss also durch das Verzweigungsverhältnis B_γ^g geteilt werden. Für die Berechnung des Parameters d ergibt sich somit nach Gleichung 4.5

$$d = \frac{S'_{\text{exp},\gamma,1} B_{\gamma,2}^g}{S'_{\text{exp},\gamma,2} B_{\gamma,1}^g}. \quad (4.25)$$

Auf den Parameter c hat dies keine Auswirkungen, da sich lediglich die Anzahl der angeregten Ionen ändert, von der c aber gemäß seiner Definition unabhängig ist.

4.4.2 Änderung der Abstrahlcharakteristik

Wie man den Termschemata in Abbildung 4.6 entnehmen kann, haben die Endzustände der radiativen Zerfälle unterschiedliche Gesamtdrehimpulse. Da der angeregte Zustand mit einem vollständig linear polarisierten Photonenstrahl erzeugt wurde, haben die Zerfälle nach Gleichung 2.67 unterschiedliche Abstrahlcharakteristiken. Die gemessene Winkelverteilung setzt sich aus den mit den Verzweigungsverhältnissen gewichteten Charakteristiken der einzelnen Zerfälle zusammen

$$W(\theta) = \sum_i B_\gamma^i W^i(\theta, \phi) \stackrel{(2.67)}{=} \frac{W_0}{4\pi} \left(1 + \sum_i \frac{B_\gamma^i \cdot \beta^i}{2} (3 \cos^2 \theta - 1) \right). \quad (4.26)$$

Da sich die Verzweigungsverhältnisse der beiden angeregten Zustände innerhalb eines Ions unterscheiden, haben die Germaniumdetektoren nun für diese Zustände verschiedene Nachweiswahrscheinlichkeiten.

$$\begin{aligned} P'_{\gamma,1} &= P_\gamma \cdot W_1(\theta) \\ P'_{\gamma,2} &= P_\gamma \cdot W_2(\theta) \end{aligned} \quad (4.27)$$

Dies muss bei der Berechnung der Parameter c und d berücksichtigt werden.

$$c = \frac{Y'_{\gamma,1}/Y'_{\text{Ion},1}}{Y'_{\gamma,2}/Y'_{\text{Ion},2}} \cdot \frac{W_2(\theta)}{W_1(\theta)} \quad (4.28)$$

$$d = \frac{S'_{\text{exp},\gamma,1}}{S'_{\text{exp},\gamma,2}} \cdot \frac{B_{\gamma,2}^0}{B_{\gamma,1}^0} \cdot \frac{W_2(\theta)}{W_1(\theta)}. \quad (4.29)$$

Der Korrekturfaktor hängt dabei davon ab, unter welchem Winkel θ der Detektor die Ionen beobachtet.

4.4.3 Messung der Verzweungsverhältnisse

Die Abhängigkeit der Abstrahlcharakteristik von den radiativen Verzweungsverhältnissen in Gleichung 4.26 lässt sich nutzen, um letztere zu bestimmen. Hierbei kann nur zwischen Zerfallsklassen mit unterschiedlichem Gesamtdrehimpuls im Endzustand unterschieden werden, da die Winkelverteilung für Zerfälle mit gleichen Drehimpulsen stets identisch ist. Somit ergeben sich für die untersuchten beryllium- und kohlenstoffartigen Übergänge drei Klassen, jeweils eine für die drei möglichen Enddrehimpulse $J_E = 0, 1, 2$.

Zur Bestimmung der Abstrahlcharakteristik wurde die Fluoreszenz mit drei Detektoren unter verschiedenen Beobachtungswinkeln gemessen (horizontal: 180° , Index H; vertikal: 270° , Index V; diagonal: 45° , Index I; siehe auch Abbildung 3.5). Da die absolute Anzahl der angeregten Ionen nicht genau bekannt ist, können jedoch nur die Verhältnisse von je zwei Detektoren betrachtet werden, wodurch man zwei Parameter erhält.

$$V_1 = \frac{Y_{\gamma,V}}{Y_{\gamma,H}}, \quad V_2 = \frac{Y_{\gamma,V}}{Y_{\gamma,I}}, \quad (4.30)$$

wobei Y_γ die Zählraten an den jeweiligen Detektoren sind. Da die drei Verzweungsverhältnisse über

$$B_\gamma^0 + B_\gamma^1 + B_\gamma^2 = 1 \quad (4.31)$$

miteinander verknüpft sind, gibt es auch nur zwei zu bestimmende Größen, so dass dieses Problem mit den aufgenommenen Daten lösbar ist. Dafür müssen jedoch die für die einzelnen Zerfallskanäle erwarteten Verhältnisse V_1, V_2 bekannt sein. Diese bestimmen sich aus der Anordnung der Detektoren.

Einfluss der Detektorgeometrie

Aufgrund der endlichen Ausdehnung der Detektoren und der Ionenwolke muss zur Bestimmung einer effektiven Detektorfläche, welche die Abstrahlcharakteristik berücksichtigt, das

Tabelle 4.4: Ergebnisse der Simulation zu den Verhältnissen der effektiven Detektorflächen für die verschiedenen Zerfallskanäle.

Übergang	$J = 0 \rightarrow 1 \rightarrow 0$	$J = 0 \rightarrow 1 \rightarrow 1$	$J = 0 \rightarrow 1 \rightarrow 2$
$V_{1,\text{eff}}$	215	0.54	1.25
$V_{2,\text{eff}}$	32.7	11.3	18.0

folgende Integral gelöst werden

$$\begin{aligned}
A_{\text{eff}}^i &= \frac{4\pi}{W_0} \int_L \int_A W(\theta(l, x, y)) \, dx dy dl \\
&= \int_L \int_A \left(1 + \frac{\beta^i}{2} (3 \cos^2 \theta(l, x, y) - 1) \right) \, dx dy dl,
\end{aligned} \tag{4.32}$$

wobei über die Länge L der Ionenwolke und die Detektorfläche A integriert wird. Für die Evaluation der Funktion $\theta(l, x, y)$ muss die Position des Detektors bekannt sein. Diese sind jedoch nicht exakt bekannt, da die Detektoren beim Aufbau lediglich manuell „auf Sicht“ ausgerichtet wurden. Das Verhältnis der Detektorflächen konnte jedoch aus Messungen an den Übergängen r und t , welche eine symmetrische Abstrahlung ($\beta = 0$) haben, bestimmt werden. Somit blieb als freier Parameter der absolute Abstand vom Fallenzentrum. Das Integral (4.32) wurde daher für verschiedene Abstände numerisch berechnet. Hierbei stellte sich heraus, dass für fast alle Übergänge die Verhältnisse

$$V_{1,\text{eff}} = \frac{A_{\text{eff,V}}}{A_{\text{eff,H}}}, \quad V_{2,\text{eff}} = \frac{A_{\text{eff,V}}}{A_{\text{eff,I}}} \tag{4.33}$$

sich auch bei Variation des Abstands um mehrere Zentimeter nur um etwa 1% verändern. Dies lässt sich durch die flachen Verläufe der Winkelverteilungen (siehe Abbildung 2.6) erklären. Lediglich die Beobachtung des $J = 0 \rightarrow 1 \rightarrow 0$ Übergangs unter 180° hat eine starke Abstandsabhängigkeit, da die Abstrahlung unter genau diesem Winkel verschwindet und es somit bei Änderung des Raumwinkels große relative Unterschiede gibt. Für diesen Übergang konnte jedoch auf Daten der im Rahmen der Resonanzenergiemessungen aufgenommenen Linie w in heliumartigen Eisen zurückgegriffen werden. Diese Linie ist ein reiner $J = 0 \rightarrow 1 \rightarrow 0$ Übergang und konnte somit zur Kalibration verwendet werden. Die so erhaltenen Verhältnisse sind in Tabelle 4.4 aufgeführt.

Berechnung der Verzweigungsverhältnisse

Mit den Verhältnissen der reinen Übergänge aus Tabelle 4.4 lassen sich die gemessenen Quotienten V_k der Fluoreszenz mit den Verzweigungsverhältnissen verknüpfen.

$$V_k = \sum_{i=0}^2 \frac{B_\gamma^i \cdot V_{k,\text{eff}}^i}{V_{k,\text{eff}}^i + 1} \bigg/ \sum_{i=0}^2 \frac{B_\gamma^i}{V_{k,\text{eff}}^i + 1}, \quad k \in \{1, 2\} \quad (4.34)$$

Zusammen mit Gleichung 4.31 erhält man somit drei Gleichungen für die drei Unbekannten B_γ^0 , B_γ^1 und B_γ^2 . Da in Gleichung 4.34 viele Quotienten gebildet werden, ist eine Behandlung der Messunsicherheiten analog zu der in Abschnitt 4.2.2 für die Zerfallsraten beschriebenen Methode notwendig. Dazu wurden anhand der gemessenen Zählraten durch Simulation von Poissonverteilungen die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Verhältnisse V_1 und V_2 bestimmt. Aus diesen wurden anschließend die Verteilungen für die Verzweigungsverhältnisse ermittelt.

Kapitel 5

Ergebnisse

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der durchgeführten Messungen und die daraus berechneten Zerfallsraten präsentiert. Sie werden zunächst für jeden Ladungszustand einzeln diskutiert, wobei die borartigen Resonanzen nicht weiter einbezogen werden, da die beiden Übergänge hier nicht getrennt beobachtet werden konnten und es somit keine Möglichkeit zur Bestimmung der Zerfallsraten gab. In der anschließenden Diskussion wird ein Vergleich mit vorhandenen Theorien vorgenommen und das Zustandekommen der Unsicherheiten betrachtet.

5.1 Lithiumartiges Fe^{23+}

Im lithiumartigen Eisen wurden insgesamt vier Übergänge vermessen, die Linien u , r , q und t (siehe Tabelle 4.1). Das Signal der Linie u war dabei sehr schwach, weshalb es nicht möglich war anhand ihres Linienprofils eine natürliche Linienbreite zu bestimmen. Zudem liegt ihre Übergangsenergie 36 eV von derjenigen der nächstgelegenen Linie r entfernt, was Scans über alle Linien erschwert hätte. Deshalb wurde die Linie u nicht eingehender untersucht.

Die Augerzerfallsrate der Linie q ist nach theoretischen Angaben über drei Größenordnungen kleiner als ihre radiative Zerfallsrate [27, 39]. Dies stimmt mit der hier durchgeführten Messung überein, innerhalb deren Messgenauigkeit keine Photoionisation bei q nachgewiesen werden konnte. Dieser Umstand kann ausgenutzt werden, um eine Bestimmung der Zerfallsraten gänzlich ohne Messung der Photoionen durchzuführen, da in diesem Fall ($A_{A,2} = A_{A,q} = 0$) für den Parameter $c = 0$ (4.3) unabhängig von den weiteren Zerfallsraten gilt. Somit ergeben sich zwei Methoden zur Bestimmung der Zerfallsraten, deren Ergebnisse zunächst dargestellt werden, bevor eine Kombination beider Verfahren diskutiert wird, die eine höhere Genauigkeit ermöglicht.

5.1.1 Bestimmung der Zerfallsraten aus der Fluoreszenz

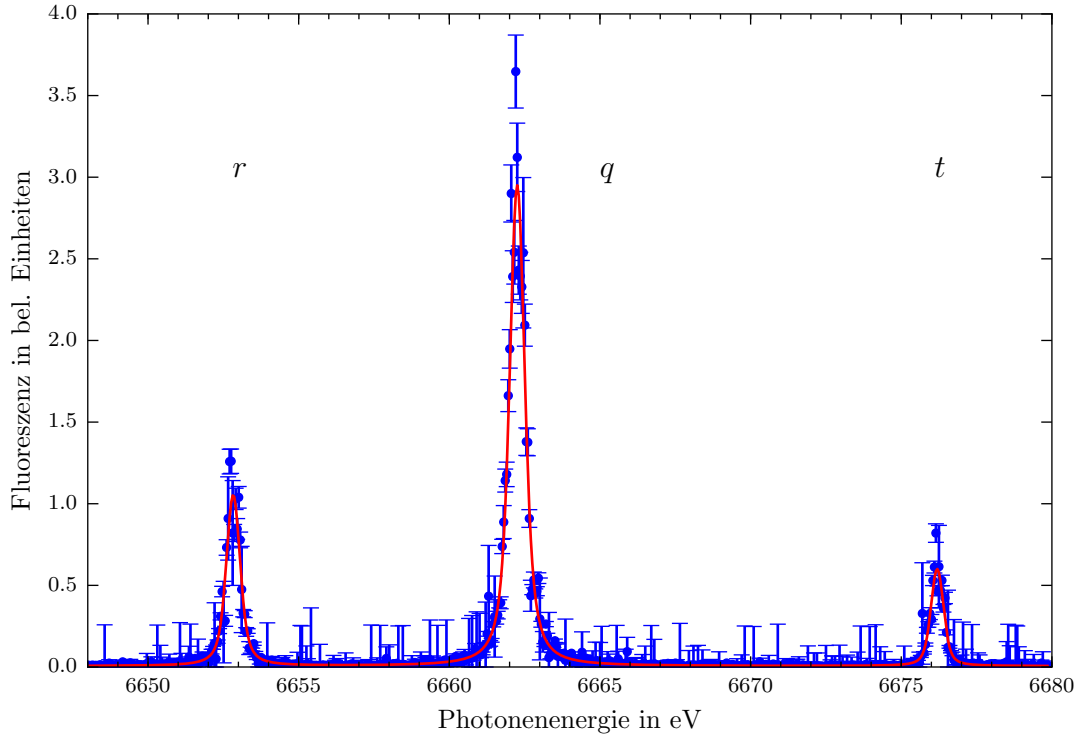


Abbildung 5.1: Photonenenergiescan mit den Resonanzen r , q und t , aufgetragen ist die mit dem vertikalen Germaniumdetektor gemessene Fluoreszenz. Dieser Scan wurde zur Bestimmung der natürlichen Linienbreiten sowie der Verhältnisse der Linienstärken verwendet. Rot eingezeichnet ist die an die Resonanzen angepasste Summe von drei Voigt-Funktionen.

Misst man in einem Scan die Fluoreszenz der Übergänge r , q und t , so lassen sich hieraus neben den natürlichen Linienbreiten der drei Resonanzen auch die Verhältnisse der Linienstärken gewinnen.

$$d_{r,q} = \frac{S_r}{S_q}, \quad d_{q,t} = \frac{S_q}{S_t}, \quad d_{r,t} = \frac{S_r}{S_t} \quad (5.1)$$

Da sich ein Verhältnis durch die jeweils anderen ausdrücken lässt, erhält man hieraus zwei unabhängige Messgrößen. Zusammen mit den drei natürlichen Linienbreiten ist es somit möglich die fünf unbekanntnen Zerfallsraten ($A_{\gamma,r}$, $A_{\gamma,q}$, $A_{\gamma,t}$, $A_{A,r}$, $A_{A,t}$) zu berechnen. Zu diesem Zweck wurde der in Abbildung 5.1 gezeigte Photonenergiescan durchgeführt.

Natürliche Linienbreiten

Die in diesem Scan gemessene Fluoreszenz wurde, wie in Abschnitt 4.3.1 beschrieben, auf die Photonenstrahlintensität und die Anzahl der Ionen normiert. Anschließend wurde

an diese Daten eine Summe von drei Voigtfunktionen angepasst. Hierbei wurde für alle Funktionen die gleiche Gaußbreite angenommen, da diese nicht von den Eigenschaften der Resonanzen abhängt. Durch Anwendung des in Abschnitt 4.2.2 beschriebenen Monte-Carlo-Verfahrens konnten die in Abbildung 5.2 dargestellten Verteilungen für die natürlichen Linienbreiten bestimmt werden, aus denen sich folgende Werte ergeben

$$\Gamma_r = 213(40) \text{ meV}, \quad \Gamma_q = 317(23) \text{ meV}, \quad \Gamma_t = 161(46) \text{ meV}, \quad (5.2)$$

wobei der Fehler – wie im Folgenden auch – die $1\text{-}\sigma$ -Standardabweichung angibt.

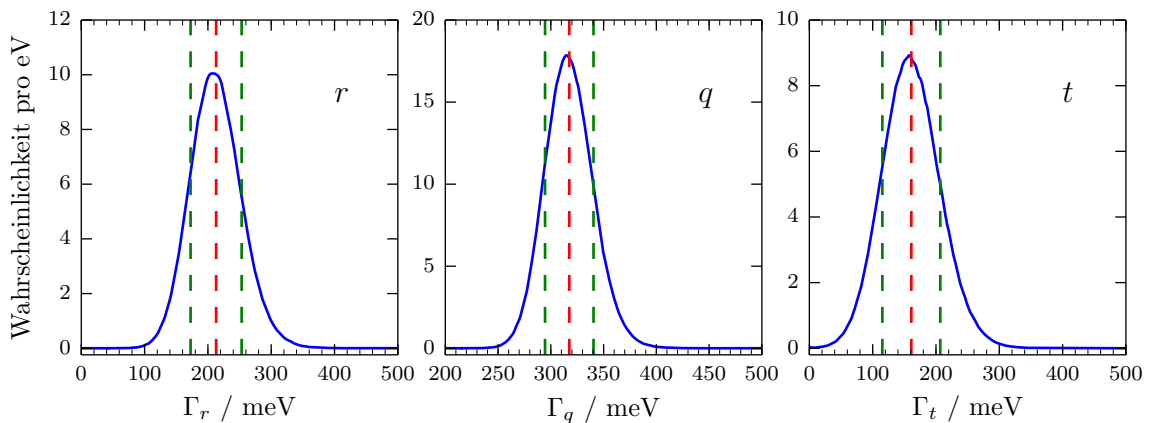


Abbildung 5.2: Wahrscheinlichkeitsverteilungen der durch Anpassung der Daten aus Abbildung 5.1 an eine Voigtfunktion erhaltenen natürlichen Linienbreiten. Die rote gestrichelte Linie kennzeichnet den Erwartungswert, die grünen zeigen das $1\text{-}\sigma$ -Intervall.

Verhältnis der Linienstärken

Die zur Bestimmung der natürlichen Linienbreiten verwendeten angepassten Voigtfunktionen enthalten über ihre Flächen auch die Linienstärken der Resonanzen. Bei der Berechnung der Verhältnisse, die q enthalten, muss die unterschiedliche Abstrahlcharakteristik von q im Vergleich zu r und t berücksichtigt werden (siehe Abschnitt 2.2.6). Die Linie q erscheint bei horizontaler Beobachtung um die Hälfte schwächer, bei vertikaler 1,25 mal stärker. Die Verteilungen der so gewonnenen Parameter $d_{r,q}$, $d_{q,t}$ und $d_{r,t}$ sind in Abbildung 5.3 gezeigt. Sie weichen nur minimal von Gaußfunktionen ab, was durch die hohen Zählraten bei der Fluoreszenz zu erklären ist, bei denen sich die Poissonverteilung kaum mehr von einer Gaußverteilung unterscheidet. Aus diesem Grund werden im weiteren für die Parameter d keine Verteilungen mehr berechnet, sondern ihre Unsicherheiten durch die Gauß'sche Fehlerfortpflanzung berechnet und auch als gaußverteilt angenommen.

Neben dem in Abbildung 5.1 dargestellten Scan konnten für die Bestimmung der Parameter d zudem Scans herangezogen werden, die im Rahmen der Messungen zur Bestim-

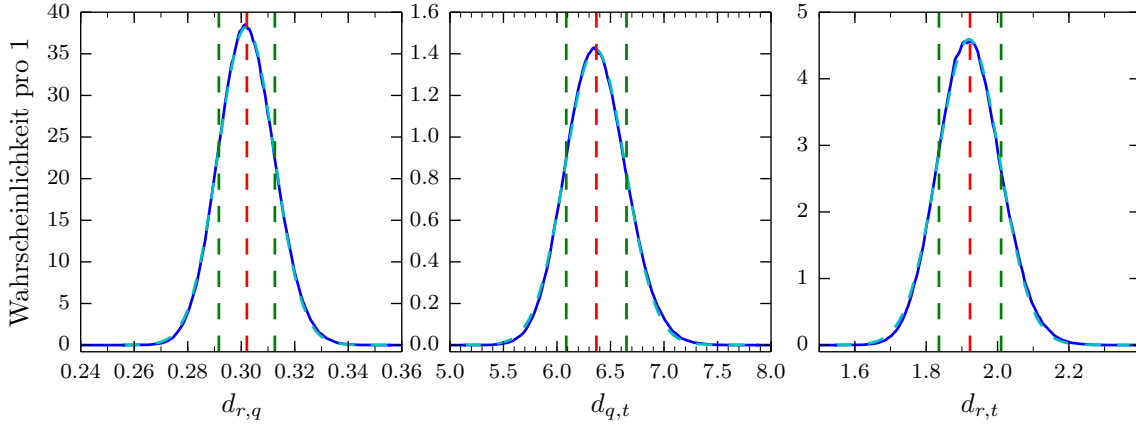


Abbildung 5.3: Verteilungen der Verhältnisse der Linienstärken $d_{r,q}$, $d_{q,t}$, $d_{r,t}$. Durch die cyan gestrichelten Linien werden angepasste Gaußfunktionen angedeutet.

mung der Übergangsenergien durchgeführt wurden. Zum Auffinden der Linien wurden dabei Übersichtsscans über große Energiebereiche gemacht, in denen auch die Linien r , q und t enthalten waren. Zudem wurden die Verhältnisse auch für die mit dem horizontalen Dektector aufgenommenen Spektren bestimmt. Aus diesen verschiedenen Messungen wurde anschließend ein gewichteter Mittelwert gebildet. Die so bestimmten Verhältnisse

$$d_{r,q} = 0,304(7), \quad d_{q,t} = 7,56(22), \quad d_{r,t} = 2,34(8) \quad (5.3)$$

weichen für $d_{q,t}$ und $d_{r,t}$ von den in Abbildung 5.3 dargestellten Verteilungen ab. Dies deutet auf eine nicht berücksichtigte Ungenauigkeit bei der Bestimmung der Linienstärke von t hin, die auch die schwächste der drei Linien ist. Jedoch wurde im weiteren Verlauf der Analyse festgestellt, dass diese verschiedenen Werte für $d_{q,t}$ und $d_{r,t}$ innerhalb der jeweiligen Unsicherheiten zu gleichen Zerfallsraten führen, so dass eine weitere Untersuchung dieser Abweichung nicht zwingend notwendig war.

Ermittelte Zerfallsraten

Aus den so erhaltenen Verteilungen von Γ_r , Γ_q , Γ_t und $d_{r,q}$, $d_{q,t}$, $d_{r,t}$ lassen sich nun die Zerfallsraten bestimmen. Dabei muss für das statistische Gewicht des Übergangs q $g_q = 2$ verwendet werden, da aufgrund der linearen Polarisation des Photonenstrahls nur $\Delta M = 0$ -Übergänge erlaubt sind, wodurch nur die $M = \pm \frac{1}{2}$ -Zustände von q bevölkert werden. Man erhält

$$\begin{aligned} A_{\gamma,r} &= 243(24) \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1} & A_{A,r} &= 83(38) \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1} \\ A_{\gamma,t} &= 140(20) \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1} & A_{A,t} &= 111(48) \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1} \\ A_{\gamma,q} &= 480(33) \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}, \end{aligned} \quad (5.4)$$

die zugehörigen Wahrscheinlichkeitsverteilungen sind in Abbildung 5.4 dargestellt.

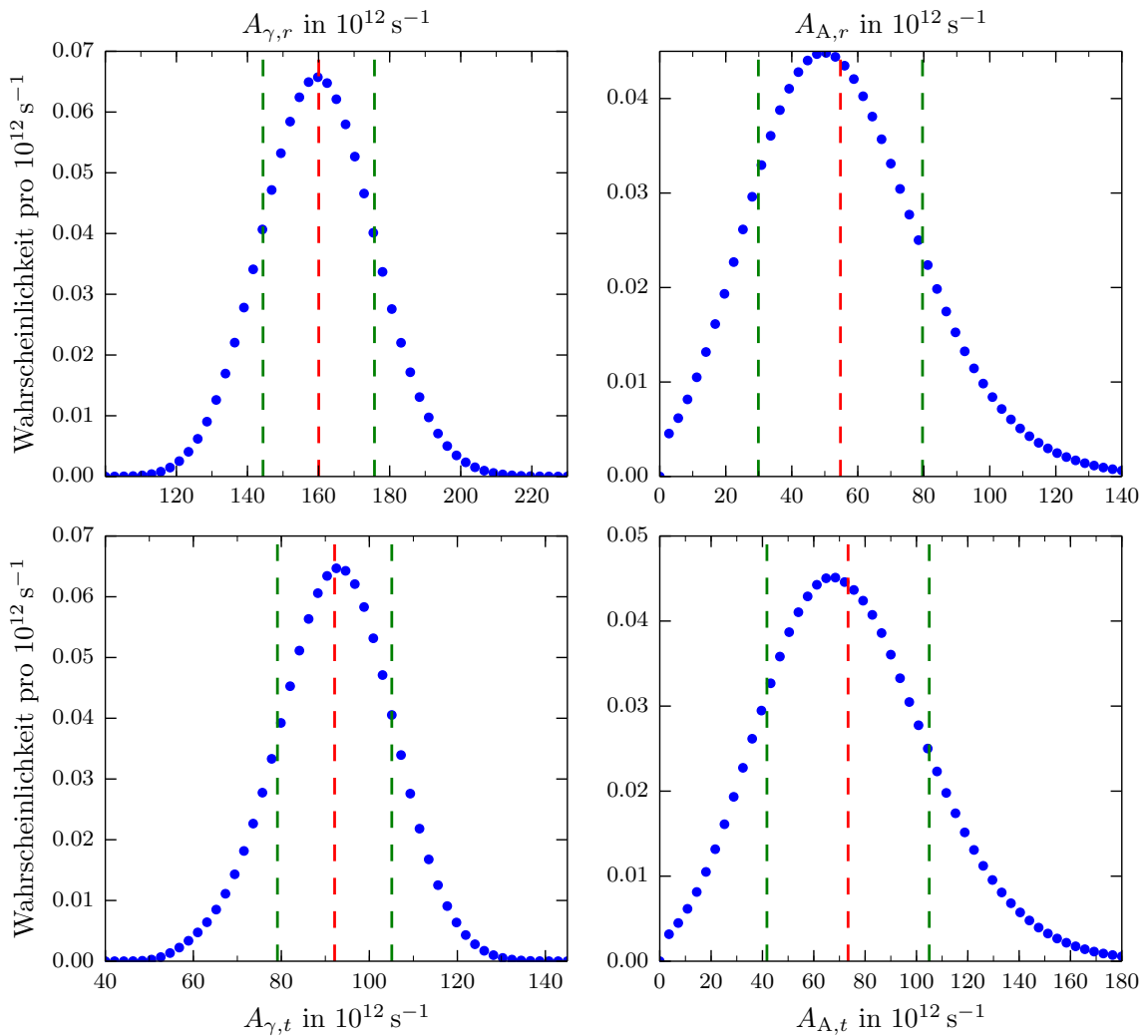


Abbildung 5.4: Wahrscheinlichkeitsverteilungen der aus der Fluoreszenzmessung ermittelten Zerfallraten. Da diese nur an diskreten Stützstellen bestimmt wurden (siehe Gleichungen (4.16) und (4.17) in Abschnitt 4.2.2), sind in den Graphen nur diese Werte als Punkte eingezeichnet. Die Verteilung von $A_{\gamma,q}$ entspricht der Verteilung von Γ_q in Abbildung 5.2.

5.1.2 Bestimmung der Zerfallraten mithilfe der Photoionisation

Für die Übergänge r und t wurden sowohl Photoionisation als auch Fluoreszenz gemessen. Somit ist es möglich, wie in Abschnitt 4.2 beschrieben, die Auger- und radiativen Raten zu bestimmen.

Tabelle 5.1: Messreihe zur Bestimmung des Parameters c . Angegeben ist jeweils die Anzahl der detektierten Photoionen und der Fluoreszenzphotonen, welche vom vertikalem (V), horizontalen (H) Detektor sowie vom IGLET (I) gemessen wurden. Die Messdauer auf den Resonanzen r und t betrug 620 s, für den mit einer Photonenenergie abseits der Resonanzen aufgenommenen Untergrund 100 s.

Linie	E_γ / eV	Photoionen	Fluoreszenzphotonen		
			V	H	I
r	6653,0	238	14 922	13 060	793
Untergrund	6656,0	24	15	19	1
t	6676,4	179	1531	1301	38
Untergrund	6673,0	27	11	15	1
r	6653,0	219	19 246	17 490	1143
Untergrund	6656,0	22	14	13	1
t	6676,4	282	10 084	9362	550
t	6676,4	297	11 354	10 722	690
r	6653,0	229	16 078	15 828	1023
Untergrund [†]	6656,0	61	76	104	9

[†] Diese Werte wurden mit einer Messdauer von 300 s aufgenommen.

Parameter c

Zur Bestimmung des Parameters c wurden Messungen bei konstanter Photonenenergie auf dem Maximum der jeweiligen Linie durchgeführt. Dadurch wurden mehr Ereignisse aufgenommen als bei einem Scan der Photonenenergie. Die Ergebnisse dieser Messungen sind in Tabelle 5.1 aufgelistet. Zur Bestimmung des Untergrundes wurden auch Messungen abseits der Resonanzenergie durchgeführt. Dieser Untergrund wurde nach einer Normierung auf die Messdauer von den auf der Resonanz gemessenen Ereignissen abgezogen. Aus jeweils einem Paar von r - und t -Messungen wurde jeweils eine Verteilung für den Parameter c ermittelt, welche anschließend zu der in Abbildung 5.5 dargestellten Gesamtverteilung zusammengefasst wurden. Der hieraus bestimmte Wert für $c_{r,t}$ ist

$$c_{r,t} = 2,50(53). \quad (5.5)$$

Zur Ermittlung der Zählrate der Fluoreszenz wurden hierbei nur die Ereignisse des vertikalen Detektors verwendet. Zwar ließe sich der Fehler durch Berücksichtigung der mit vertikalem Detektor und IGLET registrierten Ereignisse vermutlich noch etwas verringern, jedoch wird der Gesamtfehler ohnehin durch die niedrige Zahl der gemessenen Photoionen dominiert.

Ergänzend zu den Messungen auf den Resonanzmaxima lässt sich der Parameter c auch

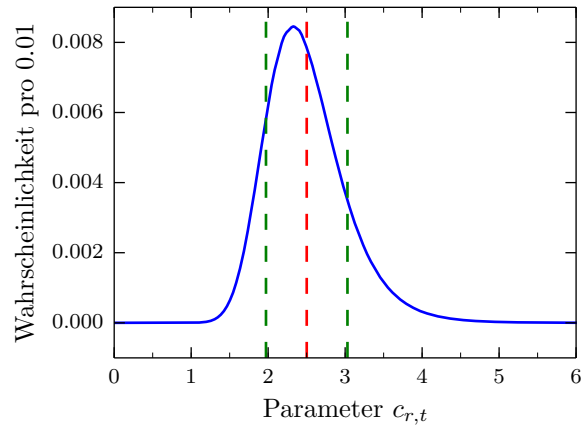


Abbildung 5.5: Wahrscheinlichkeitsverteilung des Parameters $c_{r,t}$, berechnet mit den Daten aus Tabelle 5.1.

aus den durch Energiescans ermittelten Linienstärken von Fluoreszenz und Photoionisation (siehe Abbildung 5.6) bestimmen. Hierbei wurde die Unsicherheit der Photoionisationsmessungen zuerst irrtümlicherweise um einen Faktor 3 zu groß angenommen, weshalb diese Messungen in der weiteren Auswertung keine Berücksichtigung fanden. Eine erneute Analyse ergab jedoch, dass aus diesen Messungen ein Wert von $c_{r,t} = 2,56(75)$ folgt, womit sich durch Kombination beider Messverfahren der Fehler noch um ungefähr 20 % reduzieren lassen könnte, was jedoch aus Zeitgründen bisher nicht erfolgt ist.

Ermittelte Zerfallsraten

Der Parameter $d_{r,t}$ und die natürlichen Linienbreiten Γ_r und Γ_t sind bei diesem Verfahren identisch mit den bei der Analyse der Fluoreszenz ermittelten. Die Berechnung der Zerfallsraten von r und t mit diesen Werten und dem Parameter $c_{r,t}$ ergibt

$$\begin{aligned} A_{\gamma,r} &= 219(75) \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1} & A_{A,r} &= 107(49) \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1} \\ A_{\gamma,t} &= 128(35) \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1} & A_{A,t} &= 144(67) \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1} \end{aligned} \quad (5.6)$$

ihre Verteilungen sind in Abbildung 5.7 dargestellt. Eine Bestimmung von $A_{\gamma,q}$ ist mit diesem Verfahren nicht möglich, da q keinen messbaren autoionisierenden Zerfallskanal besitzt. Die Unsicherheiten dieser Methode sind größer als bei der Bestimmung der Raten anhand der Fluoreszenz, eine ausführliche Analyse der Messunsicherheiten erfolgt in Abschnitt 5.4.2.

5.1.3 Kombination beider Methoden

Die mit den beiden Methoden ermittelten Verteilungen der Zerfallsraten lassen sich nicht einfach zu einem Gesamtergebnis zusammenfassen, da die Verteilungen von $d_{r,t}$, Γ_r und

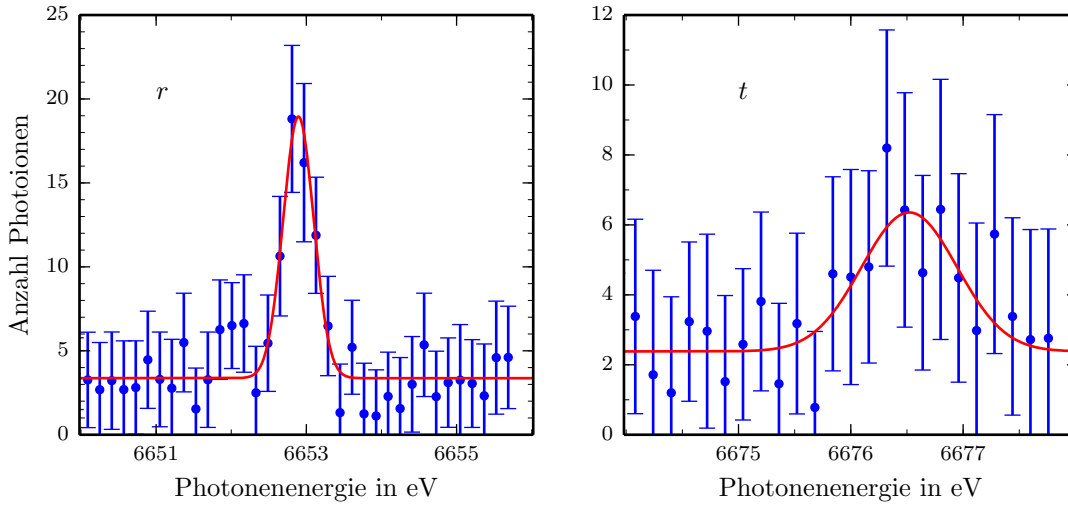


Abbildung 5.6: Photoionenausbeute der Energiescans der Resonanzen r und t . Dargestellt ist die absolute Anzahl gemessener Photoionen, nicht ganze Zahlen sind durch die (die Gesamtzahl erhaltende) Normierung bedingt. Rot dargestellt ist eine angepasste Gaußkurve, die zur Ermittlung der Linienstärke verwendet wurde.

Γ_t in beide Berechnungen einfließen und die Ergebnisse daher nicht komplett unabhängig voneinander sind. Jedoch ist es möglich aus den fünf zu bestimmenden Raten die sieben gemessenen Größen zu berechnen. Dies kann durch eine Funktion g ausgedrückt werden, mit der man wiederum die Wahrscheinlichkeiten von gemessenen und zu bestimmenden Größen verknüpfen kann (Gleichung 4.14). Die Wahrscheinlichkeitsverteilung P_M setzt sich dabei aus den fünf gemessenen Verteilungen zusammen

$$P_M(\vec{M}) = \frac{1}{N} P_{\text{ges},r}(A_{\text{ges},r}) \cdot P_{\text{ges},q}(A_{\text{ges},q}) \cdot P_{\text{ges},t}(A_{\text{ges},t}) \cdot P_{c,(r,t)}(c_{r,t}) \cdot P_{d,(r,q,t)}(d_{r,q}, d_{q,t}, d_{r,t}), \quad (5.7)$$

wobei $P_{d,(r,q,t)}$ die Wahrscheinlichkeit angibt, in einer Messung die Werte $d_{r,q}$, $d_{q,t}$ und $d_{r,t}$ zu messen. Da diese drei Größen nicht unabhängig voneinander sind, ist diese Verteilung nicht in ein Produkt von Einzelverteilungen zerlegbar. Zwar könnte eine der drei Größen durch die jeweils beiden anderen ausgedrückt werden, dadurch würde aber derjenigen Linienstärke, welche in diesen beiden Verhältnissen enthalten ist, ein größeres Gewicht zukommen.

Mit der so bestimmten Gesamtverteilung lassen sich die Zerfallsraten unter Benutzung

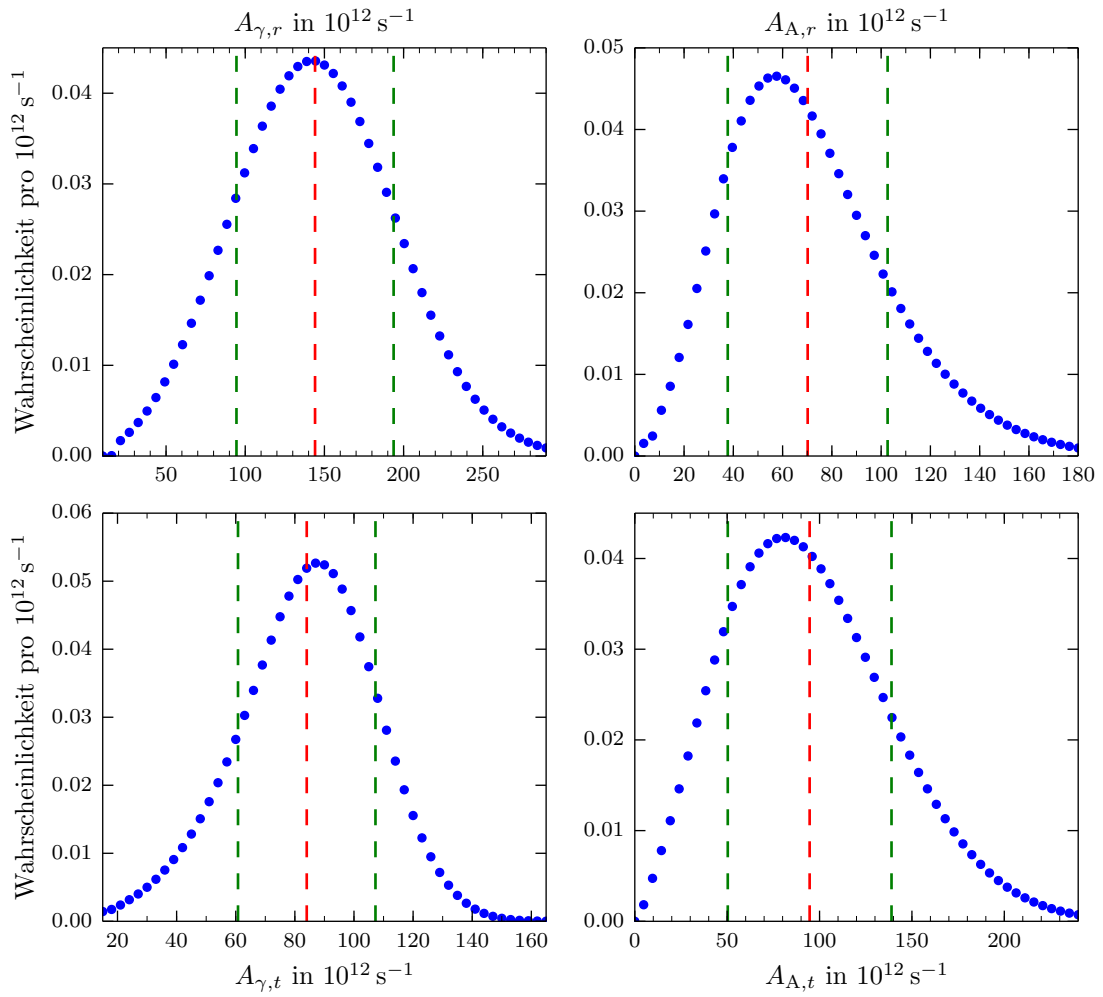


Abbildung 5.7: Wahrscheinlichkeitsverteilungen der mithilfe der Photoionisation ermittelten Zerfallsraten.

der Ergebnisse beider Methoden bestimmen:

$$\begin{aligned}
 A_{\gamma,r} &= 246(18) \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1} & A_{A,r} &= 87(27) \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1} \\
 A_{\gamma,t} &= 143(15) \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1} & A_{A,t} &= 119(40) \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1} \\
 A_{\gamma,q} &= 480(32) \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1} & &
 \end{aligned} \tag{5.8}$$

Abbildung 5.8 zeigt die Verteilungen dieser Raten.

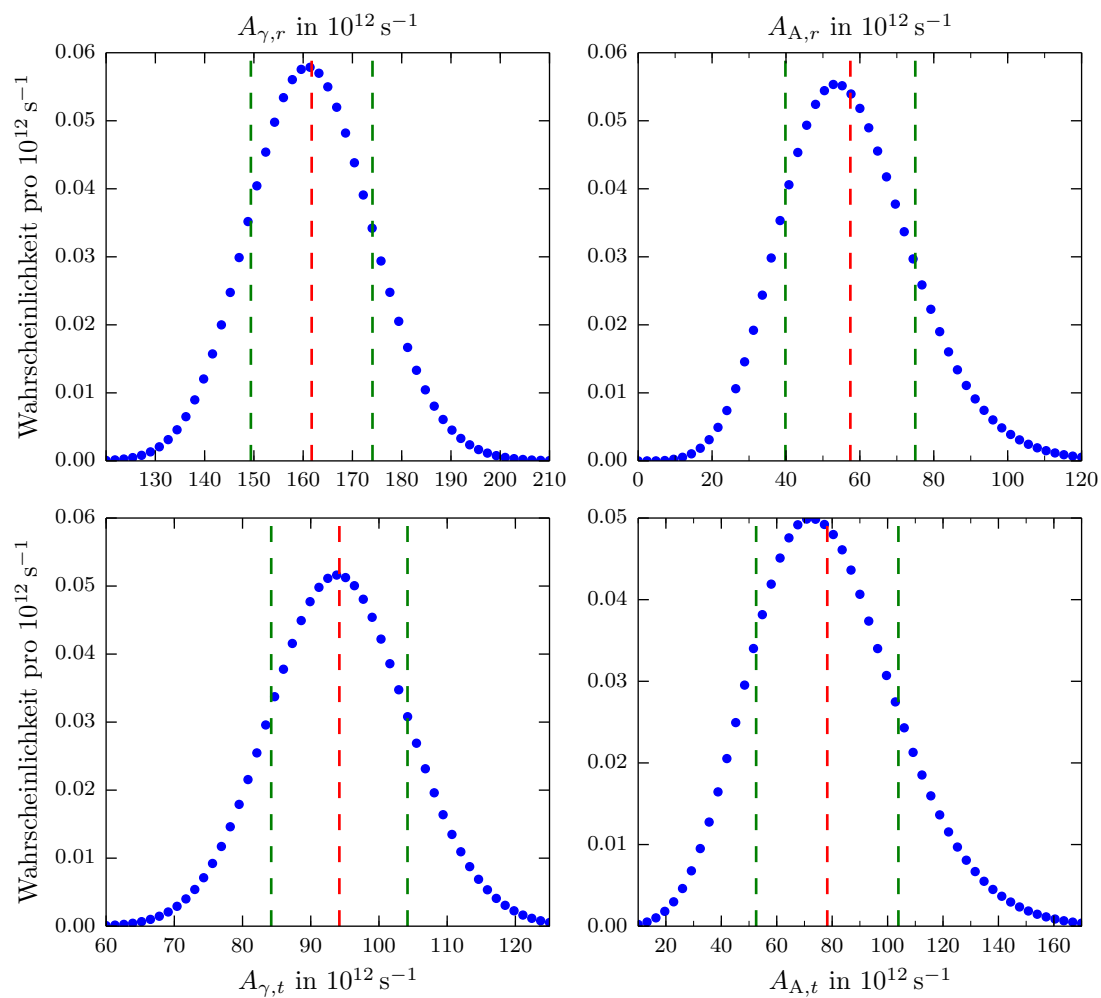


Abbildung 5.8: Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Zerfallsraten bestimmt durch Kombination der Fluoreszenz- und der Photoionisationsmethode.

5.1.4 Vergleich mit bisherigen experimentellen Daten

Das lithiumartige Eisenion ist das einzige der in dieser Arbeit untersuchten Ionen, für das bereits Messungen im Zusammenhang mit absoluten Zerfallsraten durchgeführt wurden. *Beiersdorfer et al.* haben die Resonanzstärke der dielektronischen Rekombination untersucht [38], bei der die angeregten Zustände im lithiumartigen Eisen durch resonante Rekombination von heliumartigen Ionen erzeugt werden. Da die dielektronische Rekombination der Zeitumkehrprozess der resonanten Photoionisation ist, lässt sich die Resonanzstärke S_s durch die radiativen und autoionisierenden Zerfallsraten ausdrücken:

$$S_s = \frac{g_s}{g_i} \frac{A_A \cdot A_\gamma}{A_A + A_\gamma} \frac{1}{E_{\text{au}}} 2\pi^2 a_0^3 R_y^2 \sqrt{\frac{m_e}{2R_y}}, \quad (5.9)$$

wobei E_{au} die Resonanzenergie der dielektronischen Rekombination ist, sie entspricht der Energie des Augerelektrons beim autoionisierenden Zerfall. g_s und g_i sind die statistischen Gewichte des angeregten Zustands sowie des Grundzustands des rekombinierenden Ions. Die dielektronische Rekombination wurde durch Beobachtung der dabei entstehenden Photonen vermessen, wozu ein Kristallspektrometer verwendet wurde. Um absolute Werte für S_s zu erhalten, normierten *Beiersdorfer et al.* die gemessene Intensität der dielektronischen Rekombination auf die Intensität der durch Elektronenstoß angeregten Linie w . Diese wiederum verglichen sie mit der radiativen Rekombination in die $n = 2$ Schale heliumartiger Eisenionen. Zudem hat das Kristallspektrometer eine von der Polarisation der Photonen abhängige Reflektivität, was beim Vergleich der unterschiedlich polarisierten Linien mit w berücksichtigt werden muss.

Zum Vergleich dieser Werte mit den Ergebnissen dieser Arbeit wurde die Datenauswertung so verändert, dass anstatt der Zerfallsraten die Verteilung der gemäß Gleichung 5.9 berechneten Resonanzstärken ermittelt wurde. Die so erhaltenen Werte sind in Tabelle 5.2 aufgeführt. Die beiden Messungen sind im Rahmen ihrer Messunsicherheiten miteinander vereinbar. Zwar ist die erreichte Genauigkeit der hier beschriebenen Messung etwas geringer, dennoch zeigt diese Übereinstimmung die prinzipielle Gültigkeit der angewandten Methode.

Tabelle 5.2: Vergleich der in dieser Arbeit ermittelten Resonanzstärken der dielektronischen Rekombination mit der Messung von *Beiersdorfer et al.* [38]. Dort wird der Fehler auf 20 % absolut beziehungsweise 13 % relativ angegeben.

Linie	Resonanzstärke in $10^{-20} \text{ cm}^2 \text{ eV}$	
	diese Arbeit	<i>Beiersdorfer et al.</i>
r	6,34(1,69)	5,03(1,01)
t	6,34(1,61)	5,36(1,07)

Tabelle 5.3: Messreihe zur Bestimmung der Abstrahlcharakteristiken der berylliumartigen Übergänge. Angegeben ist die Anzahl der vom jeweiligen Detektor registrierten Fluoreszenzphotonen sowie die daraus berechneten Verhältnisse. Die Untergrundmessungen erfolgten mit eingeschaltetem Photonenstrahl abseits der Resonanzenergie. Die Messdauer betrug jeweils 600 s.

Übergang	Detektor			V_1	V_2
	vertikal	horizontal	diagonal		
$E1$	151 237	3598	4804	41,8 (0,9)	31,6 (1,2)
$E1$	91 915	2480	2826	37,1 (0,9)	32,6 (1,3)
$E2$	872	100	15	14,6 (3,4)	58,1 (19,0)
$E2$	261	58	4	14,0 (8,7)	58,8 (37,0)
Untergrund	86	42	1		
Untergrund	102	47	0		

5.2 Berylliumartiges Fe^{22+}

In berylliumartigem Eisen wurden die Übergänge $E1$ und $E2$ vermessen, wobei sowohl Fluoreszenz als auch Photoionisation beobachtet wurde. Wie in Abschnitt 4.4 beschrieben, besitzen die angeregten Zustände mehrere radiative Zerfallskanäle. Deshalb werden vor den Zerfallsraten zunächst die Ergebnisse der Bestimmung der dazugehörigen Verzweigungsverhältnisse präsentiert.

5.2.1 Bestimmung der radiativen Verzweigungsverhältnisse

Zur Bestimmung der Winkelverteilung der Fluoreszenz wurde die in Tabelle 5.3 aufgelistete Messreihe aufgenommen. Dazu wurde die Photonenstrahlenergie auf das Maximum der Resonanz eingestellt, um eine möglichst große Zählrate zu erreichen.

Auffällig sind die Werte von V_2 des Übergangs $E2$. Sie sind höher als die durch die Detektorgeometrie maximal möglichen Werte (siehe Tabelle 4.4). Dies wird vermutlich durch die sehr niedrigen Zählraten des diagonalen Detektors verursacht, die auch zu den großen Fehlern dieser Werte führen. Würde man nur mit diesen Werten die Verzweigungsverhältnisse messen, so erhielte man negative Ergebnisse. Dies wird durch die Berechnung der Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Werte verhindert. Die Ergebnisse dieser Methode sind in Abbildung 5.9 und Tabelle 5.4 dargestellt.

Die Verteilungen von $E1$ haben nahezu die Form von Rechteckfunktionen. Die scharfen Kanten rühren daher, dass die Verteilungen bei $B_\gamma = 0$ abgeschnitten werden, da physikalisch keine negativen Werte möglich sind. Die Verteilungen von $E2$ sind aufgrund der größeren Messunsicherheit breiter und verlaufen daher auch glatter. Die ermittelten Werte stimmen gut mit den theoretischen Berechnungen überein. Die relativen Unsicherheiten

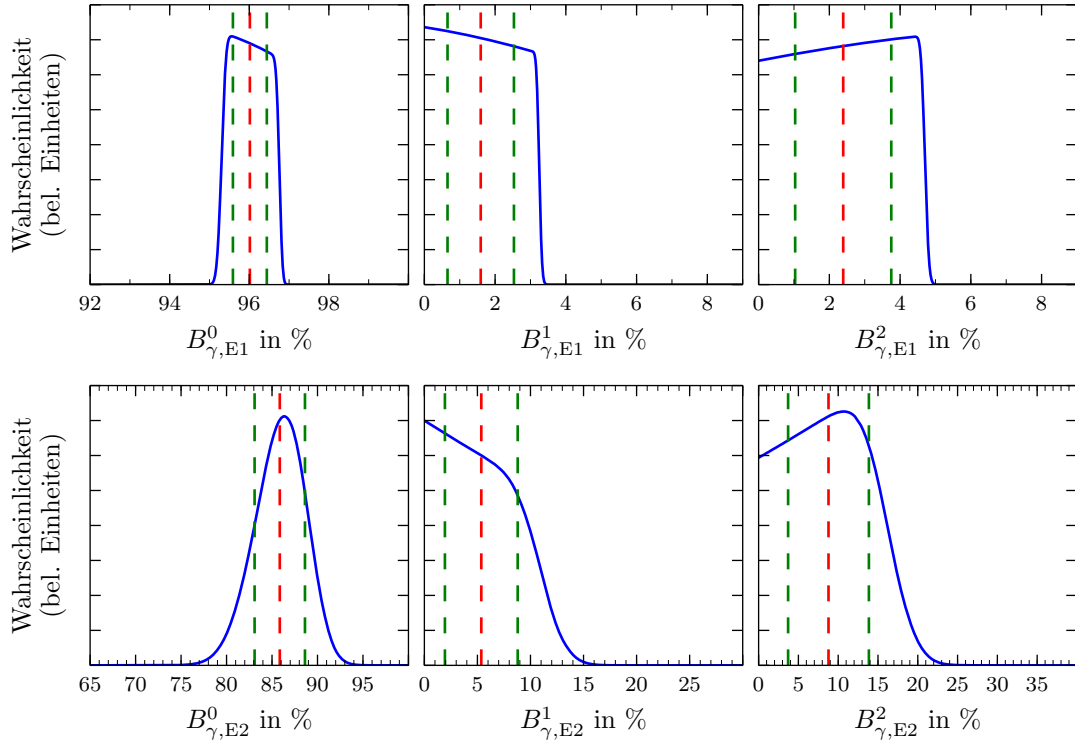


Abbildung 5.9: Wahrscheinlichkeitsverteilungen der radiativen Verzweigungsverhältnisse von $E1$ (oben) und $E2$ (unten).

sind für die Übergänge $J = 0 \rightarrow 1 \rightarrow 1$ und $J = 0 \rightarrow 1 \rightarrow 2$ zwar größer als 50 %, jedoch wird zur Korrektur des Parameters d nur B_{γ}^g benötigt (Gleichung 4.29). Für $E1$ ist B_{γ}^g identisch mit B_{γ}^0 , da der Grundzustand der einzige Endzustand mit $J = 0$ ist. Beim Zerfall von $E2$ gibt es jedoch neben dem Grundzustand auch einen Kanal in den metastabilen Zustand $1s^2 2p^2 \ ^3P_0$. Diese beiden Zerfälle können im Rahmen dieser Messung nicht getrennt werden, zur Bestimmung von B_{γ}^g wurde daher auf ein theoretisch berechnetes Verhältnis dieser Zustände zurückgegriffen.

$$\begin{aligned}
 B_{\gamma}^g &= \frac{A_{\gamma,\text{theo}}^g}{A_{\gamma,\text{theo}}^g + A_{\gamma,\text{theo}}^M} B_{\gamma}^0 \\
 &= \frac{31,3 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}}{31,3 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1} + 3,69 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}} B_{\gamma}^0 \\
 &= 0,895 \cdot B_{\gamma}^0
 \end{aligned} \tag{5.10}$$

Die Werte für $A_{\gamma,\text{theo}}^g$ und für die Zerfallsrate $A_{\gamma,\text{theo}}^M$ des metastabilen Zustands wurden aus [27] entnommen, wobei ein zusätzlicher Fehler von 10 % angenommen wurde.

Tabelle 5.4: Radiative Verzweigungsverhältnisse der Übergänge in berylliumartigen Ionen. Neben den in diesem Experiment gemessenen Werten sind auf theoretischen Rechnungen von *Palmeri et al.* [27] basierende Vergleichswerte aufgeführt. Alle Werte sind in Prozent angegeben.

	<i>E1</i>		<i>E2</i>	
	Messung	Theorie	Messung	Theorie
B_{γ}^0	96,0(0,5)	96,5	85,9(2,8)	86,2
B_{γ}^1	1,6(1,0)	0,1	5,4(3,4)	5,1
B_{γ}^2	2,4(1,4)	3,4	8,8(5,1)	8,7

5.2.2 Bestimmung der Zerfallsraten

Zur Bestimmung der Parameter c und d wurden wie beim lithiumartigen Eisen Messungen auf den Maxima der Resonanzen und Photonenenergiescans durchgeführt, in denen gleichzeitig die Fluoreszenz sowie die Photoionen detektiert wurden.

Parameter c

Um den Parameter c zu bestimmen, wurden auf den Resonanzen $E1$ und $E2$ je zwei Messungen mit einer Dauer von 600 s aufgenommen. Allerdings wurde in der Datenanalyse festgestellt, dass sich das Fluoreszenzphoton-Ion-Verhältnis der Linie $E2$ aus bisher ungeklärter Ursache zwischen beiden Messungen um einen Faktor drei unterscheidet. Da dies auf einen Messfehler hindeutet, wurden diese Messungen verworfen und der Parameter c aus den Verhältnissen der Linienstärken der Photonenenergiescans bestimmt (siehe Abbildung 5.10). Nach der in Abschnitt 4.4.2 beschriebenen Korrektur der unterschiedlichen Abstrahlcharakteristiken beider Übergänge erhält man die in Abbildung 5.11a dargestellte Verteilung. Aus ihr ergibt sich ein Wert von

$$c_{E1,E2} = 13,8(4,6). \quad (5.11)$$

Parameter d

In den aufgenommenen Photonenenergiescans, die sowohl die $E1$ als auch $E2$ enthalten, ist die Intensität der Linie $E2$ so schwach, dass hieraus keine vertrauenswürdige Linienstärke bestimmt werden konnte. Deshalb wurde auch zur Bestimmung des Parameters d auf die Linienstärken der in Abbildung 5.10b gezeigten Scans der einzelnen Resonanzen zurückgegriffen. Zwischen diesen beiden Messungen wurden die Einstellungen von EBIT und Extraktion nicht verändert, weshalb beide Scans miteinander vergleichbar sind. Die

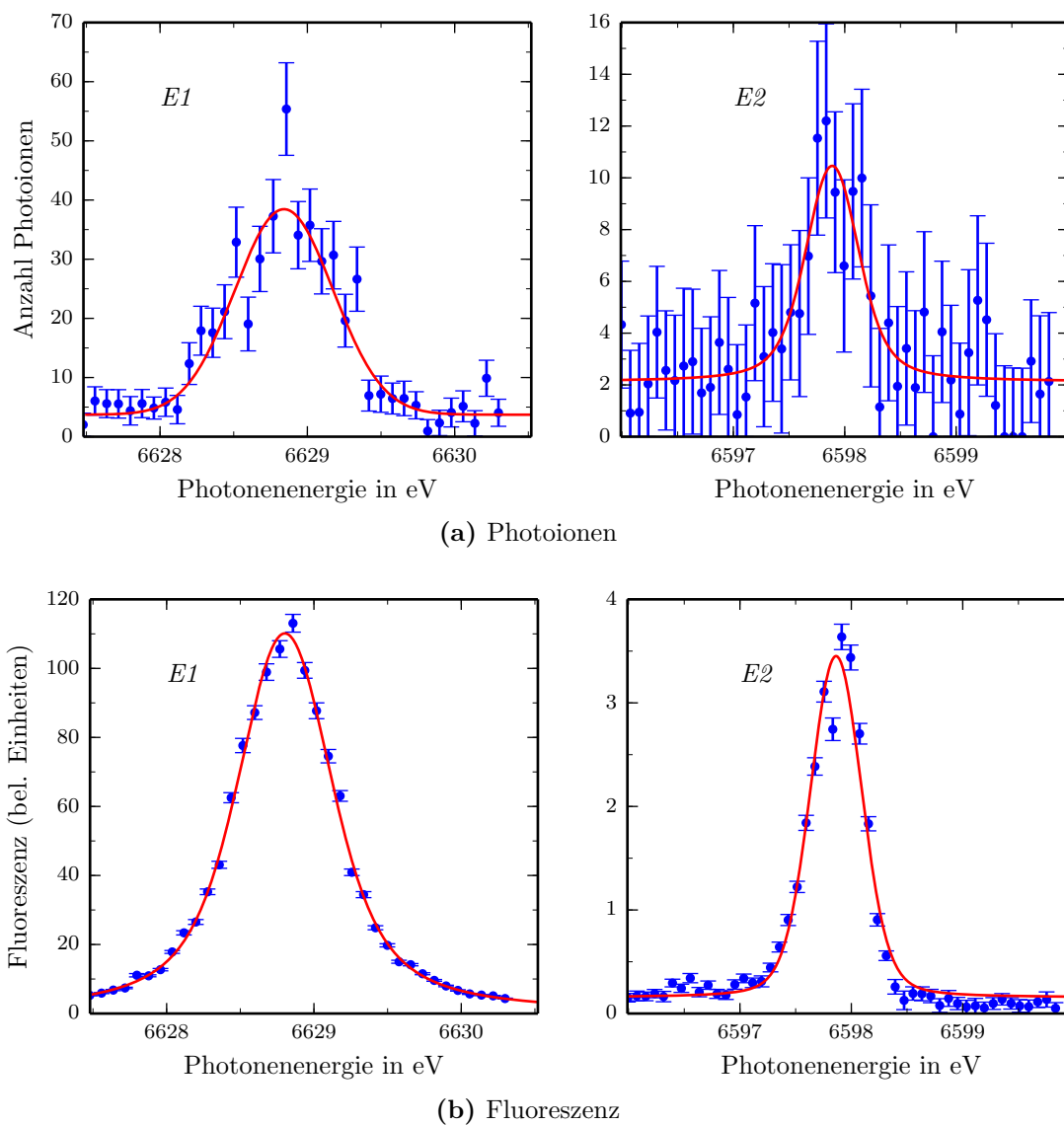


Abbildung 5.10: Photonenergiescans der berylliumartigen Resonanzen *E1* und *E2*. Die roten Linien sind an die Messdaten angepasste Voigtfunktionen, die zur Ermittlung der Linienstärken verwendet wurden.

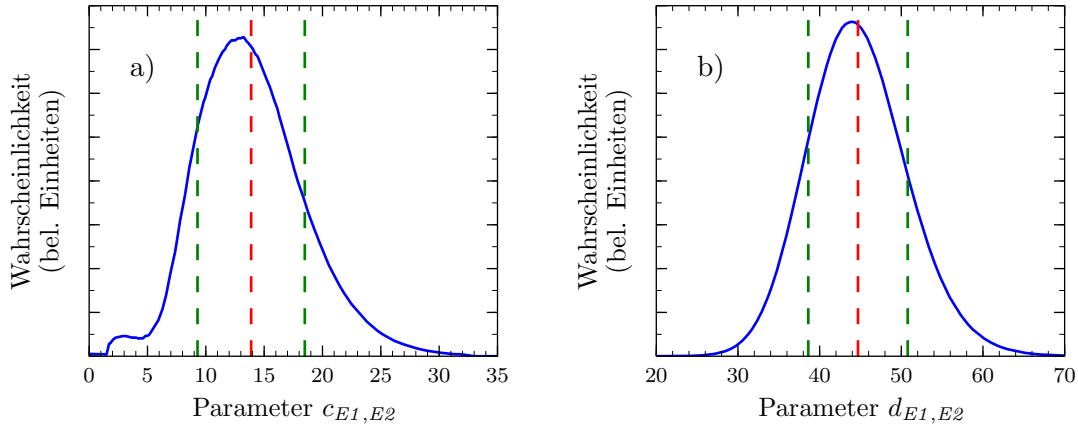


Abbildung 5.11: Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Parameter c und d .

erhaltene Verteilung des Parameters d , wiederum korrigiert bezüglich der Abstrahlcharakteristik, ist in Abbildung 5.11b dargestellt. Aus ihr ergibt sich ein Wert von

$$d_{E1,E2} = 44,7(6,1). \quad (5.12)$$

Ermittelte Zerfallsraten

Anhand der Fluoreszenzspektren in Abbildung 5.10b wurden auch die natürlichen Linienbreiten bestimmt. Die dabei erhaltenen Werte $\Gamma_{E1} = 403(64)$ meV und $\Gamma_{E2} = 78(58)$ meV weisen jedoch größere Unsicherheiten auf als die von *Rudolph et al.* [39] bestimmten Werte

$$\Gamma_{E1} = 437(12) \text{ meV} \quad \Gamma_{E2} = 178(34) \text{ meV}, \quad (5.13)$$

weshalb zur Bestimmung der absoluten Zerfallsraten letztere Werte verwendet wurden. Gemeinsam mit den Parametern c und d lassen sich hieraus, wie in Abschnitt 4.2 beschrieben, die in Abbildung 5.12 gezeigten Verteilungen ermitteln. Aus ihnen erhält man die Zerfallsraten

$$\begin{aligned} A_{\gamma,E1} &= 441(88) \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1} & A_{A,E1} &= 223(87) \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1} \\ A_{\gamma,E2} &= 42,5(9,1) \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1} & A_{A,E2} &= 235(50) \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1} \end{aligned} \quad (5.14)$$

Eine Diskussion dieser Werte erfolgt in Abschnitt 5.4.

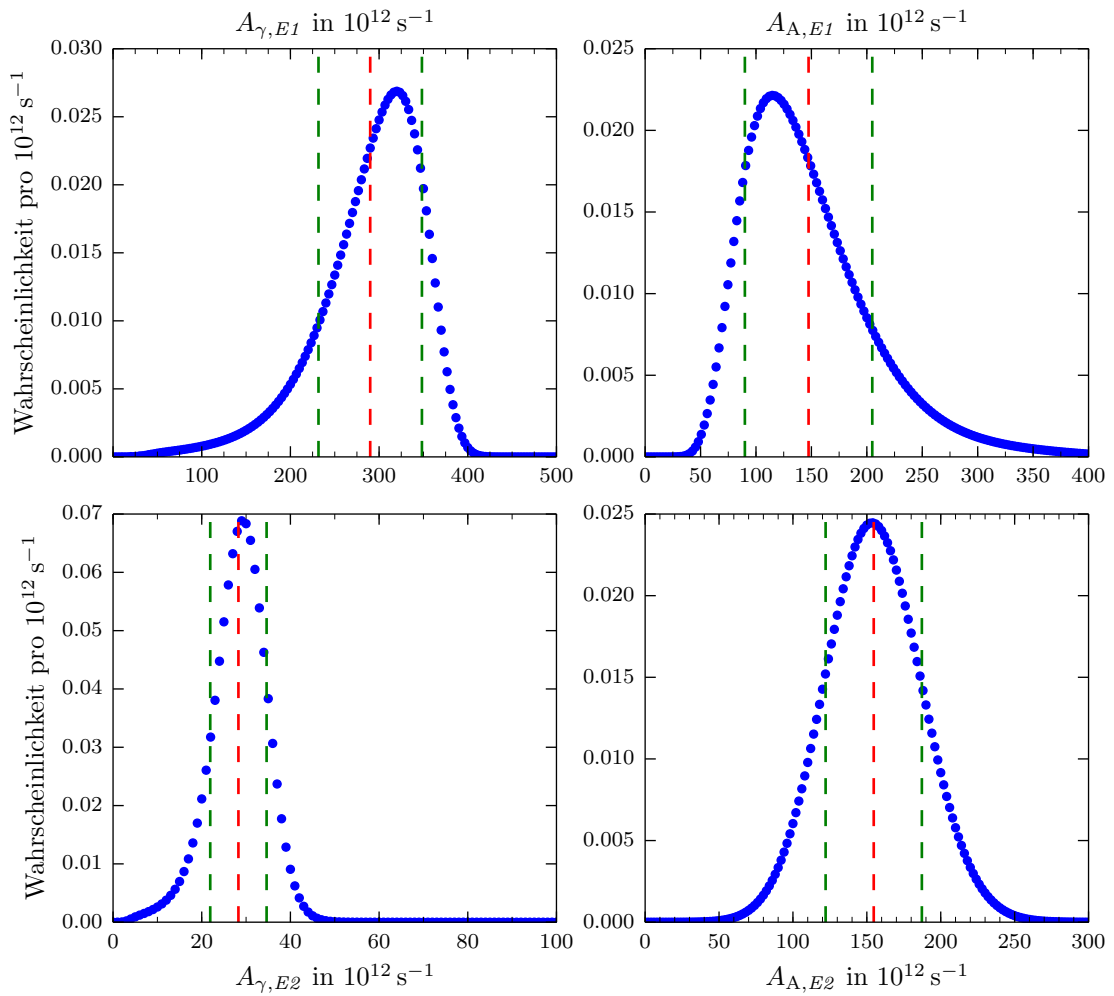


Abbildung 5.12: Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Zerfallsraten der Übergänge $E1$ und $E2$ in berylliumartigem Eisen.

Tabelle 5.5: Messreihe zur Bestimmung der Abstrahlcharakteristiken und des Parameters c der kohlenstoffartigen Übergänge. Angegeben ist jeweils die Anzahl der gemessenen Photoionen und der vom jeweiligen Detektor registrierten Fluoreszenzphotonen, sowie die aus letzteren berechneten Verhältnisse V_1 und V_2 . Die Untergrundmessung erfolgte ohne Photonenstrahl. Die Messdauer betrug jeweils 700 s.

Übergang	Photoionen	Fluoreszenzphotonen			V_1	V_2
		vertikal	horizontal	diagonal		
$C1$	630	23 895	2547	717	9,55 (0,21)	33,2 (1,3)
$C2$	109	2689	3460	188	0,77 (0,02)	14,0 (1,1)
$C2$	114	1943	2490	136	0,77 (0,03)	13,8 (1,2)
Untergrund	87	60	50	0		

5.3 Kohlenstoffartiges Fe^{20+}

Im kohlenstoffartigem Eisen wurden die Übergänge $C1$ und $C2$ (siehe Tabelle 4.1) vermessen. Sie konnten sowohl in der Fluoreszenz als auch in der Photoionisation beobachtet werden. Die angeregten Zustände haben wie beim berylliumartigen Eisen mehrere radiative Zerfallskanäle (siehe Abbildung 4.6). Aus diesem Grund werden auch hier zuerst die radiativen Verzweungsverhältnisse ermittelt, die zur Berechnung der Zerfallsraten benötigt werden.

5.3.1 Bestimmung der radiativen Verzweungsverhältnisse

Die Bestimmung der radiativen Verzweungsverhältnisse wurde anhand der in Tabelle 5.5 aufgeführten Messergebnisse vorgenommen. Diese wurden aufgenommen, während die Photonenstrahlenergie konstant auf das Maximum der jeweiligen Resonanz eingestellt war, wodurch für beide Übergänge eine ausreichende Anzahl gemessener Fluoreszenzphotonen erreicht wurde.

Die aus diesen Daten erhaltenen radiativen Verzweungsverhältnisse B_γ^i sowie deren Wahrscheinlichkeitsverteilungen sind in Tabelle 5.6 und Abbildung 5.13 angegeben. Obwohl die Werte von V_1 und V_2 im Vergleich zu denen der berylliumartigen Übergänge genauer bestimmt sind, weisen die daraus resultierenden Verzweungsverhältnisse eine größere Unsicherheit auf. Die Ursache hierfür ist, dass die Gesamtzerfallsrate sich gleichmäßiger auf die einzelnen Kanäle verteilt. Besonders wirkt sich hierbei der geringere Anteil des $J = 0 \rightarrow 1 \rightarrow 0$ Übergangs aus, welcher aufgrund seines starken Einflusses auf das Verhältnis V_1 (siehe Tabelle 4.4 in Verbindung mit Gleichung 4.34) eine höhere Sensitivität ermöglicht als die anderen Kanäle.

Die Übergänge $J = 0 \rightarrow 1 \rightarrow 0$ führen jeweils nur in den Grundzustand, so dass die Verhältnisse $B_{\gamma,C1}^0$ und $B_{\gamma,C2}^0$ direkt zur Korrektur des Parameters d verwendet werden

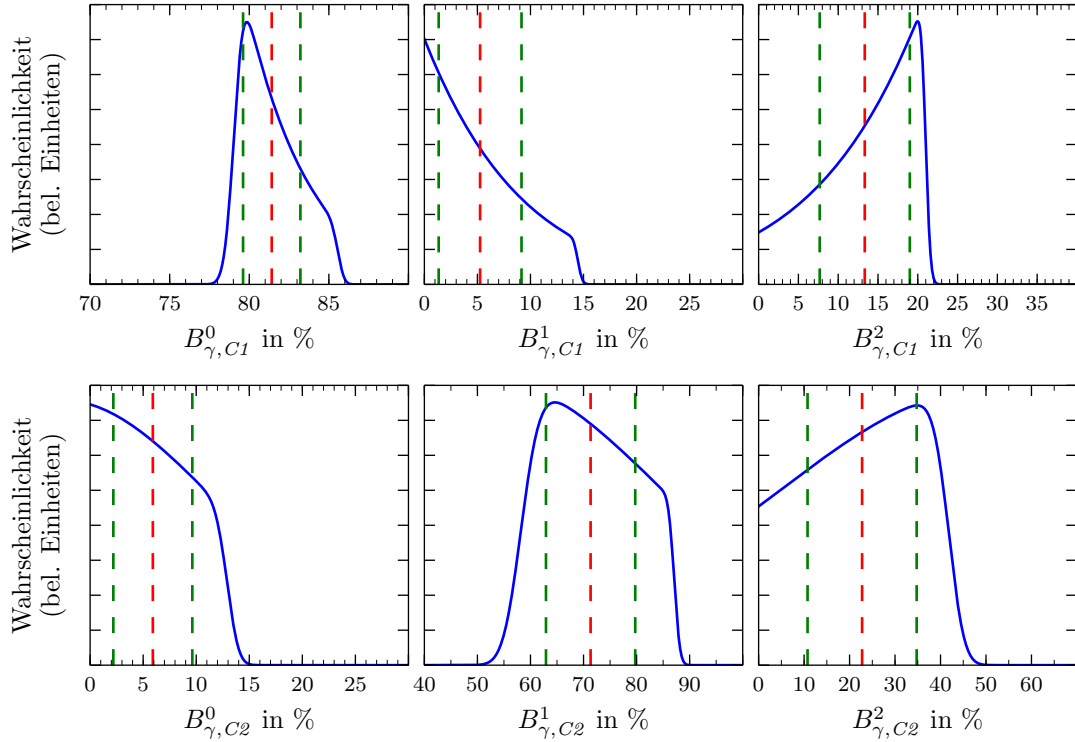


Abbildung 5.13: Wahrscheinlichkeitsverteilungen der radiativen Verzweungsverhältnisse von $C1$ (oben) und $C2$ (unten).

Tabelle 5.6: Radiative Verzweungsverhältnisse der Übergänge in kohlenstoffartigen Ionen. Neben den in diesem Experiment gemessenen Werten sind auf theoretischen Rechnungen von *Palmeri et al.* [27] basierende Vergleichswerte aufgeführt. Alle Angaben sind in Prozent.

	$C1$		$C2$	
	Messung	Theorie	Messung	Theorie
B_{γ}^0	81,4(1,8)	74,8	5,9(3,8)	2,6
B_{γ}^1	5,3(4,0)	1,7	71,3(8,5)	61,7
B_{γ}^2	13,3(5,7)	23,5	22,8(12,0)	8,7

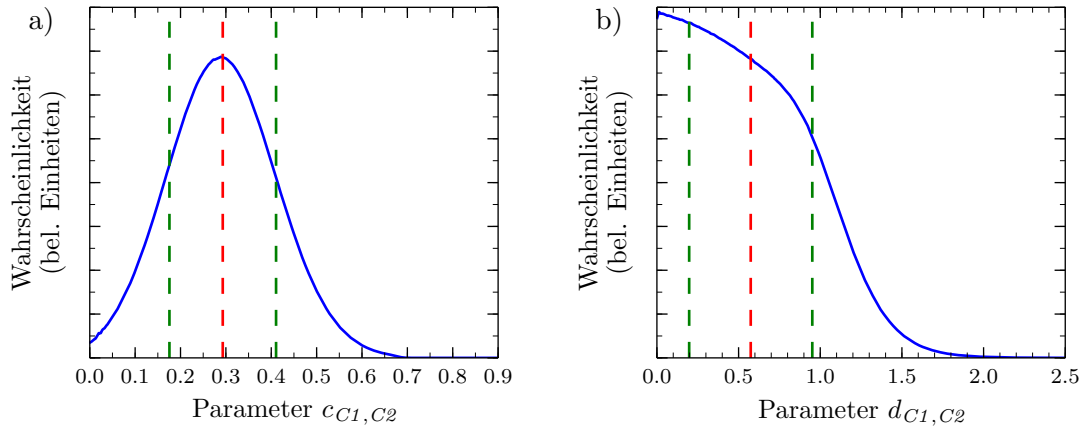


Abbildung 5.14: Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Parameter c und d der kohlenstoffartigen Übergänge $C1$ und $C2$.

können, wobei dabei die große relative Unsicherheit von $B_{\gamma,C2}^0$ sehr von Nachteil ist.

5.3.2 Bestimmung der Zerfallsraten

Die zur Bestimmung der Zerfallsraten durchgeführten Messungen erfolgten analog zu denen der lithiumartigen und berylliumartigen Übergänge. Es wurden Photonenenergiescans sowie Messungen auf den Maxima der Resonanzen durchgeführt.

Parameter c

Zur Bestimmung des Parameters c wurde die gleiche Messreihe (Tabelle 5.5) wie zur Ermittlung der Abstrahlcharakteristik verwendet, in der neben den Fluoreszenzphotonen auch die Photoionen detektiert wurden. Aus diesen Daten wurde der Parameter

$$c_{C1,C2} = 0,29(12) \quad (5.15)$$

ermittelt, wobei nur die mit dem vertikalen Germaniumdetektor gemessenen Photonen berücksichtigt wurden. Die zugehörige Verteilung ist in Abbildung 5.14a dargestellt.

Parameter d

Die relativen Linienstärken zur Berechnung des Parameters d wurden aus den zwei in Abbildung 5.15 dargestellten Photonenscans gewonnen, welche die beiden Übergänge $C1$ und $C2$ enthalten. Diese wurden gemeinsam mit den Korrekturfaktoren aus der Abstrahlcharakteristik verwendet, um den Parameter d zu bestimmen (Gleichung 4.29). Die ermittelte,

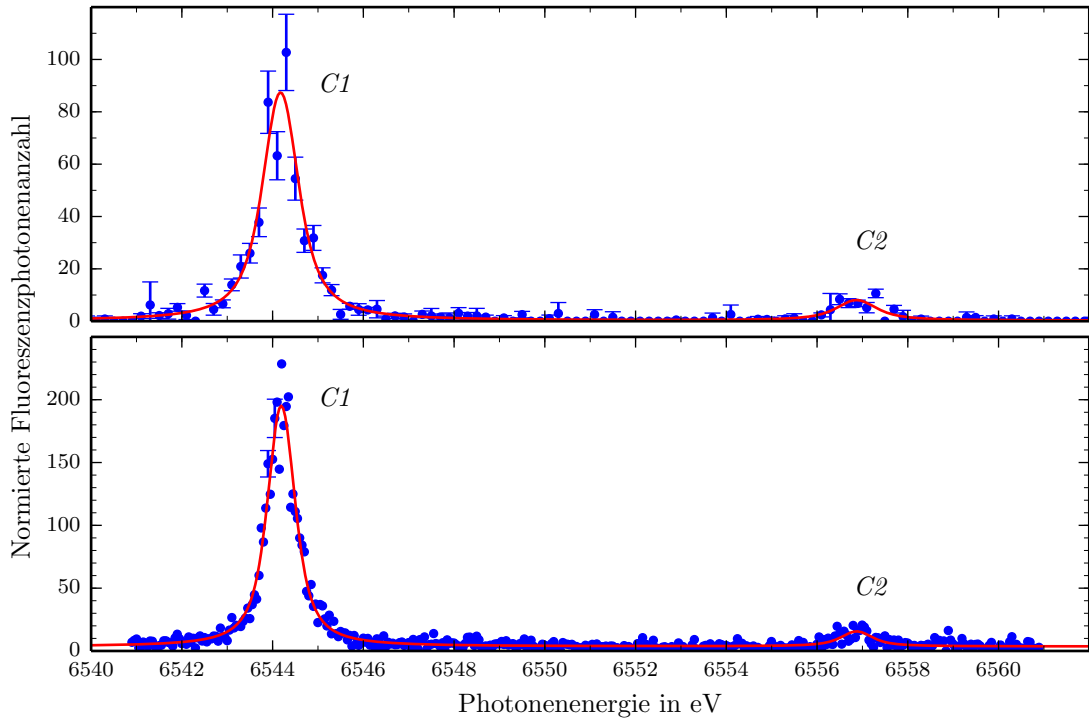


Abbildung 5.15: Photonenenergiescan mit den Resonanzen $C1$ und $C2$, aufgetragen ist die mit dem vertikalen Germaniumdetektor gemessene Fluoreszenz. Rot eingezeichnet ist die an die Resonanzen angepasste Summe von zwei Voigtfunktionen mit gleicher Gaußbreite, welche zur Bestimmung der Linienstärken und der natürlichen Linienbreiten verwendet wurde.

in Abbildung 5.14 dargestellte Verteilung ergibt für den Parameter d den Wert

$$d_{C1,C2} = 0,57(38). \quad (5.16)$$

Wie aufgrund der großen Unsicherheit von $B_{\gamma,C2}^0$ zu erwarten war, ist auch der Parameter d nicht sehr genau bestimmt.

5.3.3 Ermittelte Zerfallsraten

Aus den Linienprofilen der in Abbildung 5.15 gezeigten Resonanzen konnten durch das Anpassen von Voigtfunktionen die natürlichen Linienbreiten der Übergänge auf $\Gamma_{C1} = 575(169)$ meV und $\Gamma_{C2} = 587(325)$ meV bestimmt werden. In Kombination mit von *Jan Rudolph* aus weiteren Scans erhaltenen Werten [89] konnten die Unsicherheiten weiter reduziert werden.

$$\Gamma_{C1} = 530(13) \text{ meV} \quad \Gamma_{C2} = 540(162) \text{ meV} \quad (5.17)$$

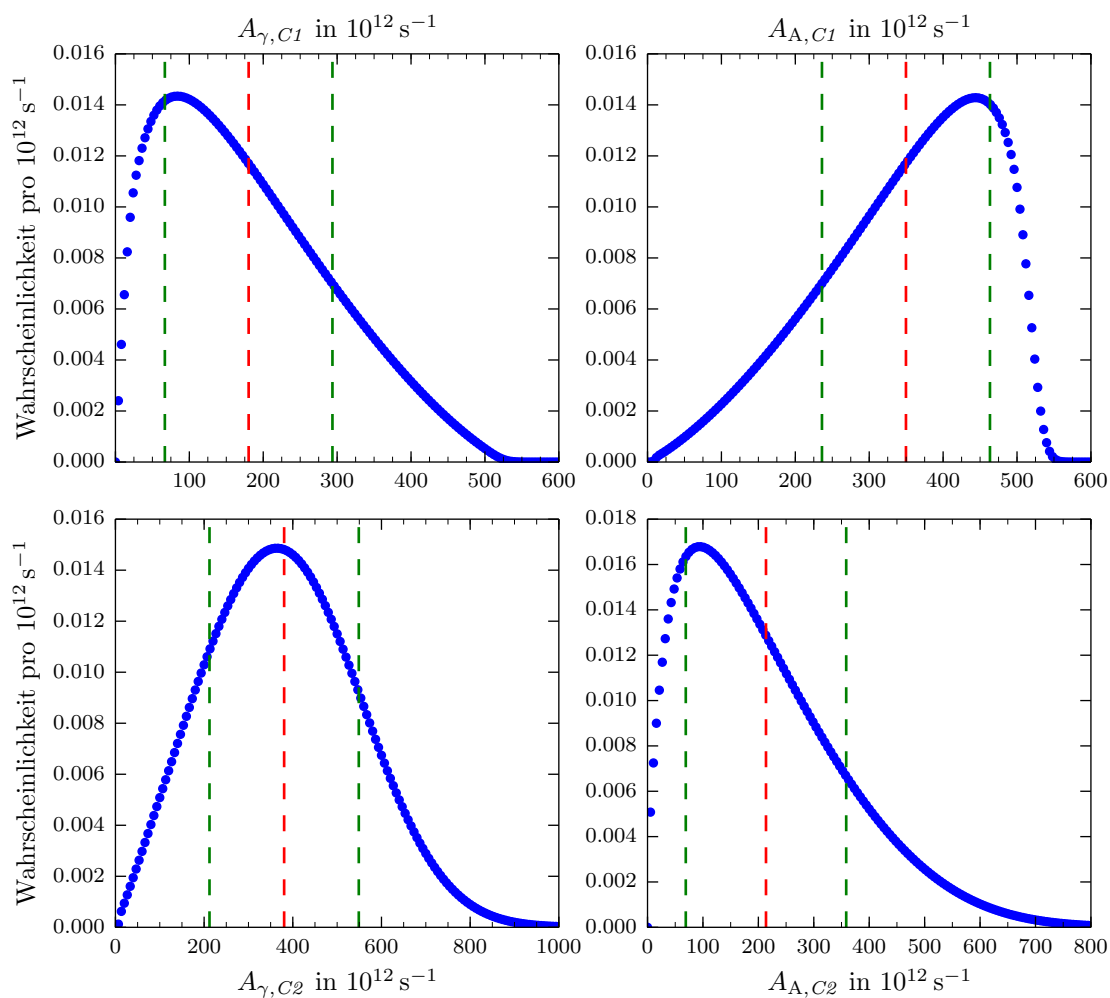


Abbildung 5.16: Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Zerfallsraten Übergänge $C1$ und $C2$ in kohlenstoffartigem Eisen.

Aus diesen Werten und den Parametern c und d wurden die in Abbildung 5.16 gezeigten Verteilungen der Zerfallsraten bestimmt, aus denen die Werte

$$\begin{aligned}
 A_{\gamma,C1} &= 273(172) \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1} & A_{A,C1} &= 532(173) \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1} \\
 A_{\gamma,C2} &= 577(255) \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1} & A_{A,C2} &= 325(220) \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1} \quad , & (5.18)
 \end{aligned}$$

folgen.

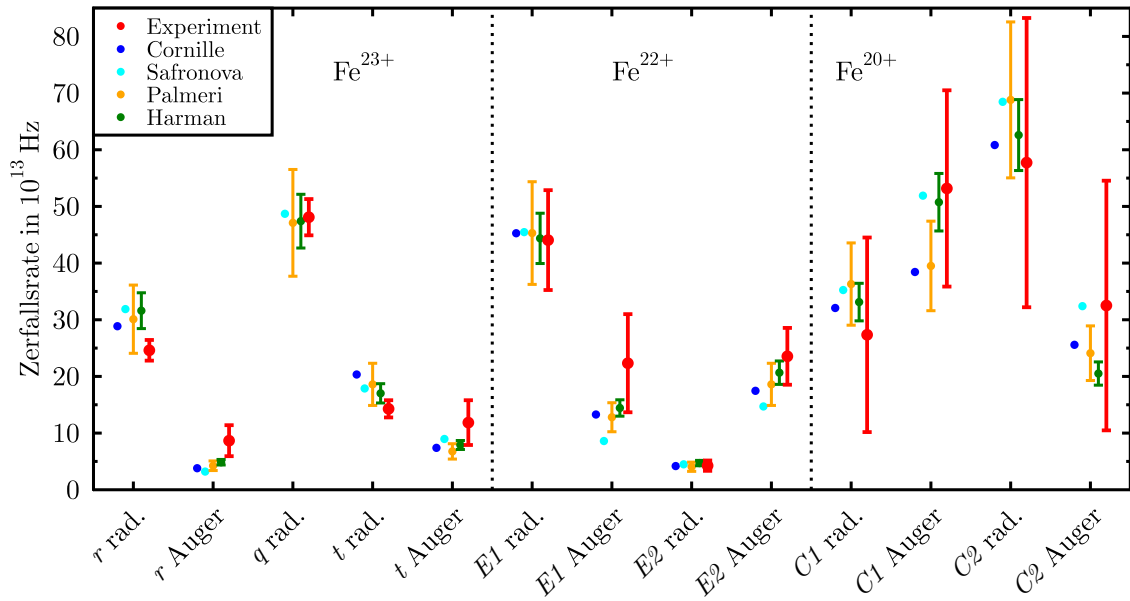


Abbildung 5.17: Graphischer Vergleich der gemessenen Zerfallsraten mit verschiedenen theoretischen Werten. Die dargestellten Daten entsprechen denjenigen in Tabelle 5.7. Für die Werte von *Palmeri* und *Harman* sind Fehlerbalken von 20 % beziehungsweise 10 % eingezeichnet, für die anderen Rechnungen liegen keine Angaben zur Genauigkeit vor.

5.4 Diskussion der Ergebnisse

5.4.1 Vergleich mit theoretischen Berechnungen

Aufgrund der astrophysikalischen Relevanz hochgeladenen Eisens existiert eine Vielzahl theoretischer Vorhersagen der Zerfallsraten. Ein Ziel dieser Arbeit war es, diese Rechnungen erstmals durch Vergleich mit experimentell gewonnenen Daten zu überprüfen. Dazu sind in Tabelle 5.7 die Ergebnisse von vier unterschiedlichen Rechnungen aufgeführt, die ausgewählt wurden, da sie zu allen in dieser Arbeit untersuchten Übergängen Werte angeben. In Abbildung 5.17 sind diese Werte zur besseren Veranschaulichung graphisch aufgetragen. Die verschiedenen Rechnungen stimmen im Rahmen der Messgenauigkeit mit den experimentell bestimmten Werten überein. Eine Unterscheidung zwischen ihnen ist jedoch nicht möglich, was aber unabhängig von der Auflösung schwierig wäre, da ihre Werte oft innerhalb der jeweiligen Fehler übereinstimmen.

Während bei den Übergängen in kohlenstoffartigen Ionen die experimentelle Unsicherheit zu groß ist, um weitere Aussagen machen zu können, lassen sich im lithiumartigen und berylliumartigen Eisen Tendenzen erkennen. So liegen die experimentellen Augerzerfallsraten alle über den theoretischen Werten. Für eine signifikante Abweichung müssten die experimentellen Unsicherheiten jedoch noch um mindestens einen Faktor drei kleiner sein.

Tabelle 5.7: Vergleich der experimentell bestimmten Zerfallsraten mit theoretischen Berechnungen von *Palmeri* ([27]), *Harman* ([39]), *Safronova* ([28]a) und *Cornille* ([28]b).

	Radiative Rate in 10^{12} s^{-1}					Augerrate in 10^{12} s^{-1}				
	diese	Theorie				diese	Theorie			
	Messung	[27]	[39]	[28]a	[28]b	Messung	[27]	[39]	[28]a	[28]b
r	246 (18)	301	316	319	289	87 (27)	42	49	32	38
t	143 (15)	186	170	179	203	119 (40)	68	79	90	74
q	480 (32)	471	474	487	–	–	0.1	0.1	0.3	–
$E1$	441 (88)	453	444	455	453	223 (87)	128	144	86	133
$E2$	43 (9)	41	47	45	42	235 (50)	186	207	147	175
$C1$	273 (172)	363	331	352	321	532 (173)	395	507	519	384
$C2$	577 (255)	688	626	685	608	325 (220)	241	205	324	256

5.4.2 Zusammensetzung der Messunsicherheiten

Um die Ursachen der Messunsicherheiten zu identifizieren und somit folgende Experimente verbessern zu können, wurde der Beitrag der einzelnen Messgrößen zur Gesamtunsicherheit bestimmt. Dabei wurden die natürlichen Linienbreiten in eine Kategorie zusammengefasst. Aus den Parametern c und d wurden die Abhängigkeiten von den radiativen Verzweigungsverhältnissen B_γ^i herausgetrennt und diese zusammen als separate Messgröße betrachtet.

Um den Einfluss einer dieser Größen auf die Unsicherheit der Messung zu evaluieren, wurden die Verteilungsfunktionen der anderen Größen durch eine Deltafunktion an deren jeweiligen Erwartungswert ersetzt. Die in der anschließenden Berechnung der Raten erhaltene Unsicherheit musste somit ihre Ursache in der nicht fixierten Größe haben. Dies wurde für alle Größen durchgeführt, anschließend folgte eine Normierung der erhaltenen Einzelunsicherheiten, so dass diese zusammen der vorher bestimmten Gesamtunsicherheit entsprachen. Die Ergebnisse dieser Berechnungen sind in Tabelle 5.8 aufgeführt.

Für die Übergänge des lithiumartigen Eisens wurden diese Rechnungen jeweils für die drei verschiedenen Methoden (Fluoreszenz (F): Abschnitt 5.1.1, Photoionisation (I): Abschnitt 5.1.2 und deren Kombination (K): Abschnitt 5.1.3) zur Bestimmung der Zerfallsraten angewandt. Bei der kombinierten Methode wurden dabei die Unsicherheiten der Parameter c und d zusammengefasst. Dies war notwendig, da es bei diesem Verfahren sechs gemessene Parameter zur Bestimmung der fünf Zerfallsraten gibt. Das System ist daher überbestimmt; würde man alle bis auf einen Parameter festhalten, so würden diese die Lösung exakt bestimmen, weshalb nur kombinierte Unsicherheiten mehrerer Größen bestimmt werden können. Ein Vergleich ergibt, dass die Bestimmung anhand der Fluoreszenz genauer ist als die Methode, welche die Daten der gemessenen Photoionen verwendet.

Dies lässt sich auf die geringen Zählraten der extrahierten Ionen zurückführen, aus denen eine große Unsicherheit des Parameters c folgt. Durch die Kombination beider Methoden lässt sich die Genauigkeit wie erwartet weiter erhöhen, wobei hier auffällt, dass bei den radiativen Raten von r und t das Ergebnis der kombinierten Methode nicht im Bereich zwischen den Ergebnissen der einzelnen Methoden liegt. Dies verdeutlicht die komplizierten nicht linearen Abhängigkeiten der Zerfallsraten von den gemessenen Parametern (Gleichung 4.7).

Die Unsicherheiten der berylliumartigen Übergänge werden (mit Ausnahme von $A_{A,E2}$) durch den Parameter c bestimmt. Verglichen mit der Methode I der Messungen am lithiumartigem Eisen ist die relative Genauigkeit hier höher, allerdings gibt es im berylliumartigen Eisen keinen fast ausschließlich radiativ zerfallenden Übergang, so dass eine Anwendung der Methode F in diesem System nicht möglich und daher die Gesamtunsicherheit höher ist.

In den kohlenstoffartigen Übergängen hat die ungenaue Kenntnis des radiativen Verzweungsverhältnisses B_γ^0 des Grundzustandes, welches für sich eine relative Unsicherheit von 64 % hat (siehe Tabelle 5.6), einen großen Anteil. Die relativen Unsicherheiten der gemessenen Raten sind größtenteils geringer, was wiederum die Vorteile der Rechnung mit Wahrscheinlichkeitsverteilungen demonstriert. Auch die durch die anderen Parameter verursachten Ungenauigkeiten sind größer als bei den Messungen der lithiumartigen und berylliumartigen Ionen, was auf die niedrigen Zählraten bei Messungen der Linie $C2$ zurückzuführen ist, welche auch in der Fluoreszenz nur eine geringe Intensität aufweist (siehe Abbildung 5.15).

Im Bezug auf zukünftige Messungen bleibt festzustellen, dass sich bis auf c alle Parameter aus Messungen der Fluoreszenz bestimmen lassen. Derartige Messungen sind einfacher durchzuführen als die zur Detektion der Photoionisation benötigte Extraktion der Ionen, welche einen hohen Aufwand zur Optimierung der Ionenoptik benötigt. Insbesondere die Unsicherheiten der kohlenstoffartigen Übergänge ließen sich durch derartige Nachmessungen in etwa halbieren. Für eine möglichst genaue Messung sollten hingegen lithiumartige Systeme untersucht werden, da dies komplett ohne Extraktion der Photoionen möglich ist und die Methode (F) die geringsten Unsicherheiten aufweist.

Tabelle 5.8: Zusammensetzung der Unsicherheiten der gemessenen radiativen und Auger-Zerfallsraten. Die Unsicherheit setzt sich zusammen aus Beiträgen der natürlichen Linienebreite (Γ), der Parameter c und d , sowie der Unsicherheit aufgrund der verschiedenen Zerfallskanäle B_γ^i . Bei den lithiumartigen Übergängen sind die Werte für die drei Bestimmungsmethoden Photoionisation (I), Fluoreszenz (F) und Kombination beider Verfahren (K) angegeben. Weiter Erläuterungen finden sich im Text. Alle absoluten Werte sind in 10^{12} s^{-1} angegeben.

Übergang		Rate	Unsicherheit		Beiträge				
			abs.	rel.	Γ	d	c	B_γ^i	
<i>r</i> rad.	$A_{\gamma,r}$	I	218,8	76,0	35%	29,5	6,4	69,7	–
		F	243,1	24,3	10%	24,2	2,5	–	–
		K	246,1	18,2	7%	18,1	– 2.2	–	–
<i>r</i> Auger	$A_{A,r}$	I	106,3	48,6	46%	20,2	4,1	44,0	–
		F	83,6	38,0	45%	37,9	2,4	–	–
		K	86,6	27,3	32%	27,2	– 2.5	–	–
<i>t</i> rad.	$A_{\gamma,t}$	I	127,6	34,9	27%	18,3	6,0	29,1	–
		F	139,8	19,8	14%	19,7	1,5	–	–
		K	142,8	15,2	11%	15,1	– 1.6	–	–
<i>t</i> Auger	$A_{A,t}$	I	144,3	66,8	46%	55,0	7,7	37,2	–
		F	110,9	48,6	44%	48,6	1,5	–	–
		K	118,5	39,5	33%	39,5	– 1.8	–	–
<i>q</i> rad.	$A_{\gamma,q}$		480,1	31,9	7%	31,9	–	–	–
<i>E1</i> rad.	$A_{\gamma,E1}$		440,6	88,1	20%	19,7	9,1	84,5	12,0
<i>E1</i> Auger	$A_{A,E1}$		223,3	86,6	39%	15,0	9,1	84,0	12,0
<i>E2</i> rad.	$A_{\gamma,E2}$		42,5	9,1	21%	3,2	2,2	7,8	2,8
<i>E2</i> Auger	$A_{A,E2}$		235,5	50,1	21%	48,6	3,1	11,1	4,1
<i>C1</i> rad.	$A_{\gamma,C1}$		273,5	171,7	63%	72,0	61,6	76,7	120,9
<i>C1</i> Auger	$A_{A,C1}$		531,7	173,2	33%	72,7	62,1	77,4	121,9
<i>C2</i> rad.	$A_{\gamma,C2}$		577,3	255,2	44%	167,4	37,7	141,2	125,5
<i>C2</i> Auger	$A_{A,C2}$		325,1	220,3	68%	4,8	43,0	161,4	143,5

Kapitel 6

Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurden die radiativen und autoionisierenden Zerfallsraten K-Schalen-angeregter hochgeladener Eisenionen untersucht. Die Kenntnis dieser Raten ist essentiell für die Modellierung heißer astrophysikalischer Plasmen, wie sie beispielsweise in der Umgebung des schwarzen Lochs im Zentrum eines aktiven galaktischen Kern vorkommen. Insbesondere das Verhältnis von radiativem und autoionisierendem Zerfall ist hierbei von Bedeutung, da letzterer den Ladungszustand des Ions ändert und dadurch die Ladungsverteilung des Plasmas verändert, während jedoch nur der radiative Anteil in Emissionsspektren beobachtet werden kann. Bisher waren für diese Raten allerdings nur theoretische Werte bekannt. Messungen der K-Schalen-Photoionisation wurden nur an leichten Elementen und in niedrigen Ladungszuständen durchgeführt [135].

Ziel dieser Arbeit war es daher, diese Raten experimentell zu bestimmen, um eine Überprüfung dieser Rechnungen durchführen zu können. Dazu wurden mit der Elektronenstrahlionenfalle FLASH-EBIT Messungen an der Synchrotronstrahlungsquelle PETRA III durchgeführt. Durch diese Kombination eines Ionentargets mit einem ultrabrillanten Photonenstrahl konnten K-Schalen-Übergänge in hochgeladenen Eisenionen induziert werden. Die Verwendung eines hochauflösenden Monochromators erlaubte dabei die gezielte Anregung einzelner Zustände. Deren radiative Abregung wurde mit Photonendetektoren registriert, während für den Nachweis des Augerzerfalls die Ladungsänderung des Ions gemessen wurde. Unter Anwendung einer neu entwickelten Methode, welche auf der gleichzeitigen Beobachtung beider Zerfallskanäle beruht, war es möglich, absolute Zerfallsraten unabhängig von der Anzahl der untersuchten Ionen und anregenden Photonen zu bestimmen und somit die systematischen Unsicherheiten stark zu verringern.

Auf diese Weise wurden Übergänge in lithiumartigem Fe^{23+} , berylliumartigem Fe^{22+} und kohlenstoffartigem Fe^{20+} untersucht. Durch eine ausführliche Datenanalyse, welche die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der gemessenen Parameter berücksichtigt, konnten, trotz der beschränkten bei PETRA III zur Verfügung stehenden Messzeit und der damit

verbundenen geringen Anzahl detektierter Ereignisse, radiative und autoionisierende Zerfallsraten für diese Übergänge bestimmt werden. Im lithiumartigen Eisen war es zudem möglich, diese allein auf Basis von Fluoreszenzspektren zu ermitteln, da mit einer nahezu vollständig radiativ zerfallenden Resonanz verglichen werden konnte. Des Weiteren konnten durch Beobachtung der Fluoreszenz unter verschiedenen Winkeln die Abstrahlcharakteristiken der Übergänge bestimmt und daraus auf die Anteile unterschiedlicher radiativer Zerfallskanäle geschlossen werden.

Die absoluten Zerfallsraten wurden mit einer Genauigkeit von bis zu 7% für den radiativen Zerfall der Linien r und q im lithiumartigen Eisen bestimmt. Dies ist vergleichbar mit den besten in „Merged-Beam“-Experimenten erhaltenen Auflösungen [135], welche allerdings bei viel niedrigeren Energien und Ladungszuständen durchgeführt wurden, und wesentlich besser als der bisher einzige in hochgeladenem Eisen gemessene Wert (50% in Fe^{14+} [115]).

Für die Übergänge im berylliumartigen und kohlenstoffartigem Eisen sind die Unsicherheiten mit 20 – 68% höher. In diesen Systemen ist keine Bestimmung allein aufgrund von Fluoreszenzspektren möglich, weshalb die niedrigen Photoionenzählraten, welche selbst auf den Maxima der Resonanzen unter 1 Hz betragen, zur Ermittlung der Zerfallsraten benutzt wurden. Zudem beeinflusst die ungenaue Kenntnis der radiativen Zerfallskanäle die erreichbare Auflösung in diesen Systemen.

Letzteres ließe sich durch die Verwendung eines hochauflösenden Photonendetektors, wie etwa eines Kristallspektrometers oder eines Mikrokalorimeters, beheben, da solche sensitiv auf die Energieunterschiede zwischen den verschiedenen Kanälen sind, welche im Bereich 10 – 150 eV liegen. Die Zählrate der Photoionen ließe sich durch eine ausführlichere Optimierung der Ionenextraktion erhöhen, welche im Rahmen des vorgestellten Experiments aufgrund begrenzter Messzeit nur eingeschränkt möglich war. Allgemein ist durch längere Messungen eine deutliche Steigerung der Genauigkeit möglich, da die effektive Dauer der Datenaufnahme nur 4,5 h für lithiumartiges, 2,5 h für berylliumartiges und 8,5 h für kohlenstoffartiges Eisen betrug.

In dem durchgeführten Experiment wurde erstmals ein neu entwickelter elektrostatischer Ablenker für die Extraktion der Ionen verwendet. Aufgrund vorbereitend durchgeführter Untersuchungen war es möglich während der Strahlzeit schnell zwischen den Einstellungen, welche zur Untersuchung des jeweiligen Ladungszustandes notwendig waren, zu wechseln. Dies erlaubte die Messung an vier verschiedenen Ionensorten Fe^{20+} – Fe^{23+} .

Die ermittelten Raten stimmen im Rahmen der Messunsicherheiten mit auf theoretischen Werten überein. Damit konnten diese Werte, welche bisher die alleinige Grundlage von spektralen Modellierungen, wie *XSTAR* [136] oder *Cloudy* [137], bildeten, erstmals experimentell unterstützt werden. Ein besonderes Interesse an den untersuchten Übergängen ist mit dem Start der satellitengestützten Röntgenobservatorien *ASTRO-H* [138] 2015

und später *ATHENA* zu erwarten, welche mit ihren Mikrokalorimetern [139, 140] in der Lage sein werden, diese Linien auch in extrasolaren Objekten aufzulösen.

Die in dieser Arbeit beschriebenen Methoden zur Bestimmung der Zerfallsraten lassen sich auch einfach auf andere Elemente und Ladungszustände anwenden; so sind derzeit weitere Messungen mit der FLASH-EBIT bei PETRA III geplant. Diese haben das primäre Ziel, einen neuen Wellenlängenstandard im Röntgenbereich auf Basis hochgeladener Ionen zu ermöglichen. Dazu sollen die Übergangsenergien in Se^{32+} und Br^{32+} präzise vermessen werden, wobei die Mößbauerlinie von ^{57}Fe zur absoluten Energiekalibration verwendet wird. Da es sich bei Br^{32+} um ein lithiumartiges System handelt, lassen sich aus den zu diesen Zweck aufgenommenen Spektren gleichzeitig auch die Zerfallsraten der Übergänge bestimmen.

Symbolverzeichnis

Mathematische Symbole

e	Eulersche Konstante 2,71828...
Δ	Laplace-Operator
i	imaginäre Einheit; $i^2 = -1$
π	Kreiszahl 3,14159...
$Y_{l,m}$	Kugelflächenfunktionen

Physikalische Konstanten

α	Feinstrukturkonstante $7,297\,352\,569\,8(24) \cdot 10^{-3}$
a_0	Bohr'scher Radius $0,529\,177\,210\,92(17) \cdot 10^{-10} \text{ m}$
c	Lichtgeschwindigkeit $299\,792\,458 \text{ m s}^{-1}$
e	Elementarladung $1,602\,176\,565(35) \cdot 10^{-19} \text{ C}$
ϵ_0	Dielektrizitätskonstante des Vakuums $8,854\,187\,817\,62 \dots \cdot 10^{-12} \frac{\text{As}}{\text{Vm}}$
h	Plancksches Wirkungsquantum $6,626\,069\,57(29) \cdot 10^{-34} \text{ J s}$
\hbar	reduziertes plancksches Wirkungsquantum $1,054\,571\,726(47) \cdot 10^{-34} \text{ J s} = 6,582\,119\,28(15) \cdot 10^{-16} \text{ eV s}$
k	Boltzmann-Konstante $1,380\,648\,8(13) \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1} = 8,617\,332\,4(78) \cdot 10^{-5} \text{ eV K}^{-1}$

m_e	Masse des Elektrons $9,109\,382\,91(40) \cdot 10^{-31}$ kg
R_y	Rydberg-Energie 13,605 692 53(30) eV

Variablensymbole

A_{21}	Einstein-Koeffizient der spontanen Emission; radiative Übergangsrate von Zustand 2 in Zustand 1
A_A	Gesamtaugerzerfallsrate
A_γ	radiative Gesamtzerfallsrate
A_{ges}	Gesamtzerfallsrate; $A_{\text{ges}} = A_A + A_\gamma$
B	Magnetfeld
β	Geschwindigkeit relativ zur Lichtgeschwindigkeit; $\beta = v/c$
B_A	Verzweigungsverhältnis; Anteil, welcher autoionisierend zerfällt
B_γ	Verzweigungsverhältnis; Anteil, welcher radiativ zerfällt
B_γ^i	radiatives Verzweigungsverhältnis; Anteil, welcher radiativ in Zustand i zerfällt
c	Verhältnis von radiativen und Augerzerfallsraten zweier Übergänge; Definition siehe Gleichung (4.3)
d	Verhältnis der Linienstärken zweier Übergänge; Definition siehe Gleichung (4.5)
E	Energie eines Teilchens
g	Statistisches Gewicht eines Zustands
γ	Lorentzfaktor; $\gamma = 1/\sqrt{1 - \beta^2}$
Γ	natürliche Linienbreite; $\Gamma = \hbar \cdot A_{\text{ges}}$
\hat{H}	Hamilton-Operator
j	Gesamtdrehimpulsquantenzahl eines gebundenen Elektrons
$J_A \rightarrow J_Y \rightarrow J_E$	Anregung eines Zustands A in den Zustand Z mit anschließendem Zerfall in Zustand E; J_A, J_Y, J_E sind die Gesamtdrehimpulsquantenzahlen der Zustände
K	Undulatorfeld-Parameter
l	Drehimpulsquantenzahl eines gebundenen Elektrons
λ	Wellenlänge eines Photons
λ_U	Periodenlänge eines Undulators
m	Masse eines Teilchens magnetische Quantenzahl eines gebundenen Elektrons

$M_{i,j}$	Übergangsmatrixelement
n	Hauptquantenzahl eines gebundenen Elektrons
ν	Frequenz eines Photons
N	Normierungskonstante in Wahrscheinlichkeitsverteilungen
N_γ	Photonenfluss des P01-Strahlrohres
p	Impuls eines Teilchens
Ψ, ψ	Wellenfunktion eines Teilchens
P_{21}	Übergangsrate
P_A	Nachweiswahrscheinlichkeit eines Photoions
P_γ	Nachweiswahrscheinlichkeit eines Fluoreszenzphotons
\vec{r}	Ortsvektor eines Teilchens
S	Linienstärke eines Übergangs
S_{exp}	Experimentell gemessene Linienstärke eines Übergangs
τ	Lebensdauer eines Zustands; $\tau = 1/A_{\text{ges}}$
$V(\vec{r}, t)$	Potential am Ort \vec{r} zur Zeit t
V_1	Verhältnis aus vertikal und horizontal detektierten Fluoreszenzphotonen
V_1	Verhältnis aus vertikal und diagonal detektierten Fluoreszenzphotonen
Y_A	Rate der detektierten Photoionen
Y_γ	Rate der detektierten Fluoreszenzphotonen
Z	Ordnungszahl (Kernladungszahl) eines Elements

Objektsymbole

e^-	Elektron
γ	Photon
X^{q+}	Ion des Elements X mit der Ladung $q \cdot e$
$[X^{q+}]^*$	Ion in einem angeregten Zustand
$[X^{q+}]^{**}$	Ion in einem mehrfach angeregten Zustand

Literaturverzeichnis

- [1] KEPLER, Johannes: *Astronomia nova Aitiologētos Sev Physica Coelestis, tradita commentariis De Motibus Stellae Martis*. Heidelberg : Vögelin, 1609 <http://diglib.hab.de/drucke/n-29-2f-helmst-2/start.htm>
- [2] WOLLASTON, William H.: A Method of Examining Refractive and Dispersive Powers, by Prismatic Reflection. In: *Philosophical Transactions of the Royal Society of London* 92 (1802), 365-380. DOI: 10.1098/rstl.1802.0014
- [3] FRAUNHOFER, Joseph: Bestimmung des Brechungs- und des Farbenzerstreungsvermögens verschiedener Glasarten, in Bezug auf die Vervollkommnung achromatischer Fernröhre. In: *Annalen der Physik* 56 (1817), Nr. 7, 264–313. DOI: 10.1002/andp.18170560706. – ISSN 1521–3889
- [4] KIRCHHOFF, G.: Ueber die Fraunhofer'schen Linien. In: *Annalen der Physik* 185 (1860), Nr. 1, S. 148–150. DOI: 10.1002/andp.18601850115. – ISSN 1521–3889
- [5] JANSKY, K. G.: Radio Waves from Outside the Solar System. In: *Nature* 132 (1933), Juli, S. 66. DOI: 10.1038/132066a0
- [6] FRIEDMAN, A.: Über die Krümmung des Raumes. In: *Zeitschrift für Physik* 10 (1922), Nr. 1, S. 377–386. DOI: 10.1007/BF01332580. – ISSN 0044–3328
- [7] HUBBLE, Edwin: A relation between distance and radial velocity among extragalactic nebulae. In: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 15 (1929), Nr. 3, S. 168–173. DOI: 10.1073/pnas.15.3.168
- [8] EDLÉN, Bengt: Early Observations of Highly Charged Ions. In: *Physica Scripta* 1983 (1983), Nr. T3, S. 5. DOI: 10.1088/0031-8949/1983/T3/001
- [9] EDLÉN, B.: Die Deutung der Emissionslinien im Spektrum der Sonnenkorona. Mit 6 Abbildungen. In: *Zeitschrift für Astrophysik* 22 (1943), 30. <http://adsabs.harvard.edu/abs/1943ZA.....22...30E>
- [10] FANG, T. ; CANIZARES, C. R.: Probing Comology with the X-Ray Forest. In: *The Astrophysical Journal* 539 (2000), S. 532–539
- [11] SERLEMITSOS, P. J. ; BOLDT, E. A. ; HOLT, S. S. ; RAMATY, R. ; BRISKEN, A. F.: X-Ray Spectrum of Cassiopeia a: Evidence for Iron Line Emission. In: *Astrophysical Journal* 184 (1973), August, S. L1. DOI: 10.1086/181275

- [12] SANFORD, Peter ; MASON, Keith O. ; IVES, John: Observation of a Line Feature in the X-ray Spectrum of Cygnus X-3. In: *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 173 (1975), Nr. 1, S. 9P–14P. DOI: 10.1093/mnras/173.1.9P
- [13] PRAVDO, S. H. ; BECKER, R. H. ; BOLDT, E. A. ; HOLT, S. S. ; SERLEMITSOS, P. J. ; SWANK, J. H.: X-ray spectra of Hercules X-1. I - Iron line fluorescence from a subrelativistic shell. In: *Astrophysical Journal* 215 (1977), Juli, S. L61–L64. DOI: 10.1086/182478
- [14] SERLEMITSOS, P. J. ; SMITH, B. W. ; BOLDT, E. A. ; HOLT, S. S. ; SWANK, J. H.: X-radiation from clusters of galaxies - Spectral evidence for a hot evolved gas. In: *Astrophysical Journal* 211 (1977), Januar, S. L63–L66. DOI: 10.1086/182342
- [15] FABIAN, A. C. ; NANDRA, K. ; REYNOLDS, C. S. ; BRANDT, W. N. ; OTANI, C. ; TANAKA, Y. ; INOUE, H. ; IWASAWA, K.: On broad iron K_{α} lines in seyfert 1 galaxies. In: *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 277 (1995), Nr. 1, S. L11–L15. DOI: 10.1093/mnras/277.1.L11
- [16] EBISAWA, K. ; UEDA, Y. ; INOUE, H. ; TANAKA, Y. ; WHITE, N. E.: ASCA Observations of the Iron Line Structure in Cygnus X-1. In: *Astrophysical Journal* 467 (1996), August, S. 419. DOI: 10.1086/177616
- [17] MARTOCCHIA, Andrea ; MATT, Giorgio: Iron K_{α} line intensity from accretion discs around rotating black holes. In: *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 282 (1996), Nr. 4, S. L53–L57. DOI: 10.1093/mnras/282.4.L53
- [18] ERACLEOUS, M. ; HALPERN, J. P. ; LIVIO, M.: The Resolved Fe K alpha Line of the Broad-Line Radio Galaxy 3C 390.3 and Its Implications. In: *Astrophysical Journal* 459 (1996), März, S. 89. DOI: 10.1086/176871
- [19] G. MATT ; S. BIANCHI ; M. GUAINAZZI ; S. MOLENDI: The high energy emission line spectrum of NGC 1068. In: *A&A* 414 (2004), Nr. 1, S. 155–161. DOI: 10.1051/0004-6361:20031635
- [20] NANDRA, K.: On the origin of the iron K_{α} line cores in active galactic nuclei. In: *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society: Letters* 368 (2006), Nr. 1, S. L62–L66. DOI: 10.1111/j.1745-3933.2006.00158.x
- [21] REYNOLDS, Christopher S. ; FABIAN, Andrew C.: Broad Iron- K_{α} Emission Lines as a Diagnostic of Black Hole Spin. In: *The Astrophysical Journal* 675 (2008), Nr. 2, 1048. <http://stacks.iop.org/0004-637X/675/i=2/a=1048>
- [22] TRIGO, Maria D. ; MILLER-JONES, James C. A. ; MIGLIARI, Simone ; BRODERICK, Jess W. ; TZIOUMIS, Tasso: Baryons in the relativistic jets of the stellar-mass black-hole candidate 4U 1630-47. In: *Nature* 504 (2013), DEC 12, Nr. 7479, S. 260+. DOI: 10.1038/nature12672. – ISSN 0028–0836
- [23] SEELY, JF ; FELDMAN, U ; SAFRONOVA, UI: Measurement of Wavelengths and Lamb Shifts for Inner-shell Transitions in Fe-XVIII-XXIV. In: *Astrophys. J.* 304 (1986), MAY 15, Nr. 2, 1, S. 838–848. DOI: 10.1086/164220

- [24] SCHULZ, N. S. ; KALLMAN, T. E. ; GALLOWAY, D. K. ; BRANDT, W. N.: The variable warm absorber in Circinus X-1. In: *Astrophys. J.* 672 (2008), JAN 10, Nr. 2, S. 1091–1102. DOI: 10.1086/523809
- [25] REYNOLDS, Mark T. ; MILLER, Jon M.: CHANDRA GRATING SPECTROSCOPY OF THE Be/X-RAY BINARY 1A 0535+262. In: *Astrophys. J.* 723 (2010), NOV 10, Nr. 2, S. 1799–1805. DOI: 10.1088/0004-637X/723/2/1799
- [26] KALLMAN, T. ; EVANS, Daniel A. ; MARSHALL, H. ; CANIZARES, C. ; LONGINOTTI, A. ; NOWAK, M. ; SCHULZ, N.: A CENSUS OF X-RAY GAS IN NGC 1068: RESULTS FROM 450 ks of CHANDRA HIGH ENERGY TRANSMISSION GRATING OBSERVATIONS. In: *Astrophys. J.* 780 (2014), JAN 10, Nr. 2. DOI: 10.1088/0004-637X/780/2/121
- [27] PALMERI, P. ; MENDOZA, C. ; KALLMAN, T. R. ; BAUTISTA, M. A.: A complete set of radiative and Auger rates for K-vacancy states in Fe XVIII-Fe XXV. In: *A&A* 403 (2003), Nr. 3, S. 1175–1184. DOI: 10.1051/0004-6361:20030405
- [28] KATO, Takako ; SAFRONOVA, Ulyana I. ; SHLYAPTSEVA, Alla S. ; CORNILLE, Marguerite ; DUBAU, Jacques ; NILSEN, Joseph: Comparison of Satellite Spectra for H-like Fe and He-like Fe, Ca, and S Calculated by Three Different Methods. In: *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 67 (1997), Nr. 2, S. 225 – 329. DOI: 10.1006/adnd.1997.0752. – ISSN 0092–640X
- [29] NAHAR, Sultana N. ; PRADHAN, Anil K. ; ZHANG, Hong L.: K-shell dielectronic resonances in photoabsorption: Differential oscillator strengths for Li-like C IV, O VI, and Fe XXIV. In: *Phys. Rev. A* 63 (2001), May, S. 060701. DOI: 10.1103/PhysRevA.63.060701
- [30] HOU, HaiJun ; JIANG, Gang ; HU, Feng ; HAO, LiangHuan: Relativistic configuration interaction calculations for the K_{α} and K_{α} X-ray satellites of iron. In: *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 95 (2009), Nr. 2, S. 125 – 140. DOI: 10.1016/j.adt.2008.10.001. – ISSN 0092–640X
- [31] CHEN, Mau H.: Relativistic Auger and x-ray emission rates of the $1s2l^n(2l')^m$ configurations of Be-like ions. In: *Phys. Rev. A* 31 (1985), Mar, S. 1449–1457. DOI: 10.1103/PhysRevA.31.1449
- [32] CORNILLE, M ; DUBAU, J ; LOULERGUE, M ; BELY-DUBAU, F ; FAUCHER, P ; SAFRONOVA, U I. ; SHLYAPTSEVA, A S. ; VAINSHTEIN, L: Fe XXIII-Fe XIX theoretical spectra in two calculational methods. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 21 (1988), Nr. 20, S. 3347. DOI: 10.1088/0953-4075/21/20/005
- [33] NAHAR, Sultana N. ; PRADHAN, Anil K. ; ZHANG, Hong L.: Electron-Ion Recombination Rate Coefficients and Photoionization Cross Sections for Astrophysically Abundant Elements. V. Relativistic Calculations for Fe XXIV and Fe XXV for X-Ray Modeling. In: *The Astrophysical Journal Supplement Series* 133 (2001), Nr. 1, S. 255. DOI: 10.1086/319187

- [34] BITTER, M. ; HILL, K. W. ; SAUTHOFF, N. R. ; EFTHIMION, P. C. ; MESERVEY, E. ; RONEY, W. ; GOELER, S. von ; HORTON, R. ; GOLDMAN, M. ; STODIEK, W.: Dielectronic Satellite Spectrum of Heliumlike Iron (Fe XXV). In: *Phys. Rev. Lett.* 43 (1979), Jul, S. 129–132. DOI: 10.1103/PhysRevLett.43.129
- [35] BEIERSDORFER, P. ; PHILLIPS, T. ; JACOBS, V. L. ; HILL, K. W. ; BITTER, M. ; VON GOELER, S. ; KAHN, S. M.: High-resolution measurements, line identification, and spectral modeling of K-alpha transitions in Fe XVIII-Fe XXV. In: *Astrophysical Journal* 409 (1993), Juni, S. 846–859. DOI: 10.1086/172715
- [36] DECAUX, V. ; BEIERSDORFER, P. ; KAHN, S. M. ; JACOBS, V. L.: High-Resolution Measurement of the K_{α} Spectrum of Fe XXV-XVIII: New Spectral Diagnostics of Nonequilibrium Astrophysical Plasmas. In: *The Astrophysical Journal* 482 (1997), Nr. 2, S. 1076. DOI: 10.1086/304169
- [37] KUBIČEK, Katharina: *Absolut- und Relativbestimmungen der Energien von 2p-1s-Übergängen in wasserstoff-, helium- sowie lithiumartigen Schwefel-, Argon- und Eisenionen*, Universität Heidelberg & Max-Planck-Institut für Kernphysik, Diss., 2010. <http://www.ub.uni-heidelberg.de/archiv/10944>
- [38] BEIERSDORFER, P. ; PHILLIPS, T. W. ; WONG, K. L. ; MARRS, R. E. ; VOGEL, D.A.: MEASUREMENT OF LEVEL-SPECIFIC DIELECTRONIC-RECOMBINATION CROSS-SECTIONS OF HELIUM-LIKE FE-XXV. In: *Phys. Rev. A* 46 (1992), OCT 1, Nr. 7, S. 3812–3820. DOI: 10.1103/PhysRevA.46.3812
- [39] RUDOLPH, J. K. ; BERNITT, S. ; EPP, S. W. ; STEINBRÜGGE, R. ; BEILMANN, C. ; BROWN, G. V. ; EBERLE, S. ; GRAF, A. ; HARMAN, Z. ; HELL, N. ; LEUTENEGGER, M. ; MÜLLER, A. ; SCHLAGE, K. ; WILLE, H.-C. ; YAVAŞ, H. ; ULLRICH, J. ; CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R.: X-Ray Resonant Photoexcitation: Linewidths and Energies of K_{α} Transitions in Highly Charged Fe Ions. In: *Phys. Rev. Lett.* 111 (2013), Sep, 103002. DOI: 10.1103/PhysRevLett.111.103002
- [40] RUTHERFORD, E.: Scattering of Alpha and Beta Particles of Matter and the Structure of the Atom. In: *Philosophical Magazine* 21 (1911), S. 669
- [41] BOHR, N.: The Constitution of Atoms and Molecules. I and II. In: *Philosophical Magazine* 26 (1913), S. 1
- [42] BROGLIE, Louis de: *Recherches sur la théorie des quanta*, Paris, Diss., 1924
- [43] SCHRÖDINGER, E.: Quantisierung als Eigenwertproblem (Erste Mitteilung). In: *Annalen der Physik* 79 (1926), S. 361
- [44] SCHRÖDINGER, E.: Quantisierung als Eigenwertproblem (Zweite Mitteilung). In: *Annalen der Physik* 79 (1926), S. 489
- [45] SCHRÖDINGER, E.: Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen. In: *Annalen der Physik* 79 (1926), S. 734
- [46] SCHRÖDINGER, E.: Quantisierung als Eigenwertproblem (Dritte Mitteilung). In: *Annalen der Physik* 80 (1926), S. 437

- [47] SCHRÖDINGER, E.: Quantisierung als Eigenwertproblem (Vierte Mitteilung). In: *Annalen der Physik* 81 (1926), S. 109
- [48] NOLTING, Wolfgang: *Quantenmechanik - Methoden und Anwendungen*. 6., überarb. Aufl. Berlin ; Heidelberg [u.a.] : Springer, 2006. – 560 S.. – ISBN 3-540-26035-8 ; 978-3-540-26035-6
- [49] HEISENBERG, W.: Über quantenmechanische Umdeutung kinematischer und mechanischer Bewegungen. In: *Zeitschrift für Physik* 33 (1926), S. 879
- [50] HEISENBERG, W.: Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik. In: *Zeitschrift für Physik* 43 (1927), S. 172
- [51] BORN, Max: *Moderne Physik*. Berlin : Springer, 1933
- [52] EINSTEIN, A.: Zur Elektrodynamik bewegter Körper. In: *Annalen der Physik* 4(17) (1905), S. 891
- [53] DIRAC, P. A. M.: The Quantum Theory of the Electron. In: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 117 (1928), S. 610–624
- [54] LAMB, Willis E. ; RETHERFORD, Robert C.: Fine Structure of the Hydrogen Atom by a Microwave Method. In: *Phys. Rev.* 72 (1947), Aug, Nr. 3, S. 241–243. DOI: 10.1103/PhysRev.72.241
- [55] FIERZ, M.: Über die relativistische Theorie kräftefreier Teilchen mit beliebigem Spin. In: *Helvetica Physica Acta* 12 (1939), S. 3–17
- [56] PAULI, W.: The Connection Between Spin and Statistics. In: *Phys. Rev.* 58 (1940), Oct, 716–722. DOI: 10.1103/PhysRev.58.716
- [57] SLATER, J. C.: The Theory of Complex Spectra. In: *Phys. Rev.* 34 (1929), Nov, 1293–1322. DOI: 10.1103/PhysRev.34.1293
- [58] PAULI, W.: Über den Zusammenhang des Abschlusses der Elektronengruppen im Atom mit der Komplexstruktur der Spektren. In: *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* 31 (1925), 765–783. <http://dx.doi.org/10.1007/BF02980631>. – ISSN 0939–7922. – 10.1007/BF02980631
- [59] HATREE, D. R.: Approximate Wave Functions and Atomic Field for Mercury. In: *Physical Review* 46 (1934), S. 738
- [60] FISCHER, C. F. ; SAHA, H. P.: Multiconfiguration Hatree-Fock Results with Breit-Pauli Corrections for Forbidden Transitions in the $2p^4$ Configuration. In: *Physical Review A* 28 (1983), S. 3169
- [61] FRIEDRICH, Harald: *Theoretische Atomphysik*. Berlin ; Heidelberg [u.a.] : Springer, 1990 (Springer-Lehrbuch). – IX, 316 S.. – ISBN 3-540-52982-9 ; 0-387-52982-9 ; 978-3-540-52982-8 ; 978-0-387-52982-0

- [62] GRANT, I.P.: Relativistic calculation of atomic structures. In: *Advances in Physics* 19 (1970), Nr. 82, S. 747–811. DOI: 10.1080/00018737000101191
- [63] GRANT, I. P. ; MAYERS, D. ; PYPHER, N.: Studies in Multiconfiguration Dirac-Fock Theory I. The Low-Lying Spectrum of Hf III. In: *Journal of Physics B* 9 (1976), S. 2777. DOI: 10.1088/0022-3700/9/16/013
- [64] GILLASPY, J. D.: Highly charged ions. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 34 (2001), Nr. 19, R93. <http://stacks.iop.org/0953-4075/34/i=19/a=201>
- [65] BERENGUT, J. C. ; DZUBA, V. A. ; FLAMBAUM, V. V. ; ONG, A.: Electron-Hole Transitions in Multiply Charged Ions for Precision Laser Spectroscopy and Searching for Variations in α . In: *Phys. Rev. Lett.* 106 (2011), May, S. 210802. DOI: 10.1103/PhysRevLett.106.210802
- [66] BEYER, H. F. ; SEVELKO, V. P.: *Introduction to the physics of highly charged ions*. Bristol [u.a.] : Institute of Physics, 2003 (Series in atomic and molecular physics). – XIV, 361 S.. – ISBN 0-7503-0481-2 ; 978-0-7503-0481-8
- [67] FERMI, Enrico: *Nuclear physics*. Rev. ed., reprint. Chicago [u.a.] : Univ. of Chicago Press, 1974. – IX, 248 S.. – ISBN 0-226-24365-6 ; 978-0-226-24365-8
- [68] DIRAC, P. A. M.: The Quantum Theory of the Emission and Absorption of Radiation. In: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 114 (1927), Nr. 767, pp. 243-265. <http://www.jstor.org/stable/94746>. – ISSN 09501207
- [69] WENTZEL, Gregor: Über strahlungslose Quantensprünge. In: *Zeitschrift für Physik* 43 (1927), Nr. 8, 524-530. DOI: 10.1007/BF01397631. – ISSN 0044-3328
- [70] FERMI, E.: Über die Theorie des Stoßes zwischen Atomen und elektrisch geladenen Teilchen. In: *Zeitschrift für Physik* 29 (1924), Nr. 1, 315-327. DOI: 10.1007/BF03184853. – ISSN 0044-3328
- [71] WEIZSÄCKER, C.F.v.: Ausstrahlung bei Stößen sehr schneller Elektronen. In: *Zeitschrift für Physik* 88 (1934), Nr. 9-10, 612-625. DOI: 10.1007/BF01333110. – ISSN 0044-3328
- [72] WILLIAMS, E. J.: Nature of the High Energy Particles of Penetrating Radiation and Status of Ionization and Radiation Formulae. In: *Phys. Rev.* 45 (1934), May, 729–730. DOI: 10.1103/PhysRev.45.729
- [73] JACKSON, John D.: *Klassische Elektrodynamik*. 3., überarb. Aufl. Berlin [u.a.] : de Gruyter, 2002. – XIX, 938 S.. – ISBN 3-11-016502-3 ; 978-3-11-016502-9
- [74] VAN REGEMORTER, H.: Rate of Collisional Excitation in Stellar Atmospheres. In: *Astrophysical Journal* 136 (1962), November, 906. DOI: 10.1086/147445

- [75] LOTZ, Wolfgang: An empirical formula for the electron-impact ionization cross-section. In: *Zeitschrift für Physik* 206 (1967), Nr. 2, 205-211. DOI: 10.1007/BF01325928. – ISSN 0044-3328
- [76] HAQUE, A. K. F. ; SHAHJAHAN, M. ; UDDIN, M. A. ; PATOARY, M. A. R. ; BASAK, A. K. ; SAHA, B. C. ; MALIK, F. B.: Generalized Kolbenstvedt model for electron impact ionization of the K-, L- and M-shell ions. In: *Physica Scripta* 81 (2010), Nr. 4, 045301. <http://stacks.iop.org/1402-4896/81/i=4/a=045301>
- [77] KIM, Y. S. ; PRATT, R. H.: Direct Radiative Recombination of Electrons with Atomic Ions: Cross Sections and Rate Coefficients. In: *Physical Review A* 27 (1983), Jun, 2913–2924. DOI: 10.1103/PhysRevA.27.2913
- [78] HERTZ, H.: Ueber einen Einfluss des ultravioletten Lichtes auf die elektrische Entladung. In: *Annalen der Physik* 267 (1887), Nr. 8, 983–1000. DOI: 10.1002/andp.18872670827. – ISSN 1521-3889
- [79] HALLWACHS, Wilhelm: Ueber den Einfluss des Lichtes auf electrostatisch geladene Körper. In: *Annalen der Physik* 269 (1888), Nr. 2, 301–312. DOI: 10.1002/andp.18882690206. – ISSN 1521-3889
- [80] EINSTEIN, A.: Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt. In: *Annalen der Physik* 322(6) (1905), S. 132
- [81] YOUNG, L. ; KANTER, E. P. ; KRAESSIG, B. ; LI, Y. ; MARCH, A. M. ; PRATT, S. T. ; SANTRA, R. ; SOUTHWORTH, S. H. ; ROHRINGER, N. ; DiMAURO, L. F. ; DOUMY, G. ; ROEDIG, C. A. ; BERRAH, N. ; FANG, L. ; HOENER, M. ; BUCKSBAUM, P. H. ; CRYAN, J. P. ; GHIMIRE, S. ; GLOWNIA, J. M. ; REIS, D. A. ; BOZEK, J. D. ; BOSTEDT, C. ; MESSERSCHMIDT, M.: Femtosecond electronic response of atoms to ultra-intense X-rays. In: *Nature* 466 (2010), JUL 1, Nr. 7302, S. 56–U66. DOI: 10.1038/nature09177. – ISSN 0028-0836
- [82] MILNE, E.A.: Statistical equilibrium in relation to the photo-electric effect, and its application to the determination of absorption coefficients. In: *Philosophical Magazine Series 6* 47 (1924), Nr. 277, 209-241. DOI: 10.1080/14786442408634360
- [83] BEYER, H. F. ; SEVELKO, V. P.: *X-ray radiation of highly charged ions*. Berlin ; Heidelberg : Springer, 1997 (Springer series on atoms and plasmas ; 19). – XI, 233 S.. – ISBN 3-540-63185-2 ; 978-3-540-63185-9
- [84] DEMTRÖDER, Wolfgang: *Laserspektroskopie 1*. 6., aktualisierte Aufl. Berlin ; Heidelberg [u.a.] : Springer, 2011. – XI, 300 S.. – ISBN 978-3-642-21305-2 ; 978-3-642-21306-9
- [85] DEMTRÖDER, Wolfgang: *Experimentalphysik 3*. 4., überarb. Aufl. Berlin ; Heidelberg : Springer, 2010 (Springer-Lehrbuch). – XXI, 650 S.. – ISBN 978-3-642-03910-2 ; 978-3-642-03911-9

- [86] ORESHKINA, Natalia S. ; CAVALETTO, Stefano M. ; KEITEL, Christoph H. ; HARMAN, Zoltán: Astrophysical Line Diagnosis Requires Nonlinear Dynamical Atomic Modeling. In: *Phys. Rev. Lett.* 113 (2014), Sep, S. 143001. DOI: 10.1103/PhysRevLett.113.143001
- [87] MEITNER, L.: Über die β -Strahl-Spektren und ihren Zusammenhang mit der γ -Strahlung. In: *Zeitschrift für Physik A* 11(1) (1922), S. 35. DOI: 10.1007/BF01328399
- [88] AUGER, P.: Sur L'effet Photoélectrique Composé. In: *Journal de Physique et Radium* 6 (1925), 205. http://hal.archives-ouvertes.fr/docs/00/20/52/07/PDF/ajp-jphysrad_1925_6_6_205_0.pdf
- [89] RUDOLPH, Jan: *Fluoreszenzspektroskopie an K-Schalen-Übergängen hochgeladener Eisenionen*, Justus-Liebig-Universität Giessen, Dissertation, 2013. <http://geb.uni-giessen.de/geb/volltexte/2013/10321>
- [90] POPPE, G. P. M. ; WIJERS, C. M. J.: More Efficient Computation of the Complex Error Function. In: *ACM Trans. Math. Softw.* 16 (1990), März, Nr. 1, S. 38–46. DOI: 10.1145/77626.77629. – ISSN 0098–3500
- [91] KNAPP, D. A. ; MARRS, R. E. ; SCHNEIDER, M. B. ; CHEN, M. H. ; LEVINE, M. A. ; LEE, P.: Dielectronic Recombination of Heliumlike Ions. In: *Physical Review A* 47(3) (1993), S. 2039
- [92] KNAPP, D. A. ; BEIERSDORFER, P. ; CHEN, M. H. ; SCOFIELD, J. H. ; SCHNEIDER, D.: Observation of Interference between Dielectronic Reacceleration and Radiative Recombination in Highly-Charged Uranium Ions. In: *Physical Review Letters* 74 (1995), S. 54
- [93] GONZÁLEZ-MARTINEZ, A. J. ; CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R. ; BRAUN, J. ; BRENNER, G. ; BRUHNS, H. ; LAPIERRE, A. ; MIRONOV, V. ; SORIA ORTS, R. ; TAWARA, H. ; TRINCZEK, M. ; ULLRICH, J. ; SCOFIELD, J. H.: State-Selective Quantum Interference Observed in the Recombination of Highly Charged $\text{Hg}^{75+ \dots 78+}$ Mercury Ions in an Electron Beam Ion Trap. In: *Physical Review Letters* 94 (2005), S. 203201
- [94] BEILMANN, C. ; MOKLER, P. H. ; BERNITT, S. ; KEITEL, C. H. ; ULLRICH, J. ; LÓPEZ-URRUTIA, J. R. C. ; HARMAN, Z.: Prominent Higher-Order Contributions to Electronic Recombination. In: *Phys. Rev. Lett.* 107 (2011), Sep, 143201. DOI: 10.1103/PhysRevLett.107.143201
- [95] BALASHOV, V. V. ; GRUM-GRZHIMAILO, A. N. ; KABACHNIK, N. M.: *Polarization and correlation phenomena in atomic collisions : a practical theory course*. New York, NY [u.a.] : Kluwer Acad., Plenum Publ., 2000 (Physics of atoms and molecules). – ISBN 0–306–46266–4

- [96] LEVINE, M.A. ; MARRS, R.E. ; BARDSLEY, J.N. ; BEIERSDORFER, P. ; BENNETT, C.L. ; CHEN, M.H. ; COWAN, T. ; DIETRICH, D. ; HENDERSON, J.R. ; KNAPP, D.A. ; OSTERHELD, A. ; PENETRANTE, B.M. ; SCHNEIDER, M.B. ; SCOFIELD, J.H.: The use of an electron beam ion trap in the study of highly charged ions. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 43 (1989), Nr. 3, S. 431 – 440. DOI: 10.1016/0168-583X(89)90386-8. – ISSN 0168–583X
- [97] DONETS, E. D. ; OVSYANNIKOV, V. P.: Investigation of Ionization of Positive Ions by Electron Impact. In: *Soviet Physics JETP* 53 (1981), Nr. 3, S. 466–471
- [98] MARRS, R. E. ; ELLIOTT, S. R. ; KNAPP, D. A.: Production and Trapping of Hydrogenlike and Bare Uranium Ions in an Electron Beam Ion Trap. In: *Phys. Rev. Lett.* 72 (1994), Jun, S. 4082–4085. DOI: 10.1103/PhysRevLett.72.4082
- [99] BEIERSDORFER, Peter: Spectroscopy with trapped highly charged ions. In: *Physica Scripta* 2009 (2009), Nr. T134, S. 014010. DOI: 10.1088/0031-8949/2009/T134/014010
- [100] BEIERSDORFER, Peter (Hrsg.): *Twenty years of spectroscopy with the electron beam ion trap (EBIT)*. Canadian Journal of Physics 86(1), 2008
- [101] DOBRODEY, Stepan: *Persönliche Mitteilung*. November 2014
- [102] HERRMANN, Gabriel: Optical Theory of Thermal Velocity Effects in Cylindrical Electron Beams. In: *Journal of Applied Physics* 29 (1958), Nr. 2, S. 127–136. DOI: 10.1063/1.1723053
- [103] CURRELL, Fred J. (Hrsg.): *The Physics of Multiply and Highly Charged Ions*. Springer, 2003. DOI: 10.1007/978-94-017-0542-4. DOI: 10.1007/978-94-017-0542-4. – ISBN 978–94–017–0542–4
- [104] WILLE, Klaus: *Physik der Teilchenbeschleuniger und Synchrotronstrahlungsquellen*. 2., überarb. und erw. Aufl. Stuttgart : Teubner, 1996 (Teubner-Studienbücher : Physik). DOI: 10.1007/978-3-663-11039-2. DOI: 10.1007/978-3-663-11039-2. – ISBN 978–3–519–13087–1
- [105] MOTZ, H.: Applications of the Radiation from Fast Electron Beams. In: *Journal of Applied Physics* 22 (1951), Nr. 5, S. 527–535. DOI: 10.1063/1.1700002
- [106] LINDBLAD, A. ; SVENSSON, S. ; TIEDTKE, K.: *A Compendium on Beam Transport and Beam Methods for Free Electron Lasers: IRUVX-PP Expert’s Report*. Dt. Elektronen-Synchrotron DESY, IRUVX-PP Project Coordinator, 2011 (EuroFEL - free electron lasers of Europe). <http://www.iruvx.eu/media/publications/>. – ISBN 978–3–935702–45–4
- [107] SASAKI, Shigemi ; MIYATA, Koji ; TAKADA, Takeo: A New Undulator for Generating Variably Polarized Radiation. In: *Japanese Journal of Applied Physics* 31 (1992), Nr. 12B, S. L1794. DOI: 10.1143/JJAP.31.L1794

- [108] BALEWSKI, K (Hrsg.) ; BREFELD, W (Hrsg.) ; DECKING, W (Hrsg.) ; FRANZ, H (Hrsg.) ; RÖHLSBERGER, R (Hrsg.) ; WECKERT, E (Hrsg.): *PETRA III: a Low Emittance Synchrotron Radiation Source: Technical Design Report*. DESY 04-035, 2004 http://petra3-project.desy.de/general/tdr/index_eng.html
- [109] BRAGG, W. H. ; BRAGG, W. L.: The Reflection of X-rays by Crystals. In: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A* 88 (1913), Nr. 605, S. 428–438. DOI: 10.1098/rspa.1913.0040
- [110] CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R. ; DORN, A. ; MOSHAMMER, R. ; ULLRICH, J.: The Freiburg Electron Beam Ion Trap/Source Project FreEBIT. In: *Phys. Scr.* T 80 (1999), S. 502
- [111] EPP, S. W. ; CRESPO-LÓPEZ-URRUTIA, J. R. ; BRENNER, G. ; MÄCKEL, V. ; MOKLER, H. P. ; TREUSCH, R. ; KUHLMANN, M. ; YURKOV, M. V. ; FELDHAUS, J. ; SCHNEIDER, J. R. ; WELLHÖFER, M. ; MARTINS, M. ; WURTH, W. ; ULLRICH, J.: Soft X-Ray Laser Spectroscopy on Trapped Highly Charged Ions at FLASH. In: *Physical Review Letters* 98 (2007), S. 183001
- [112] EPP, S. W. ; CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R. ; SIMON, M. C. ; BAUMANN, T. ; BRENNER, G. ; GINZEL, R. ; GUERASSIMOVA, N. ; MÄCKEL, V. ; MOKLER, P. H. ; SCHMITT, B. L. ; TAWARA, H. ; ULLRICH, J.: X-ray laser spectroscopy of highly charged ions at FLASH. In: *J. Phys. B* 43 (2010), S. 194008
- [113] BERNITT, S. ; BROWN, G. V. ; RUDOLPH, J. K. ; STEINBRÜGGE, R. ; GRAF, A. ; LEUTENEGGER, M. ; EPP, S. W. ; EBERLE, S. ; KUBIČEK, K. ; MÄCKEL, V. ; SIMON, M. C. ; TRÄBERT, E. ; MAGEE, E. W. ; BEILMANN, C. ; HELL, N. ; SCHIPPERS, S. ; MÜLLER, A. ; KAHN, S. M. ; SURZHYKOV, A. ; HARMAN, Z. ; KEITEL, C. H. ; CLEMENTSON, J. ; PORTER, F. S. ; SCHLOTTER, W. ; TURNER, J. J. ; ULLRICH, J. ; BEIERSDORFER, P. ; CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R.: An unexpectedly low oscillator strength as the origin of the Fe XVII emission problem. In: *Nature* 492 (2012), Nr. 7428, S. 225–228. DOI: 10.1038/nature11627
- [114] SIMON, M C. ; SCHWARZ, M ; EPP, S W. ; BEILMANN, C ; SCHMITT, B L. ; HARMAN, Z ; BAUMANN, T M. ; MOKLER, P H. ; BERNITT, S ; GINZEL, R ; HIGGINS, S G. ; KEITEL, C H. ; KLAWITTER, R ; KUBICEK, K ; MÄCKEL, V ; ULLRICH, J ; LÓPEZ-URRUTIA, J R C.: Photoionization of N^{3+} and Ar^{8+} in an electron beam ion trap by synchrotron radiation. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 43 (2010), Nr. 6, S. 065003. DOI: 10.1088/0953-4075/43/6/065003
- [115] SIMON, M. C. ; CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R. ; BEILMANN, C. ; SCHWARZ, M. ; HARMAN, Z. ; EPP, S. W. ; SCHMITT, B. L. ; BAUMANN, T. M. ; BEHAR, E. ; BERNITT, S. ; FOLLATH, R. ; GINZEL, R. ; KEITEL, C. H. ; KLAWITTER, R. ; KUBIČEK, K. ; MÄCKEL, V. ; MOKLER, P. H. ; REICHARDT, G. ; SCHWARZKOPF, O. ; ULLRICH, J.: Resonant and Near-Threshold Photoionization Cross Sections of Fe^{14+} . In: *Phys. Rev. Lett.* 105 (2010), Oct, S. 183001. DOI: 10.1103/PhysRevLett.105.183001
- [116] EPP, Sascha W.: *Röntgen-Laserspektroskopie hochgeladener Ionen in einer EBIT am Freie-Elektronen-Laser FLASH*, Universität Heidelberg & Max-Planck-Institut für Kernphysik, Dissertation, 2007

- [117] SÖDING, P.: On the discovery of the gluon. In: *The European Physical Journal H* 35 (2010), Nr. 1, 3-28. DOI: 10.1140/epjh/e2010-00002-5. – ISSN 2102-6459
- [118] DESY - PETRA III Extension. <http://petra3-extension.desy.de/>, Oktober 2014
- [119] DESY, Deutsches Elektronen-Synchrotron: *PETRA III - Facility information*. http://photon-science.desy.de/facilities/petra_iii/facility_information/index_eng.html. Version: Oktober 2014
- [120] TISCHER, M. ; BALEWSKI, K. ; DECKING, W. ; SEIDEL, M. ; YONGJUN, L. ; VOBLY, P. ; KUZMINYKH, V. ; ZOLOTARIOV, K. ; LEVICHEV, E.: Damping Wigglers for the Petra III Light Source. In: *Proceedings of the 2005 Particle Accelerator Conference*, 2005, S. 2446–2448
- [121] WILLE, H. C. ; FRANZ, H. ; RÖHLSBERGER, R. ; CALIEBE, W. A. ; DILL, F. U.: Nuclear resonant scattering at PETRA III : Brilliant opportunities for nano - and extreme condition science. In: *Journal of Physics: Conference Series* 217 (2010), Nr. 1, S. 012008. DOI: 10.1088/1742-6596/217/1/012008
- [122] YAVAŞ, Hasan: *Design details of the inelastic X-ray scattering (IXS) instrument*. private Mitteilung an Jan Rudolph, November 2012
- [123] KIRKPATRICK, P. ; BAEZ, A. V.: Formation of Optical Images by X-Rays. In: *J. Opt. Soc. Am.* 38 (1948), Sep, Nr. 9, S. 766–773. DOI: 10.1364/JOSA.38.000766
- [124] KRAFT, S. ; STÜMPEL, J. ; BECKER, P. ; KUETGENS, U.: High resolution x-ray absorption spectroscopy with absolute energy calibration for the determination of absorption edge energies. In: *Review of Scientific Instruments* 67 (1996), Nr. 3, S. 681–687. DOI: 10.1063/1.1146657
- [125] BERNITT, Sven: *Resonante Anregung astrophysikalischer Röntgen-Übergänge in hochgeladenen Eisenionen mit dem Freie-Elektronen-Laser LCLS*, Universität Heidelberg & Max-Planck-Institut für Kernphysik, Diss., 2013. <http://archiv.ub.uni-heidelberg.de/volltextserver/15218/>
- [126] SIMON, Martin C.: *Photoionisation hochgeladener Ionen durch weiche Röntgenstrahlung in einer Elektronenstrahl-Ionenfalle*, Universität Heidelberg & Max-Planck-Institut für Kernphysik, Dissertation, 2010. – XI, 176 S.
- [127] STEINBRÜGGE, René F.: *Weiterentwicklung eines Geschwindigkeitsfilters zur Beobachtung ladungsändernder Prozesse hochgeladener Ionen*, Universität Heidelberg & Max-Planck-Institut für Kernphysik, Diplomarbeit, 2010
- [128] BERNITT, Sven: *Optimierung der Ladungszustandsverteilung in einer EBIT durch resonante Photorekombination*, Universität Heidelberg & Max-Planck-Institut für Kernphysik, Diplomarbeit, 2009
- [129] BERNITT, Sven: *luaList2 - a library for MPA3 listfile processing with Lua*. – Version vom 14.09.2009

- [130] EPP, S.W. ; STEINBRÜGGE, R. ; BERNITT, S. ; RUDOLPH, J.K. ; BEILMANN, C. ; BEKKER, H. ; MÜLLER, A. ; VERSOLATO, O.O. ; WILLE, H.-C. ; YAVAŞ, H. ; ULLRICH, J. ; LÓPEZ-URRUTIA, J.R. C.: Single photon excitation of K_α in heliumlike Kr^{34+} : Results support quantum electrodynamics predictions. In: *Physical Review Letters (eingereicht)* (2014)
- [131] CHANTLER, C. T. ; KINNANE, M. N. ; GILLASPY, J. D. ; HUDSON, L. T. ; PAYNE, A. T. ; SMALE, L. F. ; HENINS, A. ; POMEROY, J. M. ; TAN, J. N. ; KIMPTON, J. A. ; TAKACS, E. ; MAKONYI, K.: Testing Three-Body Quantum Electrodynamics with Trapped Ti^{20+} Ions: Evidence for a Z -dependent Divergence Between Experiment and Calculation. In: *Phys. Rev. Lett.* 109 (2012), Oct, S. 153001. DOI: 10.1103/PhysRevLett.109.153001
- [132] EPP, S. W.: Comment on “Testing Three-Body Quantum Electrodynamics with Trapped Ti^{20+} Ions: Evidence for a Z -Dependent Divergence Between Experiment and Calculation”. In: *Phys. Rev. Lett.* 110 (2013), Apr, S. 159301. DOI: 10.1103/PhysRevLett.110.159301
- [133] CHANTLER, C. T. ; KINNANE, M. N. ; GILLASPY, J. D. ; HUDSON, L. T. ; PAYNE, A. T. ; SMALE, L. F. ; HENINS, A. ; POMEROY, J. M. ; KIMPTON, J. A. ; TAKACS, E. ; MAKONYI, K.: Chantler et al. Reply:. In: *Phys. Rev. Lett.* 110 (2013), Apr, S. 159302. DOI: 10.1103/PhysRevLett.110.159302
- [134] RUDOLPH, Jan: *Persönliche Mitteilung.* September 2013
- [135] MÜLLER, A ; SCHIPPERS, S ; PHANEUF, R A. ; SCULLY, S W J. ; AGUILAR, A ; CISNEROS, C ; GHARAIBEH, M F. ; SCHLACHTER, A S. ; MCLAUGHLIN, B M.: K-shell photoionization of Be-like boron (B^+) ions: experiment and theory. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 47 (2014), Nr. 13, S. 135201. DOI: 10.1088/0953-4075/47/13/135201. – und darin enthaltene Referenzen auf andere Elemente und Ladungszustände
- [136] BAUTISTA, M. A. ; KALLMAN, T. R.: The XSTAR Atomic Database. In: *Astrophys. J. Suppl.* 134 (2001), Nr. 1, S. 139. DOI: 10.1086/320363
- [137] FERLAND, G. J. ; PORTER, R. L. ; HOOF, P. A. M. ; WILLIAMS, R. J. R. ; ABEL, N. P. ; LYKINS, M. L. ; SHAW, Gargi ; HENNEY, W. J. ; STANCIL, P. C.: The 2013 release of cloudy. In: *Revista mexicana de astronomía y astrofísica* 49 (2013), 04, 137 - 163. http://www.astroscu.unam.mx/rmaa/RMxAA..49-1/PDF/RMxAA..49-1_gferland.pdf. – ISSN 0185–1101
- [138] TAKAHASHI, T. ; MITSUDA, K. ; KELLEY u. a.: The ASTRO-H X-ray Observatory. Version: September 2012. DOI: 10.1117/12.926190. In: TAKAHASHI, Tadayuki (Hrsg.) ; MURRAY, Stephen S. (Hrsg.) ; HERDER, Jan-Willem A. (Hrsg.): *Space Telescopes and Instrumentation 2012: Ultraviolet to Gamma Ray* Bd. 8443. SPIE, Bellingham, WA, September 2012, S. 84431Z

- [139] MITSUDA, K. ; KELLEY, R. L. ; BOYCE, K. R. ; BROWN, G. V. ; COSTANTINI, E. ; DIPIRRO, M. J. ; EZOE, Y. ; FUJIMOTO, R. ; GENDREAU, K. C. ; DEN HERDER, J.-W. ; HOSHINO, A. ; ISHISAKI, Y. ; KILBOURNE, C. A. ; KITAMOTO, S. ; MCCAMMON, D. ; MURAKAMI, M. ; MURAKAMI, H. ; OGAWA, M. ; OHASHI, T. ; OKAMOTO, A. ; PALTANI, S. ; POHL, M. ; PORTER, F. S. ; SATO, Y. ; SHINOZAKI, K. ; SHIRRON, P. J. ; SNEIDERMAN, G. A. ; SUGITA, H. ; SZYMKOWIAK, A. ; TAKEI, Y. ; TAMAGAWA, T. ; TASHIRO, M. ; TERADA, Y. ; TSUJIMOTO, M. ; DE VRIES, C. ; YAMAGUCHI, H. ; YAMASAKI, N. Y.: The high-resolution x-ray microcalorimeter spectrometer system for the SXS on ASTRO-H. Version: Juli 2010. DOI: 10.1117/12.856778. In: ARNAUD, Monique (Hrsg.) ; MURRAY, Stephen S. (Hrsg.) ; TAKAHASHI, Tadayuki (Hrsg.): *Space Telescopes and Instrumentation 2010: Ultraviolet to Gamma Ray* Bd. 7732. SPIE, Bellingham, WA, Juli 2010, S. 773211
- [140] HERDER, J. W. ; BAGNALI, D. ; BANDLER, S. ; BARBERA, M. ; BARCONS, X. ; BARRET, D. ; BASTIA, P. ; BISOTTI, M. ; BOYCE, K. ; CARA, C. ; CEBALLOS, M. ; CORCIONE, L. ; COBO, B. ; COLASANTI, L. ; PLAA, J. de ; DIPIRRO, M. ; DORIESE, W. B. ; EZOE, Y. ; FUJIMOTO, R. ; GATTI, F. ; GOTTARDI, L. ; GUTTRIDGE, P. ; HARTOG, R. den ; HEPBURN, I. ; KELLEY, R. ; IRWIN, K. ; ISHISAKI, Y. ; KILBOURNE, C. ; KORTE, P. A. J. ; KUUR, J. van d. ; LOTTI, S. ; MACCULI, C. ; MITSUDA, K. ; MINEO, T. ; NATALUCCI, L. ; OHASHI, T. ; PAGE, M. ; PALTANI, S. ; PERINATI, E. ; PIRO, L. ; PIGOT, C. ; PORTER, F. S. ; RAUW, G. ; RAVERA, L. ; RENOTTE, E. ; SAUVAGEOT, J.-L. ; SCHMID, C. ; SCIORTINO, S. ; SHIRRON, P. ; TAKEI, Y. ; TORRIOLI, G. ; TSUJIMOTO, M. ; VALENZIANO, L. ; WILLINGALE, D. ; VRIES, C. de ; WEERS, H. van ; WILMS, J. ; YAMASAKI, N. Y.: The x-ray microcalorimeter spectrometer onboard Athena. In: *Proc. SPIE* 8443 (2012), S. 84432B–84432B–12. DOI: 10.1117/12.924269