

Inaugural-Dissertation

zur

Erlangung der Doktorwürde

der

Naturwissenschaftlich-Mathematischen

Gesamtfakultät

der Ruprecht-Karls-Universität

Heidelberg

vorgelegt von

Dipl.-Phys. Johannes Braun

aus Landau in der Pfalz

Tag der mündlichen Prüfung: 28.06.2006

**Präzisionsröntgenspektroskopie zur
absoluten Wellenlängenbestimmung an
hochgeladenen Ionen**

**Gutachter: Prof. Dr. Joachim Ullrich
Prof. Dr. H. Jürgen Kluge**

Zusammenfassung:

In dieser Arbeit wurden erstmals mit dem sogenannten Bond-Verfahren präzise Absolut- und Relativmessungen von Röntgenübergängen in hochgeladenen Ionen durchgeführt. Neben weiterer Übergänge wurde die Energie des Lyman- α_1 Übergangs in Ar^{17+} und die der Resonanzlinie ($1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$, “w”) in Ar^{16+} zu 3323.035(60) eV (absolut) bzw. 3139.583(6) eV (relativ) bestimmt. Es handelt es sich dabei jeweils um die bisher genauesten Absolut- bzw. Relativmessungen von Röntgenübergängen in hochgeladenen Ionen, mit respektiven Fehlern von 18 ppm und 2 ppm, innerhalb derer die theoretischen Vorhersagen bestätigt werden. Die experimentelle Bestimmung dieser Röntgenwellenlängen, sowie auch die der Lyman- α_1 Linie in Cl^{16+} , der “w” Linie in Cl^{15+} und des “z” Übergangs ($1s2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$) in Ar^{16+} fand an der Heidelberger Elektronenstrahlionenfalle (HD-EBIT) statt. Ein neuartiges, hochpräzises Verfahren zur Bragg-Winkelbestimmung wurde entwickelt, welches zwei Strahlen sichtbaren Lichts nutzt, um die zur Bragg-Winkelmessung notwendige Einfallsrichtung der reflektierten Röntgenstrahlung festzustellen. Es wurde ein neues Kristallspektrometer entwickelt und aufgebaut, welches das neue Verfahren mit der Bond-Methode kombiniert. Die Ergebnisse zeigen, dass zukünftig eine absolute Präzision von ~ 1 ppm durchaus realisierbar ist und damit die genauesten Tests quantenelektrodynamischer Rechnungen von Ein-, Zwei oder Mehrelektronensystemen durchgeführt werden können. Zudem rückt damit das Ziel in greifbare Nähe, eine Vielzahl von Referenzlinien zur Verfügung zu stellen und letztendlich einen neuen Röntgenstandard zu definieren.

Abstract:

Within this work the first absolute high-precision wavelength measurements on highly charged ions using the Bond-method were carried out. Measuring the Lyman- α_1 transition in Ar^{17+} , and the resonance line ($1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$, “w”) in Ar^{16+} resulted in an energy of 3323.035(60) eV (absolute) and 3139.583(6) eV (relative). These are so far the most precise absolute- and relative measurements of x-ray transitions in highly charged ions. The errors are 18 ppm and 2 ppm, respectively, and the results agree well with theoretical predictions. The experiments to determine the wavelengths of these lines and also of the Lyman- α_1 line in Cl^{16+} , the “w” line in Cl^{15+} , as well as the “z” transition ($1s2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$) in Ar^{16+} were performed at the Heidelberg EBIT. Therefore a novel, highly accurate technique of Bragg-angle determination was developed employing two beams of visible light reflected on the x-ray crystal to identify the incoming direction of the reflected x-rays. A new spectrometer which uses the new technique in combination with the Bond-method was designed and built up. The results indicate, that in the near future a precision of ~ 1 ppm is achievable and, hence, the most accurate test of QED calculations for one-, two- and more-electron systems can be implemented. Furthermore the goal to provide a large variety of reference lines and finally to establish a new x-ray standard becomes accessible.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Die Theorie des Wasserstoffatoms	7
1.1 Das Wasserstoffatom und wasserstoffartige Ionen	9
1.2 Die Lambverschiebung	12
1.2.1 Kerneffekte	13
1.2.2 Quantenelektrodynamik	14
1.2.3 Experimentelle Werte der Lambverschiebung	23
2 Hochgeladene Ionen im Labor	27
2.1 Die Beam-Foil-Technik	29
2.2 Die Rückstoß-Ionen-Methode	29
2.3 Der Tokamak	32
2.4 Die Abbrems-Methode	33
2.5 Elektron Beam Ion Trap (EBIT)	34
2.6 Funktionsprinzip einer EBIT	36
3 Messmethoden	39
3.1 Methoden zur Wellenlängenbestimmung von Röntgenstrahlung	39
3.1.1 Halbleiterdetektoren	42
3.1.2 Mikrokalorimeter	44
3.1.3 Transmissionsgitter	46
3.1.4 Kristallspektrometer	47
3.2 Kristallspektrometertypen	50

3.2.1	Geometrie bei Verwendung ebener Kristalle	51
3.2.2	Von Hámos-Geometrie	53
3.2.3	Johann-Geometrie	54
3.2.4	Messbereichserweiterung durch Kristallrotation unter Verwen- dung ebener Kristalle	54
3.3	Referenzlinien	57
3.4	Methoden für Absolutmessungen von Röntgenwellenlängen	59
3.4.1	Der Quasi-Monolith	61
3.4.2	Das Bond-Verfahren	62
4	Kollimationfreie Bestimmung der Einfallsrichtung, die a/b-Methode	67
4.1	Das Prinzip der a/b-Methode	67
4.2	Simulation der a/b-Methode	72
4.2.1	Auswirkung verschiedener Positionen von Röntgen- und Licht- quelle auf die Präzision der Wellenlängenmessung	75
4.2.2	Auswirkung des Verkippungswinkels zwischen Kristall- ebene und -oberfläche auf die a/b-Methode	80
4.3	3-dimensionale Betrachtung	85
4.3.1	Linienkrümmung auf dem Detektor	86
4.3.2	Axiale Ausdehnung der Quelle	88
4.3.3	Integrationsvektor des Detektors	91
5	Aufbau des Spektrometers	93
5.1	Hauptkammer	94
5.2	Detektoreinheit	95
5.3	Kristallrotationseinheit	97
5.3.1	Die Winkelmessung	98
5.3.2	Der Kristallhalter	98
5.4	Die optische Justiervorrichtung	100

6	Absolut- und Relativmessungen an Cl¹⁵⁺, Cl¹⁶⁺, Ar¹⁶⁺ und Ar¹⁷⁺	107
6.1	Aspekte der Datenanalyse	107
6.1.1	Überlapp von Röntgen- und Lichtquelle	107
6.1.2	Stabilität der Quellposition	111
6.1.3	Messabfolge und Datenanalyse	112
6.2	Experimentelle Bestimmung verschiedener Übergangsenergien in hochgeladenen Ionen	113
6.2.1	Energie der Lyman- α_1 und w Übergänge in Chlor	115
6.2.2	Energie der Lyman- α_1 , w und z Übergänge in Argon	117
6.2.3	Diskussion der Ergebnisse der Absolutmessungen	118
6.2.4	Relativmessungen an Cl ¹⁵⁺ , Cl ¹⁶⁺ und Ar ¹⁶⁺	124
6.2.5	Diskussion der Ergebnisse der Relativmessungen	125
7	Zusammenfassung und Ausblick	131
A	Anhang	135
A.1	Farbtafeln	135
A.2	Orientierung der Kristallebenen	136
A.3	Winkelmessgerät RON 905	137
	Literaturverzeichnis	139

Einleitung

Seit der Entdeckung der Röntgenstrahlung hat diese, bedingt durch den wissenschaftlichen Fortschritt und die rasante technische Entwicklung eine immer größere Bedeutung erlangt. Ihre Fähigkeit Materie zu durchdringen, zusammen mit dem materialabhängigen Absorptionsvermögen, machen sie zu einem einzigartigen Werkzeug der durchleuchtenden Bildgebungstechnik. Die wohl bekannteste Anwendung ist die medizinische Röntgendiagnostik, die aufgrund der durch sie eröffneten Möglichkeiten unverzichtbar geworden ist. Dabei entwickelte sich diese Untersuchungsmethode von der anfänglichen einfachen zweidimensionalen Bildgebung der stark absorbierenden Knochen über die Abbildung der Organe hin zur heute üblichen dreidimensionalen Computertomographie, mit der sich nahezu alle Gewebearten erfassen lassen. In Einzelfällen erreicht man mit dieser Technik ein extrem hohes räumliches Auflösungsvermögen, bis hin zu wenigen μm . Auch in der Materialwissenschaft ist die Röntgenstrahlung ein Standardwerkzeug. So werden mit ihr z.B. die Flügel von Flugzeugturbinen regelmäßig auf Haarrisse untersucht und damit die Zuverlässigkeit und letztlich die Sicherheit des Flugverkehrs gewährleistet. Genauso werden Schweißnähte z.B. in Kesselanlagen regelmäßig auf Festigkeit geprüft. In der Biologie ermöglicht die kurze Wellenlänge der Röntgenstrahlung und das damit verbundene, im Vergleich zur optischen Mikroskopie hohe Auflösungsvermögen, die Erforschung des inneren Aufbaus einzelner Zellen. So ist es heutzutage sogar möglich, mittels intensiver Röntgenstrahlung, die Struktur von sehr komplexen Proteinen abzubilden. Die zahlreichen Anwendungsmöglichkeiten der Röntgenstrahlung machen sie zu einem universellen und unverzichtbaren Instrument in vielen Bereichen von Wissenschaft und Technik. Folglich werden immer neuere Röntgenquellen mit zunehmender Brillanz, wie Synchrotrons der dritten Generation entwickelt und gebaut. Ein wichtiger Schritt in die Zukunft stellen die Freie Elektronen Laser (FEL) dar, welche sich in Hamburg und Stanford am Beginn des Aufbaus befinden.

Als die Röntgenstrahlung im Jahre 1895 durch Wilhelm Conrad Röntgen (Nobelpreis 1901) entdeckt wurde, war für weitere zwanzig Jahre nicht klar, ob es sich dabei um Teilchenstrahlung oder um elektromagnetische Wellen handelte. Falls Röntgenstrahlung elektromagnetische Wellen wären, so sollte dies zur Beobachtung von Beu-

gungerscheinungen an einem Gitter führen. Max von Laue (Nobelpreis 1914) hatte die Idee, die vermutete periodische Raumstruktur von Kristallen, die bis dahin ebenfalls noch nicht eindeutig nachgewiesen worden war, als Beugungsgitter zu nutzen. In einem ersten Versuch zum Nachweis der Röntgenbeugung an Kristallen konnten damit Laue, Friedrich und Knipping diese beiden grundlegenden Annahmen durch ein einziges Experiment (1912) bestätigen. Eine theoretische Erklärung formulierten bereits zu diesem Zeitpunkt von Laue selbst sowie auch Ewald. Doch letztendlich lieferten W.L. Bragg und sein Vater W.H. Bragg (Nobelpreis 1915) eine einfachere Betrachtungsweise, welche die Gitterstruktur eindeutig mit den Beugungsreflexen verband und zudem erklärte, warum unterschiedliche Gitterabstände in ein und demselben Kristall existieren können. Dies ist die Grundlage für die präzise Vermessung der Wellenlänge von Röntgenstrahlung mit Hilfe von Kristallspektrometern. Diese sind bis heute, also über 90 Jahre nach ihrem ersten Einsatz, noch immer weit verbreitet, besonders wenn bei der Bestimmung der Wellenlänge höchste Präzision gefordert ist. Diese ist z.B. in der chemischen Analyse, vorwiegend jedoch in der Astrophysik, der Fusionsforschung und zum Test hochgenauer atomtheoretischer Vorhersagen notwendig.

Wie die Radioastronomie deckt auch die Röntgenastronomie einen weiteren, zum Sichtbaren komplementären Spektralbereich zur Beobachtung des Universums ab. Da Röntgenstrahlung aufgrund der Absorption in der Atmosphäre vom Boden aus nicht beobachtet werden kann, erschließt sie sich mit Hilfe von Röntgenteleskopen, die in Satelliten wie z.B. Chandra oder XMM-Newton, installiert sind. Die in den gewonnenen Spektren gemessenen Linienintensitäten und Wellenlängen geben Aufschluss über die Zusammensetzung von Sternen, deren Dichte sowie die dort vorhandene Plasmatemperatur. Zur Entdeckung aktiver galaktischer Kerne lieferte die Röntgenastronomie einen entscheidenden Beitrag, da diese Objekte durch optische Spektroskopie kaum von gewöhnlichen Sternen unterscheidbar sind. Um jedoch die Spektren solcher Aufnahmen analysieren zu können, ist ein Vergleich mit im Labor gewonnenen, präzisen Daten notwendig. Diese erhält man durch künstlich erzeugte Plasmen, wie sie z.B. bei der Fusionsforschung in einem Tokamak vorkommen. Die physikalischen Zusammenhänge in einem magnetisch eingeschlossenen Plasma sind jedoch ebenfalls hochkompliziert und es ist daher schwer zu kontrollieren. Im Plasma vorhandene, bzw. absichtlich eingebrachte Verunreinigungen wie z.B. injiziertes Argon eignen sich um die jeweiligen Plasmaparameter zu bestimmen und somit die erwähnten Zusammenhänge besser verstehen zu können. Die theoretischen Plasmodelle setzen die Kenntnis möglichst vieler Details der Struktur der beteiligten Ionen, in den jeweils vorhandenen Ladungszuständen voraus. Insbesondere für die in Plasmen enthaltenen, hochgeladenen Ionen liegen bedauerlicherweise nur vereinzelt experimentelle Daten vor. Diese zum Teil durch Röntgenspektroskopie gewonnenen

Daten dienen als Grundlage, um auch nicht vermessene Niveaus und Wirkungsquerschnitte mit Hilfe atomphysikalischer Methoden vorhersagen zu können. Es lässt sich zur Zeit ganz allgemein behaupten, dass nur wenige, extrem aufwendige Modelle in der Lage sind, eine realistische Simulation der Beobachtungen an astrophysikalischen bzw. Hochtemperaturplasmen zu liefern. Die gängigen Codes enthalten nur sehr grobe Näherungen, die teilweise seit langem als inkorrekt angesehen werden. Durch die Mittelung über viele Zustände in den Temperaturverteilungen ergibt sich gewissermaßen der Anschein einer guten Beschreibung. Kleine Abweichungen in den verwendeten Parametern führen bei diesen Modellen zu Fehlabschätzungen der tatsächlichen Verhältnisse, die Größenordnungen betragen können.

Die Vorstellungen, die wir heute über den Aufbau und die Struktur der Atome haben, sind vorwiegend zu Beginn des letzten Jahrhunderts entstanden. Um die Natur der Atome zu beschreiben, wurden Modelle entwickelt, welche die zum damaligen Zeitpunkt bereits gesammelten Erkenntnisse wiedergaben. Gleichzeitig sollten diese Modelle auch die Möglichkeit bieten, noch nicht erforschte Eigenschaften der Atome vorherzusagen. So konnte z.B. das Bohr'sche Atommodell gewisse experimentelle Beobachtungen treffend voraussagen. Doch mit der Weiterentwicklung der verschiedenen Messmethoden wurde eine immer größere Präzision erreicht, und es ließen sich deutliche Abweichungen von den einfachen theoretischen Vorhersagen erkennen. Um diese Widersprüche aufzuheben, sind nach und nach neue Theorien, wie die Quantenmechanik, die relativistische Quantenmechanik und die Quantenelektrodynamik (QED) entwickelt worden. Experimentelle Fortschritte in der Atomphysik, die Entwicklung immer präziserer Meßmethoden, waren dabei fast immer der entscheidende Antrieb. Bis heute beschreibt die Quantenelektrodynamik die Natur der Atome am erfolgreichsten und bildet gewissermaßen die konzeptionelle Grundlage aller feldtheoretischen Modelle auf der z.B. auch die Quantenchromodynamik und das Standardmodell aufbauen.

Viele bedeutende Effekte in der Atomphysik sind aufgrund ihrer verschwindend kleinen Beiträge schwer nachweisbar. Oft wird die notwendige Messgenauigkeit nur in Verbindung mit einem erheblich gesteigerten experimentellen Aufwand erreicht. Zu diesen Effekten zählen z.B. die Feinstrukturaufspaltung, die durch die Spin-Bahn-Kopplung auf den Elektronenspin hinweist und ein relativistischer Effekt ist; die Hyperfeinstruktur, viel kleiner noch, die den ersten Hinweis auf die Existenz des Kernspins gab; die Hyperfeinanomalie, die durch die räumliche Verteilung der Kernmagnetisierung im Kernvolumen entsteht, und die Lamb-Verschiebung, die zum ersten Mal eine Kopplung des Elektronenfeldes mit dem Photonfeld zeigte und die Entwicklung der QED auslöste. All dies ist am Wasserstoffatom, dem am besten untersuchten Quantensystem nachgewiesen worden.

Seit etwa 30 Jahren sind, durch die zunehmende Verfügbarkeit von hochgeladenen

Ionen im Labor, eine Vielzahl neuer experimenteller Möglichkeiten entstanden. Die genannten Effekte skalieren nämlich häufig mit hohen Potenzen der Kernladung Z , wie z.B. die Verschiebung der Niveaus durch Kerngrößenbeiträge im Atom mit Z^6 , die Beiträge der QED mit Z^4 und die Hyperfeinstrukturaufspaltung mit Z^3 . Beobachtet man nun hochgeladene Ionen, die nur wenige Elektronen besitzen und die theoretisch einfacher behandelt werden können als Vielelektronensysteme, so nehmen diese Effekte Größen an, die, anstatt μeV nun meV bis sogar zu einigen 100 eV betragen können. So erreicht z.B. die Lamb-Verschiebung des U^{91+} 1s-Niveaus eine Größe von 469 eV . Das wiederum heisst, dass der spektroskopisch zu untersuchende Wellenlängenbereich sich vom optischen bei Atomen hin zum Röntgenbereich bei hochgeladenen Ionen verschiebt.

Zur Herstellung und Speicherung hochgeladener Ionen im Labor gibt es heutzutage diverse Methoden, von den bereits genannten Tokamaks über Elektron-Zyklotron-Resonanz-Quellen zu Speicherringen und der Elektronenstrahlionenfalle (engl. *electron beam ion trap*, EBIT). Dabei eignen sich besonders Speicherringe und die EBIT für die Präzisionspektroskopie. Bei letzterer sind die Ionen in einem begrenzten Volumen gefangen und bewegen sich nur mit thermischen Geschwindigkeiten. Speicherringe bieten die Möglichkeit, hochgeladene Ionen, die zunächst bei relativistischen Geschwindigkeiten in Beschleunigern erzeugt werden, stark abzubremesen. Hierdurch vermeiden beide Methoden Fehlerquellen, die bei der Dopplertransformation der im Labor gemessenen Übergangsenergien ins Ruhesystem der Ionen entstünden. Zudem liefern beide Techniken aufgrund der reduzierten Wechselwirkung der Ionen mit ihrer Umgebung unverfälschte („satellitenfreie“) Spektren, und daher symmetrische Linienprofile. Somit werden systematische Fehler, die durch asymmetrische Linienformen entstehen, vermieden.

Da die Vorteile, die sich im sichtbaren Spektralbereich durch die Verwendung kollimierter, schmalbandiger Laserstrahlung mangels geeigneter Quellen noch nicht auf das Röntgengebiet übertragen lassen, ist die Röntgenspektroskopie zum größten Teil noch auf die klassischen, wellenlängendispersiven Verfahren angewiesen. Zur Präzisionsröntgenspektroskopie wurden im Laufe der Zeit verschiedene Kristallgeometrien entwickelt, die sich zum Einsatz an Quellen mit niedrigen Intensitäten, wie z.B. der EBIT, eignen. Bei ihr resultiert der schwache Photonenfluss aus der geringen Plasmadichte und der niedrigen Anregungsrate, wodurch man im Gegenzug die bereits erwähnten satellitenfreie Spektren erhält. Beispiele für Kristallgeometrien sind in Transmission die DuMond-Geometrie sowie in Reflexion die von Hámos- und die Johann-Geometrie, bei denen die Kristalle zylindrisch gekrümmt sind und deshalb die Röntgenstrahlung fokussieren. Bei diesen Geometrien entstehen jedoch meist Abbildungsfehler welche höchste Präzision zumindest sehr erschweren, manchmal sogar verhindern. Zudem beschränkt sich ihre Verwendung kristallspezifisch auf einen

nur sehr kleinen Energiebereich. Um dies zu vermeiden werden in der vorliegenden Arbeit ebene Kristalle verwendet. Üblicherweise werden dann Kollimationsspalte benötigt, um die Einfallrichtung der Röntgenstrahlung und damit die Raumachse für die Kristallwinkelmessung festzulegen. Diese reduzieren jedoch gleichzeitig den nutzbaren Photonfluss erheblich. In dieser Arbeit wurde eine Methode entwickelt, die auf Kollimation verzichtet. Zwei darauf basierende Spektrometer wurden aufgebaut und getestet. Diese sogenannte a/b Methode benutzt Strahlen sichtbaren Lichts als Referenzrichtung, um die Einfallrichtung der Röntgenstrahlung zu ermitteln. Die a/b Methode wurde mit dem älteren von W.L. Bond 1960 entwickelten und nach ihm benannten Bond-Verfahren [Bon60] kombiniert, das Absolutmessungen von Wellenlängen mit ebenen Kristallen ermöglicht. Beides zusammen, die Kombination von a/b und Bond-Verfahren erlaubt erstmalig hochpräzise Absolutmessungen der Wellenlängen von Übergängen in hochgeladenen Ionen bei einer geringen Intensität der Röntgenstrahlung über einen weiten Wellenlängenbereich. Diese Messungen sind deshalb notwendig, da sie zum einen derzeit die einzige Möglichkeit darstellen die Rechnungen der modernen Atomtheorie für diese Übergänge zu testen, ohne dabei auf Sekundärstandards zurückgreifen zu müssen. Zum anderen könnten sie umgekehrt genutzt werden, um neue Röntgenstandards mit hoher Präzision und im Einklang mit theoretischen Rechnungen zu etablieren: Stellt sich bei Erreichen der angestrebten Genauigkeit von 1 ppm oder vielleicht sogar darunter heraus, dass die absoluten Messwerte für wasserstoffartige Ionen mit den theoretischen Vorhersagen übereinstimmen, so hat man damit konsistent einen neuen Standard etabliert. Erste Testmessungen in dieser Arbeit an wasserstoffartigen und heliumartigen Chlor- sowie Argon-Ionen demonstrieren das Potential dieses Messverfahrens. Die erreichte Genauigkeit überbietet bereits die bisher besten Ergebnisse anderer Gruppen, die nach vieljähriger Arbeit erzielt wurden.

Das erste Kapitel dieser Dissertation widmet sich der theoretischen Beschreibung von Eielektronensystemen. Dabei werden die verschiedenen physikalischen Effekte, welche einen Einfluss auf die Bindungsenergie haben, beschrieben, und deren Größe für die in dieser Arbeit vermessenen Ionen berechnet. Das zweite Kapitel gibt einen Überblick über die heutzutage zur Verfügung stehenden Quellen von hochgeladenen Ionen bzw. über die Möglichkeiten diese zu speichern und zu spektroskopieren. Die dabei verwendbaren Messmethoden mitsamt ihrer Vor- und Nachteile werden im darauffolgenden Kapitel 3 aufgezeigt. Kapitel 4 erläutert das neu entwickelte, kollimationsfreie Messverfahren, sowie darin enthaltene mögliche Fehlerquellen, die mit Hilfe einer Vektorsimulation des entwickelten Spektrometers untersucht wurden. Kapitel 5 beschreibt den Aufbau des Spektrometers, sowie die Modifikationen, die gegenüber der ursprünglichen, im Rahmen meiner Diplomarbeit entwickelten und in [Bru05] verwendeten Version durchgeführt werden mussten, um Absolutmessun-

gen mit der Bond-Methode zu ermöglichen. Die Ergebnisse der ersten Testmessung in Kapitel 6 geben den momentanen Stand des Projekts wieder. Die Arbeit schliesst mit einer Zusammenfassung und einem Ausblick.

Kapitel 1

Die Theorie des Wasserstoffatoms

Unsere heutige Vorstellung über den Aufbau der Atome resultiert aus dem Wechselspiel von Experiment und Theorie. Dabei ist es Aufgabe der Theorie, die im Experiment extrahierten Ergebnisse mit mathematischen Modellen quantitativ zu beschreiben. Die in den Modellen enthaltenen Schlussfolgerungen lassen sich auf andere Atome und auch Moleküle übertragen und erlauben Voraussagen für physikalische Messgrößen weiterer Experimente, die entweder das Modell und die darin getroffenen Annahmen bestätigen, oder aber Anstoß zu neuen, modifizierten Modellen geben. So widerlegten z.B. E. Rutherfords Streuversuche von α -Teilchen an einer Goldfolie [Rut11] das Anfang des 20sten Jahrhunderts diskutierte Atommodell von J.J. Thomson, bei dem die positive und negative Ladung des Atoms gleichmäßig sphärisch verteilt ist. Die Ergebnisse von E. Rutherford lassen sich nur mit einem schweren, positiv geladenen Kern im Zentrum des Atoms erklären, der in der Lage ist die α -Teilchen zurückzustreuen.

Mit der Entwicklung der Quantenmechanik durch E. Schödinger, W. Heisenberg und P.A.M. Dirac, konnten viele wesentliche experimentelle Beobachtungen, wie z.B. die Quantisierung der atomaren Energieniveaus und deren Feinstrukturaufspaltung, erklärt werden. Die Diskrepanz zwischen den Vorhersagen der Dirac-Theorie, nach der Zustände mit gleicher Gesamtdrehimpulsquantenzahl j entartet sind, und den Messungen von Lamb und Retherford, die eine Aufspaltung der $2s_{1/2}$ - und $2p_{1/2}$ -Niveau in atomarem Wasserstoff feststellten, führte zur Entwicklung der Quantenelektrodynamik (QED). Diese beschreibt die Wechselwirkung geladener Teilchen (Elektronen, Kerne) untereinander sowie mit dem Strahlungsfeld im Rahmen einer Quantenfeldtheorie durch den Austausch von Photonen. Mit der QED lassen sich atomare Eigenschaften, wie z.B. die atomaren Energieniveaus, der g -Faktor des Elektrons oder die Lebensdauer angeregter Zustände, mit einer derart hohen Genauigkeit beschreiben, dass ihre Vorhersagen als die genauesten aller physikalischer Theorien gelten. Folg-

lich sind nur Experimente mit höchster Präzision in der Lage die QED zu testen und ihren Gültigkeitsbereich zu prüfen. Bei moderaten elektromagnetischen Feldstärken, wie sie im Wasserstoffatom herrschen, besteht eine hervorragende Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment. Hier wurde in der Gruppe von T.W. Hänsch (Nobelpreis 2005) die $1s$ - $2s$ Übergangsenergie von atomarem Wasserstoff mit einer relativen Genauigkeit von $1.4 \cdot 10^{-14}$ gemessen [FKZ⁺04, NHR⁺00, Fis04]. Der relative QED-Beitrag zu dieser Energie beträgt $3 \cdot 10^{-6}$.

Zum Test der QED in starken Feldern und zum Vermessen relativistischer Effekte eignen sich insbesondere hochgeladene Ionen, da in ihnen große Feldstärken von bis zu $10^{17} \frac{V}{cm}$ (U^{91+}) herrschen und zusätzlich, durch die hohe kinetische Energie der Elektronen, relativistische Effekte deutlich stärker als beim Wasserstoff in Erscheinung treten. Hier beträgt die Lambverschiebung des $1s_{1/2}$ Zustandes etwa 466 eV, also $3.5 \cdot 10^{-3}$ der gesamten Bindungsenergie des Zustands.

Vergleicht man allgemein die Messergebnisse zur atomaren Struktur mit den Vorhersagen der Theorie, so ist zu beachten, dass noch weitere physikalische Effekte, die nicht innerhalb der QED behandelt werden, einen Einfluss auf die Bindungsenergie der Elektronen haben. Dazu zählt z.B. die Mitbewegung des Kerns, der beim Wasserstoff im Vergleich zum Elektron eine ~ 1836 mal höhere Masse besitzt und nicht, wie oft zur Vereinfachung angenommen, unendlich schwer ist und damit bewegungslos in der Mitte eines Zentralpotentials ruht. Auch die mit der Kernladungszahl Z zunehmende Ausdehnung der Ladungsverteilung des Kerns, der nicht als punktförmig angenommen werden kann, die Verteilung des magnetischen Moments und vieles mehr, führen zu einer Korrektur der Bindungsenergie. Da nur in den einfachsten Fällen die Ansätze, mit denen das Ausmaß dieser Effekte bestimmt wird, analytisch lösbar sind, verwendet man im Allgemeinen Störungstheorie, d.h. die Energiezustände der Elektronen werden erst im ungestörten Fall berechnet und anschließend die jeweilige den Effekten zugrunde liegende Wechselwirkung als Störung in den Hamilton'schen Operator eingeführt. Hierzu werden jedoch oft Näherungen verwendet, deren Gültigkeit experimenteller Bestätigung bedürfen.

Bei Mehrelektronensystemen, im einfachsten Fall Zweielektronensysteme wie Helium und heliumartige Ionen, ist eine analytische Lösung des auftretenden Vielkörperproblems generell nicht mehr möglich. Zum Berechnen der Bindungsenergien der einzelnen Elektronen wurde daher eine Vielzahl von numerischen Methoden entwickelt, die meist jedoch nicht universell einsetzbar sind, also z.B. Näherungen verwenden, die nur bei niedrigen bzw. hohen Kernladungszahlen Z gerechtfertigt sind. Ihr jeweiliger Gültigkeitsbereich lässt sich mit präzisen Messungen überprüfen. Einen Überblick über verschiedene numerische Methoden und ihre Anwendbarkeit gibt [BJ03].

Dieses Kapitel behandelt verschiedene Methoden zur Berechnung der Bindungsenergie des Elektrons in wasserstoffartigen Systemen, da deren absolute Vermessung

Thema dieser Arbeit ist.

1.1 Das Wasserstoffatom und wasserstoffartige Ionen

G. Kirchhoff und R. Bunsen stellten in ihrer gemeinsam verfassten Arbeit bereits 1859 fest, dass Atome nur Licht bestimmter Wellenlängen absorbieren und emittieren können. Diese für eine Atomsorte ganz spezifischen Wellenlängen nennt man Absorptions- bzw. Emissions-Spektren des Atoms. J. Balmer fand bei der Untersuchung des einfachsten Atoms, des Wasserstoffatoms, dass sich dessen Emissionsspektrum durch folgende Formel beschreiben lässt:

$$\frac{1}{\lambda} = Ry \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) . \quad (1.1)$$

Dabei ist $Ry = 109678 \text{ cm}^{-1}$ die Rydbergkonstante und $n_2 \geq n_1 + 1$ positive ganze Zahlen. Bei der Balmer-Serie ist $n_1 = 2$; später wurden jedoch noch weitere Serien entdeckt, wie z.B. die Lyman- ($n_1 = 1$) und die Paschen-Serie ($n_1 = 3$). Zunächst konnten diese Spektren nur durch das Atommodell von Bohr erklärt werden, bei dem sich die Elektronen ausserhalb des Kerns befinden und wie Planeten um den positiven Kern kreisen. Zusätzlich forderte Bohr im Jahr 1913, dass die Elektronen im Widerspruch zur klassischen Elektrodynamik strahlungslos den Kern umlaufen, und dass der Bahnumfang ein ganzzahliges Vielfaches der de Broglie-Wellenlänge des umkreisenden Elektrons entspreche [Boh13, Boh14]. Daraus ergeben sich zulässige Bahnradien $r_n = a_0 \cdot n^2/Z$, wobei $a_0 = 5,2971 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ der Bohr-Radius ist, in dessen Abstand das Elektron des Wasserstoffs im Grundzustand um den Kern kreist.

Ebenfalls im frühen 20. Jahrhundert entwickelten E. Schrödinger, W. Heisenberg und P.A.M. Dirac, gleichfalls durch den von de Broglie formulierten Welle-Teilchen Dualismus inspiriert, die heutige Form der Quantenmechanik [Sch26]. In dieser Theorie wird ein Teilchen nicht durch seine Ortskoordinaten beschrieben, sondern durch eine (komplexe) Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$, deren Quadrat $\Psi(\mathbf{r}, t) \cdot \Psi^*(\mathbf{r}, t)$ die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für das Teilchen zur Zeit t am Ort \mathbf{r} angibt. Die zeitunabhängige Schrödingergleichung für die Wellenfunktion des Elektrons im Coulombfeld des Atomkerns mit der Kernladung Z lautet:

$$\hat{H}\psi_{nlm} = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - \frac{Ze^2}{r} \right) \psi_{nlm} = E_{nlm}\psi_{nlm} . \quad (1.2)$$

Dabei ist \hat{H} der sogenannte Hamilton-Operator, der im wesentlichen die verschiedenen Beiträge zur Teilchenenergie enthält, e die Elementarladung, \hbar die Planck-Konstante und

$$\mu = \frac{m_e \cdot m_K}{m_e + m_K} \quad (1.3)$$

die reduzierte Masse, durch welche die Mitbewegung des Kerns berücksichtigt wird. Die Wellenfunktion ψ_{nlm} beschreibt ein Elektron mit Hauptquantenzahl $n = 1, 2, 3, \dots$, Drehimpulsquantenzahl $l = 0, 1, \dots, n - 1$ und Magnetquantenzahl $m = -l, \dots, l$. Für ein Eielektronensystem kann die Wellenfunktion in einen Radialteil und einen winkelabhängigen Teil aufgespalten werden:

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right) \quad (1.4)$$

Die Energieeigenwerte dieser Wellenfunktion, die nur von der Hauptquantenzahl n abhängen, berechnen sich nach:

$$E_n = -\frac{1}{2}\mu c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \quad (1.5)$$

wobei $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$ die von Sommerfeld eingeführte Feinstrukturkonstante ist. Mit den Energieeigenwerten der Wellenfunktion für Elektronen in unterschiedlich gebundenen Zuständen n_1, n_2, \dots kann die von Balmer empirisch ermittelte Gleichung (1.1) von fundamentalen Prinzipien ausgehend erklärt werden.

Die Schrödingergleichung (1.2) ist jedoch nicht Lorentzinvariant, d.h. die relativistische Abhängigkeit des Elektronenimpulses und der Elektronengesamtenergie wird nicht berücksichtigt. Dem relativistischen Energiesatz $E = \pm \sqrt{p^2 c^2 + m_e^2 c^4}$ folgend entwickelte Dirac das relativistische Analogon zur Schrödingergleichung, die Diracgleichung:

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad ; \quad \hat{H} = \left(c\vec{\alpha}\vec{p} + \vec{\beta}m_e c^2 - e\phi \right) \quad (1.6)$$

Dabei ist $\phi = Ze/r$ das Kernpotential und $\vec{\alpha}$ und $\vec{\beta}$ sind 4×4 Matrizen, die wie folgt definiert sind:

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad , \quad (1.7)$$

welche die 2×2 Einheitsmatrix I und die 2×2 Paulimatrizen enthalten:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.8)$$

1.1. Das Wasserstoffatom und wasserstoffartige Ionen

Die Spur der Matrizen $\vec{\alpha}$ und $\vec{\beta}$ ist dabei gleich 1 und sie erfüllen die Vertauschungsrelation $\vec{\alpha}\vec{\beta} + \vec{\beta}\vec{\alpha} = 0$. Da es sich bei $\vec{\alpha}$ und $\vec{\beta}$ um 4×4 Matrizen handelt, ist die Wellenfunktion ein Vektor mit vier Komponenten:

$$\psi = \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \end{pmatrix}. \quad (1.9)$$

Für das zentrale Coulombpotential Ze/r , wie es im Wasserstoffatom bzw. bei wasserstoffähnlichen Ionen näherungsweise vorliegt, sowie unter Annahme eines unendlich schweren Kernes, kann die Dirac-Gleichung analytisch gelöst werden. Man erhält folgende diskrete Energieeigenwerte

$$E_{n,j} = m_e c^2 \left\{ \left[1 + \left(\frac{Z\alpha}{n - (j + \frac{1}{2}) + \sqrt{(j + \frac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2}} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}} - 1 \right\} \quad (1.10)$$

mit der Gesamtdrehimpulsquantenzahl j , die der Einschränkung $j = |l - s|, \dots, l + s$ unterliegt, wobei die Elektronenspinquantenzahl $s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ aus der Auswertung von Gleichung (1.6) resultiert. Die Feinstrukturaufspaltung zwischen Energieniveaus mit unterschiedlichem Gesamtdrehimpuls j , die anschaulich u.a. durch die Wechselwirkung des Elektronenspins s mit dem Bahndrehimpuls l und durch die relativistische Massenzunahme des Elektrons erklärt wird, läßt sich durch die Dirac-Theorie ohne weitere Annahmen berechnen. Nach Dirac hängt die Bindungsenergie eines Zustandes nur von der Hauptquantenzahl n und der Gesamtdrehimpulsquantenzahl j ab. Eine Entwicklung der Gleichung (1.10) in Ordnungen von $(Z\alpha)$ liefert den Ausdruck

$$E_{n,j} = m_e c^2 \left\{ -\frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} - \frac{(Z\alpha)^4}{2n^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) + \dots \right\}. \quad (1.11)$$

Der erste Term in Gleichung (1.11) entspricht dem nichtrelativistischen Anteil der Bindungsenergie und stimmt daher, unter Berücksichtigung der dort eingeführten reduzierten Masse, mit den Energieeigenwerten der Schrödingergleichung (1.5) überein. Der zweite Term enthält die relativistischen Korrekturen niedrigster Ordnung $(Z\alpha)^2$ und gibt die Größe der Spinbahnwechselwirkung zusammen mit der relativistischen Massenänderung des Elektrons an. Neben den gebundenen Zuständen mit positiven Energieeigenwerten und dem positiven Kontinuum erlaubt die Diracgleichung auch Lösungen im negativen Kontinuum [Dir30]. In Abbildung 1.1 sind diese möglichen Lösungen graphisch dargestellt. Übergänge von den positiven Zuständen, insbesondere des $1s$ -Zustandes, zu den negativen Zuständen sollten unter der Emission eines Photons mit entsprechender Energie grundsätzlich möglich sein. Der

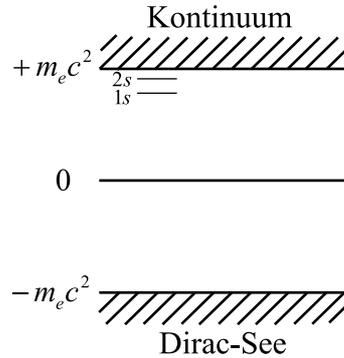


Abbildung 1.1: Mögliche Energiewerte der Dirac-Gleichung sind das positive Kontinuum, der Dirac-See und die gebundenen Zustände (beispielhaft ist der 1s- und 2s-Zustand von wasserstoffartigem Uran eingezeichnet).

1s-Zustand ist jedoch nach allen Erkenntnissen stabil, da ein Übergang aus den positiven in negative Energiezustände noch nie beobachtet wurde. Dirac folgerte daraus, dass alle negativen Niveaus, der sogenannte Dirac-See, bereits mit Elektronen besetzt sei und, dass das Fehlen eines solchen Elektrons sich als ein Elektron mit positiver Ladung manifestiere. Bereits wenige Jahre später wurde Diracs Annahme durch die experimentelle Entdeckung des Positrons durch Anderson bestätigt [And33].

1.2 Die Lambverschiebung

Entgegen der Aussage der Diractheorie, dass Zustände mit gleicher Hauptquantenzahl n und gleicher Gesamtdrehimpulsquantenzahl j energetisch entartet sind (d.h. den gleichen Energieeigenwert besitzen), konnten im Jahre 1947 Lamb und Retherford im Wasserstoffatom eine Energieaufspaltung der Niveaus $2s_{1/2}$ und $2p_{1/2}$ nachweisen [LR47]. In ihrem Experiment regten sie einen atomaren Wasserstoffstrahl mit Hilfe eines Elektronenstrahls in den metastabilen $2s_{1/2}$ Zustand an. Die Anzahl der auf den Detektor auftreffenden angeregten Atome verringerte sich stark, wenn diese ein Mikrowellenfeld mit einer Frequenz von etwa 1000 MHz durchqueren, da hierdurch ein Übergang in den energetisch niedriger liegenden $2p_{1/2}$ Zustand induziert wird, von dem aus ein schneller elektrischer Dipolübergang in den Grundzustand $1s$ erlaubt ist. Dieses Ergebnis, zusammen mit der von Uehling und Serber durchgeführten Berechnung von Energiekorrekturen atomarer Zustände aufgrund der sogenannten Vakuumpolarisation, führte zu der Entwicklung der Quantenelektrodynamik (QED). Der QED zufolge ist die elektrische und magnetische Feldenergie quantisiert, und die Übertragung von Kräften, wie z.B. der Coulombkraft, geschieht durch den Austausch virtueller Photonen. Ursprünglich ist die Lambverschiebung

die zuvor erwähnte energetische Aufspaltung des $2s_{1/2}$ - und $2p_{1/2}$ - Zustandes im atomaren Wasserstoff, doch heute bezeichnet man damit die Summe sämtlicher Abweichungen der Bindungsenergie im Vergleich zu der durch die Diractheorie für ein punktförmigen Kern mit unendlicher Masse vorhergesagten. Diese Abweichungen werden z.B. durch die Ausdehnung und die endliche Masse des Atomkerns sowie durch weitere Strahlungskorrekturen, welche mit Hilfe der QED berechnet werden können, verursacht, und werden im folgenden erklärt. Effekte wie die sogenannte Selbstenergie und Vakuumpolarisation werden im folgenden Abschnitt 1.2.2 im Rahmen der QED erläutert.

1.2.1 Kerneffekte

Der größte Einfluss des Kerns auf die Bindungsenergie nach der Berücksichtigung der Kernmasse (reduzierte Masse) und dessen Spin (Hyperfeinstruktur) wird bei schweren Elementen durch die räumliche Ausdehnung der Kernladung verursacht. Unter der Annahme einer homogen verteilten Ladung bei zunächst unendlich schwerem Kern wurde die Diracgleichung analytisch durch V.M. Shabaev gelöst [Sha93]. Die Verschiebung der Bindungsenergie (in Einheiten von $m_e c^2$) verschiedener Zustände kann innerhalb einer Genauigkeit von 0.2 % mit den folgenden Gleichungen berechnet werden:

$$\Delta E(ns_{1/2}) = \frac{(\alpha Z)^2}{10n} \left[1 + (\alpha Z)^2 f_{ns_{1/2}}(\alpha Z) \right] \left(2 \frac{\alpha Z}{n} \frac{R}{\hbar/m_e c} \right)^{2\gamma}, \quad (1.12)$$

$$\Delta E(np_{1/2}) = \frac{(\alpha Z)^4}{40n} \frac{n^2 - 1}{n^3} \left[1 + (\alpha Z)^2 f_{np_{1/2}}(\alpha Z) \right] \left(2 \frac{\alpha Z}{n} \frac{R}{\hbar/m_e c} \right)^{2\gamma}, \quad (1.13)$$

$$\gamma = \sqrt{1 - (\alpha Z)^2}.$$

Dabei ist $R = \sqrt{5/3} \langle r^2 \rangle^{1/2}$ der Radius der Ladungsverteilung, angenähert in erster Ordnung durch den effektiven Radius (RMS, root mean square [$\langle r^2 \rangle^{1/2}$]) des Kerns. Dieser Radius wird z.B. durch Elektronenstreuung an Atomkernen oder durch Spektroskopie myonischer Atome experimentell bestimmt. Werte für die verschiedenen Elemente sind in [Ang04] angegeben. Die Funktion $f_{nl_{1/2}}$ hat für $n = 1$ bzw. $n = 2$ für verschiedene Kernladungszahlen Z folgende Gestalt:

$$f_{1s_{1/2}}(Z) = 1.380 - 0.162(\alpha Z) + 1.612(\alpha Z)^2, \quad (1.14)$$

$$f_{2s_{1/2}}(Z) = 1.508 + 0.215(\alpha Z) + 1.332(\alpha Z)^2, \quad (1.15)$$

$$f_{2p_{1/2}}(Z) = 1.615 + 4.319(\alpha Z) - 9.152(\alpha Z)^2 + 11.87(\alpha Z)^3. \quad (1.16)$$

Die Energiekorrekturen aufgrund der Kernausdehnung des $1s_{1/2}$ Niveaus für Cl^{16+} und Ar^{17+} liegen im Bereich von ~ 10 meV (Tabelle 1.3) und sind somit bei ei-

ner experimentellen Präzision von 1 ppm (~ 3 meV) durchaus messbar. Für eine Abschätzung der Energieverschiebung des angeregten $2p_{3/2}$ Zustandes bei der Bestimmung der Lyman- α_1 Photonenenergie kann die Formel (1.16) für den $2p_{1/2}$ Zustand verwendet werden. Da der Überlapp der $2p_{3/2}$ Radialwellenfunktion mit dem Kernvolumen geringer ist als derjenige der $2p_{1/2}$ Radialwellenfunktion, ist die Energieverschiebung für den $2p_{3/2}$ Zustand geringer als für den $2p_{1/2}$ Zustand und daher gibt die Formel (1.16) für ersteren eine obere Grenze der Energieverschiebung an [Har06]. Ein Vergleich der Formel (1.12) mit (1.13) ergibt für $Z = 18$ eine um den Faktor ~ 2500 geringere Energieverschiebung für den $2p_{1/2}$ Zustand im Vergleich zum $1s_{1/2}$ Zustand. Daher kann bei Elementen mit $Z \leq 18$ die Energieverschiebung des $2p_{1/2}$ und erst recht die des $2p_{3/2}$ Zustandes hinsichtlich der zum jetzigen Zeitpunkt angestrebten experimentellen Präzision von 1 ppm vernachlässigt werden.

Bei wasserstoffartigem Uran erreichen die Energiekorrekturen aufgrund der Kernausdehnung beim $1s$ -Zustand bereits ein Ausmaß von einigen hundert Elektronenvolt (Tabelle 1.3) und haben daher trotz der geringeren experimentellen Präzision (~ 35 ppm [GSB⁺05]) der Lyman- α_1 Energie, prozentual einen wesentlich größeren Beitrag zur gesamten Lambverschiebung. Hinzu kommt, dass bei solch ausgedehnten Kernen bereits die Annahme über die Form der Ladungsverteilung im Kern die Bindungsenergie beeinflusst. Bei zukünftigen Messungen an schweren Kernen mit einer Genauigkeit von ~ 1 ppm wird dieser Effekt durchaus messbar sein. So unterscheidet sich die Korrektur der $1s_{1/2}$ Zustandsenergie in U^{91+} um 0.36 eV, je nachdem ob eine homogene oder eine Fermi-Ladungsverteilung, bei gleichem effektivem Kernradius, angenommen wird [Sha93].

Kerneffekte, die einen vernachlässigbar kleinen Einfluss auf die $1s$ -Bindungsenergie der in dieser Arbeit vermessenen wasserstoffartigen Ionen (Cl^{16+} und Ar^{17+}) haben, sind unter anderem der relativistische Rückstoß des Kerns und die Auswirkung des Kernvolumens auf die Selbstenergie und die Vakuumpolarisation.

Auch eine durch das gebundene Elektron induzierte Polarisation des Kerns führt zu einer Abweichung der Bindungsenergie. Berechnungen hierzu zeigen, dass dies nur bei Kernen mit hoher Kernladungszahl Z , die aufgrund ihrer Größe leichter verformbar sind, einen deutlichen Einfluss hat, so z.B. beim wasserstoffartigen Uran ($\Delta E_{1s_{1/2}} \sim 1$ eV) [PMGS89, NLPS96].

1.2.2 Quantenelektrodynamik

Die QED beschreibt die Wechselwirkung zweier geladener Teilchen durch den Austausch virtueller Photonen, sowie die Wechselwirkung mit dem quantisierten elektrischen und magnetischen Feld. Dabei gibt die Ordnung α^n mit $n = 1, 2, 3, \dots$ die Anzahl der ausgetauschten virtuellen Photonen an. Die QED kann entsprechend

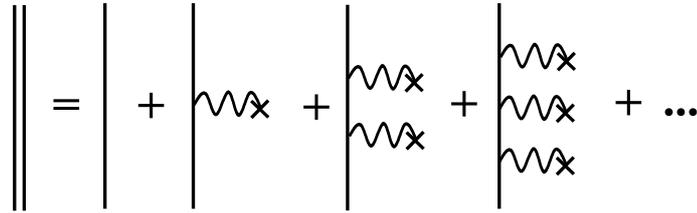


Abbildung 1.2: In störungstheoretischer Behandlung des freien Elektrons im Kernfeld wird der Kern als \times , das virtuelle Photon als Wellenlinie und das frei propagierende Elektron als eine durchgezogene Linie gezeichnet. Gebundene Zustände werden im Furry-Bild durch eine doppelt durchgezogene Linie symbolisiert, die eine Summation aller möglichen Wechselwirkungen des Elektrons mit dem Kern darstellt.

der mathematischen Ansätze generell in zwei Bereiche unterteilt werden: zum einen den „traditionellen“ störungstheoretischen Bereich, der meist bei niedrigen Kernladungszahlen Z Anwendung findet und daher eine große Bedeutung bei der Bestimmung von Naturkonstanten aus den experimentell ermittelten Übergangsenergien im Wasserstoffatom besitzt, und den sogenannten All-Order-Bereich (All-Order = alle Ordnungen), der für Kerne mit hoher Ladungszahl Z zuverlässige Aussagen erlaubt und die QED in den dort vorkommenden starken Feldern beschreibt. Bei ersterem wird das im Feld des Kerns gebundene Elektron als quasifreies Teilchen behandelt und das Kernfeld als eine Störung hinzugefügt. Zur Berechnung der Energieeigenwerte wird diese Störung in Terme von $(Z\alpha)^n$, also in Potenzen n der sogenannten Kopplungskonstante, entwickelt. Bei Erreichen der gewünschten Präzision wird die Reihenentwicklung abgebrochen. Der All-Order-Bereich vermeidet die Entwicklung in $(Z\alpha)^n$ und benutzt daher keine solche Näherung. In diesem Bereich wird das Kernfeld von Beginn an in die Berechnung mit einbezogen und zwar in die Wellenfunktion des gebundenen Elektrons, sogenannte Coulombwellen, sowie auch in dessen Propagator. Daraus ergeben sich gebundene Zustände, die zur weiteren Berechnung der Vakuumpolarisation- und Selbstenergie-Korrekturen als Ausgangspunkt dienen; dies bezeichnet man als Furry-Bild. Abbildung 1.2 zeigt die Darstellungsweise der gebundenen Zustände im Furry-Bild mit Hilfe von Feynmandiagrammen. Diese graphische Darstellungen dienen der Veranschaulichung der Wechselwirkung und stellen gleichzeitig eine Abkürzung des mathematischen Formalismus dar.

Ein Vergleich zwischen der Selbstenergie des Elektrons (die im nächsten Abschnitt beschrieben wird), einerseits berechnet mit der Störungstheorie und andererseits mit der All-Order-Theorie, zeigt Abbildung 1.3. Dort dargestellt ist das Verhältnis R :

$$R = \frac{\Delta E(Z\alpha) - \tilde{E}(Z\alpha)}{\Delta E(Z\alpha)} . \quad (1.17)$$

Dabei ist $\Delta E(Z\alpha)$ die Selbstenergiekorrektur in allen Ordnungen von $(Z\alpha)$ [Moh92] und $\tilde{E}(Z\alpha)$ die störungstheoretisch berechnete Energiekorrektur mit einer Entwick-

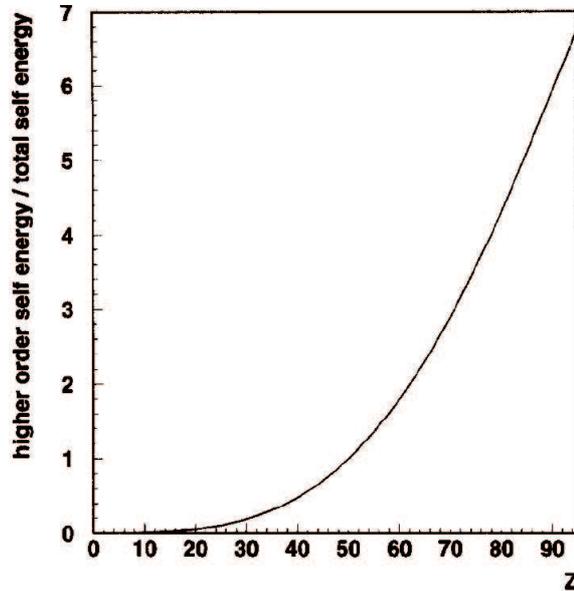


Abbildung 1.3: Verhältnis der Beiträge höher Ordnung in $(Z\alpha)$ im Vergleich zur totalen Selbstenergie als Funktion der Kernladungszahl Z [MPS98].

lung bis zu den Termen $(Z\alpha)^6$ [MPS98]. In der Abbildung ist zu erkennen, dass für Elemente mit kleiner Kernladungszahl die Störungstheorie genügt. Bereits bei $Z \sim 20$ ist jedoch eine deutliche Abweichung der Ergebnisse der verschiedenen Rechenwege zu erkennen, und ab $Z \sim 50$ übersteigt diese bereits das Ausmaß der eigentlichen Selbstenergiekorrektur, was die Bedeutung von Termen höherer Ordnung in $(Z\alpha)$ für hohe Z verdeutlicht.

Die Selbstenergiekorrektur

Eine physikalisch anschauliche Erklärung für die Selbstenergiekorrektur ergibt sich nach der QED durch eine ständige Emission und Absorption virtueller Photonen durch ein gebundenes Elektron. Im Rahmen der Heisenberg'schen Unschärferelation $\Delta E \cdot \Delta t \leq \hbar$ stellt dieser Prozess keine Verletzung der Energieerhaltung dar. Dieser Effekt ist umso stärker, je näher sich das Elektron am Kern befindet. Dies lässt sich klassisch mit der sehr hohen Beschleunigung, die das Elektron in Kernnähe erfährt erklären, da dies nach den Gesetzen der klassischen Elektrodynamik zur Emission von Strahlung führt. In der QED wird jedoch das emittierte virtuelle Photon sofort wieder absorbiert. Durch solche Vakuumfluktuationen des elektromagnetischen Feldes, d.h. durch Emission und Absorption virtueller Photonen, erscheint die Ladung des Elektrons nicht mehr als punktförmig, sondern über ein kleines Volumen

verteilt. Der daraus resultierende, endliche Elektronenradius führt zu einer Korrektur des Coulombfeldes δV , da sich die Stärke des Coulombfeldes ($\sim \frac{1}{r^2}$) über die räumlich verteilte Ladung des Elektrons verändert. Die Korrektur δV kann gemäß

$$\delta V = \frac{2\pi}{3} Z\alpha \langle r^2 \rangle \delta(\vec{r}) \quad (1.18)$$

abgeschätzt werden [EGS01]. Die daraus resultierende Energieverschiebung ist dann durch das Matrixelement dieser Störung gegeben. Da diese Störung insbesondere am Ursprung des Coulombfeldes einen nennenswerten Beitrag liefert, führt dies zu einer Aufhebung der Entartung der Dirac Energieniveaus im Coulombfeld, da die Elektronen in Abhängigkeit von der Drehimpulsquantenzahl l unterschiedliche Aufenthaltswahrscheinlichkeiten am Feldursprung besitzen. Zustände mit gleicher Hauptquantenzahl j und verschiedenen Drehimpulsen l weisen somit aufgrund der Selbstenergie verschiedene Korrekturbeiträge auf, wodurch ihre Entartung aufgehoben wird. Eine einfache Abschätzung der Energieverschiebung für ein s -Niveau ($l = 0$) ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \delta E &= \langle ns | \delta V | ns \rangle \approx |\Psi_n(0)|^2 \frac{2\pi Z\alpha}{3} \langle r^2 \rangle \\ &\approx \frac{4m(Z\alpha)^4}{n^3} \ln [(Z\alpha)^{-2}] \delta_{l_0|n=2} \approx 1330 \text{ Mhz (H - Atom)}. \end{aligned} \quad (1.19)$$

Für das Wasserstoffatom erreicht man hiermit schon eine recht gute Abschätzung des experimentellen Wertes der Lambverschiebung (~ 1040 Mhz). Das Vorzeichen der Energiekorrektur erklärt sich anschaulich dadurch, dass das Elektron im Coulombfeld räumlich etwas verteilt erscheint und deshalb nicht mehr so stark gebunden ist, d.h. die Bindungsenergie reduziert sich, bzw. die Zustandsenergie wird erhöht. Der logarithmische Beitrag in Gleichung (1.19) (nichtlogarithmische Beiträge fehlen bei dieser groben Abschätzung) liefert bei Energiekorrekturen in der QED immer den signifikanten Beitrag. Der Feynmangraph der Selbstenergie ist in Abbildung 1.4a zu sehen.

Nur mit Hilfe der All-Order-Rechnungen läßt sich die Selbstenergiekorrektur besonders für schwerere Elemente ($Z > 20$) zuverlässig berechnen, und wird durch folgenden Ausdruck als Funktion von $Z\alpha, R$ zusammengefasst [MPS98]:

$$\delta E_{nlj}^{SE} = \frac{\alpha}{\pi} \frac{(Z\alpha)^4}{n^3} F_{nlj}(Z\alpha, R) m_e c^2 \quad (1.20)$$

In der Tabelle 1.1 sind die Werte der Funktion $F(Z\alpha, R)$ für das $1s$ -Niveau verschiedener wasserstoffartiger Ionen angegeben. Die Selbstenergiekorrektur wird auch in geringem Maße durch die endliche Ausdehnung der Kernladung beeinflusst, weshalb die Funktion $F(Z\alpha, R)$ vom effektiven Kernradius $R = \sqrt{\langle r^2 \rangle}$ (RMS) abhängt. Dieser Einfluss wurde bei den schweren Elementen Blei und Uran in der Tabelle bereits

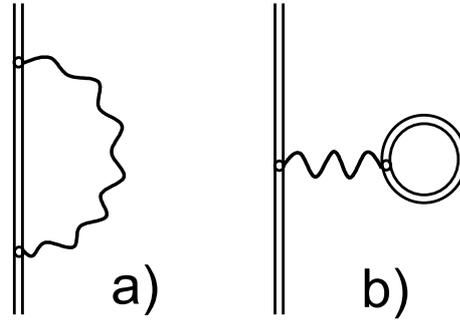


Abbildung 1.4: Feynmangraphen für die Selbstenergie (a) und die Vakuumpolarisation (b) im Furry-Bild.

berücksichtigt, liegt jedoch bei Elementen mit $Z < 54$ unterhalb der numerischen Präzision. Hierbei wurde eine gleichförmige Ladungsverteilung im Kern angenommen.

Tabelle 1.1: Werte der Funktion $F(Z\alpha, R)$ für den $1s$ -Zustand verschiedener wasserstoffartiger Ionen zusammen mit dem effektiven Kernradius R [MPS98].

Ion	Fe^{25+}	Kr^{35+}	Pb^{81+}	U^{91+}
$F(Z\alpha, R) 1s$	0.094720(1)	0.178506(1)	0.654493(1)	0.797701(1)
R (fm)	3.730	4.230	5.505	5.863

Die Vakuumpolarisationskorrektur

Eine weitere Korrektur der Zustandsenergie in der gleichen Ordnung ($Z\alpha$) wie die Selbstenergie liefert die Vakuumpolarisation. Die virtuellen Photonen, die das Elektron mit dem Vakuum austauscht, erzeugen wiederum virtuelle Elektron-Positron-Paare, die durch das vorhandene elektrische Feld des Kerns eine Ausrichtung erfahren. Dies bedeutet eine Polarisation des Vakuums. Die dadurch bedingte Änderung des Potentials V ist näherungsweise gegeben durch [EGS01]:

$$\delta V = -\frac{4}{15} \frac{\alpha(Z\alpha)}{m^2} \delta(\vec{r}) . \quad (1.21)$$

Daraus folgt die Korrektur des Energieeigenwertes:

$$\begin{aligned} \delta E &= \langle ns | \delta V | ns \rangle = - |\Psi_n(0)|^2 \frac{4\alpha(Z\alpha)}{15m^2} \\ &= \frac{4m(Z\alpha)^4}{n^3} \frac{\alpha}{15\pi} \delta_{l0|n=2} \approx -30 \text{ Mhz} \quad (\text{H} - \text{Atom}). \end{aligned} \quad (1.22)$$

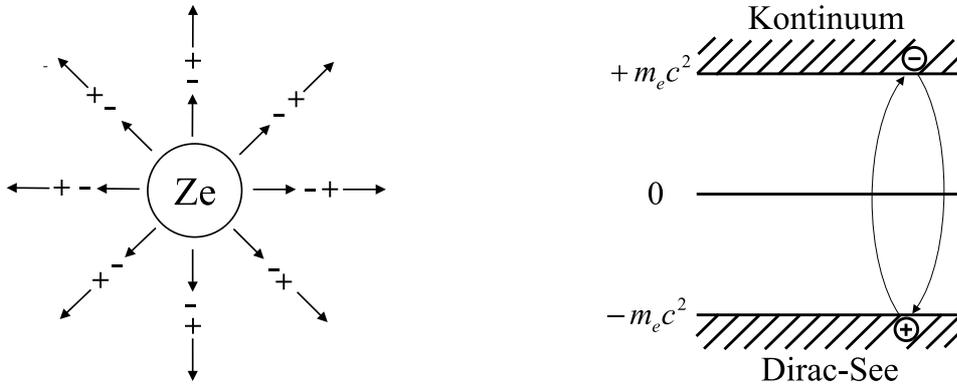


Abbildung 1.5: Links: Anschauliche Darstellung der Vakuumpolarisation. Rechts: Erzeugung und Vernichtung eines Elektron-Positron-Paars.

Die Modifikation des Coulombfeldes durch die Vakuumpolarisation kann man sich wie eine Modifikation der Kernladung vorstellen. Um den Kern herum entsteht eine Ladungsverteilung wie sie in Abb. 1.5 zu sehen ist. Dringt nun das Elektron in diese sogenannte Polarisationswolke ein (zwischen Kern und das virtuelle Elektron-Positron-Paar), wirkt auf dieses eine elektrische Kraft, die von einer effektiv höheren Kernladung herzurühren scheint. Es kommt daher zu einer stärkeren Bindung des Elektrons, d.h. die Energie eines Zustandes wird durch die Vakuumpolarisation abgesenkt. Der Beitrag dieser Korrektur ist jedoch geringer als derjenige der Selbstenergie, und so führen die gesamten Strahlungskorrekturen der QED zu einer Anhebung der Zustandsenergie. Der Feynmangraph für die Vakuumpolarisation ist in Abb. 1.4b zu sehen.

Das Uehlingpotential

Da bei schweren Kernen präzise Ergebnisse nur mit All-Order-Rechnungen erreicht werden, ist bei diesen zu beachten, dass ein virtuelles Elektron-Positron-Paar (Vakuumpolarisation) bei der Wechselwirkung mit dem Kern durchaus mehrere virtuelle Photonen austauschen kann. Daher ist eine weitere Entwicklung in $Z\alpha$ notwendig, um die Energieverschiebung durch die Vakuumpolarisation exakt bestimmen zu können. Das Uehling-Potential ist dabei die Korrektur des Coulombfeldes, bei dem nur ein virtuelles Photon ausgetauscht wird, und ist von der Ordnung $\alpha(Z\alpha)$. Allgemein hat es für eine punktförmige Ladung folgende Gestalt [MPS98]:

$$V_U(r) = \frac{2\alpha(Z\alpha)}{3\pi} \frac{1}{r} \chi_1(2r/\lambda_c) \quad , \quad (1.23)$$

$$\text{VP} = \text{Uehling}_{\alpha(Z\alpha)} + \text{Wichman-Kroll}_{\sum_n \alpha(Z\alpha)^n \quad n=3,5,\dots} + \dots$$

Abbildung 1.6: Zusammensetzung der Vakuumpolarisation durch den Austausch mehrerer virtueller Photonen mit dem Kern.

mit der Comptonwellenlänge $\lambda_c = \frac{\hbar}{m_e c}$ und der speziellen Funktion

$$\chi_1(z) = \left(1 + \frac{z^2}{12}\right) K_0(z) - \left(\frac{5z}{6} + \frac{z^3}{12}\right) K_1(z) + \left(\frac{3z}{4} + \frac{z^3}{12}\right) K_{i_1}(z). \quad (1.24)$$

Bei $K_0(z)$ und $K_1(z)$ handelt es sich um modifizierte Besselfunktionen, und bei $K_{i_1}(z)$ um ein Besselfunktionsintegral [AS65].

Für $r \rightarrow \infty$ ergibt sich die asymptotische Näherung

$$V_U(r) = \frac{\alpha(Z\alpha)}{4\sqrt{\pi}} \frac{e^{-r/\lambda_c}}{(r/\lambda_c)^{5/3}}, \quad (1.25)$$

bei der es sich um ein kurzreichweitiges Potential handelt, die man als eine Modifikation des Coulombfeldes betrachten kann. Die Energieverschiebung berechnet sich dann mit

$$\Delta E = \int_0^\infty r^2 (f_1^2 + f_2^2) V_U(r) dr, \quad (1.26)$$

wobei es sich bei f_1 und f_2 um die große und kleine Komponente der radialen Diracwellenfunktion handelt.

Die Wichman-Kroll Korrektur

Alle Beiträge höherer Ordnung in $(Z\alpha)^n$, wobei nach dem Furry-Theorem nur ungerade Terme einen Beitrag liefern, werden in der sogenannten Wichman-Kroll-Korrektur zusammengefasst, deren Beitrag sich wie folgt berechnet:

$$\Delta E = \frac{\alpha(Z\alpha)}{\pi} \frac{H_{3+}(Z\alpha)}{n^3} m_e c^2. \quad (1.27)$$

Dabei handelt es sich bei $H_{3+}(Z\alpha)$ um eine dimensionslose Zahl, die für den 1s-Zustand für beispielhafte Elemente in Tabelle 1.2 angegeben ist.

1.2. Die Lambverschiebung

Tabelle 1.2: Werte der Funktion H_{3+} für den $1s$ -Zustand verschiedener wasserstoffartiger Ionen [MPS98].

Ion	Zn^{29+}	Kr^{35+}	Pb^{81+}	U^{91+}
H_{3+}	0.0020	0.0027	0.0150	0.0206

Die Wichman-Kroll-Korrekturen der Bindungsenergie des $1s$ -Zustandes sind für Cl^{17+} und Ar^{17+} bei der in unserem Experiment angestrebten Präzision von 1 ppm nicht nachweisbar (≤ 0.1 ppm). Bereits für Kr^{35+} erreichen sie jedoch eine Größe von ~ 1 ppm, und bei wasserstoffartigem Uran liegen sie gar im Bereich der derzeitigen experimentellen Genauigkeit von ~ 5 eV [GSB⁺05].

Bei der bereits erreichten und in Zukunft noch zu erwartenden, höheren experimentellen Präzision bei schweren Elementen, insbesondere bei Uran, müssen noch weitere QED-Korrekturen zur Bindungsenergie berücksichtigt werden. Diese werden dadurch verursacht, dass das Elektron mehrere virtuelle Photonen emittieren und reabsorbieren kann. In dem Fall von zwei Photonen spricht man von Zweischleifen-Korrekturen. Die Feynmandiagramme dieser Beiträge in der zweiten Ordnung von α sind in Abbildung 1.7 dargestellt und führen z.B. bei U^{91+} zu einer Energieverschiebung von 0.6 ± 1.3 eV [YAB⁺03]. Die große Unsicherheit bei diesem Wert ist durch die Komplexität der Berechnungen der SESE-Diagramme (b) und (c) in Abbildung 1.7 bedingt. Solche Rechnungen wurden bisher z.B. von Goidenko *et al.* durchgeführt [GLN⁺01]. Zusammenfassend sind in der Tabelle 1.3 die wichtigsten Beiträge zur $1s$ -Lambverschiebung für die Elemente Chlor, Argon und Uran angegeben.

Einen abschließenden Überblick über die einzelnen Beiträge der Lambverschiebung

Tabelle 1.3: Beiträge zur Grundzustands-Lambverschiebung für wasserstoffartige Chlor-, Argon- und Uran-Ionen in eV.

Ion	Cl^{16+} [JS85]	Ar^{17+} [JS85]	U^{91+} [YAB ⁺ 03, MPS98]
Kernausdehnung	0.007	0.009	198.81 ± 0.38
Selbstenergie	1.000	1.218	355.05
Uehling	- 0.068	- 0.086	-93.58
Wichmann-Kroll	$2 \cdot 10^{-4}$	$2.8 \cdot 10^{-4}$	4.99
höhere Ordnung	$3.7 \cdot 10^{-4}$	$4.6 \cdot 10^{-4}$	0.59 ± 1.3
Lambverschiebung	0.94	1.143	$466.11 \pm 0.39 \pm 1.3$

des $1s$ -Niveaus wasserstoffartiger Ionen in Abhängigkeit von der Kernladungszahl Z ist in Abbildung 1.8 gegeben. Zu beachten ist hierbei, dass die Beiträge die durch

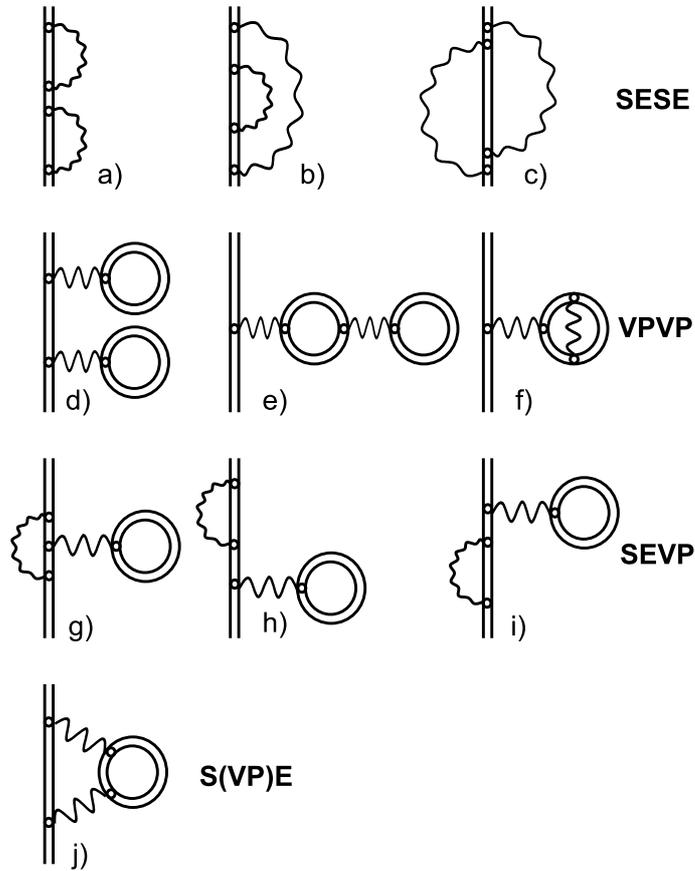


Abbildung 1.7: Feynmandiagramme für die Zweischleifenkorrekturen.

die Kernaussdehnung (F.S.) verursacht werden, bei den schwersten Kernen nahezu das Ausmaß der Selbstenergiekorrektur erreichen, wie dies auch aus den Werten für Uran in Tabelle 1.3 hervorgeht. Deshalb ist bei diesen Elementen bei der Berechnung der Lambverschiebung bereits die Annahme über die Ladungsverteilung im Kern von Bedeutung bzw. unter Annahme der Korrektheit der Theorie können Messungen der Lambverschiebung Aussagen über die Ladungsverteilung im Kern geben. Der starke Anstieg des Kernbeitrags bei Elementen mit $Z \leq 10$ ist durch die große Änderung des effektiven Kernradius mit jedem weiteren Nukleon begründet. Wie bereits erwähnt hat die Kernaussdehnung auch einen Einfluss auf die Selbstenergiekorrektur und das Uehlingpotential. Diese Korrektur ist entsprechend mit S-FS und U-FS gekennzeichnet und übersteigt bei schweren Kernen die Wichman-Kroll Korrektur.

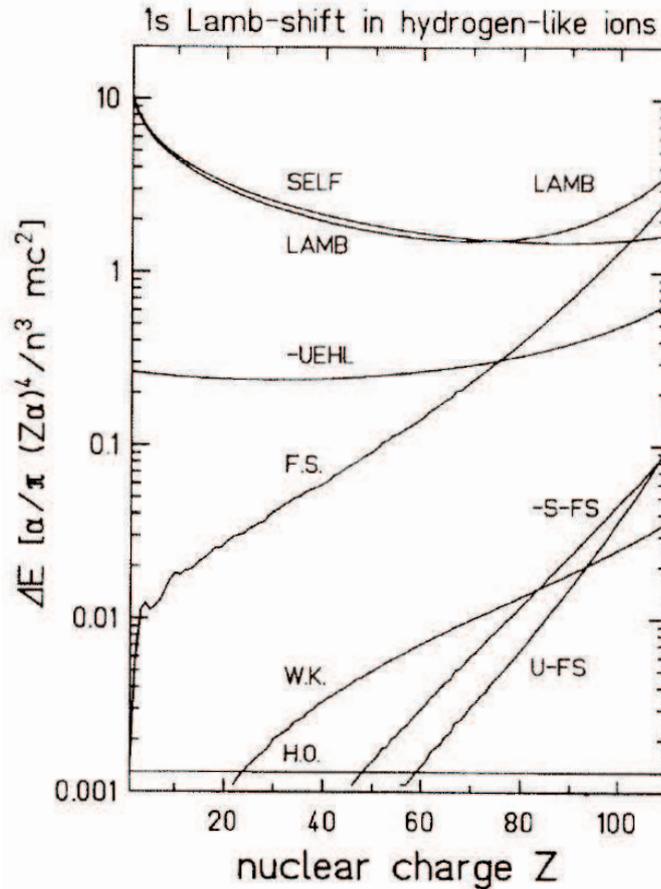


Abbildung 1.8: Beiträge zur Lambverschiebung des 1s-Niveaus in wasserstoffartigen Ionen in Abhängigkeit von der Kernladungszahl Z [JS85]. Die Energieverschiebung ΔE ist in Einheiten von $(\alpha/\pi)[(Z\alpha)^4/n^3]m_e c^2$ angegeben. Hierbei wurden folgende Bezeichnungen verwendet: LAMB ist die gesamte Lambverschiebung bestehend aus der Summe der Einzelbeiträge, SELF ist die Selbstenergieverschiebung unter der Annahme eines punktförmigen Kerns, -UEHL ist das Uehlingpotential eines punktförmigen Kerns, F.S. (Field Shift) sind die Korrekturen aufgrund der Kernaushdehnung, -S-FS und U-FS sind entsprechende Korrekturen zur Selbstenergie und zur Vakuumpolarisation, W.K. sind die Wichman-Kroll Korrekturen und H.O. die Beiträge höherer Ordnung in α durch den Austausch von zwei Photonen. Die meisten Beiträge, wie die gesamte Lambverschiebung selbst, führen zu einer Anhebung der Zustandsenergie (einer Reduktion der Bindungsenergie), mit Ausnahme der mit - gekennzeichneten Beiträge.

1.2.3 Experimentelle Werte der Lambverschiebung

Um die theoretische Berechnung der Lambverschiebung überprüfen zu können, wurde bisher von verschiedenen Gruppen eine Vielzahl von Experimenten an wasserstoffartigen Ionen mit unterschiedlicher Kernladungszahl Z durchgeführt. Diese Messungen reichen vom Wasserstoffatom bis hin zu H-ähnlichem Uran. Hierbei werden

jedoch, bedingt durch die jeweilige Wellenlänge der emittierten Lyman- α Strahlung und somit durch die zur Verfügung stehende Technik, sehr unterschiedliche Präzisionen erreicht. Die Laserspektroskopie erlaubt die höchste Präzision ($1.4 \cdot 10^{-14}$ [FKZ⁺04]), jedoch ist der Einsatz dieser Methode bis heute nur im sichtbaren Spektralbereich bzw. nahen ultraviolett- und infrarot- Bereich möglich. Bei Übergängen mit einer Energie von $\sim 1 - 20$ keV werden, wie auch in dieser Arbeit, Kristallspektrometer in Reflexionsgeometrie (Abschnitt 3.1.4) verwendet, und die höchste bisher erreichte Präzision von 5 ppm [BDFL85] ist auch die einzige Messung besser als 10 ppm überhaupt. Bei noch höheren Übergangsenergien von bis zu ~ 100 keV wurden bisher meist Germaniumdetektoren (Abschnitt 3.1.1) eingesetzt, jedoch wird hier in Zukunft eine höhere Präzision mit Kristallspektrometern in Transmissionsgeometrie (z.B. das FOCAL an der GSI [BSB⁺]) erwartet.

Ein Vergleich der bisher durchgeführten Messungen der Lambverschiebung ΔE_{1s} mit den theoretisch berechneten Werten ist in Abbildung 1.9 zu sehen. In diesem Diagramm ist die relative Abweichung $(\Delta E_{1s}^{exp} - \Delta E_{1s}^{theo})/\Delta E_{1s}^{theo}$ gegen die Kernladungszahl Z zusammen mit den Fehlern, die in erster Linie vom Experiment stammen, aufgetragen. Zu erkennen ist, dass die Theorie mit allen Experimenten innerhalb der Fehlergrenzen übereinstimmt. Besonders gut ist diese Übereinstimmung bei Wasserstoff ($Z = 1$), der störungstheoretisch mit höchster Präzision berechnet werden kann, und bei Uran ($Z = 92$), wo mit Hilfe der All-Order-Rechnungen sehr gute Voraussagen möglich sind. Im gesamten Bereich dazwischen weisen die Experimente z.T. eine wesentlich geringere Präzision auf. Sollen Übergänge in wasserstoffartigen Ionen als zukünftige Röntgenstandards dienen (Abschnitt 3.3), müssen die entsprechenden Rechnungen noch hinreichend genau getestet werden. Zu beachten ist hierbei, dass es sich nur bei den Messungen an den Elementen Magnesium ($Z = 12$) und Silizium ($Z = 14$) um Absolutmessungen ohne Rückgriff auf Sekundärstandards handelt, und dass diese noch nicht die erforderliche Präzision aufweisen, um einen neuen Röntgenstandard zu etablieren. Hierzu ist eine Präzision von ~ 1 ppm notwendig, was mit dem in dieser Arbeit aufgebauten Kristallspektrometer in naher Zukunft erreicht werden soll.

1.2. Die Lambverschiebung

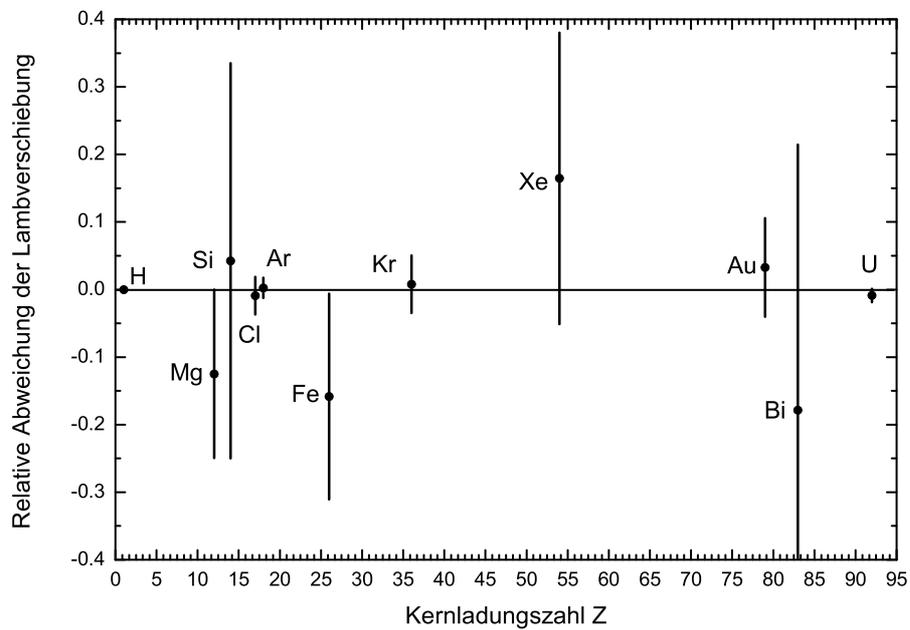


Abbildung 1.9: Vergleich der Lambverschiebung zwischen Theorie und Experiment. Folgende Quellen wurden verwendet: Wasserstoff ($Z = 1$) [FKZ⁺04], Magnesium ($Z = 12$) [HFK⁺98], Silizium ($Z = 14$) [TKB⁺02], Chlor ($Z = 17$) [Bru05], Argon ($Z = 18$) [BDFL85], Eisen ($Z = 26$) [BMI⁺83a], Krypton ($Z = 36$) [TBI⁺85], Xenon ($Z = 54$) [BIS⁺89], Gold ($Z = 79$) [BLB⁺94], Wismut ($Z = 83$) [SMG⁺92], Uran ($Z = 92$) [GSB⁺05].

Kapitel 2

Hochgeladene Ionen im Labor

Zur Produktion hochgeladener Ionen ist es notwendig, beginnend vom zunächst neutralen Atom sukzessive immer mehr Elektronen zu entfernen. Während die Elektronen in den äußeren Schalen nur relativ leicht gebunden sind, nimmt die Bindungsenergie zu tiefer liegenden Zuständen hin stark zu. Gelangt man beim Entfernen der Elektronen an eine abgeschlossene Schale, steigt die Bindungsenergie sprunghaft an, und somit auch der Energieaufwand für weitere Ionisationsprozesse. Für die in dieser Arbeit untersuchten Elemente Chlor und Argon sind die Bindungsenergien ausgewählter Elektronenkonfigurationen in der Tabelle 2.1 angegeben. Zu erkennen ist der überproportionale Anstieg der Bindungsenergie in den He- bzw. Ne-artigen Edelgaskonfigurationen im Vergleich zur den Alkali- und Erdalkalikonfigurationen Li-, Be- bzw. Na- und Mg-artig.

Der in technischen Anwendungen sowie in Plasmen meist dominierende physikalische Prozess zum Erzeugen hochgeladener Ionen ist die Elektronenstoßionisation. Je nach der beim Stoß zwischen Projektil- und Targetelektron übertragenen Energie wird das Targetelektron entweder in einen angeregten (gebundenen) Zustand gebracht oder ins Kontinuum befördert. Bei letzterem Vorgang erhöht sich der Ladungszustand des Ions (Atoms) im Allgemeinen um eine Einheit. Realisiert wird die Elektronen-

Tabelle 2.1: Ionisationspotentiale in eV der Ionen Chlor und Argon für verschiedene Ladungszustände [TV01]. In Klammern ist die Konfiguration angegeben, dabei bedeutet: H = wasserstoffartig, He = heliumartig, usw.

Elektron	12 (Mg)	11 (Na)	10 (Ne)	...	4 (Be)	3 (Li)	2 (He)	1 (H)
Chlor	96.84	114.20	348.5	...	750.5	809.2	3658	3946
Argon	124.24	143.46	422.8	...	855.8	918.4	4121	4426

stoßionisation mittels verschiedener Methoden, die sich zur Produktion, Anregung und evtl. zur späteren Speicherung von hochgeladenen Ionen (HCI) unterschiedlich gut eignen.

Bei der sogenannten Beam-Foil-Technik werden Ionen mit geringem Ladungszustand auf eine sehr hohe Geschwindigkeit beschleunigt und anschließend durch ein Gas oder einen Festkörper gelenkt, in dem die Elektronen der Targetatome durch Stöße mit den Projektilelektronen wechselwirken und diese ionisieren. In einer *electron beam ion trap* (EBIT) werden anstatt der Ionen die Elektronen beschleunigt und der entstehende Elektronenstrahl auf mehr oder mindergeladene Atome bzw. Ionen gerichtet, die nur eine geringe, ungerichtete thermische Energie besitzen. Im Vergleich hierzu verwendet man bei einer Elektron-Zyklotron-Resonanz-Ionenquelle (ECR-Quelle) keinen Elektronenstrahl, sondern Plasmaelektronen, die ihre Energie aus einem Mikrowellenfeld erhalten. Diese kreisen auf Zyklotronbahnen, die durch ein äußeres Multipol-Magnetfeld erzwungen werden. Auch bei dieser Quelle besitzen die Ionen nur eine thermische Geschwindigkeit. Die Ionisation in einem Tokamak geschieht ebenfalls durch Elektronenstoß, hier in einem thermischen Plasma. Ionen die in das Plasma des Tokamaks injiziert werden, wechselwirken mit den Plasmaelektronen, deren thermische Energie im Bereich einiger keV liegt.

Weitere Methoden zu Ionisation sind der Stoß schneller, hochgeladener Ionen mit neutralen Atomen, wobei sehr effizient sehr „kalte“ hochgeladene Targetionen bei niedrigen Z erzeugt werden (Rückstoßionenquelle [BDFL85]) sowie der Elektronenaustausch bei niedrigen Geschwindigkeiten. Wird ein Atom nicht „zu schnell“ (nicht viel schneller als die Orbitgeschwindigkeit des betrachteten Elektrons) nah an ein zuvor erzeugtes hochgeladenes Ion gebracht, kommt es durch das starke elektrische Feld des hochgeladenen Ions zu einem Elektronenaustausch, und das zuvor neutrale Atom wird ionisiert. Eine besondere Art hochgeladene Ionen zu erzeugen geschieht durch den Einfang von Antiprotonen oder Myonen. Diese kaskadieren nach dem Einfang in hohe Rydbergzustände in den Grundzustand, und dabei werden die noch vorhandenen Elektronen im Atom durch Augerprozesse ionisiert. Da die Myonen eine ~ 206 und Antiprotonen eine 1836 fache Elektronenmasse haben, ergeben sich viel höhere Bindungsenergien (vergl. Kapitel 1), die für diese Ionisationsprozesse zur Verfügung stehen. Durch die verstärkte Mitbewegung des Kerns eröffnet sich darüberhinaus ein komplementärer Spektroskopiebereich.

Die für die Präzisionsspektroskopie an hochgeladenen Ionen bisher vorwiegend verwendeten Verfahren werden mit ihren Vor- und Nachteilen in den folgenden Abschnitten vorgestellt.

2.1 Die Beam-Foil-Technik

Ionen können leicht in einem starken elektrischen Feld auf hohe kinetische Energien beschleunigt werden. Die dafür notwendigen Potentiale werden z.B. in einem Van de-Graaff Beschleuniger wie er auch am Max-Planck-Institut für Kernphysik vorhanden ist, erreicht. Mit einem Zyklotron erzielt man ebenfalls sehr hohe Energien, indem das beschleunigende, alternierende elektrische Feld mehrmals durchlaufen wird. Die Elektronen der so beschleunigten, hochenergetischen Ionen wechselwirken mit den Elektronen des sog. Strippers, während sie diesen durchqueren. Der Stripper besteht entweder aus einer Gaszelle, oder einer dünnen Festkörperfolie, die die Ionen durchdringen können. Nach Durchlaufen des Strippers befinden sich aufgrund der zuvor genannten Stoßionisation nur noch wenige bis gar keine Elektronen in der Ionenhülle. Elektronen in angeregten Zuständen fallen nach einer gewissen Zeit unter der Emission von Photonen in den Grundzustand zurück [RSD⁺84]. Die durch den Stripper erzeugten Ionen können nun in einem weiteren Target Elektronen einfangen, die dann zur Emission der zu vermessenden Röntgenstrahlung führen. Mit dieser Technik wurden die Lyman- α Übergänge in verschiedener Ionen mit teilweise sehr hoher Präzision vermessen. Einige dieser Experimente sind in Tabelle 2.2 aufgelistet. Da die Ionen sich mit einer großen Geschwindigkeit bewegen, muß die im Labor gemessene Energie der von ihnen emittierten Photonen aufgrund der Dopplerverschiebung in das Ruhesystem des Ions transformiert werden, um die Messergebnisse mit den theoretischen Vorhersagen vergleichen zu können. Hierzu ist für höchste Präzision eine entsprechend exakte Kenntnis der Ionengeschwindigkeit notwendig. Dies ist jedoch schwierig, da die Ionen typischerweise nach dem Strippen leicht unterschiedliche kinetische Energien aufweisen [TBI⁺85]. Eine weitere Unsicherheit bei der Umrechnung der Energie ins Schwerpunktsystem der Ionen entsteht durch die ungenaue Kenntnis des Winkels α zwischen Bewegungsrichtung der Ionen und Detektionsrichtung der Photonen (siehe Abbildung 2.1). Bei all diesen Experimenten ist die nicht exakt bekannte Geschwindigkeit der Ionen sowie weitere Unsicherheiten in der Korrektur der Dopplerverschiebung, der limitierende Faktor der erreichten Präzision.

2.2 Die Rückstoß-Ionen-Methode

Bei der schon zuvor erwähnten Rückstoß-Ionen-Methode werden Ionen spektroskopiert, die sich im Vergleich zur Beam-Foil-Technik mit vernachlässigbar kleiner Geschwindigkeit bewegen. Eine Doppler-Transformation der gemessenen Energie ins Ruhesystem des Ions ist daher nicht notwendig, und die im vorigen Abschnitt 2.1

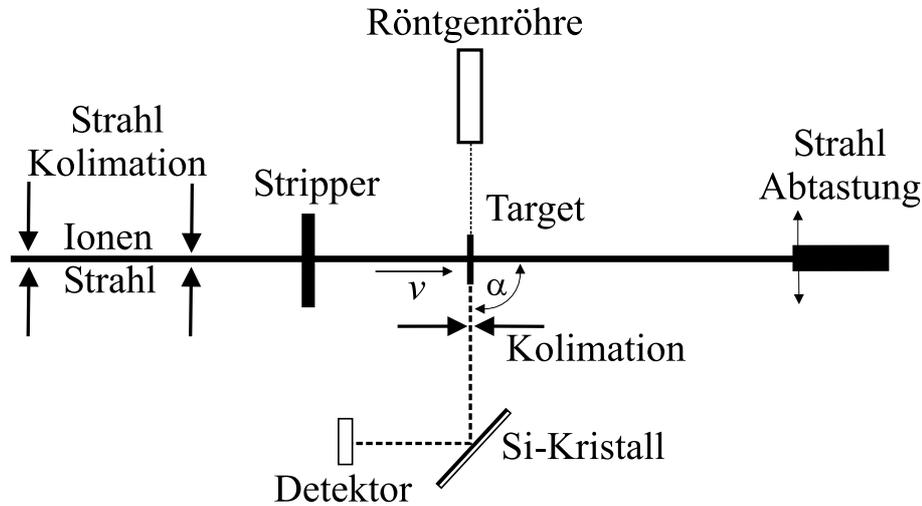


Abbildung 2.1: Experimentelle Anordnung für die Beam-Foil-Spektroskopie, wie sie z.B. in [BMI⁺83b] und [BMI⁺83a] verwendet wurde. Mit der Röntgenröhre werden Kalibrationspektren erzeugt.

Tabelle 2.2: Präzisionsmessungen der Lyman- α_1 Übergänge verschiedener Elemente zur Bestimmung der Lambsverschiebung, welche die Beam-Foil-Technik nutzen.

Ion	Ly_{α_1} Energie (eV)	ΔE (ppm)	Ort	Quelle
Cl ¹⁶⁺	2962.47	41	Brookhaven Tandem	[RSD ⁺ 84]
Ar ¹⁷⁺	3323.2	150	Orsay CEVIL	[BMI ⁺ 83b]
Fe ²⁵⁺	6973.8	90	Berkley SuperHILAC	[BMI ⁺ 83a]
Kr ³⁵⁺	13508.95	36	Cean GANIL	[TBI ⁺ 85]

erwähnten Fehlerquellen werden vermieden. In [BDFL85] wurde z.B. zur Herstellung von wasserstoffartigen Argonionen ein Strahl von U⁶⁶⁺ Ionen (welcher mit Hilfe der Beam-Foil-Technik erzeugt wurde) mit einer Energie von 5.9 MeV in eine mit Argon gefüllte Gaszelle geschossen. Durch das hohe elektrische Feld der U⁶⁶⁺ Ionen kommt es bereits bei großen Stoßparametern, und damit geringem Impulsübertrag auf den Targetkern sowohl zur vielfachen Stoßionisation der äußeren Targetelektronen als auch zum effizienten Einfang von Elektronen im wesentlichen aus der K-Schale, so daß das Targetatom insgesamt höchst effektiv in einem Stoß in höchste Ladungszustände gebracht wird. Anschließend kaskadieren die verbleibenden angeregten Elektronen, oder bei vollständig ionisiertem Argon ein nachträglich eingefangenes Elektron, unter Photonenemission in den Grundzustand. Es ist bei dieser Methode jedoch nicht ausgeschlossen, dass sich während eines elektronischen Übergangs ein oder mehrere weitere, passive sogenannte Zuschauerelektronen in

2.2. Die Rückstoß-Ionen-Methode

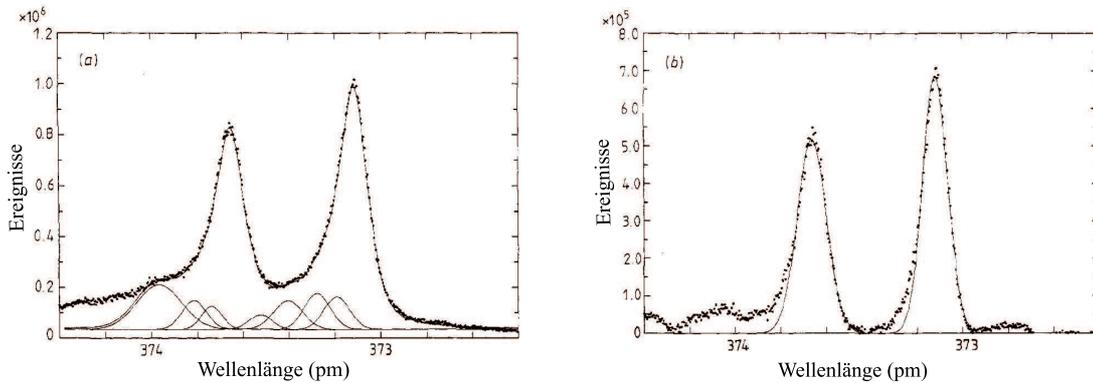


Abbildung 2.2: Links: Gemessenes Lyman- α -Spektrum mit 7 beliebig gewählten Satelliten. Rechts: Hier wurde der Beitrag von theoretisch berechneten Satelliten vom gemessenen Spektrum subtrahiert und anschließend die verbleibenden Maxima gefittet [BDFL85].

angeregten Zuständen mit hoher Hauptquantenzahl n befinden. Diese Elektronen besitzen je nach Drehimpuls l eine kleine, von Null verschiedene Aufenthaltswahrscheinlichkeit zwischen Atomkern und dem aktiven Elektron, und schirmen somit die Kernladung für den zu vermessenden Übergang geringfügig ab. Dies führt zu leicht verringerten Übergangsenergien. In einem Spektrum erscheinen diese Übergänge als mit dem ungestörten Übergang überlappende Linien, sogenannte Satelliten, die zu einer Verschiebung des Gesamtlinienschwerpunktes führen. Um die Auswirkung der Satelliten zu kompensieren und die Lyman- α Energien richtig vermessen zu können wurden in [BDFL85] zum eigentlichen Übergang noch weitere 7 Gaußkurven, welche mögliche Satelliten repräsentieren, modelliert. Deren Positionen gingen als freie Parameter in die Auswertung ein (siehe Abb. 2.2). In einer unabhängigen Prüfauswertung der Daten wurden Beiträge theoretisch berechneter Satelliten vom gemessenen Spektrum subtrahiert und anschließend die Position der Linienmaxima und somit die Lyman- α Übergangsenergien bestimmt. Auch nach Subtraktion hat man noch signifikant asymmetrische Spektren. Beide Vorgehensweisen liefern innerhalb ihrer Fehlergrenzen das gleiche Ergebnis. Die in dieser Messung erreichte Präzision von 5 ppm ist die höchste je erreichte bei der Energiebestimmung eines Röntgenübergangs in hochgeladenen Ionen. Die Satellitenlinien stellen für die Präzision der Rückstoß-Ionen-Methode den limitierenden Faktor dar. In [DBF84] wurde an Übergängen in heliumartigen Ionen zudem gezeigt, dass bei dieser Methode die Intensitäten der Satelliten und somit ihr Einfluss auf das Messergebnis stark vom Argon-Gasdruck in der Targetgaszelle abhängen.

2.3 Der Tokamak

In einem Tokamak wird ein durch ein toroidiales Magnetfeld eingeschlossenes Plasma durch einen induzierten, gepulsten Plasmastrom aufgeheizt. Durch die im Plasma herrschenden hohen Temperaturen von 10 keV besitzen leichte Wasserstoffatome gegebenenfalls genügend kinetische Energie um die Coulombbarriere zu überwinden und zu fusionieren. Die geeignetsten Brennstoffe sind die schweren Isotope des Wasserstoffs, nämlich Deuterium (2H) und Tritium (3H), nach folgender Reaktion [BS03]:



Der kinetische Teil der freiwerdenden Energie heizt das Plasma weiter an, wodurch dies für kurze Zeit selbstständig „brennt“. [Tea92]

Injiziert man in ein solches Plasma neutrale Gasatome, so werden diese durch Elektronenstoß mit den Plasmaelektronen bzw. durch Ladungsaustausch ionisiert und angeregt. Darauf hin können wieder die entsprechenden Übergänge spektroskopiert werden. Mit dieser Methode wird eine sehr hohe Linienintensität erreicht, und sehr kurze Aufnahmezeiten sind möglich. Wie bei der Rückstoß-Ionen-Technik, jedoch in geringerem Ausmaß, limitieren auch hier Satelliten die erreichbare Genauigkeit. Abbildung 2.3 zeigt ein Spektrum der Lyman- α Linien von Ar^{17+} mit den dazu angepassten Satelliten [MRK⁺86]. Die Linienbreite dieser Übergänge ($\frac{\lambda}{\Delta\lambda} \sim 1000$) wird hauptsächlich durch die Dopplerverbreiterung, der sich mit hohen thermischen Geschwindigkeiten bewegendem Ionen verursacht. Da diese Bewegung keine ausgezeichnete Richtung besitzt und das Plasma mit einer relativ geringen Geschwindigkeit rotiert, kommt es nur zu einer vernachlässigbar kleinen Dopplerverschiebung. Die Ergebnisse von zwei beispielhaften Messungen von Lyman- α Übergängen in wasserstoffartigen Ionen, die an einem Tokamak durchgeführt wurden, sind in Tabelle 2.3 aufgelistet.

Tabelle 2.3: Präzisionsmessungen der $Ly_{\alpha 1,2}$ -Übergänge von Chlor und Argon an einem Tokamak.

Ion	$Ly_{\alpha 1}$ Energie (eV)	ΔE (ppm)	Ort	Quelle
Cl^{16+}	2962.46	34	MIT Alcator C	[KKRS84]
Ar^{17+}	3322.96	19	MIT Alcator C	[MRK ⁺ 86]

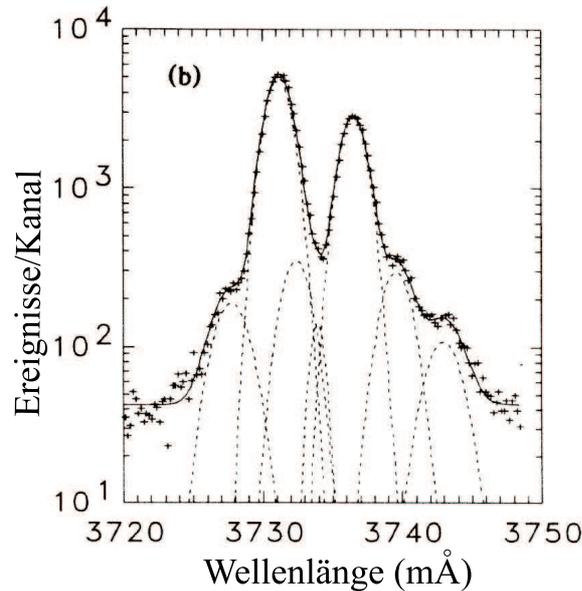


Abbildung 2.3: Das an einem Tokamak gemessene Spektrum von Ar^{17+} , mit dem Lyman- α -Doublet und den gefitten Satelliten [MRK⁺86].

2.4 Die Abbrems-Methode

Bei der sogenannte Abbrems-Methode werden zunächst niedrig geladene Ionen mit Hilfe der Beam-Foil-Technik (Abschnitt 2.1) durch Strippen der verbleibenden Elektronen in einem Target teilweise vollständig ionisiert. Diese werden auf niedrige Geschwindigkeiten abgebremst und fangen in einem darauffolgenden Target ein Elektron ein. Anschließend kaskadiert dieses Elektron in den Grundzustand und emittiert dabei charakteristische Photonen. Hierdurch erhält man die mit der Beam-Foil-Technik möglichen, nahezu satellitenfreien Spektren, jedoch bei geringen bzw. einstellbaren Geschwindigkeiten. Durch die Möglichkeit, die Ionen bei verschiedenen Geschwindigkeiten zu studieren, können die gemessenen Energien auf die Geschwindigkeit Null extrapoliert werden, was den Fehler bei der Dopplertransformation ins Ruhesystem der Ionen erheblich reduziert.

Mit dieser Methode wurden am Max-Planck-Institut für Kernphysik die Lyman- α Übergänge in wasserstoffartigem Chlor vermessen [DSJ85]. Durch die Verwendung von Heliumgas als Target wurde der gleichzeitige Einfang von zwei Elektronen in angeregte Zustände nahezu vollständig unterdrückt und somit der Beitrag von Satelliten zum Spektrum auf ein vernachlässigbares Maß reduziert. Die Geschwindigkeitsverteilung der emittierenden Ionen ging wiederum als Fehlerquelle in die Dopplertransformation ein und limitierte maßgeblich die in dieser Messung erreichte Genauigkeit auf ~ 41 ppm.

Eine wesentliche Verbesserung der Strahlqualität erreicht man durch sogenanntes Elektronenkühlen. Dabei wird ein Elektronenstrahl mit dem Ionenstrahl überlagert, und dessen Geschwindigkeit so gewählt, dass Elektronen und Ionen relativ zueinander sehr kleine Relativgeschwindigkeiten haben. In longitudinaler Richtung werden Ionen, die sich aufgrund ihrer Geschwindigkeitsverteilung relativ zu den Elektronen bewegen, je nach Relativgeschwindigkeit durch Stöße mit diesen entweder beschleunigt oder abgebremst. Die transversale kinetische Energie der Ionen wird dabei ebenfalls indirekt stark reduziert. Mit dieser Methode wurde bei der Messung der Lambverschiebung in wasserstoffartigem Uran an der GSI in Darmstadt die hohe zur Erzeugung der Ionen notwendige Ionengeschwindigkeit von 360 MeV/u auf 43.59 MeV/u verringert und somit der Fehler bei der Dopplertransformation auf $\frac{\Delta E}{E} = 3.16 \cdot 10^{-5}$ begrenzt [GSB⁺05].

2.5 Elektron Beam Ion Trap (EBIT)

In einer EBIT werden hochgeladene Ionen ebenfalls durch Elektronenstoßionisation erzeugt. Wobei jedoch hier nicht die Ionen, sondern die Elektronen beschleunigt werden. Die benötigte Schwerpunktsenergie, die höher als die Bindungsenergie der zu entfernenden Elektronen sein muss, fällt im Vergleich zur Beam-Foil-Technik um den Faktor ($\frac{m_{Ion}}{m_e}$) geringer aus. Deshalb ist der technische Aufwand zum Erzeugen der hochgeladenen Ionen mit einer EBIT im Vergleich zu den Beschleunigeranlagen, die bei der Beam-Foil-Technik zum Einsatz kommen, wesentlich geringer. Für die Spektroskopie an hochgeladenen Ionen birgt die EBIT den großen Vorteil, dass die Ionen in einem begrenzten Fallenvolumen gehalten werden und keine Driftgeschwindigkeit besitzen. Durch die thermische Bewegung der in der Falle eingeschlossenen Ionen kommt es zwar zu einer Zunahme der Linienbreite, jedoch entfällt die Dopplertransformation mit den damit verbundenen Fehlerquellen. Da in einer EBIT die Lebensdauer angeregter Zustände in hochgeladenen Ionen um einige Größenordnungen geringer ist als die mittlere Zeitdifferenz zweier aufeinanderfolgender Elektron-Ionenstöße, ist die Wahrscheinlichkeit eines Übergangs in einem doppelt angeregten Ion vernachlässigbar klein. Somit gibt es im gemessenen Spektrum innerhalb der statistischen Genauigkeit keinen Beitrag durch Satelliten (Abb. 2.4). Die niedrige Anregungsrate ist aber auch der größte Nachteil einer EBIT, da hierdurch für die Spektroskopie nur vergleichsweise geringe Photonenflüsse zur Verfügung stehen. Dieser Nachteil wird teilweise durch die in dieser Arbeit entwickelte a/b-Methode kompensiert, da durch den Verzicht auf einen üblicherweise verwendeten Kollimationsspalt nicht zusätzlich Photonen absorbiert werden.

Methoden zur Erzeugung hochgeladener Ionen, deren Spektren nicht reduzierbare

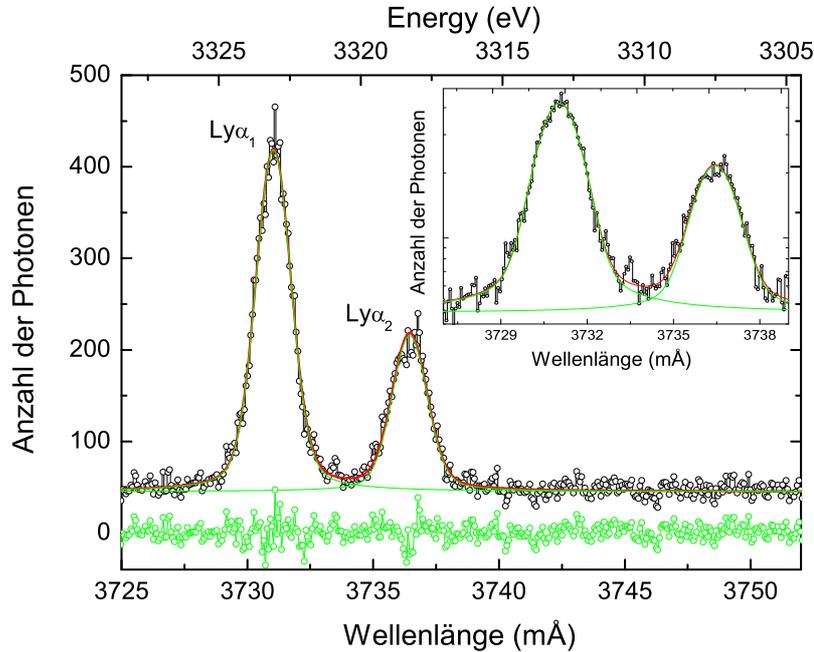


Abbildung 2.4: Ein mit der EBIT aufgenommenes Spektrum der Lyman- α Übergänge. Bei dem eingefügten Spektrum handelt es sich um die gleichen Daten in logarithmischer Darstellung.

Beiträge von Satelliten enthalten, lassen für zukünftige Messungen keine entscheidende Verbesserung der Messergebnisse erwarten. Hingegen beschränken weder die Abbrems-Methode noch die EBIT die prinzipiell erreichbare Präzision einer Messung, so dass sie für Präzisionsspektroskopie anderen Quellen gegenüber vorzuziehen sind. Da die EBIT, im Gegensatz zur bisherigen Abbrems-Methode, Ionen mit nur themischer Geschwindigkeit erzeugt, und somit Fehler durch die Dopplertransformation nicht nur vermindert, sondern ausgeschlossen sind, jedoch die Spektren beider Verfahren in etwa die gleiche Qualität aufweisen, ist die EBIT bisher das Instrument der Wahl, wenn das Ziel Spektroskopie mit höchster Präzision ist. In Zukunft ist bei der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) geplant (HITRAP), und die entsprechende Anlage befindet sich bereits in der Aufbauphase, die Abbrems-Methode soweit zu treiben, dass die hochgeladenen Ionen schließlich in eine Falle eingefangen und dort sogar auf 4 K Temperaturen abgekühlt werden können. Es wird erwartet, dass so die Zahl von Ionen höchster Ladungszustände gegenüber einer EBIT erheblich gesteigert werden kann, so dass letztendlich hier auf lange Sicht die höchsten Präzisionen zu erwarten sind. Im folgenden werden die Funktionsweise und die wichtigsten Kenndaten der in dieser Arbeit verwendeten EBIT vorgestellt.

2.6 Funktionsprinzip einer EBIT

Die EBIT besteht im Wesentlichen aus einer Elektronenkanone, einer Anzahl von zylindrischen Fallenelektroden (sogenannte Driftröhren) in der Mitte eines supraleitenden Magneten und einem Elektronenkollektor (siehe Abb. 2.5). Elektronen, die aus der Kanone austreten, werden durch eine angelegte Hochspannung auf Energien von einigen hundert Elektronenvolt bis zu mehreren hundert keV beschleunigt und axial ins Magnetfeld injiziert. Dabei folgen sie Trajektorien entlang der Feldlinien des Magnetfeldes, das durch die Helmholtzspulen des supraleitenden Magneten erzeugt wird. Der Strahl wird vom Magnetfeld in die Driftröhren, in deren Mitte das Fallenzentrum liegt, geführt. Entlang der Strahlachse wird die Falle durch eine Potentialbarriere begrenzt, welche durch die außen positiv gegenüber der Fallennitte geladenen Driftröhren erzeugt wird. Durch Veränderungen der dort angelegten Spannungen kann die Fallentiefe und Falllänge eingestellt werden. Der Elektronenstrahl wird auf dem Weg von der Elektronenkanone hin zum Fallenzentrum durch die zunehmende magnetische Feldliniendichte immer stärker komprimiert. Aufgrund dieser Verringerung des Strahldurchmessers, der in der Mitte des Magnetfeldes in etwa $60 \mu\text{m}$ beträgt, steigt die Stromdichte an. Auf dem weiteren Weg zum Kollektor werden die Elektronen in Bezug auf das Potential der Elektronenkanone auf eine Energie von üblicherweise 1500 eV abgebremst. Schließlich treffen die Elektronen im Kollektor auf die Wand und werden abgeleitet. Über eine differentiell gepumpte Atomstrahlanordnung besteht die Möglichkeit Gasatome in das Fallenvolumen einströmen zu lassen. Festkörperatome werden mit Hilfe einer Laserionenquelle injiziert [MTW⁺03]. In der Fallennitte werden Atome, die vom Elektronenstrahl getroffen werden, stoßionisiert. So erzeugte positiv geladene Ionen werden durch die negative Raumladung des Elektronenstrahls angezogen. Diese erzeugt nämlich eine Potentialabsenkung gegenüber den Driftröhren von bis zu mehreren hundert Elektronenvolt. Dadurch können die Ionen in radialer Richtung nicht mehr aus dem Fallenvolumen entkommen. Die Anziehung bewirkt außerdem, dass die Ionen wiederholt in den Elektronenstrahl gelangen und zu immer höheren Ladungszuständen ionisiert werden, bis die bei einem Stoß maximal übertragbare Energie nicht zu einer weiteren Ionisierung ausreicht. Das Ion wird gleichzeitig auch durch Stöße elektronisch angeregt und emittiert, in Folge der Relaxation in den Grundzustand, Photonen. Neben Ionisation und Anregung werden simultan Elektronen vom Elektronenstrahl (Rekombination) oder von benachbarten Atomen (Ladungstransfer) von den Ionen eingefangen, wodurch sich deren Ladungszustand verringert. Die Zeitdauer bis zum Erreichen eines Gleichgewichtszustandes dieser Prozesse hängt in erster Linie von der Elektronenenergie, der Stromdichte, dem Injektions- und dem Restgasdruck ab. Bei den leichten bis mittelschweren Elementen sind die Rekombinationsprozesse im Ver-

2.6. Funktionsprinzip einer EBIT

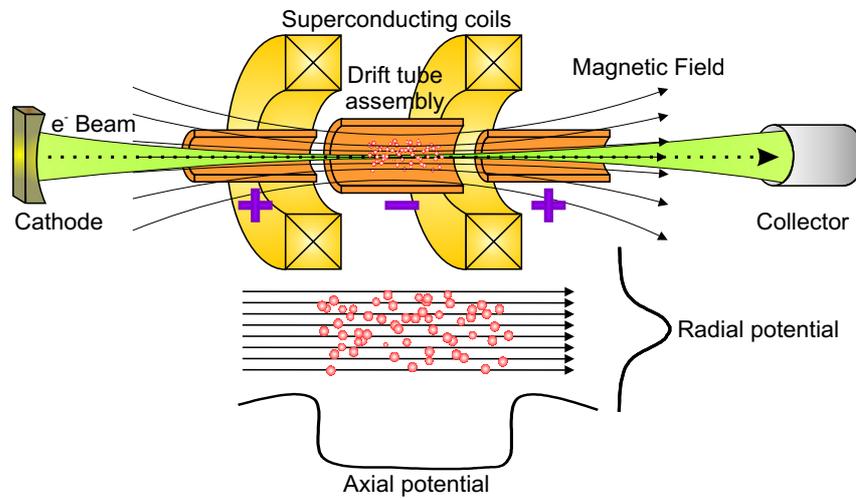


Abbildung 2.5: Das Funktionsprinzip einer EBIT.

gleich zur Ionisation vernachlässigbar, und der maximal erreichte Ladungszustand hängt nahezu ausschließlich von der Elektronenstrahlenergie ab. Bei sehr schweren Elementen am Ende des Periodensystems gewinnen die Rekombinationsprozesse relativ an Bedeutung, und es stellt sich eine gewisse Ladungsverteilung der Ionen im Gleichgewicht ein.

Für Experimente die z.B. die Dynamik von Ion-Atom-Stößen, oder die Wechselwirkung hochgeladener Ionen mit Festkörpern untersuchen können die in der EBIT erzeugten Ionen durch den Kollektor extrahiert werden.

Für die Messungen, wie sie in der vorliegenden Arbeit durchgeführt wurden, ist die linienförmige Ausdehnung der Quelle von großer Bedeutung, da hierdurch eine systematische Korrektur der Messwerte verursacht wird (siehe Abschnitt 4.3.2). Der Durchmesser der Ionenwolke ist bis um den Faktor ~ 10 größer als der des EBIT-Elektronenstrahls. Da die Ionen jedoch nur innerhalb des Elektronenstrahls angeregt werden, hängt der Durchmesser des lumineszenten Volumens von der Lebensdauer der zu vermessenden Übergänge ab, die hier im Bereich von 10^{-13} s liegt [JS85]. Bei der kinetischen Energie der Ionen in der Falle von einigen keV ($E_{kin} = U_{DT} \cdot qe$ mit der Driftröhrenspannung U_{DT} , dem Ladungszustand q und der Elementarladung e) und diesen kurzen Lebensdauern findet die Emission eines Röntgenquants noch innerhalb des Elektronenstrahls statt, auf dessen Größe ($\varnothing \approx 60 \mu\text{m}$) die Röntgenquelle folglich begrenzt ist.

In dieser Arbeit wurde für die Erzeugung der wasserstoffartigen und heliumartigen Chlor- ($\text{Cl}^{16+}, \text{Cl}^{15+}$) bzw. Argon-Ionen ($\text{Ar}^{17+}, \text{Ar}^{16+}$) eine Elektronenstrahlenergie von 6-15 keV bei einem Strom von 300-400 mA eingestellt. Bei der Installation des Spektrometers wird zum Ausrichten eines Spaltes (siehe Abschnitt: 4.2.1) sichtbares Licht, welches von den Ionen stammt, benötigt. Hierzu wird bei borartigem Argon

eine Elektronenstrahlenergie von ~ 900 eV und ein Strahlstrom von ~ 100 mA benötigt.

Kapitel 3

Messmethoden

3.1 Methoden zur Wellenlängenbestimmung von Röntgenstrahlung

Zur Detektion von Röntgenstrahlung gibt es eine Vielzahl von Möglichkeiten. Zu den zuerst verwendeten gehören Photoplatten bzw. Geigerzähler. Da Röntgenstrahlung die Fähigkeit besitzt in Abhängigkeit von ihrer Energie, Materie unterschiedlich weit zu durchdringen, wurde, aufgrund dieser Eigenschaft bereits eine frühe Charakterisierung der Strahlung möglich. Je nach Durchdringungsvermögen wurde der Röntgenstrahlung eine gewisse Härte zugewiesen. Dabei erkannte man bereits früh den Zusammenhang zwischen Durchdringungsvermögen und der Beschleunigungsspannung der Elektronen, welche die Strahlung beim Auftreffen auf Materie erzeugen. Die Beobachtung der Beugung und Reflexion dieser Strahlung an Kristallen führte zur Entwicklung wellenlängendispersiver Verfahren. Bei den sogenannten energiedispersiven Verfahren wird die verhältnismäßig hohe Photonenenergie direkt anhand der Wechselwirkung des einzelnen Photons mit Materie bestimmt.

Verschiedene Methoden zur Vermessung der Wellenlänge und somit der Energie eines Röntgenphotons werden in diesem Teil der vorliegenden Arbeit vorgestellt. Wie zuvor erklärt, lassen sie sich prinzipiell in zwei Gruppen einteilen.

- Energiedispersiv, wie z.B.
 - Proportionalzähler
 - Szintillatoren
 - Halbleiterdetektoren
 - Mikrokalorimeter

- Wellenlängendispersiv
 - Reflexions- und Transmissionsgitter
 - Kristallspektrometer (Transmission, Reflexion)

Bei den energiedispersiven Verfahren wird ein Photon absorbiert und hierbei seine Energie in eine andere messbare Größe umgewandelt. Im Allgemeinen setzt dies einen möglichst linearen Zusammenhang zwischen den beiden Größen voraus. Beim Proportionalzähler ionisiert das Röntgenphoton Moleküle oder Atome eines geeigneten Gases, wozu eine mittlere Energie von ~ 30 eV benötigt wird [Leo93]. Dabei steht die Anzahl der ionisierten Moleküle bzw. Atome und der dadurch entstandenen freien Elektronen in einem linearen Zusammenhang zur Photonenenergie. Die freien Elektronen lösen im elektrischen Feld eine Entladungskaskade aus, wodurch ein messbarer Stromimpuls entsteht, dessen Größe im sogenannten „Proportionalbetrieb“ in linearer Relation zur Photonenenergie steht. Bei Szintillatoren werden in einem Festkörper durch die Absorption eines Röntgenphotons eine der Photonenenergie entsprechende Anzahl von Elektronen in angeregte Zustände gebracht, die dann ihrerseits, bei Relaxation in den Grundzustand, ihre Energie in Form von sichtbarem Licht abgeben. Die Anzahl der Photonen, die ein Maß für die Röntgenenergie ist, kann mit Hilfe eines Photomultipliers über die Pulshöhe des integrierten Photostroms bestimmt werden. Szintillatoren haben eine mit den Proportionalzählern vergleichbare Auflösung, eignen sich jedoch durch die wesentlich höhere Dichte des absorbierenden Materials besser zum Nachweis von hochenergetischer Strahlung bis hin in den MeV Bereich.

In Halbleiterdetektoren wird die Energie des im Material absorbierten Röntgenphotons in freie Elektron-Loch-Paare verwandelt. Hierzu wird in einem Germaniumkristall eine mittlere Energie von 2.96 eV benötigt. Die Anzahl der durch ein Röntgenphoton erzeugten Elektron-Loch-Paare steht wiederum in einem linearen Zusammenhang zur Photonenenergie. Da Halbleiterdetektoren sehr häufig eingesetzt werden, wird ihre Funktion in Abschnitt 3.1.1 genauer erklärt. Die Herstellungstechnik von extrem reinen, großen Halbleiterkristallen hat in der zweiten Hälfte des 20ten Jahrhunderts einen bedeutenden Fortschritt erfahren. Deshalb können heutige Halbleiterdetektoren in weiten Energiebereichen verwendet werden und gestatten dank ihrer Größe eine gute Raumwinkelerfassung. Sie bieten auf der anderen Seite jedoch nur eine verhältnismäßig geringe Auflösung, welche häufig nicht ausreicht, um atomphysikalische Messungen mit höchster Präzision durchzuführen.

Bei Mikrokalorimetern führt die Absorption des Röntgenphotons zu einer Erwärmung des sog. Absorbers, die proportional zur Energie des Photons ist und mit einem geeigneten Thermometer vermessen wird. Solche Thermometer messen z.B.

3.1. Methoden zur Wellenlängenbestimmung von Röntgenstrahlung

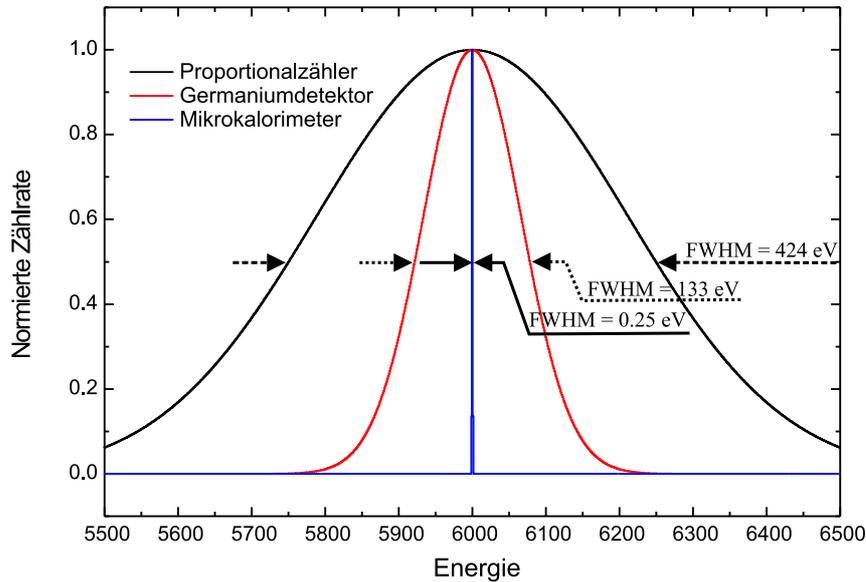


Abbildung 3.1: Das theoretisch mögliche Auflösungsvermögen von einem Proportionalzähler, einem Germaniumdetektor und eines Mikrok calorimeters, bei einer Photonenenergie von 6 keV.

die Anzahl dissoziierter Cooper-Paare, die Widerstandsänderung eines supraleitenden Materials nahe der kritischen Temperatur, oder auch das Umklappen von zuvor ausgerichteten Elektronenspins. Die hierzu benötigte Energie beträgt in einem beispielhaft angenommenen Magnetfeld von 50 mT nur $\sim 10^{-5}$ eV. Für das erreichbare Auflösungsvermögen eines energiedispersiven Detektors ist die benötigte mittlere Energie E_m zur Erzeugung eines Zählereignisses ausschlaggebend, da die Anzahl der Ereignisse durch $N = E_{ph}/E_m$, mit der Photonenenergie E_{ph} , gegeben ist. In diesem statistischen Prozess berechnet sich der Fehler des Mittelwertes \bar{N} zu $\Delta N = \sqrt{\bar{N}}$. Das theoretisch mögliche Auflösungsvermögen in der Halbwertsbreite ($FWHM$) berechnet sich dann zu $FWHM = \sqrt{\bar{N}} \cdot E_m$. Anschaulich dargestellt ist dies für verschiedene Detektoren und einer Photonenenergie von 6 keV in Abbildung 3.1. In der Praxis wird das ideal mögliche Auflösungsvermögen durch die zur Signalaufbereitung notwendigen Prozesse, wie z.B. Verstärkung, und den darin enthaltenen Fehlerquellen (Rauschen) nicht erreicht. Mikrok calorimeter erzielen zur Zeit ein ähnlich hohes Auflösungsvermögen wie Kristallspektrometer, mit dem Vorteil dass sie, wie auch Halbleiterdetektoren, einen großen Spektralbereich simultan abdecken und zumindest prinzipiell ein großflächiger Einsatz möglich ist. Ihre Entwicklung steht jedoch noch am Anfang und bei ihrer Anwendung gibt es noch technische Probleme, z.B. wurden bislang nur kleine Nachweisvolumina realisiert.

Wellenlängendispersive Methoden nutzen die Wellennatur der Photonen aus. Durch Interferenzerscheinungen an periodisch angeordneten Streuzentren wird dabei das

Energiespektrum in ein Ortsspektrum transformiert und anschließend mittels eines ortsempfindlichen Detektors nachgewiesen. Die dafür benötigten periodische Strukturen können z.B. natürliche Kristalle, oder auch künstlich hergestellte Reflexions- und Transmissionsgitter sein. Transmissionsgitter bieten hierbei den Vorteil, dass sie gleichzeitig einen großen Spektralbereich abdecken, jedoch ist ihre Dispersion und ihr Auflösungsvermögen geringer als das von Kristallen. Zum kleineren Teil kann dies durch eine entsprechende Größe des Spektrometers ausgeglichen werden, was jedoch ihren Laboreinsatz erschwert.

Üblicherweise ist das Kristallspektrometer das Instrument der Wahl, wenn die präzise Vermessung von Röntgenwellenlängen gefordert ist. Je nach zu vermessender Röntgenenergie werden die Kristalle in Reflexions- oder Transmissionsgeometrie eingesetzt. Wie aus Kapitel 3.2 ersichtlich sein wird, haben Kristallspektrometer eine geringe Effizienz, weil nur ein kleiner Teil der Kristalloberfläche die Bragg'sche Bedingung erfüllt (siehe Abschnitt 3.1.4). Um dennoch innerhalb vertretbarer Messdauern die geforderte Präzision zu erreichen, wurden verschiedene Typen mit speziell gear- teten Geometrien entwickelt. Ein Beitrag hierzu ist die im Rahmen dieser Doktorar- beit ausgearbeitete und in Kapitel (4) beschriebene sog. a/b-Methode, die eine kol- limationsfreie Bestimmung der Einfallsrichtung des vom Kristall reflektierten Teils der Röntgenstrahlung ermöglicht. In den folgenden Abschnitten wird ein Überblick über die in unserem Labor eingesetzten energiedispersiven-, sowie die wichtigsten wellenlängendispersiven-Messverfahren der Röntgenphotonenenergie gegeben.

3.1.1 Halbleiterdetektoren

Bei einem Halbleiterdetektor handelt es sich im Prinzip um eine in Sperrrichtung betriebene PIN-Diode. Der Silizium- oder Germaniumkristall ist an zwei gegenüber- liegenden Endflächen jeweils mit drei- bzw. fünfwertigen Atomen dotiert. Hierzu eignen sich z.B. Bor und Phosphor. Das erstgenannte ist ein Elektronenakzeptor, d.h. es entsteht ein Loch im Valenzband (P) wohingegen fünfwertige Dotierungen Elektronendonatoren sind, d.h. sie geben ein Elektron an das Leitungsband ab (N). Die sogenannten p- und n-Gebiete stehen über den nicht dotierten Halbleiterbereich, den sog. intrinsischen Halbleiter (I), in Kontakt und es kommt zu einer Diffusion der freien Ladungsträger in das jeweils andere Gebiet, so dass sich die diffundierte positive und negative Ladung kompensieren und daher dieser Bereich an freien La- dungsträgern verarmt. Durch Anlegen einer Spannung in Sperrrichtung wird dieser Effekt verstärkt, d.h. die Leitfähigkeit nimmt weiter ab, und es fließt daher kein Strom. Trifft ein Röntgenphoton auf ein gebundenes Elektron in der Verarmungszo- ne, so wird dieses in das Leitungsband befördert und es entsteht ein Elektron-Loch- Paar, das durch die angelegte Spannung getrennt wird; das Elektron gibt durch

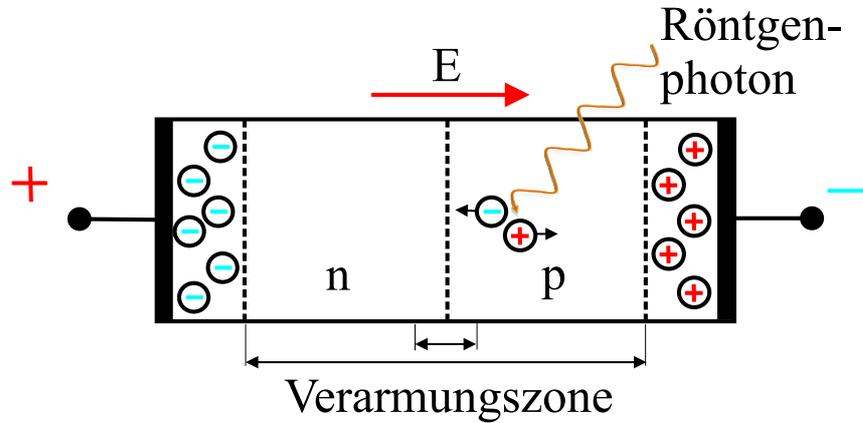


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung eines p-n-Übergangs. Durch das elektrische Feld E werden Elektron-Loch-Paare, die durch die Absorption eines Photons entstehen, getrennt. Die Pfeile am unteren Bildrand zeigen die Größe der Verarmungszone mit/ohne angelegter äußerer Spannung.

Stöße seine kinetische Energie an andere Valenzelektronen ab, die dadurch ebenfalls ins Leitungsband gebracht werden. Die insgesamt zur Verfügung stehende Energie wird damit gleichmäßig auf möglichst viele Elektronen verteilt. Durch die angelegte Spannung werden die so erzeugten freien Ladungsträger abgesaugt, und somit kann ein Stromimpuls gemessen werden. Die Anzahl der Elektron-Loch-Paare steht so in direktem Zusammenhang mit der Photonenenergie, und daher ist die Gesamtladung im Stromimpuls ein Maß für die Energie der Röntgenstrahlung. Um Untergrundsignale, die durch thermisch erzeugte Elektron-Loch-Paare entstehen, zu unterdrücken, werden diese Detektoren im allgemeinen bei einer Temperatur von 77 Kelvin (flüssig Stickstoff) betrieben. Bei dieser Temperatur wird bei Silizium eine mittlere Energie von 3,81 eV und bei Germanium von 2,96 eV benötigt, um ein Elektron-Loch-Paar zu erzeugen [Leo93]. Diese Werte entsprechen nicht der jeweiligen Bandlücke der Halbleiter, da ein gewisser Teil der Photonenenergie an Phononen verteilt wird. Da die Erzeugungsenergie von freien Ladungsträgern im Germanium somit um etwa eine Größenordnung kleiner ist als die bei Proportionalzählern im Durchschnitt zur Ionisation von Gasen benötigte Energie, erreichen Halbleiterdetektoren ein wesentlich höheres Auflösungsvermögen als Gasdetektoren.

Bei Photonenenergien unterhalb von 1 MeV ist der Photoeffekt der dominante Absorptionsprozess, dessen Wirkungsquerschnitt sich wie folgt nähern lässt [Dem98]:

$$\sigma_{ph} \sim \frac{Z^5}{E_{ph}} \quad (3.1)$$

Aufgrund der höheren Kernladungszahl von Germanium ($Z = 32$) im Vergleich zu Silizium ($Z = 14$) eignen sich Germaniumdetektoren besonders zur Detektion harter

Röntgenstrahlung bzw. Gammastrahlung. Da die thermische Bildung von Elektron-Loch-Paaren durch die Kühlung des Detektors stark verringert wird, kann eine äussere Spannung mit resultierenden Feldstärken von bis zu $1000 \frac{V}{cm}$ angelegt werden. Durch Absorption eines Photons entstehende freie Ladungsträger werden auf diese Weise effizient getrennt und ihre Rekombination verhindert. Hierdurch wird gewährleistet, dass bei Photonen mit gleicher Energie die gesamte Anzahl der Elektron-Loch-Paare nahezu konstant bleibt und die anschließend gemessene Signalhöhe ein Maß für die Photonenenergie ist. Das Auflösungsvermögen des an der Heidelberger EBIT verwendeten Germaniumdetektors (ORTEC GLP 36360) beträgt 560 eV bei einer Photonenenergie von 122 keV; für niedrige Röntgenenergien werden Detektoren mit hochreinen Germanium I-Bereichen (ORTEC IGLET) eingesetzt, die ein Auflösungsvermögen von etwa 140 eV bei 6-keV aufweisen.

3.1.2 Mikrokalorimeter

Ein Mikrokalorimeter besteht aus einem Absorber, der über einen thermischen Kontakt mit geringer Wärmeleitfähigkeit mit einem Wärmebad verbunden ist. Die durch ein Röntgenquant in den Absorber eingetragene Energie wird in Wärme umgewandelt und führt zu einem Temperaturanstieg des Absorbermaterials,

$$\delta T_{absorb} = \frac{E_{ph}}{C_{absorb}} \quad (3.2)$$

Anschließend wird die Wärme langsam an das Wärmebad abgeführt und der Absorber erreicht nach einer gewissen Zeit wieder seine Ausgangstemperatur. Je kleiner die Wärmekapazität C_{absorb} , desto größer ist bei gleicher Photonenenergie der Temperaturanstieg. Mikrokalorimeter werden deshalb bei Temperaturen von Millikelvin betrieben, da sich hier die Wärmekapazität von Festkörpern proportional zu T^3 verhält.

Um die Temperaturänderung des Absorbers zu vermessen haben sich verschiedene Techniken mit unterschiedlichen Vorzügen etabliert. Bei der Verwendung von wärmesensitiven Halbleiterwiderständen wird die exponentielle Abhängigkeit des Widerstandes von der Temperatur genutzt [Ens01]. Eine andere Art der Messung des Energieeintrags nutzt den Übergang zwischen supraleitender und normalleitender Phase eines Festkörpers. Dieser Übergang ist nahezu sprunghaft, wodurch eine sehr hohe Temperatursensitivität erreicht wird. Damit die Sprungtemperatur etwas oberhalb der Gleichgewichtstemperatur des Detektors liegt, ist es notwendig sie anzupassen, was mit Hilfe der Sensorgeometrie möglich ist. Dies gelingt z.B. mit einem aus sehr dünnen Schichten von Kupfer und Molybdän bestehenden Festkörper, bei dem die Röntgenstrahlung direkt durch diese Schichten absorbiert wird. Auf diese

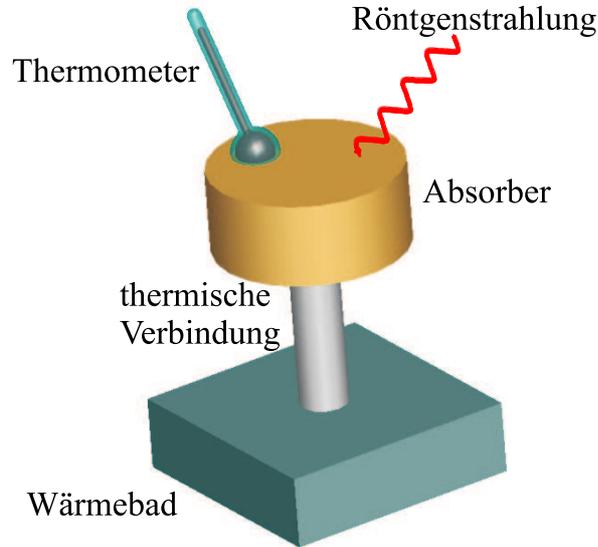


Abbildung 3.3: Schema eines Mikrokalorimeters mit Absorber, schwacher thermischer Verbindung, Wärmebad und Thermometer [Ens01].

Weise wurde ein Auflösungsvermögen von $\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \approx 1300$ erreicht, mit dem Nachteil einer geringen Quanteneffizienz [IHM⁺00].

Magnetische Kalorimeter messen die Magnetisierung eines paramagnetischen Absorbers in einem schwachen Magnetfeld. Die Magnetisierung und somit der magnetische Fluß ändert sich bei einem Temperaturanstieg, da die Ausrichtung der magnetischen Momente der gebundenen Elektronen im Festkörper teilweise zerstört wird. Hierdurch wird eine enorme Temperatursensitivität erreicht [BU88]. Mit sogenannten SQUIDS (Superconducting Quantum Interference Devices) können solche Flussänderungen mit einer Genauigkeit von 10^{-14} Tesla vermessen werden. Diese Kalorimeter sollen in Zukunft im Rahmen einer Kollaboration mit der Gruppe von C. Enss auch an der Heidelberger EBIT eingesetzt werden und erreichen bereits ein Auflösungsvermögen von $\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \approx 1700$. Abbildung 3.4 zeigt ein Spektrum, welches dieses hohe Auflösungsvermögen demonstriert. Ein detaillierter Überblick über die verschiedenen Mikrokalorimetertypen und ihre jeweiligen Vor- und Nachteile ist in [Ens01] gegeben. Bei nicht allzu hohen Röntgenenergien von wenigen keV besitzen Mikrokalorimeter je nach Typ eine fast hundertprozentige Quanteneffizienz, da die Röntgenphotonen ihre Energie nahezu vollständig an den Absorber abgeben können. Die Effizienz steigt mit dem Detektorvolumen, das jedoch gleichzeitig möglichst klein gewählt werden sollte, um die notwendige geringe Wärmekapazität zu gewährleisten. Diesen Widerspruch löst man durch die Verwendung vieler kleiner

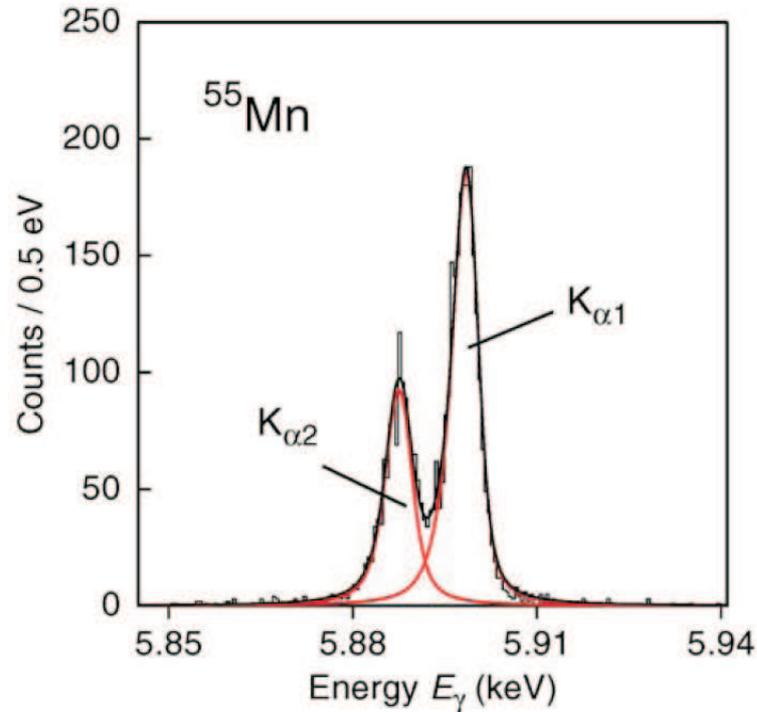


Abbildung 3.4: Spektrum der K_α Linien von Mangan. Die durchgezogenen Linien sind ein Fit an die Daten [FLD⁺04].

Absorber in einer Matrix-Gruppierung; hierdurch erhält man zusätzlich eine orts-empfindliche Nachweismöglichkeit. Da, wie Abb. 3.4 zeigt, Mikrokalorimeter zudem ein ähnliches Auflösungsvermögen wie Kristallspektrometer erreichen, und da weiterhin die Thermalisierung des Absorbers innerhalb weniger μs verläuft, ist mit diesen Detektoren orts- und zeitaufgelöste Präzisionsspektroskopie bei niedrigen Zählraten und hoher Quanteneffizienz möglich. Es besteht kein Zweifel, dass Mikrokalorimeter, wenn ihre Anwendung vereinfacht wird und manche technische Probleme in absehbarer Zeit gelöst sind, Kristallspektrometer fast vollständig ersetzt werden. Jedoch benötigen sie, wie auch die meisten Kristallspektrometer, für die Energiekalibrierung Referenzlinien. Absolute Energiemessungen, wie sie mit Hilfe bestimmter Kristallspektrometertypen durchgeführt werden können (siehe Kap. 3.4), scheinen mit Mikrokalorimetern nicht möglich zu sein.

3.1.3 Transmissionsgitter

Transmissionsgitter für Röntgenstrahlung werden vorwiegend in der Röntgenastonomie und zum Teil zur Diagnostik von Hochtemperaturplasmen verwendet. Satel-

3.1. Methoden zur Wellenlängenbestimmung von Röntgenstrahlung

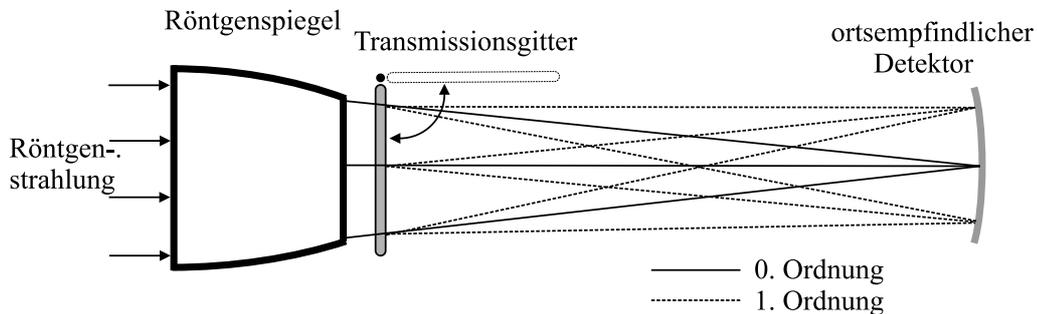


Abbildung 3.5: Prinzipielle Andordnung der Einzelkomponenten des High Energy Transmission Grating (HETG) Spektrometers des Chandrasatelliten [Can]. Die Röntgenstrahlung wird durch eine Röntgenlinse (konzentrische zylindrische Röntgenspiegel) auf den Detektor fokussiert. Mit einem Transmissionsgitter im Strahlengang wird die Röntgenstrahlung gemäß ihrer Wellenlänge gebeugt (gestrichelter Strahlverlauf).

liten wie XMM-Newton (The X-ray Multi-Mirror Mission) oder Chandra sammeln großflächig die Röntgenstrahlung der zu untersuchenden Objekte mittels Röntgenspiegel. Diese Spiegel bestehen aus konzentrisch angeordneten Rotationsparaboloiden und Hyperboloiden, deren Metalloberfläche die Strahlung unter einem Glanzwinkel von der Größenordnung 1° reflektiert. Durch diese spezielle Geometrie wird die Röntgenstrahlung, nachdem sie ein Transmissionsgitter durchlaufen hat, auf den Detektor fokussiert. Dort entsteht ein orts aufgelöstes Spektrum (siehe Abb. 3.5). Wie aus der Optik bekannt (Youngs Doppelspalte bzw. optische Gitter) interferieren die Röntgenstrahlen unter einem Winkel α zur Spaltnormalen nur dann konstruktiv, wenn die Bedingung $n \cdot \lambda = d \cdot \sin(\alpha)$ erfüllt ist. Dabei ist d der Spaltabstand, λ die Wellenlänge und n die Reflexionsordnung ($n = 1, 2, 3, \dots$). Da jedoch der Spaltabstand technisch bedingt groß (bei Chandra 0.2μ bzw. 0.4μ) im Vergleich zur nachweisbaren Wellenlänge ($(1.2 - 30) \cdot 10^{-9}$ m) ist, ergeben sich in Relation zur Optik sehr kleine Ablenkwinkel α . Das Transmissionsspektrometer (HETG) in Chandra, welches für Energien von (0.4-10) keV ausgelegt ist, erreicht dennoch ein verhältnismäßig hohes Auflösungsvermögen von $\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = 60 - 1000$; dies ist jedoch nur durch den in diesem Instrument vorhandenen großen Abstand (~ 10 m) vom Gitter zum Detektor möglich. Diese Ausmaße zeigen, dass der Einsatz von Transmissionsgittern im Labor nicht immer zweckmäßig ist.

3.1.4 Kristallspektrometer

Zur Bestimmung der Wellenlänge und damit der Energie von Röntgenstrahlung nutzen Kristallspektrometer die periodische Anordnung der Atome in Kristallen. Der Abstand der auf Gitterplätzen angeordneten Atome ist ähnlich der Röntgenwellen-

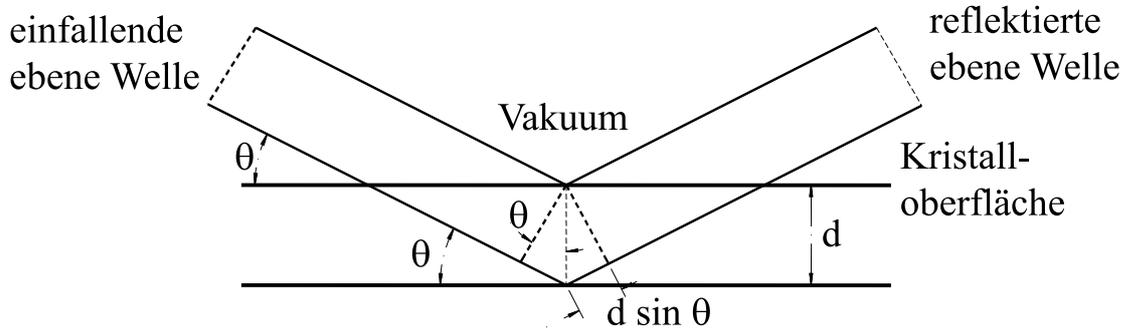


Abbildung 3.6: Veranschaulichung der Herleitung des Bragg-Gesetzes [Bra03]

länge, weshalb es zu Interferenzerscheinungen zwischen den von den Elektronen der einzelnen Atome gestreuten Photonen kommt. Im Kristall lassen sich äquidistante Ebenen definieren, die die Atome enthalten. Ein sehr anschauliche Erklärung der beobachteten Interferenzen lieferten W.H. Bragg und W.L. Bragg, welche vorschlugen, diese Ebenen als teildurchlässige Spiegel zu betrachten, die je nur einen kleinen Teil der Strahlung reflektieren [BB13]. Dabei sei, wie bei einem Spiegel üblich, der Einfallswinkel gleich dem Ausfallswinkel. Jede Ebene reflektiert nur einen kleinen Teil des einfallenden Röntgenquants. Man betrachtet nun eine Schar von parallelen Ebenen im gleichen Abstand d und Röntgenstrahlung der Wellenlänge λ , die unter dem Winkel θ auf den Kristall trifft (Abb. 3.6). Der Wegunterschied Δ zweier Strahlen, die an zwei benachbarten Ebenen reflektiert werden, beträgt $\Delta = 2d \sin \theta$. Damit es nun zur konstruktiven Interferenz kommt, muß dieser Unterschied ein ganzzahliges Vielfaches von λ sein. Dabei können die einfallenden und gestreuten Strahlen als parallel angesehen werden, da im Vergleich zum Ebenenabstand sowohl die Quelle als auch der Beobachter sehr weit entfernt sind. Das Gesetz von Bragg lautet dann:

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.3)$$

Durch die Brechung der Röntgenstrahlung an der Kristalloberfläche modifiziert sich die Gleichung 3.3 zu:

$$2d \sin \theta' = n\lambda' \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.4)$$

Dabei ist λ' die Wellenlänge innerhalb des Kristalls und θ' der Winkel zwischen einer Netzebene und der Röntgenstrahlung im Kristall (Abb. 3.7). Für die Brechzahl μ der Kristalle, die für Röntgenstrahlung aufgrund der größeren Phasengeschwindigkeit v_{ph} im Vergleich zur Gruppengeschwindigkeit v_g ($v_{ph} > v_g$) kleiner 1 ist, gilt folgende Beziehung:

$$\mu = 1 - \delta = \frac{\lambda}{\lambda'} = \frac{\cos \theta}{\cos \theta'} \quad (3.5)$$

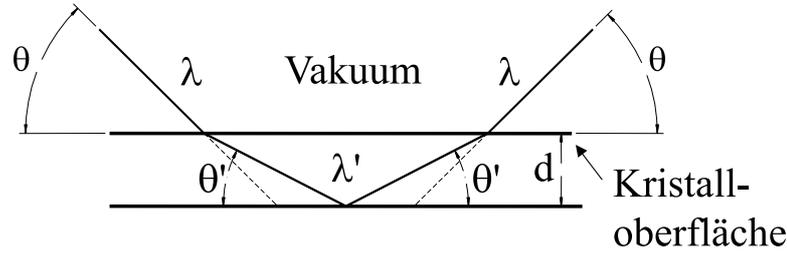


Abbildung 3.7: Modifizierung des Bragg-Gesetzes durch Brechung.

erhält man:

$$\mu = \frac{\lambda}{\lambda'} = \frac{\lambda}{2 \frac{d}{n} \sin \theta'} = \frac{n\lambda}{2d \left(1 - \frac{\cos^2 \theta}{\mu^2}\right)^{\frac{1}{2}}} . \quad (3.6)$$

Eine Umformung ergibt:

$$n\lambda = 2d \sin \theta \left(1 + \frac{\mu^2 - 1}{\sin^2 \theta}\right)^{\frac{1}{2}} . \quad (3.7)$$

Da μ nahe eins ist, kann man $\mu^2 - 1 = (\mu + 1)(\mu - 1) \simeq 2(-\delta)$ nähern. Mit Hilfe der Taylorreihenentwicklung der Wurzel, die nach dem linearen Term abgebrochen wird, erhält man:

$$n\lambda = 2d \sin \theta \left(1 - \frac{\delta}{\sin^2 \theta}\right) . \quad (3.8)$$

Dies ist das modifizierte Bragg-Gesetz unter Berücksichtigung der Brechung, wenn die Absorption im Kristall vernachlässigbar ist [Ewa82]. Mit einem fiktiven Winkel Θ_B läßt sich die Gleichung in die bekannte Form bringen:

$$n\lambda = 2d \sin \theta_B \quad \text{mit: } \sin \theta_B = \sin \theta \left(1 - \frac{\delta}{\sin^2 \theta}\right) = \sin \theta - \frac{\delta}{\sin \theta} \quad (3.9)$$

Dann ist $\sin \theta - \sin \theta_B = \Delta(\sin \theta) = \cos \theta(\Delta\theta)$ und weiterhin ist

$$\Delta\theta = \theta - \theta_B = \frac{\sin \theta - \sin \theta_B}{\cos \theta} = \frac{\delta}{\sin \theta \cos \theta} = \frac{2\delta}{\sin 2\theta} > 0 . \quad (3.10)$$

Hieraus ergibt sich ein Abweichung vom ursprünglichen Bragg-Winkel

$$\Delta\theta \approx \frac{\delta}{\theta} \sim \frac{5 \cdot 10^{-5}}{\theta} \quad (3.11)$$

für kleine Winkel θ mit Werten für δ , die für beispielhafte Übergänge in hochgeladenen Ionen in Tabelle 3.1 aufgelistet sind. Diese Abschätzung ist zwar nur für

Tabelle 3.1: Brechzahl δ in Abhängigkeit der Energien, der in dieser Arbeit gemessenen Übergänge [XROS].

Element	Übergang	Energie (eV)	$\delta * 10^{+6}$ (Si111)
Chlor ¹⁶⁺	$Ly_{\alpha 1}$	~ 2962	55.7
Chlor ¹⁵⁺	$^1P_1 \rightarrow ^1S_0$	~ 2790	62.3
Argon ¹⁷⁺	$Ly_{\alpha 1}$	~ 3323	44.7
Argon ¹⁶⁺	$^1P_1 \rightarrow ^1S_0$	~ 3140	49.8

kleine Winkel gültig, jedoch gibt sie die Größenordnung der Abweichung vom Bragg-Winkel wieder und zeigt, dass bei Präzisionsspektroskopie, die Berücksichtigung des Brechungsindex unbedingt notwendig ist.

Je nach Kristalldicke und Wellenlänge der zu vermessenden Strahlung ist die Nutzung des Kristalls in Transmission möglich, wodurch sehr kleine Bragg-Winkel eingestellt werden können. In dieser Anordnung werden die Röntgenstrahlen, z.B. bei einem fcc-Gitter (face-centered-cubic, kubisch-flächenzentriert), an den senkrecht zur Kristalloberfläche verlaufenden Netzebenen reflektiert (siehe Abb. 3.8). Dies bezeichnet man auch als den Laue Fall, wobei nun die Röntgenstrahlung ausreichend hochenergetisch sein muß, um nicht absorbiert zu werden. Im Gegensatz zur Reflexion muß bei der Transmission die Beugung an der Kristalloberfläche nicht beachtet werden, da der Wegunterschied zweier Strahlen nur durch die unterschiedlichen Wege außerhalb des Kristalls verursacht wird.

Der Zusammenhang zwischen Wellenlänge λ und Winkel θ bildet das Grundprinzip aller Kristallspektrometer. Je nach Kristalldicke und Wellenlänge der zu vermessenden Strahlung ist die Nutzung eines Kristalls in Transmission, d.h. die einfallende Strahlung wird wellenlängenselektiv am Kristall gebrochen, oder in Reflexion, d.h. der rückgestreute Teil wird detektiert, möglich. Im folgenden werden, entsprechend des in dieser Arbeit verwendeten Spektrometers, lediglich Kristallspektrometertypen letzterer Geometrie, die für niederenergetische Röntgenstrahlung geeignet ist, betrachtet.

3.2 Kristallspektrometertypen

Um ein aus vielen verschiedenen diskreten Wellenlängen bestehendes Röntgenspektrum mit nah beieinanderliegenden Linien analysieren zu können, benötigt man ein hohes Auflösungsvermögen. Wie in der Optik gilt hier das Rayleigh-Kriterium, welches besagt, dass zur Trennung zweier sich überlappender Spektrallinien der Abstand derselben voneinander mindestens so groß sein muss, dass sie nicht innerhalb ihrer

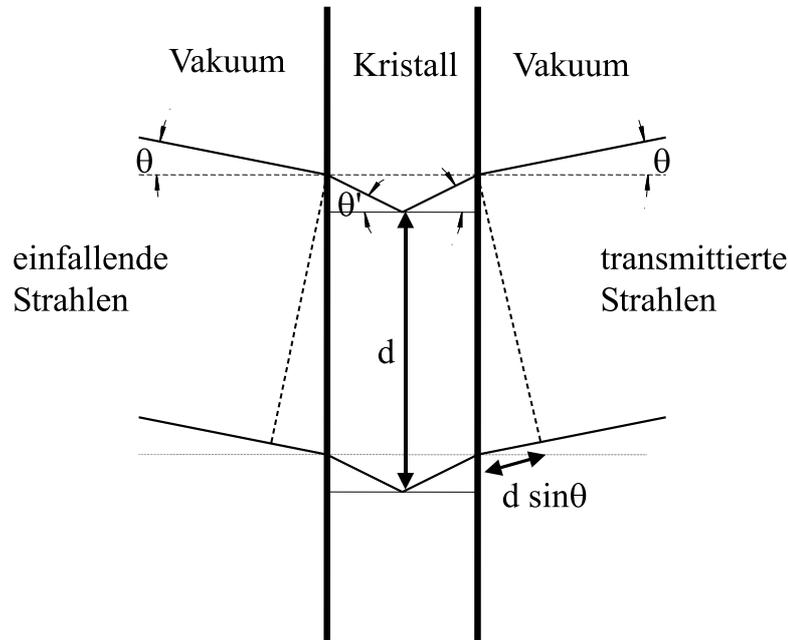


Abbildung 3.8: Geometrie im Lauefall (Transmission).

Halbwertsbreiten überlappen [GV93]. Für Kristallspektrometer impliziert eine hohe Auflösung, dass die Bragg-Bedingung nur in einem sehr kleinen Winkelintervall $\Delta\theta$ um dem Bragg-Winkel θ erfüllt ist, was wiederum bedeutet, dass nur Photonen innerhalb eines sehr kleinen Raumwinkelbereichs konstruktiv interferieren und somit zum Signal beitragen. Das heisst gleichzeitig, dass die meisten, nicht in diesem Raumwinkelintervall einfallenden Photonen destruktiv interferieren und somit verloren sind. Gekrümmte Kristalle, die das röntgenspektroskopische Äquivalent eines fokussierenden Spiegels darstellen, vergrößern diesen Raumwinkel, was insbesondere zum Nachweis schwacher Signale hilfreich ist. Um den in dieser Arbeit neu entwickelten Kristallspektrometertypen einordnen zu können, werden im folgenden die gängigsten Kristallspektrometer vorgestellt. Diese sind die Spektrometer mit ebenen Kristallen, sowie solche mit gekrümmten Kristallen in von Hámos- und Johann-Geometrie.

3.2.1 Geometrie bei Verwendung ebener Kristalle

Ist die Kristallausdehnung in der nichtdispersiven Richtung, d.h. in Richtung orthogonal zur Streuebene, klein im Vergleich zum Abstand Röntgenquelle - Kristall, treffen Strahlen ausserhalb der Streuebene nicht mehr auf den Kristall und werden somit nicht detektiert. Die geometrische Anordnung lässt sich dann auf die 2-dimensionale Streuebene reduzieren und wie in Abb. 3.9 darstellen.

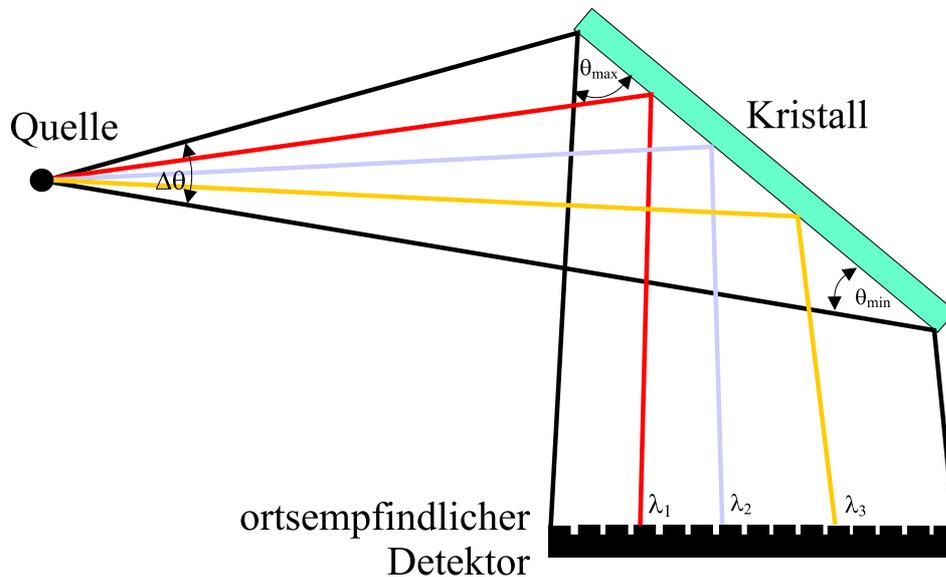


Abbildung 3.9: Anordnung von Quelle, ebenem Kristall und Detektor zum gleichzeitigen Aufzeichnen mehrerer Linien eines Röntgenspektrums.

Bei ebenen Kristallen sind die Netzebenen idealerweise parallel zur Oberfläche. Ein unter verschiedenen Winkeln auf den Kristall treffendes Spektrum verschiedener Wellenlängen wird entsprechend der Bragg-Bedingung in Gl. 3.3 reflektiert und mit Hilfe eines ortsempfindlichen Detektors nachgewiesen. Für höchste Präzision sind die Positionen von Quelle, Kristall und Detektor, sowie die Eichung des Winkelmessgerätes auf die so vorgegebene Achse nicht hinreichend genau bestimmbar und somit ist eine direkte Messung des jeweiligen Bragg-Winkels nicht innerhalb der geforderten hohen Präzision möglich. Vielmehr werden Kalibrationslinien benötigt, deren Wellenlängen jedoch auch nur mit einer gewissen Genauigkeit bekannt sind und die daher unter Umständen die Gesamtgenauigkeit der Messung limitieren. Sind wohlbekannte Kalibrationslinien auf der höher- und niederenergetischen Seite der Linie mit unbekannter Wellenlänge vorhanden, kann die Wellenlänge über die Dispersion berechnet werden, wobei dann systematische Fehlerquellen, wie z.B. die Ausrichtung bzw. Positionierung des Detektors, keinen wesentlichen Einfluss auf das Ergebnis haben. Von Nachteil ist hierbei, dass die Breite des simultan nachweisbaren Spektrums durch Kristall- und Detektorgröße stark eingeschränkt ist und sich deshalb die Anzahl der verwendbaren Referenzlinien erheblich reduziert. Bei der typischen Größe eines positionsempfindlichen Detektors von wenigen Zentimetern und einem Abstand von der Quelle zum Detektor von etwa 1 m ergibt sich ein Winkelbereich in der Größenordnung weniger Winkelgrade, oder $10^{-1} - 10^{-2}$ rad. Bei der Verwendung eines Si-111 Kristalls entspricht dies einem abgedeckten Spektralbereich weniger 10 eV.

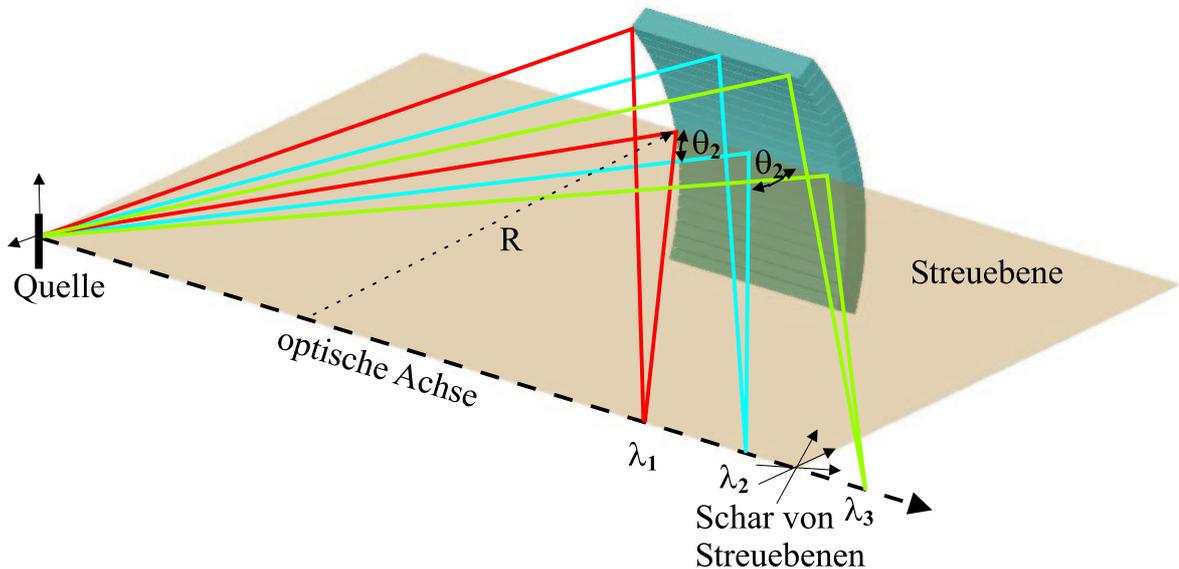


Abbildung 3.10: Gekrümmter Kristall in von Hámos-Geometrie. Die optische Achse ist zugleich Symmetrieachse der Kristallkrümmung. Innerhalb einer Streuebene herrschen die gleichen Bedingungen wie bei ebenen Kristallen

3.2.2 Von Hámos-Geometrie

Bei der von Hámos-Geometrie ist der Kristall zylindrisch entlang der nichtdispersiven Achse gekrümmt; dabei sind die Netzebenen noch immer parallel zur Oberfläche. Röntgenstrahlen, die im Vergleich zu ebenen Kristallen ausserhalb der dort beschriebenen Streuebene verlaufen (vgl. Abschnitt 3.2.1), befinden sich nun in einer Streuebene, die bezüglich der optischen Achse um einen kleinen Winkel gedreht ist (Abb. 3.10). Es gibt somit ein Schar von Streuebene, die sich in der optischen Achse, welche gleichzeitig auch die Symmetrieachse der Kristallkrümmung ist, schneiden. Röntgenstrahlen innerhalb der verschiedenen Ebenen werden so wieder auf die optische Achse zurückreflektiert. Aufgrund der orthogonal zur Streuebene möglichen größeren Ausmaße des Kristalls im Vergleich zu ebenen Kristallen (Strahlengänge ausserhalb der Streuebene führen dort zu Abbildungsfehlern, siehe Abschnitt 4.3.1) wird der Raumwinkel erhöht und die Zählrate entsprechend gesteigert. Die Abbildungseigenschaften wurden durch von Hámos hergeleitet und erlauben die Berechnung der Abbildungsfehler, die durch eine ausgedehnte Quelle, wie z.B. die EBIT, entstehen [Hám33] [Hám34].

3.2.3 Johann-Geometrie

Eine Möglichkeit, die Reflektivität eines Kristalls immens zu steigern, bietet die Johann-Geometrie. Sie ist somit insbesondere für Experimente mit sehr geringem Photonenfluss geeignet. Wie bei der von Hámos-Anordnung ist auch hier der Kristall zylindrisch gekrümmt, jedoch diesmal in Richtung der dispersiven Achse des Kristalls. Bei entsprechender Quellpositionierung fokussiert der Kristall Photonen mit gleicher Energie auf einen bestimmten Punkt eines imaginären, sogenannten Rowlandkreises (Abb. 3.11). Hierbei ist die Bragg-Bedingung auf der gesamten Kristalloberfläche erfüllt, was den zur Detektion zur Verfügung stehenden Raumwinkel um bis zu drei Größenordnungen steigert, nämlich um denjenigen Faktor zwischen der gesamten Kristallfläche und des kleinen Flächenausschnitts, der bei ebenen Kristallen zur Reflexion beiträgt. Eine ausgedehnte Röntgenquelle erlaubt die Abdeckung einer gewissen spektralen Bandbreite durch das Spektrometer, d.h. die Fokuspunkte unterschiedlicher Wellenlängen auf der Detektorfläche stammen aus unterschiedlichen Quellpunkten. Im Falle der Untersuchung hochgeladener Ionen sind z.B. ein Tokamak oder eine ECR-Quelle geeignete Quelltypen. Hat die Quelle keine große räumliche Ausdehnung (z.B. EBIT), kann dieser Nachteil zu einem geringen Teil durch eine Positionierung der Quelle innerhalb des Rowlandkreises ausgeglichen werden. Dadurch trägt aber für eine Linie nicht mehr der gesamte Kristall zur Reflexion bei. Durch die verschiedenen Radien von Kristallkrümmung R_K und Rowlandkreis R_R ($R_R = R_K/2$) kann der räumliche Überlapp von Kristall und Kreis nur in einem Punkt erfüllt werden. Die dadurch entstehende geometrische Abberation und das zu erwartende Auflösungsvermögen können, wie z.B. in [ZMM82] beschrieben, berechnet werden.

3.2.4 Messbereichserweiterung durch Kristallrotation unter Verwendung ebener Kristalle

Wie aus den vorigen Abschnitten ersichtlich, eignen sich gekrümmte Kristalle hervorragend, um die Photonenausbeute bei Kristallspektrometern um einige Zehnerpotenzen zu erhöhen. Geometrische Abbildungsfehler lassen sich jedoch nicht vermeiden und im Fall der Johann-Geometrie ist u.U. die spektrale Bandbreite des Spektrometers erheblich reduziert. Dies hat zur Folge, dass wohlbekannt Referenzlinien um so näher an der zu untersuchenden Linie liegen müssen oder die Quelle um so ausgedehnter sein muss, je besser die Fokussierung der Strahlung durch den Kristall ist. Somit sind systematische Messreihen an verschiedenen Elementen nur mit einer großen Anzahl von Referenzlinien durchführbar, da der energetische Abstand eines bestimmten Übergangs zweier benachbarter Elemente mehrere hundert Elek-

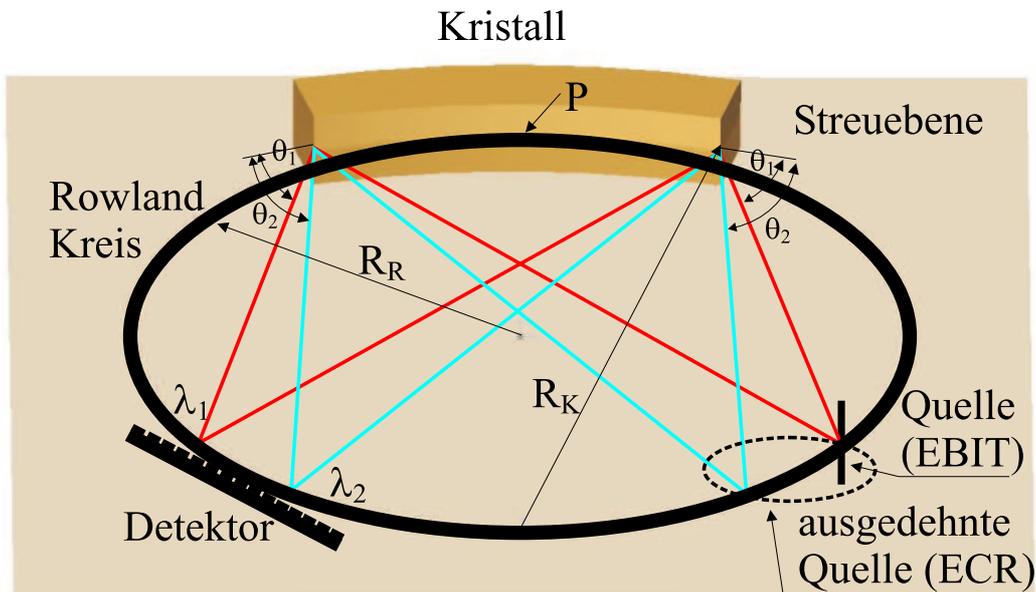


Abbildung 3.11: Johann-Geometrie: Quelle, Detektor und Kristall befinden sich auf dem Rowlandkreis, dessen Radius halb so groß wie der Krümmungsradius des Kristall ist ($R_R = R_K/2$). Aufgrund der unterschiedlichen Radien berühren sich Kristall und Rowlandkreis nur im Punkt P, was zu einer geometrischen Aberration führt.

tronenvolt betragen kann. So beträgt z.B. die Energie der $Ly_{\alpha 1}$ Linie ($2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$) in den benachbarten wasserstoffartigen Systemen Cl^{16+} und $Ar^{17+} \sim 2962$ eV bzw. ~ 3323 eV. Aber auch Messungen verschiedener Übergänge desselben Elements, mit Hilfe derer sich z.B. Aussagen über die Elektronenkorrelation treffen lassen, setzen eine große spektrale Bandbreite voraus ($Ar^{16+} 1s2p \ ^1P_1 \rightarrow 1s^2 \ ^1S_0 \sim 3139$ eV). Eine Messbereichserweiterung, um oben genannte Messungen durchführen zu können, lässt sich bei handhabbaren geometrischen Bedingungen nur bei der Verwendung ebener Kristalle erreichen. Diese bieten den Vorteil, dass man sie zur Wahl des Bragg-Winkels rotieren kann, ohne dass Abbildungsfehler bzw. deren Änderung eine Rolle spielen, welche die Drehung gekrümmter Kristalle praktisch unmöglich machen. Wird der Drehwinkel des ebenen Kristalls mit hoher Präzision vermessen, erreicht man hiermit eine enorme Erweiterung des Messbereichs ohne signifikante Einbußen bei der Genauigkeit (siehe Abb. 3.12). Da jedoch wie zuvor erwähnt die Position von Quelle, Kristall und Detektor nicht hinreichend genau bekannt sind, muss die Strahlung zur Sicherstellung identischer Einfallsrichtungen von Referenzlinie und zu vermessender Linie kollimiert werden (siehe Abb. 3.12). Dies hat jedoch offensichtlich zur Folge, dass zeitgleich kein breites Spektrum mehr aufgenommen werden kann. Viel schlimmer wiegt jedoch oft, dass durch den zusätzlich reduzierten Raumwinkel die Zählstatistik um mindestens 30% verschlechtert wird,

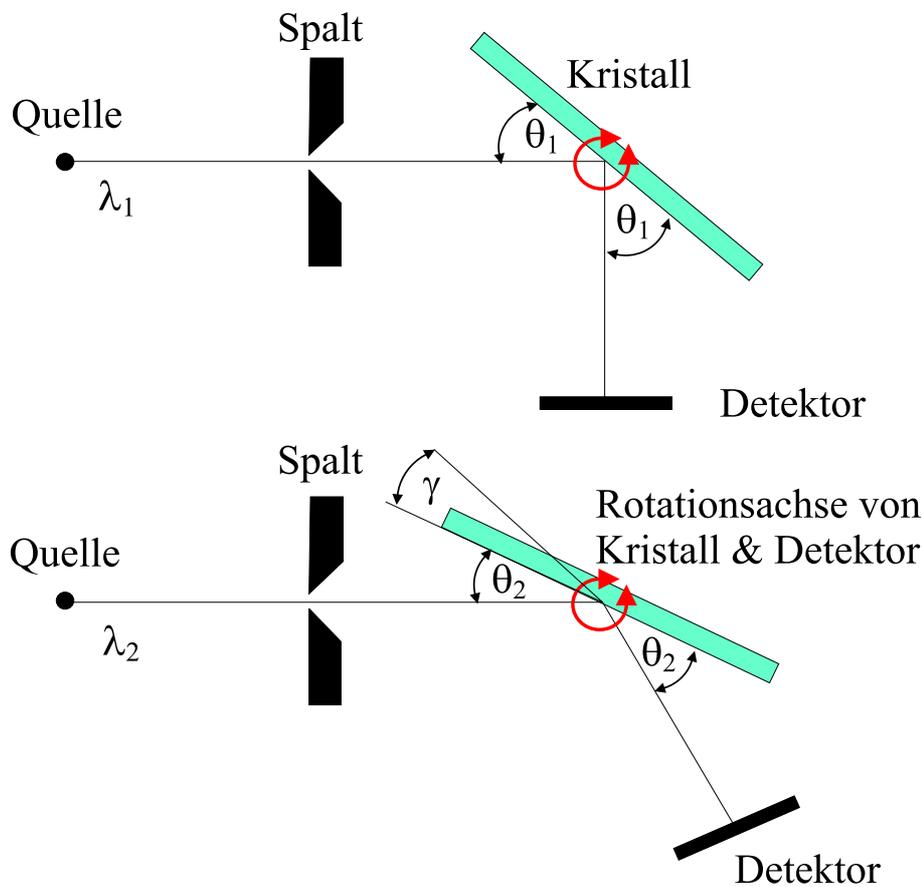


Abbildung 3.12: Messprinzip bei Kristallrotation. Der Winkel γ ist der präzise messbare Rotationswinkel und Θ_1 der z.B. aus der Literatur bekannte Bragg-Winkel einer Kalibrationslinie. Es gilt: $\Theta_2 = \Theta_1 - \gamma$.

da die Breite des Kollimationsspalt es zumindest auf die Linienbreite reduziert werden sollte, um die Einfallsrichtung hinreichend genau festlegen zu können. Dadurch ist die Genauigkeit der Messung zudem durch die Linienbreite begrenzt. Für genauere Einfallsrichtungsbestimmung muss der Spalt verengt und das Intensitätsprofil der Linie abgetastet werden, was zu zusätzlichem Intensitätsverlust führt und eine stabile Quellintensität voraussetzt. Es ist offensichtlich, dass daher Kollimation nur bei sehr intensiven, intensitätsstabilen Strahlungsquellen in Frage kommt. Die durch Kollimation entstehenden Nachteile werden durch die im folgenden Kapitel (4.1) beschriebene Methode der kollimationsfreien Bestimmung der Einfallsrichtung, unter Beibehaltung der durch Kollimation erreichbaren Winkelpräzision, vollständig eliminiert. Hierdurch erreicht man die gewünschte Meßbereichserweiterung trotz geringer Quellintensität.

3.3 Referenzlinien

Alle bisher beschriebenen Messverfahren verwenden eine oder mehrere geeignete Referenzlinien, um die Wellenlänge einer unbekanntes Röntgenlinie zu bestimmen. Die K_α Übergänge in Metallen dienen häufig als Referenzlinien im Röntgenbereich, da ihre Wellenlängen zum überwiegenden Teil mit hoher Genauigkeit bekannt sind und sie durch Elektronenstoß einfach erzeugt werden können. Hierzu wird ein hochenergetischer Elektronenstrahl auf eine Elektrode aus dem gewählten Metall gerichtet, der neben anderen Prozessen auch Elektronen aus der K-Schale der Atome heraus schlägt. Beim anschließenden Übergang eines Elektrons aus einer energetisch höheren Schale in das so entstandene Loch sendet das Atom ein charakteristisches Photon mit der Energie aus, die dem Unterschied der beiden Bindungsenergien der beteiligten Niveaus ($K_{\alpha 1(2)} : 2p_{3/2} (2p_{1/2})$ und $1s_{1/2}$) entspricht. Im Bereich weicher Röntgenstrahlung verwendet man die K_α Übergangsenergien von Kupfer (Cu), Molybdän (Mo) und Wolfram (W) als Standardwellenlänge [MT00], doch auch die Wellenlängen anderer Elemente sind mit einer Genauigkeit von etwa einem ppm bekannt [HFD⁺97]. Für die Messung der Ly_α Wellenlängen in wasserstoffartigen Systemen mit der Kernladung Z eignen sich besonders die K_α Wellenlängen der Elemente mit der Kernladungszahl $Z - 1$, da sie ähnliche Übergangsenergien besitzen ($E_{K_\alpha}(Z) \approx E_{Ly_\alpha}(Z - 1)$).

Trotz der hochgenauen Literaturwerte ist die Verwendbarkeit dieser Linien z.T. erheblich eingeschränkt, bzw. erfordert die Beachtung vieler möglicher Fehlerquellen. So ist beispielsweise das Linienprofil durch sog. Satelliten geprägt, d.h. durch Beiträge von Übergängen mit nur leicht abweichender Energie, die durch eine veränderte Elektronenkonfiguration bei den äußeren Elektronen während des K_α Übergangs hervorgerufen wird. Es ist z.B. möglich, dass ein weiteres Elektron in der Hülle fehlt und somit die Kernabschirmung geringfügig abnimmt, oder dass das emittierte Photon an einem schwach gebundenen Elektron streut, dieses anregt oder ionisiert und somit das Atom mit leicht verringerter Energie verlässt. Diese Beiträge führen zu einem asymmetrischen Linienprofil und sind zusätzlich vom Anregungsmechanismus (z.B. Elektronenstrahlenergie und -strom) sowie der chemischen Umgebung des strahlenden Atoms abhängig. Durch die Faltung dieser Linienasymmetrie mit der aufgrund des Kristalls, der Ausdehnung der Quelle und des begrenzten Auflösungsvermögens des Detektors entstehenden Verbreiterungsfunktion, resultiert eine Verschiebung des Linienschwerpunktes, welche die Unsicherheit des Literaturwertes der Wellenlänge bei weitem übertreffen kann. Eine Simulation basierend auf den in [HFD⁺97] veröffentlichten Daten und der im hier verwendeten Spektrometer erwarteten Verbreiterung, ergibt für das Element Eisen die in Abb.(3.13) gezeigte Verschiebung des Linienschwerpunktes um ≈ 35 ppm. Es ist nur mit erheblichen

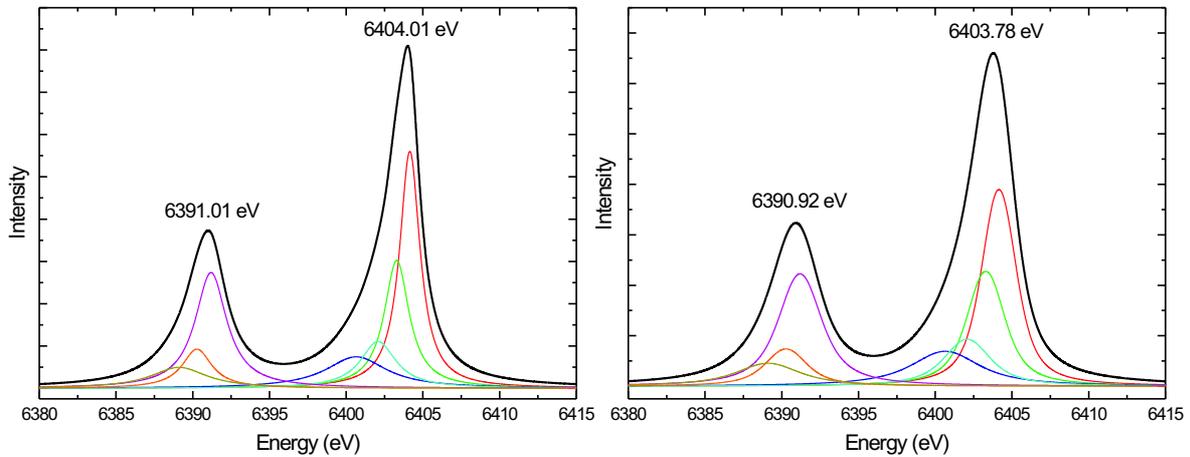


Abbildung 3.13: Links: 7 empirisch ermittelte Lorentzkurven, welche verschiedene Satelliten darstellen, ergeben das Summenspektrum, das bestmöglich das tatsächlich gemessene Spektrum repräsentiert [HFD⁺97]. Rechts: Das gleiche Spektrum mit einer Gaußverbreiterung von 0.5 eV gefaltet, um die kristallbedingte Verbreiterung zu simulieren [Bru05].

Schwierigkeiten möglich, diese Verschiebung des Linienschwerpunktes zu korrigieren, denn hierzu muss die Linie mit immer gleichen Bedingungen angeregt werden und oben erwähnte Verbreiterungsmechanismen quantitativ bekannt sein. Hingegen ist die Linienform von Lyman- α Linien in H-ähnlichen Systemen symmetrisch, da bei Übergängen in wasserstoffartigen Ionen eine Wechselwirkung mit anderen Elektronen ausgeschlossen ist. Daher stellen hier Verbreiterungsmechanismen kein prinzipielles Problem dar, und der Linienschwerpunkt kann ohne Korrekturen, d.h. modellunabhängig, bestimmt werden.

Da die Übergangsenergien in H-ähnlichen Ionen zudem präzise berechnet werden können, wurde in der Literatur bereits der Vorschlag geäußert, diese Linien als neuen Röntgenstandard zu definieren [FKKM01, AGIS03]. Damit jedoch diese Linien als neuer Röntgenstandard akzeptiert werden können, ist zuvor eine experimentelle Bestätigung der Rechnungen im Bereich von 1 ppm notwendig, und somit eine Genauigkeit vergleichbar mit derjenigen des bisherigen Standards erreicht wird. Eine solche Bestätigung steht noch aus, da bisher nur in einer einzigen Messung 5 ppm erreicht wurden und nur einige wenige besser als 30 ppm sind.

Bei Verwendung der meisten Kristallspektrometertypen, insbesondere auch beim Einsatz der in Kapitel 4.1 beschriebenen a/b-Methode, ist es zudem notwendig, dass Referenz- und zu vermessende Linie vom identischen Volumen emittiert werden. Der erforderliche präzise räumliche Überlapp der Positionen verschiedener Quellen ist generell schwierig mit hinreichender Genauigkeit zu erreichen. Im Falle der Verwendung von K_α Strahlung neutraler Elemente und einer EBIT ergeben sich zusätzliche Schwierigkeiten durch den begrenzten Zugang zum Fallenvolumen, da dieses vom

supraleitenden Magneten, insbesondere dessen Flüssighelium-Dewar und von thermischen Schilden umgeben ist, und daher nur schmale Zugänge zur Spektroskopie zur Verfügung stehen. Demonstriert wurde eine solche Kalibration von Tarbutt *et al.* [TCM⁺00], die einen Vanadiumdraht in das Fallenvolumen der Oxford-EBIT einbrachten und die Vanadium K_α Übergänge mit dem EBIT-Elektronenstrahl anregen. Da für die Kalibrierung und die Messung höchst unterschiedliche Elektronenstrahlparameter eingestellt werden müssen, ist es jedoch fraglich, ob der räumliche Überlapp hinreichend gewährleistet ist. So führt beispielsweise ein Versatz von nur $1\ \mu\text{m}$ in der in dieser Arbeit verwendeten Messanordnung zu einem systematischen Fehler von 1-1,5 ppm.

Folglich erscheint es sinnvoll, auf Referenzlinien zurückzugreifen, die im Fallenvolumen produziert und von dort emittiert werden, beispielsweise die Lyman- α Übergänge, in H-ähnlichen Ionen, die zudem auch ein symmetrisches Linienprofil aufweisen. Eine solche Messung wurde bereits an der Heidelberger EBIT durchgeführt [Bru05]. Eine Betrachtung der erhaltenen Ergebnisse zeigt, dass der Messfehler nun allerdings zu wesentlichem Anteil durch die Ungenauigkeit der Referenzlinie geprägt ist. Da die verbleibenden dominanten Fehlerquellen, nämlich die statistische Signifikanz und die Positionierung der Lichtquelle für die a/b-Methode kontrollierbar sind, stellt der Fehler der Referenzlinie die untere Grenze der erreichbaren Genauigkeit dar. Da die in [Bru05] verwendete Referenzlinie, Ar $Ly_{\alpha 1}$, die experimentell am genauesten bekannte Röntgenlinie in hochgeladenen Ionen ist, kann keine signifikante weitere Reduktion des Messfehlers in folgenden Messungen erwartet werden. Deshalb wäre es für die Präzisionsspektroskopie von entscheidender Bedeutung, wenn man vollständig auf Referenzlinien verzichtete und somit die prinzipiell erreichbare Unsicherheit auf $< 1\ \text{ppm}$ verringerte. Möglichkeiten zur absoluten Bestimmung von Röntgenwellenlängen werden im nächsten Abschnitt behandelt.

3.4 Methoden für Absolutmessungen von Röntgenwellenlängen

Bei einer Absolutmessung wird die Wellenlänge, anstatt sie wie bei einer Relativmessung mit einer anderen Wellenlänge zu vergleichen, direkt gemessen. Das so erhaltene Ergebnis ist also in seiner Genauigkeit nicht mehr von der Referenzlinie abhängig. So ist es z.B. in der Optik möglich die Wellenlänge von sichtbarem Licht unter Verwendung eines Doppelspalt (oder mit Hilfe eines optischen Gitters mit bekannter Strichzahl), dessen Abstand in der SI-Einheit Meter bekannt ist zu bestimmen. Dabei existiert zwischen Wellenlänge λ und Spaltabstand d der Zusammenhang $n \cdot \lambda = d \cdot \sin(\alpha)$ (siehe Kap. 3.1.3), ähnlich zum Bragg-Gesetz für Röntgenstrahlung.

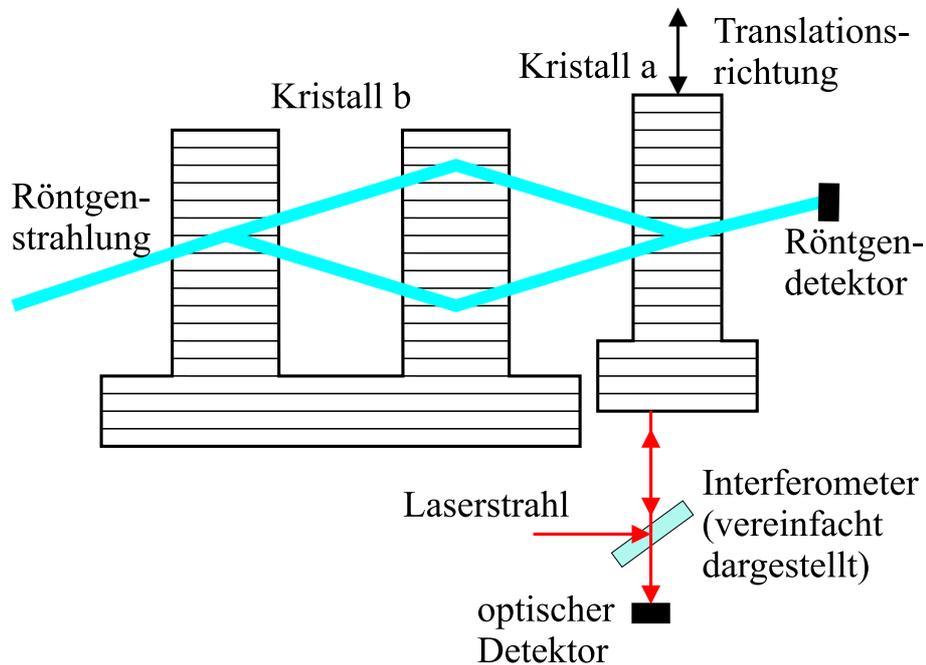


Abbildung 3.14: Prinzip der Messanordnung zur Absolutbestimmung der Silizium Kristallgitterkonstanten.

Die Genauigkeit der Position von Detektor und Doppelspalt, wie auch der Spaltgröße, limitieren analog dem Fall der Absolutbestimmung eines Bragg-Winkels aus einer Kristall-Detektorposition die erreichbare Genauigkeit einer solchen Messung. Mit sichtbarem Licht erreicht man daher höchste Genauigkeiten durch Vermessen der Frequenz statt der Wellenlänge mit phasenstabilisierten Lasern, die einen sog. Frequenzkamm mit äquidistanten Lasermoden bilden. Mit einer solchen Apparatur wurde am Max-Planck-Institut für Quantenoptik in der Gruppe um T.W. Hänsch der 1S-2S Übergang in atomarem Wasserstoff mit einem relativen Fehler von $1,8 \cdot 10^{-14}$ gemessen [NHR⁺00].

Eine Messung der Frequenz von Röntgenstrahlung ist derzeit weder realisierbar noch absehbar in Aussicht, da im Energiebereich von keV keine phasenstabile Röntgenlaser existieren. Somit ist bisher lediglich eine Absolutmessung von Röntgenwellenlängen unter Verwendung von Kristallen in speziellen Geometrien möglich. Ein wesentlicher Beitrag hierzu ist die Ankopplung der Gitterkonstante des Siliziumkristalls an den SI-Standardmeter [BDE⁺81]. Dies gelang durch die Verwendung eines Röntgeninterferometers, mit dem die Verbindung zwischen der Kristallgitterkonstanten und der Wellenlänge eines optischen Lasers hergestellt werden konnte. Eine schematische Darstellung des Messprinzips ist in Abb. 3.14 zu sehen. In der verwendeten Geometrie passiert die Röntgenstrahlung dünne Kristallschichten, wobei jeweils ein Teil ohne Ablenkung transmittiert wird, während der andere Teil un-

ter dem Bragg-Winkel gestreut wird. Anschließend interferieren zwei Teilstrahlen aus dem Kristall b in dem verschiebbaren Kristall a, dessen Verschiebeweg laserinterferometrisch bestimmt wird. Die Intensität der interferierenden Röntgenstrahlung variiert periodisch bei einer Translation des Kristalls entsprechend dessen Gitterkonstanten d , wohingegen sich die Laserintensität periodisch gemäß einer Verschiebung um $\lambda/2$ wiederholt. Somit entsteht folgender Zusammenhang zwischen Gitterkonstanten d und Laserwellenlänge λ

$$d = \frac{m}{n} \cdot \frac{\lambda}{2} , \quad (3.12)$$

wobei m für die Anzahl der optischen- und n für die Anzahl der Röntgenintensitätsmaxima steht. Der mit solch einer Apparatur gemessene Wert der Gitterkonstanten d_{220} eines hochreinen Siliziumkristalls im Vakuum bei $22,50^\circ\text{C}$ ist $d_{220} = (192015.560 \pm 0.012)$ fm, dies entspricht einem relativen Fehler von 0.062 ppm. Es gilt hierbei zu beachten, dass diese Bestimmung unabhängig von der Röntgenwellenlänge ist, d.h. die Gitterkonstante ist in SI-Einheiten gegeben. Das Ergebnis einer absoluten Wellenlängenmessung mit solch einem Kristall liegt dann ebenso in der gewünschten SI-Einheit Meter vor. Für höchste Präzision wird hierzu eine geeignete, raffinierte Messanordnung benötigt, bei der sich der Bragg-Winkel aus präzise vermessbaren Größen ableiten lässt. Zwei geeignete Geometrien werden im folgenden vorgestellt.

3.4.1 Der Quasi-Monolith

Bereits vor mehr als 80 Jahren wurde von Uhler und Cooksey [UC17] eine Methode vorgestellt, die bei bekannter Kristallgitterkonstanten eine Absolutmessung der Wellenlänge erlaubt. Diese Methode benutzt einen fest montierten Kristall und einen beweglichen Detektor, damals eine Photoplatte, welcher zwischen zwei Aufnahmen wohldefiniert orthogonal zu seiner Oberfläche verschoben wurde. Der Abstand der beiden Bilder ein und derselben Röntgenlinie auf der Photoplatte, bedingt durch deren Verschiebung, ist wellenlängenabhängig und erlaubt deren Berechnung. Da hierzu immer zwei aufeinanderfolgende Aufnahmen notwendig waren, entwickelten Förster *et. al.* [KHFB97] aufbauend auf dieser Methode einen sog. Kristall-Quasimonolithen, der ohne Doppelbelichtung auskommt. Der Quasimonolith besteht aus zwei gleichen Kristallplatten, die auf gegenüberliegenden Seiten eines Quarzglasblocks befestigt sind; hierdurch wird ein präzise bestimmbarer Abstand L der Platten und ihr paralleler Verlauf gewährleistet (Abb. 3.15). Die hintere Kristallfläche ragt über die vordere hinaus, so dass unter dem Bragg-Winkel einfallende Röntgenstrahlung von den Frontflächen beider Kristallplatten reflektiert wird. Aufgrund des

Parallelversatzes der reflektierenden Flächen ergibt sich ein Parallelversatz der beiden Röntgenreflexe auf dem Detektor um den Abstand A . Aus der Geometrie läßt sich die Größe des Bragg-Winkels

$$\theta = \sqrt{1 - \left(\frac{A}{2L}\right)^2} \quad (3.13)$$

herleiten. Da zur Bestimmung des Bragg-Winkels mit dieser Methode keine Winkelmessung durchgeführt werden muss, kann auf Kollimation der einfallenden Strahlung verzichtet werden. Bei der bisher genauesten Messung mit solch einem Aufbau wurde die Energie der $Ly_{\alpha 1}$ und $Ly_{\alpha 2}$ von Mg^{11+} an einer EBIT mit einer Genauigkeit von 24 ppm bestimmt [HFK⁺98]. Da Zählstatistik hierbei der limitierende Faktor war, sind präzisere Messungen mit dieser Methode in Zukunft möglich. Sicherlich ist prinzipiell mit solch einem Quasi-Monolithen ein relativer Fehler von nur 1 ppm erreichbar, wobei jedoch für präzise Messungen der Messbereich auf große Bragg-Winkel θ beschränkt ist (Abb. 3.16). Ist die Detektorskala nicht hinreichend genau bekannt oder nichtlinear, ist für ein Messergebnis mit höchster Präzision eine genaue Kalibrierung des Detektors unumgänglich. Die Tatsache, dass der Abstand der Linien auf dem Detektor mit kleiner werdendem Bragg-Winkel zunimmt, erfordert für höhere Energien eine größere Nachweisfläche; da diese in der Praxis jedoch meist begrenzt ist, wird hierdurch der verfügbare Messbereich zusätzlich reduziert.

3.4.2 Das Bond-Verfahren

Im Jahre 1959 stellte W.L. Bond eine Methode zur Bestimmung der Kristallgitterkonstanten mit Hilfe einer bekannten Röntgenwellenlänge vor, die, wie noch gezeigt wird, wenig sensitiv auf systematische Fehler ist [Bon60]. Ist umgekehrt die Gitterkonstante präzise bekannt (Abschnitt: 3.4), kann mit diesem Verfahren die Röntgenwellenlänge mit einer Genauigkeit von 1 ppm und sogar besser vermessen werden. Im Prinzip nutzt die Bond-Methode die Tatsache aus, dass ein Halbkreis im Bogenmaß exakt 180 Winkelgrad misst, was eine Differenzwinkelmessung zwischen dem unbekanntem Bragg-Winkel und 180° ermöglicht. Wie in Abb. 3.17 zu sehen ist, trifft in dieser Anordnung ein Röntgenstrahl bekannter Einfallrichtung auf den drehbar gelagerten ebenen Kristall; dabei wird die Strahlung je nach Kristallstellung nach unten oder nach oben reflektiert. Der Bragg-Winkel lässt sich aus dem Drehwinkel des Kristalls γ , bzw. dem des Detektors Γ bestimmen:

$$\theta_B = \frac{180 - \gamma}{2} \quad \text{bzw.} \quad \theta_B = 180 - \frac{\Gamma}{2} . \quad (3.14)$$

Dies birgt den enormen Vorteil, dass keine Absolutpositionen und Winkel bekannt sein müssen, sondern lediglich Differenzwinkel, die mit höchster Präzision gemessen

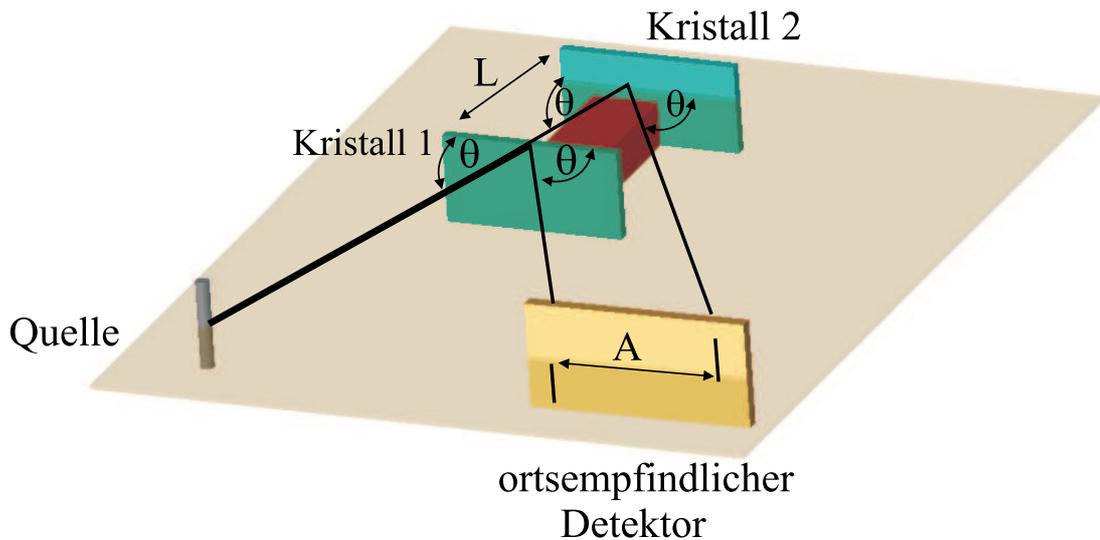


Abbildung 3.15: Prinzipielle Anordnung für die Verwendung eines Quasimonolithen zur absoluten Wellenlängenbestimmung. Die Wellenlänge der zu vermessenden Röntgenstrahlung kann mit Hilfe der Gitterkonstante d , dem Abstand der reflektierenden Oberflächen L und der durch den Detektor gemessenen Distanz A der Reflexe bestimmt werden [KHFB97].

werden können. Misst man den Drehwinkel des Kristalls, können bei einer Messapparatur zwei verschiedene Detektoren verwendet werden, falls es nicht möglich ist, einen Detektor über die Spektrometerachse (Abszisse) zu schwenken. Zudem kann der Drehwinkel des Kristalls experimentell sicherlich präziser bestimmt werden als der eines Detektors, da der Kristall kleiner und leichter ist und somit besser auf einer drehbaren Achse zu montieren ist (Abschnitt: 5.3.2). Liegt die Drehachse des Kristalls nicht, wie es in Abb. 3.17 gezeigt ist, exakt auf einer durch Kollimation definierten Strahlrichtung, erfährt der reflektierte Strahl einen Versatz. Verwendet man jedoch einen großflächigen Detektor, kann das Signal dennoch aufgenommen werden und der Kristallwinkel gibt (im Gegensatz zum Detektorwinkel) den Bragg-Winkel noch immer richtig wieder. Dies ist auch dann der Fall, wenn die Rotationsachse nicht entlang der Kristallobersfläche verläuft, d.h. die Oberfläche exzentrisch gelagert ist.

Das Bond-Verfahren mit seinen Vorzügen, die höchste Präzision erlauben, wurde u.a. bei der Vermessung der K_α Linien von Cr, Mn, Fe, Co, Ni und Cu verwen-

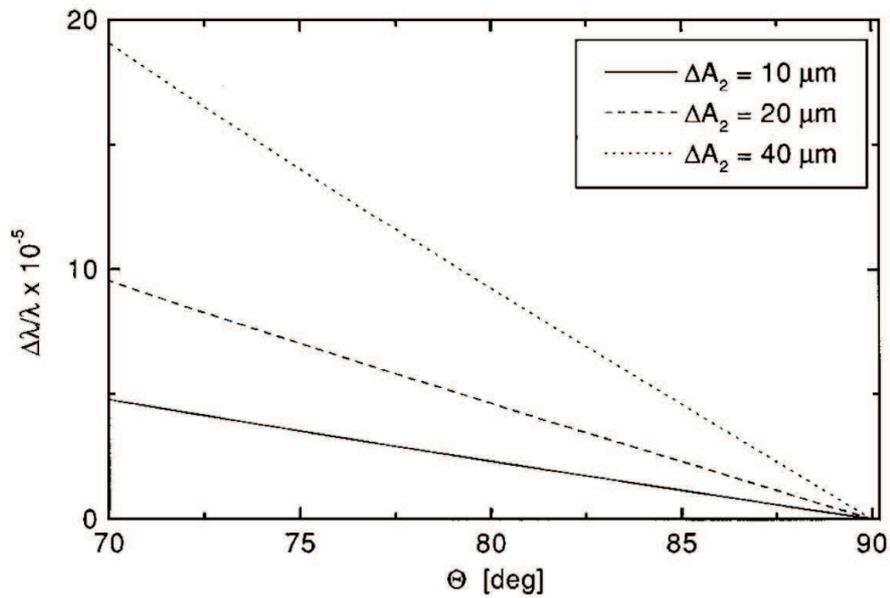


Abbildung 3.16: Berechnetes Auflösungsvermögen $\Delta\lambda/\lambda$ für einen Quasimonolithen abhängig vom Bragg-Winkel. ΔA ist der Fehler bei der Bestimmung des Linienabstandes auf der Detektoroberfläche [KHFB97].

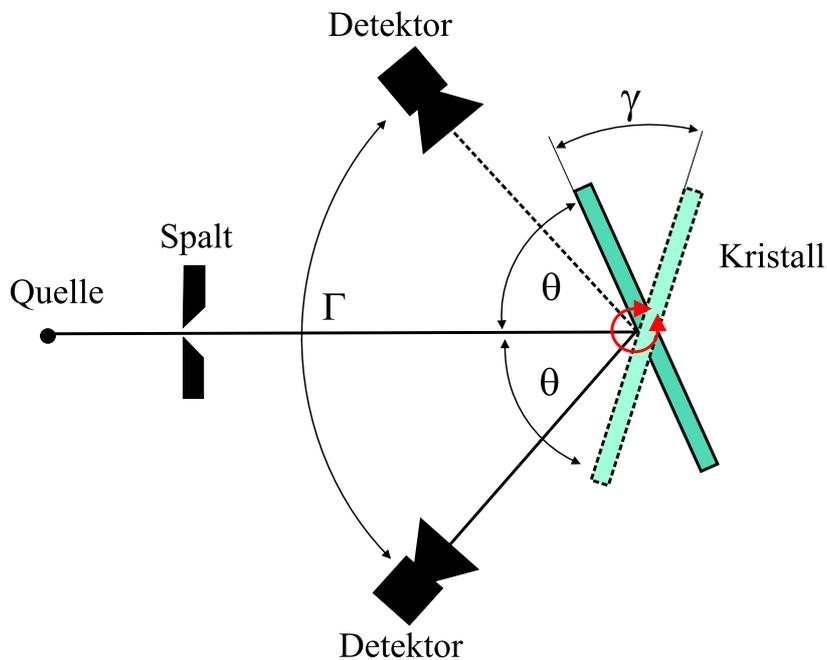


Abbildung 3.17: Messmethode nach Bond.

det [HFD⁺97]. In diesen Messungen wurde die Überlegenheit dieses Verfahrens demonstriert, da die genannten Wellenlängen mit Genauigkeiten bis zu 0.25 ppm ver-

messen wurden, und damit die am präzisesten bekannten Wellenlängen im Röntgenbereich darstellen. Da der Einsatz der Bond-Methode einen definierten Strahlengang erfordert, der bislang nur durch Kollimation und somit nur mit intensiven Röntgenquellen erreicht werden konnte, erlaubt die im nächsten Kapitel vorgestellte a/b-Methode nun erstmalig, das Bond-Verfahren zusammen mit einer Quelle mit niedrigem Photonenfluss z.B. einer EBIT anzuwenden. Dadurch ist es möglich, die Rechnungen von Übergangswellenlängen in wasserstoffartigen Ionen ohne Bedarf sekundärer Standards direkt zu überprüfen, und die Übergangswellenlängen unter Einsatz eines Silizium-Kristalls direkt an den Standardmeter zu koppeln. Zudem bilden diese Linien dann eine geeignete Referenz für zukünftige Messungen an hochgeladenen Ionen mit Mikrokolorimetern, die für höchste Präzision symmetrische Referenzlinien erfordern. Dieser bereits vorgeschlagene Röntgenstandard könnte bei Erreichen einer Präzision von ~ 1 ppm den bisherigen Standard ablösen, da aufgrund der Symmetrie der Linien aus H-artigen Ionen eine Verschiebung des Schwerpunktes durch Verbreiterungsmechanismen keine modelabhängigen Korrekturen nötig sind, d.h. dass trotz zunächst evtl. geringerer Genauigkeit des Wertes der „neuen“ Standardlinie experimentell insgesamt eine höhere Präzision erreicht werden kann.

Kapitel 4

Kollimationfreie Bestimmung der Einfallrichtung, die a/b-Methode

Das grundlegende Konzept der Bestimmung der Wellenlänge mittels Beugung an Kristallen erfordert die Kenntnis der Winkel der einfallenden bzw. reflektierten Strahlung. Bei nicht von Natur aus hochparallelen Strahlenbündeln, die von ausgedehnten Strahlungsquellen ausgesandt werden, ist es notwendig, eine Richtung der Strahlung durch Kollimation auszuwählen. Im Allgemeinen kann dies durch die Verwendung von Spalten, Blenden, oder durch eine Kombination dieser Elemente (z.B. Soller-Schlitzen) in einer gewissen Entfernung voneinander und der Quelle gewährleistet werden. Bei dieser Festlegung der Strahlrichtung wird sämtliche Strahlung, die nicht exakt entlang der vorgegebenen Richtung verläuft, durch das Material der Spalte absorbiert.

4.1 Das Prinzip der a/b-Methode

Der Nutzen eines Kollimationsspalts besteht somit darin, die Einfallrichtung der Röntgenstrahlung festzulegen, was jedoch zu Photonenverlust führt. Tatsächlich ist aber lediglich die Kenntnis der Einfallrichtung bzw. deren Unterschied für die jeweilige Kristallstellung für Referenz- und zu vermessender Linie notwendig, um die Bragg-Winkeldifferenz bestimmen zu können. Der wesentliche Punkt der in dieser Arbeit zusammen mit [Bru05] entwickelten neuen Methode besteht darin, die Röntgenstrahlung nicht zu kollimieren und somit die Einfallrichtung zu definieren, sondern stattdessen die Einfallrichtung in Abhängigkeit von der Kristallrotation zu beschreiben. Hierdurch werden alle Vorteile der Verwendung ebener Kristalle erhalten ohne einen Intensitätsverlust hinnehmen zu müssen. So kann bei einer Abso-

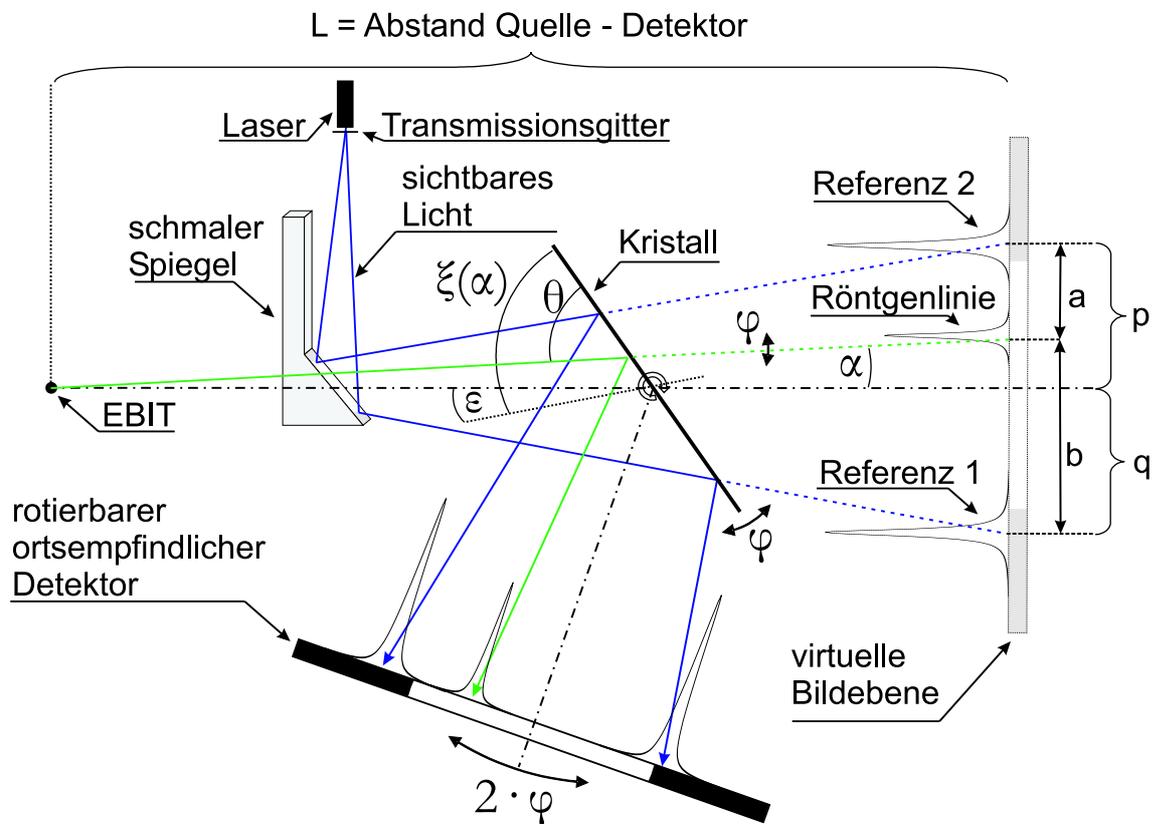


Abbildung 4.1: Geometrische Skizze der a/b-Methode zur Bestimmung der Einfallrichtung reflektierter Röntgenstrahlen [Bru05]. Die horizontale Strichpunktlinie ist die Hauptachse die durch die Quelle (EBIT) und durch die Kristallrotationsachse verläuft. Mit einem Laser und einem Transmissionsgitter werden Lichtreferenzlinien erzeugt. Diese werden über einen schmalen Spiegel in den Strahlengang der Röntgenstrahlung umgelenkt. Auf diese Weise ist ihre virtuelle Punktquelle identisch mit derjenigen der Röntgenstrahlung. Zum besseren Verständnis werden sowohl die vom Kristall reflektierten Strahlen als auch der Detektor an der Kristalloberfläche gespiegelt auf der rechten Bildseite (gestrichelt) dargestellt. Dies ergibt eine virtuelle Bildebene, in der die gleiche Geometrie wie auf dem Detektor gilt.

lutenergie von z.B. 3 keV ein relativ breites Spektrum mit einem Umfang von bis zu 100 eV unter Verwendung eines gängigen ortsauflösenden Detektors aufgenommen werden. Weiterhin ist es möglich durch Drehung des Kristalls den vom Spektrometer abgedeckten Spektralbereich um ein Vielfaches, bis in den Bereich von einigen keV zu erweitern. Zudem werden durch die einfache Geometrie ebener Kristalle Abbildungsfehler und unübersichtliche geometrische Verhältnisse vermieden. Wie im folgenden erläutert ist, wird dies durch die Verwendung von zwei Lichtstrahlen, die als Richtungs- bzw. Positionsreferenz dienen, bewerkstelligt (Abb. 4.1).

Die erwähnten Lichtstrahlen werden durch Beugung eines Laserstrahls an einem Transmissionsgitter erzeugt und werden an der polierten Oberfläche des Röntgen-

kristalls, der für sichtbares Licht wie ein gewöhnlicher Spiegel wirkt, reflektiert. Im Gegensatz zur Röntgenstrahlung, für deren Reflexion die Bragg-Bedingung erfüllt sein muss, wird sichtbares Licht vom Kristall unter jedem beliebigen Winkel reflektiert. Bei Drehung des Kristalls um den Winkel φ und gleichzeitiger Drehung des Detektors um 2φ um dieselbe Achse treffen die Lichtstrahlen immer auf die gleiche Position des Detektors. Sie erscheinen somit als Fixpunkte in einer virtuellen Bildebene, die zur Vereinfachung der geometrischen Gegebenheiten eingeführt wird. Der Winkel α zwischen dem Strahlengang der auf dem Kristall unter dem Winkel θ reflektierten Röntgenstrahlung und der Hauptachse, die durch den Quellpunkt (EBIT) und die Kristallrotationsachse definiert ist, ist von der Kristalldrehung abhängig. Wird der Kristall um φ , gedreht ändert sich α um den gleichen Betrag, und der Auftreffort der Röntgenstrahlung auf dem Detektor verschiebt sich trotz der gleichzeitigen Detektordrehung um 2φ . Da die Einfallrichtung der Lichtstrahlen unabhängig von der Kristalldrehung ist, bilden sie eine Positionsreferenz auf dem Detektor. Insbesondere ist das Verhältnis der Abstände a und b zwischen den Auftreffpunkten der Röntgenstrahlung und der Lichtreflexe ein Maß für die Einfallrichtung der reflektierten Röntgenquanten. Dies bedeutet, dass bei zwei verschiedenen Kristallwinkeln ξ_1, ξ_2 die Wellenlängen λ_1, λ_2 ($\rightarrow \theta_1, \theta_2$) genau dann zu identischen Verhältnissen a/b reflektiert werden, wenn die Einfallrichtung von λ_1 beim Kristallwinkel ξ_1 dieselbe war wie die Einfallrichtung von λ_2 beim Kristallwinkel ξ_2 . Der absolute Kristallwinkel ξ wird relativ zu einer beliebigen Achse, die mit der Hauptachse einen unbekanntem, jedoch konstanten Winkel ϵ einschließt, gemessen. In dem genannten Fall gleicher Verhältnisse a/b gilt also: $\xi_2 - \xi_1 = \theta_2 - \theta_1 \rightarrow \lambda_2 - \lambda_1$. Um die mathematische Funktion zu finden, welche das a/b-Verhältnis in Abhängigkeit von ξ beschreibt, werden zusätzlich die beiden Abstände p und q der Lichtreferenzpunkte zur Hauptachse eingeführt (Abb. 4.1). Der Abschnitt der Hauptachse mit der Länge L und der Strahlengang der Röntgenstrahlung bilden ein Dreieck, dessen Gegenkathete $x(\alpha)$ auf der virtuellen Detektoroberfläche liegt. Für die Länge dieser Gegenkathete gilt:

$$x(\alpha) = L \cdot \tan(\alpha) \quad (4.1)$$

mit $\alpha = \alpha(\xi)$. Das a/b-Verhältnis ist dann gegeben durch

$$\left| \frac{a}{b}(\xi) \right| = \left| \frac{p - L \cdot \tan(\alpha(\xi))}{q + L \cdot \tan(\alpha(\xi))} \right| = \left| \frac{p - L \tan(\xi_i - \theta_i^*)}{q + L \tan(\xi_i - \theta_i^*)} \right|, \quad (4.2)$$

wobei der Index $i = \{1, 2, \dots\}$ für verschiedene Wellenlängen λ_i steht, und $\theta_i^* = \theta_i + \epsilon$ der bei $\alpha = 0$ gemessene Winkel ist. Dies ist der spezielle Fall, bei dem die

Einfallrichtung der reflektierten Röntgenstrahlung entlang der Hauptachse verläuft ($a/b = p/q$). Wäre es möglich den Winkel zwischen Kristalloberfläche und Abszisse absolut zu messen ($\epsilon = 0$), wäre θ_i^* gleich dem Bragg-Winkel θ_i . Da eine solche Ausrichtung des Winkelmessgeräts im Rahmen der gewünschten Präzision von wenigen ppm nicht möglich ist, und daher der Winkel $\epsilon = 0$ nicht eingestellt werden kann, wird bei dieser Methode, wie auch bei anderen, eine Referenzlinie benötigt. Mit Hilfe einer solchen Referenzlinie wird dann die Winkeldifferenz γ der Bragg-Winkel für verschiedene λ gemessen. Bei einer solchen Differenzmessung hat der Winkel ϵ keinen Einfluß auf das Ergebnis: $\gamma = \theta_j^* - \theta_i^* = (\theta_j + \epsilon) - (\theta_i + \epsilon) = \theta_j - \theta_i$.

Der Verlauf der Funktion (4.2) ist in Abb. 4.2 für zwei verschiedene Bragg-Winkel in Abhängigkeit des Kristallwinkels ξ dargestellt. Die Kurven weisen jeweils zwei Grenzfälle auf: im ersten verläuft die Einfallrichtung des reflektierten Röntgenstrahls entlang der Strahlrichtung von Lichtreferenz 1 und somit ist der Nenner von Gleichung (4.2) gleich Null. Daher ist die Funktion an dieser Stelle divergent. Im zweiten Fall stimmt die Einfallrichtung mit der von Lichtreferenz 2 überein, und der Zähler und somit auch der Funktionswert sind gleich Null. Für beide in Abb. 4.2 gezeigten Kurven wurden die gleichen Parameter für L , p und q verwendet. Dies ist auch in einer tatsächlichen Messung der Fall, da der Abstand $p+q$ der Lichtreferenzlinien durch die Geometrie des Transmissionsgitters bestimmt und damit konstant, sowie auch der Abstand L von der Quelle zum Detektor fix ist. Dies hat zur Folge, dass beide Kurven die gleiche Form haben und lediglich entlang der den Kristallwinkel angegebenden Abszisse, dem einzigen verbleibenden freien Parameter, verschoben sind. Hieraus ergibt sich, dass die Winkeldifferenz γ bei einem beliebigen Wert von a/b bestimmt werden kann. Ein Datenfit liefert die benötigten $\theta_{i,j}^*$ an der Stelle $a/b = p/q$:

$$\gamma = \theta_j - \theta_i = \xi_j \left(\frac{a}{b} = \frac{p}{q} \right) - \xi_i \left(\frac{a}{b} = \frac{p}{q} \right) . \quad (4.3)$$

Unter der Voraussetzung, dass $p+q$ dem Abstand der Lichtreferenzlinien entspricht, können die Werte für p und q für die Datenanalyse beliebig gewählt werden, da die Wahl von p und q (wie zuvor die Wahl von a/b) die Einfallrichtung unter der die Winkeldifferenz γ bestimmt wird, festlegt. Bei der Auswertung wird die Achse ausgehend von der Röntgenquelle hin zum Mittelpunkt zwischen den Lichtreferenzlinien gewählt, hierzu werden die Werte für p und q wie folgt gewählt: $p = q = (p + q)/2$. Hieraus folgt, dass der Datenfit die Winkel $\theta_{i,j}^*$ an der Stelle $a/b = p/q = 1$ liefert. Der bedeutende Vorteil hiervon liegt in der Tatsache, dass die beiden Lichtstrahlen nicht symmetrisch zur Hauptachse verlaufen müssen (was zum besseren Verständnis bisher angenommen wurde). Dies wäre ohnehin im Rahmen der gewünschten Präzision unmöglich zu realisieren, da nun wieder die Kenntnis der Position von Quelle

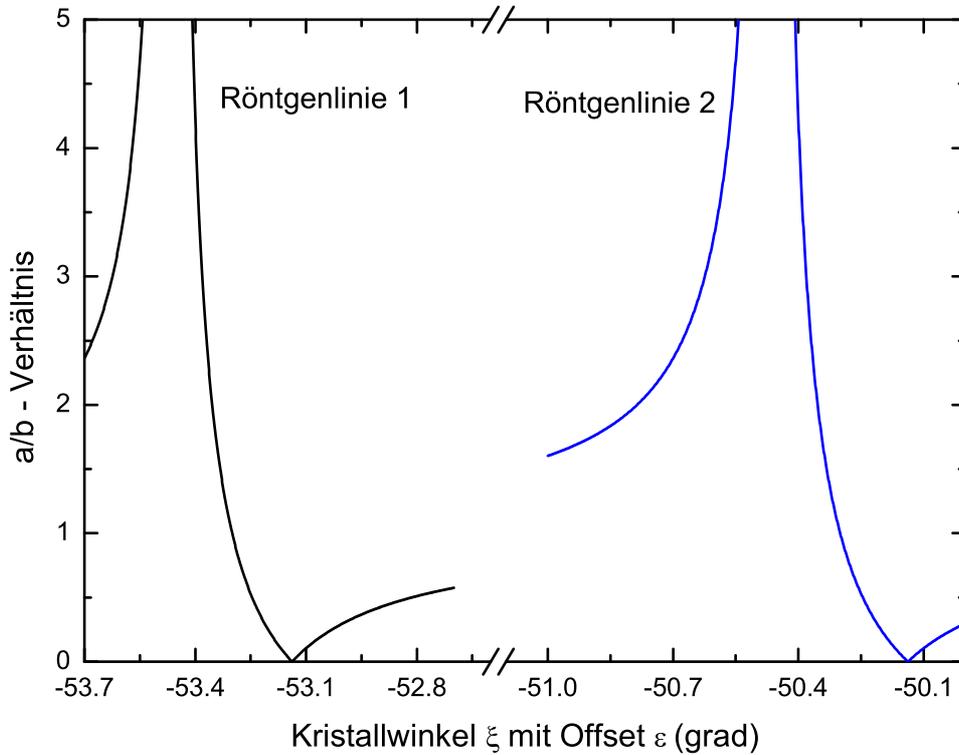


Abbildung 4.2: Kurvenverlauf der Gleichung 4.2 für zwei verschiedene Röntgenlinien [Bru05].

und Rotationsachse des Kristalls hinreichend genau benötigt würde. Weitere Erklärungen finden sich in [Bru05].

Bei der Beschreibung der a/b-Methode wurde bisher angenommen, dass eine Referenzlinie mit ausreichender präzise bekannter Wellenlänge vorhanden ist. Kombiniert man nun jedoch die a/b-Methode mit dem Bond-Verfahren (Kapitel 3.4.2), so werden erstmalig Absolutmessungen von Röntgenwellenlängen an Quellen mit geringem Photonenfluss, wie z.B. der EBIT über einen weiten Wellenlängenbereich möglich. Bei der Kombination beider Verfahren ist wie bei der Verwendung einer Referenzlinie zu beachten, dass das Verhältnis $(a/b)_1$ bei Detektor 1 dem Verhältnis $(a/b)_2$ bei Detektor 2 entsprechen muss, um die gleiche Einfallsrichtung der Röntgenstrahlung für beide Kristallwinkel sicherzustellen. Ersichtlich wird dies aus Abb. 4.3: die Röntgenlinien λ_1 und λ_2 behalten ihre "Reihenfolge" auf beiden Detektoren bei, während die Lichtreferenzlinien zur Symmetrieachse des Detektors gespiegelt erscheinen.

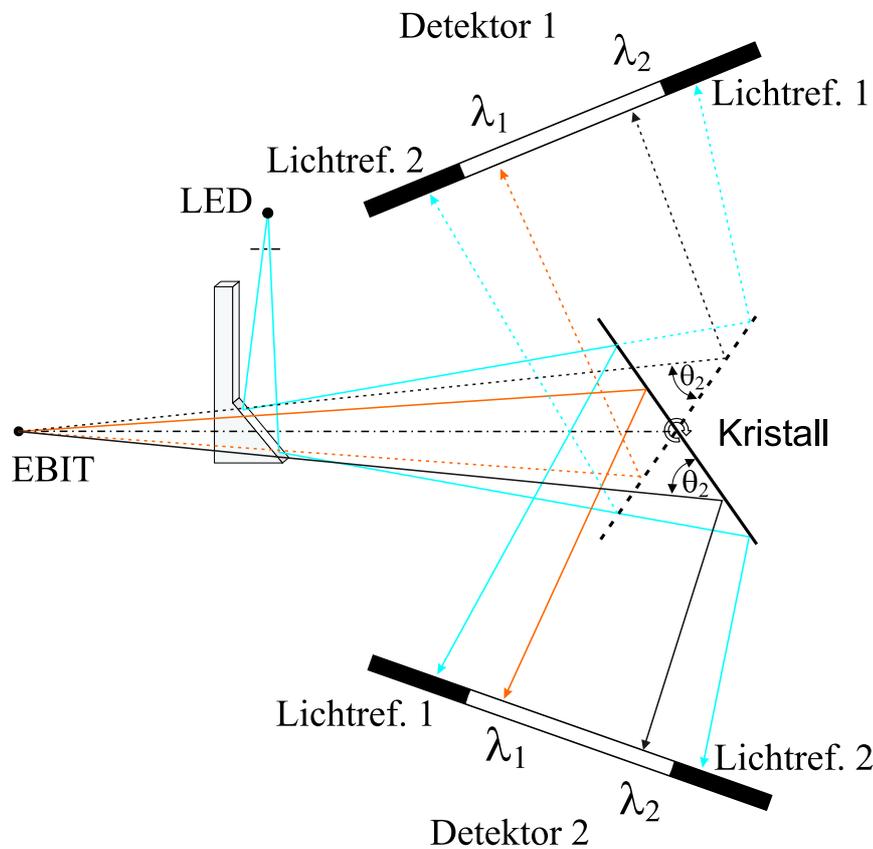


Abbildung 4.3: Kombination aus a/b-Methode und Bond-Verfahren. Für Reflexion Richtung Detektor 1 sind alle Strahlengänge sowie der Kristall gestrichelt gezeichnet. Die Position der Lichtreferenzpunkte erscheint im Vergleich zu den Röntgenlinien getauscht. Zur besseren Übersicht ist nur der Bragg-Winkel θ_2 für beide Kristallstellungen dargestellt.

4.2 Simulation der a/b-Methode

Das für das Bond-Verfahren genutzte Spektrometer ist eine Weiterentwicklung des in [Bra03] aufgebauten und in [Bru05] eingesetzten Spektrometers, in dem die in dieser Arbeit entwickelte a/b-Methode erstmalig und erfolgreich eingesetzt wurde. Wie es allgemein für neuartige Geräte und Verfahren notwendig ist, musste auch hier eine quantitative Untersuchung aller denkbaren systematischen Fehlerquellen durchgeführt werden. Bisher wurden bei der Herleitung der a/b-Methode ideale Voraussetzungen angenommen, die natürlich in Wirklichkeit nicht in dieser Form existieren bzw. im experimentellen Aufbau nur näherungsweise erreicht werden. Als Beispiel sei hier die Kristallrotation erwähnt, die tatsächlich immer eine, wenn auch kleine, Exzentrizität aufweisen wird, d.h. die Kristallrotationsachse liegt nicht in der Kristalloberfläche. Eine Variation solcher Fehlerquellen, z.B. eine experimentell absichtlich eingebaute veränderbare Exzentrizität der Kristallrotation, zur Bestimmung der

Auswirkungen auf das Messergebnis ist häufig mit einem großen technischen Aufwand verbunden. Zur Charakterisierung einer Fehlerquelle durch Messungen ist es schließlich notwendig, dass das Resultat mit einer ausreichend hohen Zählstatistik erreicht wird, damit systematische Effekte (Fehler), deren Größe zuvor nur schwer abgeschätzt werden kann, nicht durch Schwankungen rein statistischer Natur überdeckt werden. Somit werden umfangreiche Messreihen mit einer jeweils langen Messdauer notwendig, was in den seltensten Fällen mit vertretbarem Aufwand erreichbar ist. Die größte Schwierigkeit bei solchen Untersuchungen liegt jedoch darin, dass verschiedene Fehlerquellen u.U. nicht separat behandelt werden können. Das Ergebnis enthält dann immer die Summe aller Fehler, deren quantitative Beiträge sich stark unterscheiden können, evtl. auch nicht konstant bleiben und sich gegebenenfalls gar gegenseitig aufheben.

Da die a/b-Methode (siehe Abschnitt 4.1) eine Geometrie nutzt, die sich trigonometrisch beschreiben läßt, wurde in dieser Arbeit mit der Software Mathcad eine zweidimensionale Vektorsimulation entwickelt, bei der sowohl die Strahlengänge, als auch die Kristall- und die Detektoroberflächen durch Geradengleichungen dargestellt werden. Diese Simulation erlaubt systematische numerische Tests und eine anschließende Differenzierung der zu beachtenden Fehlerquellen, bzw. Analyse ihrer quantitativen Auswirkungen auf eine Messung. Unter Beachtung der optischen Reflexionsbedingung (Einfallswinkel gleich Ausfallswinkel) und des Bragg-Gesetzes wurden bei der Simulation die Strahlrichtungen nach der Reflexion am Kristall entsprechend der Einfallsrichtung berechnet und anschließend die Auftreffpunkte auf der Detektorfläche bestimmt. Mit diesen wird dann das a/b-Verhältnis für vorgegebene Kristallorientierung und Bragg-Winkel ermittelt. Besondere Bedeutung kommt hierbei dem Vergleich von realem Detektor und virtueller Bildebene zu. Diese wird wie in Abschnitt 4.1 beschrieben, durch Spiegelung an der Kristalloberfläche konstruiert, jedoch unter der Annahme, dass keine Exzentrizitäten vorhanden sind. Der Abstand von Röntgenquelle zur virtuellen Bildebene ist also festgehalten, wie dies auch bei der Herleitung der Fitfunktion (4.2) angenommen wurde. Es ist nicht offensichtlich, dass sich Fehlerquellen auf die reale Detektorebene und die festgehaltene virtuelle Bildebene gleich auswirken, d.h. ob bei der geometrischen Vereinfachung unter Einbeziehung von Fehlerquellen (z.B. Exzentrizitäten) alle notwendige Information erhalten bleibt und die Realität auf dem Detektor durch die Fitfunktion (4.2) richtig wiedergegeben wird.

Mit der Simulation lassen sich schnell Datensätze von a/b-Verhältnissen bei verschiedenen Kristallorientierungen, wie sie auch im Experiment aufgenommen werden, erzeugen. Natürlich ist das Ergebnis einer Simulation exakt reproduzierbar, d.h. auch systematische Fehlerquellen mit kleinsten Auswirkungen, die durch Abweichungen von der idealen Geometrie entstehen, können quantitativ erfasst werden. Wichtige

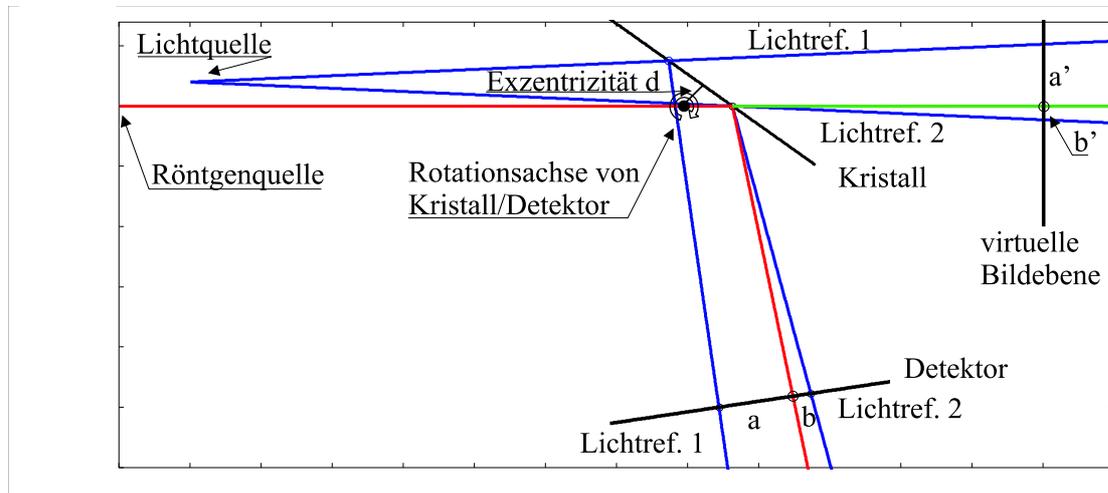


Abbildung 4.4: Grafische Darstellung einer Spektrometereinstellung (nicht maßstabgetreu). Bei den blauen Linien handelt es sich um Lichtstrahlen, bei den roten (grün) um den Röntgenstrahlengang. Kristall- und Bragg-Winkel sind so gewählt, dass die Einfallrichtung des reflektierten Röntgenstrahls horizontal verläuft.

Parameter, die in der Simulation leicht verändert werden können, deren Auswirkungen auf ein Experiment ohne Simulation schwer abzuschätzen wären, sind in den Abbildungen 4.4 und 4.9 dargestellt und werden im folgenden aufgeführt:

- Die Positionen von
 - Röntgenquelle
 - Lichtquelle
- Die Exzentrizität der
 - Kristallrotation (mit dem orthogonalen Abstand d von der Kristalloberfläche zur Rotationsachse)
 - Detektorrotation
- Der Winkel zwischen Kristalloberfläche und Reflexionsebene (Verkipfungswinkel δ).

4.2.1 Auswirkung verschiedener Positionen von Röntgen- und Lichtquelle auf die Präzision der Wellenlängenmessung

In der ursprünglichen Version des Spektrometers, wie es in Testmessungen zur generellen experimentellen Überprüfung der a/b-Methode und zu ersten erfolgreichen Messungen atomphysikalischer Effekte eingesetzt wurde [Bru05], war der räumliche Überlapp von virtueller Licht- und reeller Röntgenquelle durch die räumliche Anordnung beider Elemente nicht gegeben. Mit Hilfe der Simulationen wurde der hierdurch entstehende Fehler quantitativ ermittelt. Abbildung 4.5 zeigt den Verlauf des a/b-Verhältnisses auf der virtuellen Bildebene im Vergleich zum a/b-Verhältnis auf dem realen Detektor, die in Abwesenheit von Exzentrizität sogar ungeachtet der voneinander unterschiedlichen Positionen von Röntgen- und Lichtquelle übereinstimmen. Zusätzlich ist noch die Differenz der Lichtreferenzabstände ($|p + q|_{Det} - |p + q|_{virt}$) vom Detektor und der virtuellen Bildebene eingezeichnet, deren Bedeutung später noch erläutert wird. Die zur Erzeugung von Abbildung 4.5 verwendete Abstand der Quellpunkte sowie der angenommenen Exzentrizität entsprechen nicht der Realität, sondern wurden zur Veranschaulichung der Auswirkung auf das a/b-Verhältnis unrealistisch groß gewählt (z.B. Exzentrizität $d = 50$ mm). Die Winkeldifferenz zwischen Referenz- und zu vermessender Linie wird bei der tatsächlichen Datenauswertung durch den Fit bei einem Verhältnis $a/b = p/q$ bestimmt, das, wie in Abschnitt 4.1 beschrieben, aufgrund der Parallelität der Fitkurven auf 1 gesetzt werden kann (horizontale Linie in Abb. 4.5). Hier liegt der Auftreffpunkt der Röntgenstrahlung genau in der Mitte zwischen den Lichtreferenzlinien, was gleichzeitig der Mitte des sinnvoll auswertbaren Bereichs entspricht. Dieser wird bei Messungen so gewählt, dass der Röntgenstrahl immer zwischen den Lichtstrahlen verläuft, um einen möglichen Einfluss von Randeffekten bei der Reflexion und Detektion der Röntgenstrahlung zu vermeiden.

Verwendet man die gleichen Einstellungen der einzelnen Parameter wie zuvor, fügt jedoch eine gewisse Exzentrizität d der Kristallrotationachse hinzu, ergibt sich für das a/b-Verhältnis in der virtuellen Bildebene der durch die schwarze durchgezogene Linie, im unteren Teil von Abb. 4.5 dargestellte Kurvenverlauf, der mit den Verhältnissen auf dem Detektor (rote Punkte) nicht übereinstimmt. Wird hier der Winkel ξ zur Bestimmung der Winkeldifferenz γ (bzw. $\Delta\Theta$) beim Funktionswert $a/b=1$ ermittelt, kommt es aufgrund der unterschiedlichen Kurvenverläufe zu einem Unterschied $\Delta\xi$. Nähere Untersuchungen zeigen, dass das Ausmaß der Abweichung $\Delta\xi$ zudem vom Bragg-Winkel und somit vom Kristallwinkel ξ selbst abhängt. Dadurch heben sich die aufgrund der Exzentrizität der Kristallrotation entstehenden Unterschiede $\Delta\xi(\Theta_1)$ und $\Delta\xi(\Theta_2)$ zwischen realen Detektordaten und Fitfunktion

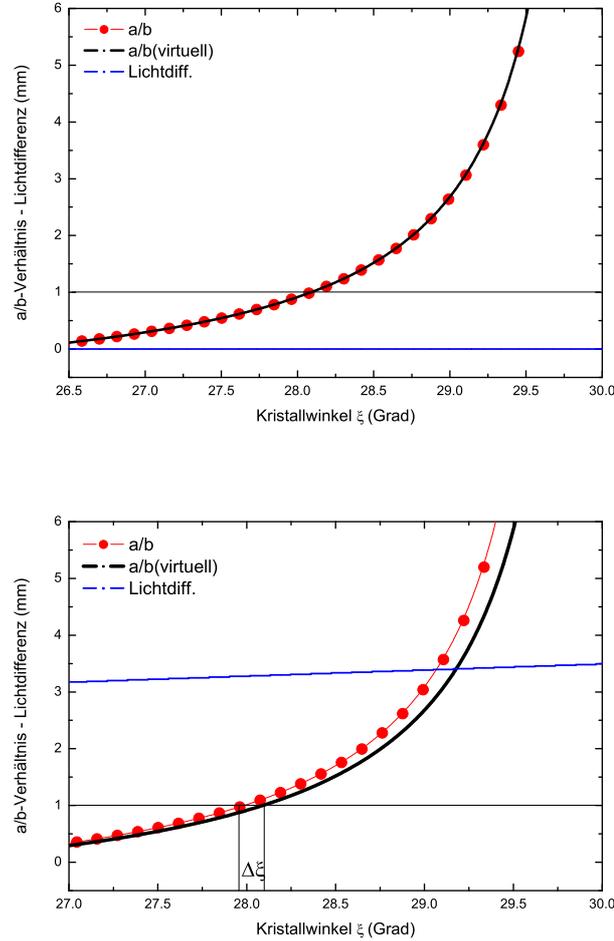


Abbildung 4.5: Oben: Verhältnis a/b ohne exzentrische Kristallrotation auf der Detektorebene (rote Punkte) und das der virtuellen Bildebene (schwarze Linie), entsprechend der Fitfunktion 4.2. Die blaue Linie ist die Differenz $(|p+q|_{Det} - |p+q|_{virt})$ der Lichtlinienabstände von Detektor und virtueller Bildebene. Unten: Die gleichen Kurven bei exzentrischer Kristallrotation. Beim Verhältnis $a/b = 1$ (horizontale Linie) wird der Winkel ξ bestimmt (siehe Text).

(virtuelle Bildebene) nicht gegenseitig auf, was in einer systematischen Fehlerquelle resultiert.

In Abb. 4.5 (unten) ist auch zu erkennen, dass der Abstand der Lichtreferenzlinien $(|p+q|_{Det} \neq |p+q|_{virt})$ auf Detektor und virtueller Bildebene verschieden ist und der Unterschied vom Kristallwinkel ξ abhängt. Da der Öffnungswinkel der Lichtstrahlen in der Simulation konstant ist (was im Experiment durch das Transmissionsgitter tatsächlich gewährleistet ist), deutet ein sich verändernder Lichtreferenzlinienabstand unter Beachtung des Strahlensatzes auf eine variierende Strahlengänglänge L hin. Weshalb sich diese Länge durch Exzentrizität verändert, lässt sich anschau-

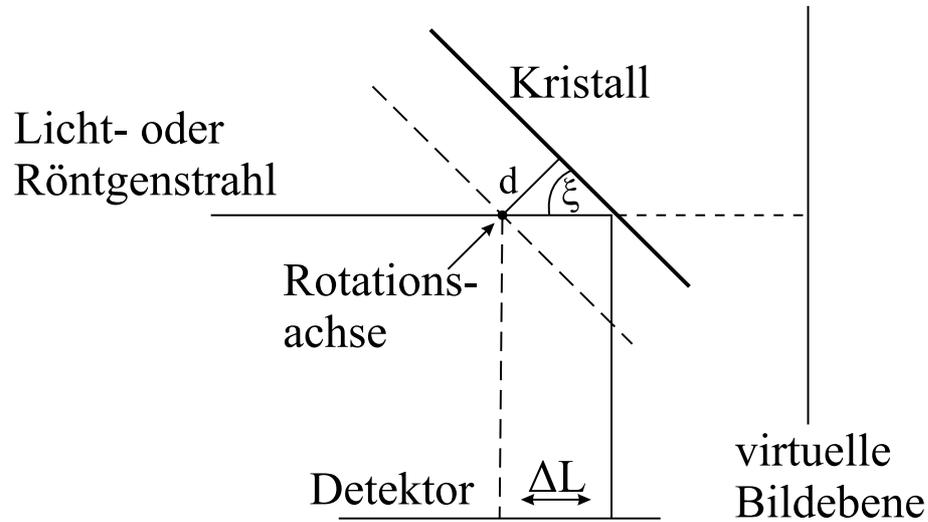


Abbildung 4.6: Die Länge des gesamten Strahlengangs verändert sich durch die Exzentrizität d und ist von der Kristallstellung abhängig.

lich anhand von Abb. 4.6 erklären. Für einen dort horizontal verlaufenden Licht- oder Röntgenstrahl ändert sich durch die Exzentrizität d der Gesamtabstand von Quelle zum Detektor um ΔL , wohingegen der Abstand von der Quelle zur virtuellen Bildebene unverändert erscheint. Die Differenz der beiden Längen ist gegeben durch: $\Delta L = d / \sin(\xi)$. Misst man nun eine Röntgenwellenlänge unter Verwendung einer Referenzlinie, befindet sich der Kristall bei horizontalem Strahlverlauf in zwei unterschiedlichen Orientierungen $\xi_{1,2}$, deren Winkeldifferenz gemäß der jeweiligen Bragg-Winkel $\theta_{1,2}$ festgelegt ist. Somit ergeben sich zwei verschiedene Gesamtlängen $L_{1,2}$ und daraus unterschiedliche Werte für die Verschiebung $\Delta\xi$ (Abb. 4.5). Dies bedingt den zuvor erwähnten systematischen Fehler bei der Bestimmung der Winkeldifferenz $\Delta\theta$. Bei Absolutmessungen mit dem in Abschnitt 3.4.2 beschriebenen Bond-Verfahren hingegen ist wegen der Symmetrie zur Hauptachse die durch die Exzentrizität der Kristallrotation entstehende Änderung ΔL bei beiden Kristallwinkeln gleich (Abb. 3.17), weshalb auch die Unterschiede $\Delta\xi$ bei beiden Kristallwinkeln gleich sind, so dass sie sich bei der Ermittlung der Winkeldifferenz γ gerade aufheben. Ein Fehler entsteht lediglich durch die evtl. ungleichen Abstände der beiden Detektoren zur Kristallachse, bzw. bei der Verwendung von nur einem Detektor durch dessen möglicherweise exzentrische Rotation, die ebenfalls zu unterschiedlichen Strahlengängslängen und zu den daraus folgenden Auswirkungen führt.

Der Einfluss der nicht konstanten Spektrometerlänge bei nicht vorhandenem räumlichen Überlapp von Röntgen- und Lichtquelle auf das a/b-Verhältnis lässt sich einfach an der virtuellen Bildebene in Abb. 4.7 zeigen. Zu erkennen sind die a/b-Verhältnisse für zwei verschiedene Längen L und da der Strahlensatz, für dessen Gültigkeit die

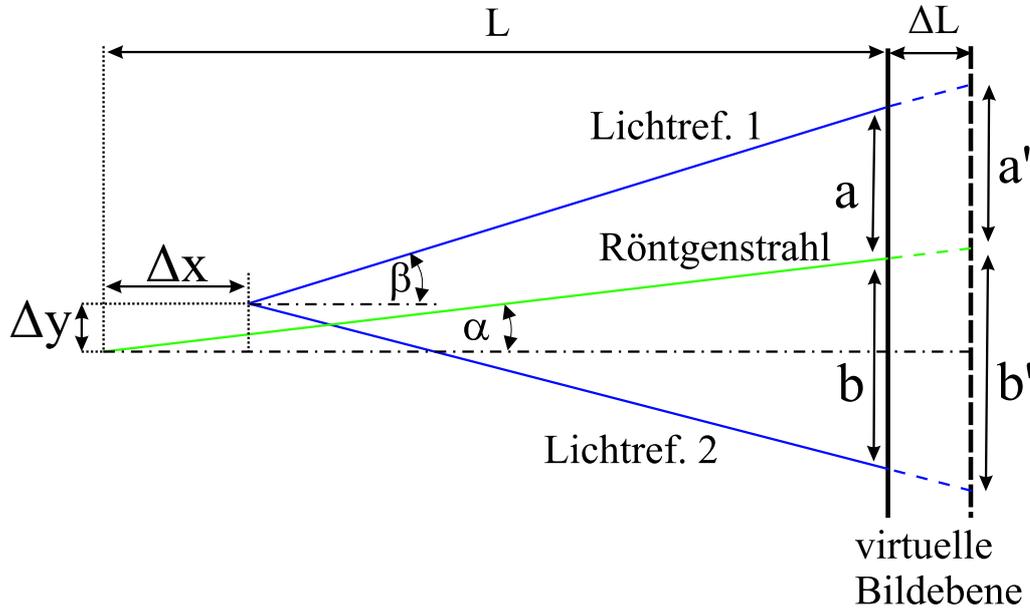


Abbildung 4.7: Geometrische Situation bei unterschiedlicher Röntgen- und Lichtquellenposition. Eine um sich um ΔL ändernde Länge L führt zu verschiedenen a/b -Verhältnissen.

Strahlen aus dem gleichen Quellpunkt stammen müssen, nicht angewendet werden kann, gilt $a/b \neq a'/b'$. Das a/b -Verhältnis ist nun bei unterschiedlichen Quellpositionen gegeben durch:

$$\frac{a}{b}(\alpha, \beta, \Delta x, \Delta y, L) = \frac{(L - \Delta x) * \tan(\beta) - \Delta y - L * \tan(\alpha)}{(L - \Delta x) * \tan(\beta) - \Delta y - L * \tan(\alpha)} \quad (4.4)$$

Dabei ist L der Abstand von der Röntgenquelle zum Detektor, Δx , Δy sind jeweils die Positionsdifferenz von Röntgen- und Lichtquelle, und α , $\beta_{1,2}$ sind die Winkel zwischen dem Röntgenstrahl bzw. den Lichtstrahlen und der Hauptachse.

Die Differenz der beiden a/b -Verhältnisse kann durch zweimalige Verwendung der Formel (4.4) mit den entsprechenden Längen berechnet werden. In Abbildung 4.8 ist diese Differenz in Abhängigkeit vom vertikalen Versatz Δy unter der Annahme $\Delta x = 0$ dargestellt.

Die Parameter $\alpha = 0^\circ$, $\beta = 0.3^\circ$ wurden bei der Simulation so gewählt, dass das a/b -Verhältnis nahe eins liegt, da in der Auswertung bei diesem Funktionswert die zu messende Winkeldifferenz $\Delta\theta$ bestimmt wird. Die Länge $L = 1600$ mm entspricht dem realen Wert des experimentellen Aufbaus. Da beim Spektrometer der Abstand der Detektoren zur Rotationsachse des Kristalls bisher nicht präzise vermessen werden konnte, wird für den Längenunterschied der relativ hohe Wert von $\Delta L = 1$ mm angenommen, der aufgrund der engen Fertigungstoleranzen der Spektrometerteile sicherlich nicht überschritten wird. Dem Graphen 4.8 entnimmt man, dass bei einer Gewährleistung des vertikalen Überlapps von Licht- und Röntgenquelle innerhalb

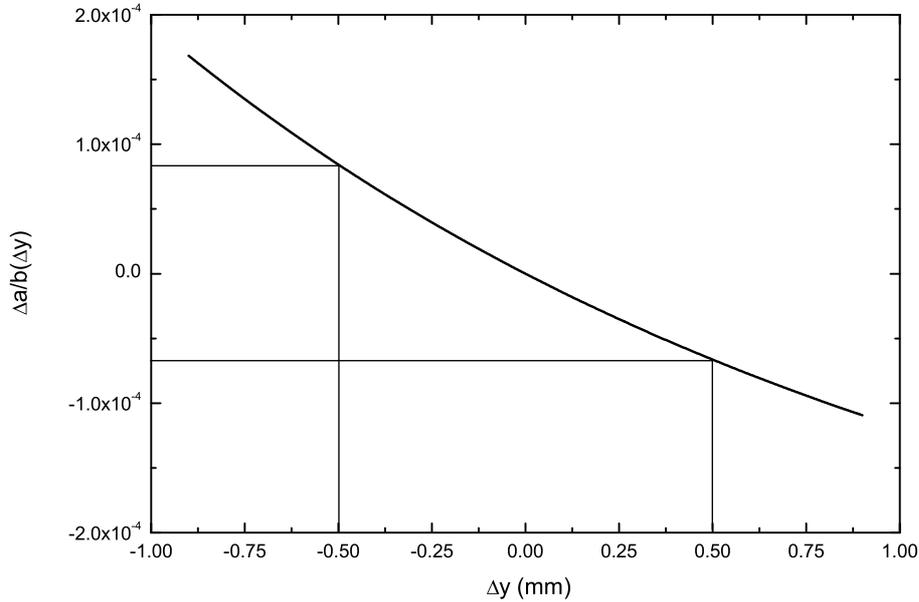


Abbildung 4.8: Abweichung des a/b-Verhältnis bei einer Längenänderung des Strahlengangs (durch z.B. unterschiedliche Detektorabstände) um 1 mm in Abhängigkeit des vertikalen Versatzes von Röntgen- und Lichtquelle.

von $|\Delta y| \leq 0.5$ mm der Fehler im a/b-Verhältnis $|\Delta \frac{a}{b}| < 1 \cdot 10^{-4}$ ist. Der daraus resultierende absolute Winkelfehler $\Delta \xi$ ist kleiner $(2 \cdot 10^{-5})^\circ$. Der relevante relative Fehler, welcher beim Vermessen der Winkeldifferenz γ entsteht ist $\frac{\Delta \gamma}{\gamma} \leq 3.3 \cdot 10^{-7}$, da bei dem hier aufgebauten Bond-Spektrometer Bragg-Winkel von $30^\circ - 60^\circ$ eingestellt werden können, und somit die messbare Winkeldifferenz γ im Intervall $60^\circ - 120^\circ$ liegt.

Um den zuvor geforderten vertikalen Überlapp $|\Delta y| \leq 0.5$ mm im Experiment sicherzustellen, wurde eine neue optische Justiervorrichtung entwickelt (Kapitel 5). Die Auswirkungen eines horizontalen Versatzes ($\Delta x \neq 0$) zwischen Röntgen- und Lichtquelle lassen sich vereinfacht unter der Annahme $\Delta y = 0$ analysieren (siehe Abb. 4.7). Bei einem mit der Hauptachse des Spektrometers übereinstimmenden Verlauf der Röntgenstrahlung und gleichzeitig identischem Öffnungswinkel $\beta_{1,2}$ der Lichtreferenzstrahlen wirkt sich eine solche Positionsdivergenz auf das a/b-Verhältnis nicht aus, da der Röntgenstrahl (bzw. seine Verlängerung) durch den Lichtquellpunkt verläuft und somit der Strahlensatz immer erfüllt ist. Eine Fehlerabschätzung ist nur für den Fall sinnvoll, dass die Winkel $\beta_{1,2}$ verschiedene Werte annehmen bzw. die Röntgenstrahlung nicht horizontal verläuft. Der Unterschied der Winkel $\beta_{1,2}$ im Experiment wurde auf nicht mehr als 20 % abgeschätzt. Beim Verhältnis a/b=1 ist jetzt

der Winkel α von Null verschieden und jede Änderung der gesamten Strahlweglänge führt wieder zu einer Variation des a/b-Verhältnisses. Bei gleichen geometrischen Bedingungen wie bei der Untersuchung der vertikalen Quellpositionsdifferenz zeigt sich, dass selbst bei einer großen angenommenen horizontalen Differenz ($|\Delta x| \leq 10$ mm), eine wesentlich geringere Auswirkung auf das a/b-Verhältnis als für vertikale Fehlpositionierungen auftritt. Der durch horizontale Fehlpositionierung erzeugte Fehler ist vernachlässigbar klein. Die in [Bru05] angegebenen Auswirkungen auf die dort vorgestellte Messung wurden analog ermittelt.

4.2.2 Auswirkung des Verkippungswinkels zwischen Kristallebene und -oberfläche auf die a/b-Methode

Bei der Herstellung von Kristallen für Spektroskopiezwecke werden ihre Oberflächen sorgfältig poliert, wodurch Fehler in einer Messung durch Strahlversatz der infolge von Unebenheiten bzw. Stufen entstehen könnte, weitgehend vermieden werden. Wie eine Untersuchung durch die röntgenoptische Abteilung der Universität Jena (Leitung Prof. Förster [E.F]) zeigt, weisen die in diesem Spektrometer verwendeten Kristalle eine Oberflächengüte von $\lambda/2$ auf, d.h. die Ebenheit über die gesamte Oberfläche des Kristalls entspricht der Hälfte der Wellenlänge eines Helium-Neon-Lasers nämlich ~ 320 nm. Der Kristall wird für die Politur so ausgerichtet, dass die gewünschte Kristallorientierung parallel zur Oberfläche verläuft. Dieser Vorgang ist jedoch nur mit begrenzter Genauigkeit möglich, und somit existiert immer ein gewisser Verkippungswinkel zwischen der Oberfläche und den für die Reflexion aktiven Netzebenen (Abb. 4.9), genauer gesagt zwischen den Normalenvektoren der beiden Flächen. Dieser Winkel ist, nach einer Reihe von Untersuchungen durch die Gruppe von [E.F], bei den in dieser Arbeit verwendeten Kristallen kleiner als 0.1° . Bei einer Simulation, welche diesen Verkippungswinkel berücksichtigt, ist zu beachten, dass die Röntgenstrahlung immer noch an der Oberfläche des Kristalls reflektiert wird, die Bragg-Bedingung jedoch zum Gitternormalvektor erfüllt sein muss, und daher Einfallswinkel und Reflexionswinkel relativ zur Oberfläche nicht mehr identisch sind. Um den Effekt des Verkippungswinkels auf den Verlauf des a/b-Verhältnisses veranschaulichen zu können, wurde in Abb. 4.10 der übertrieben große Wert $\delta = (+3^\circ$ oben, -3° unten) gewählt. Dort ist das erhaltene a/b-Verhältnis (rote Kurve) im Vergleich zu jenem a/b-Verhältnis, welches man ohne Verkippungswinkel erhielte (blaue Kurve), jeweils auf dem Detektor, dargestellt. Eine Parallelverschiebung der zweitgenannten Kurve (schwarz punktiert) verdeutlicht die unterschiedliche Krümmung der beiden Kurven, die aus der Verkippung resultiert. Durch den Verkippungswinkel kommt es zu einem veränderten Kurvenverlauf (Krümmung) und zu einer Verschiebung des a/b-Graphen entlang der Abszisse. Letzteres bedeutet, dass im Experiment

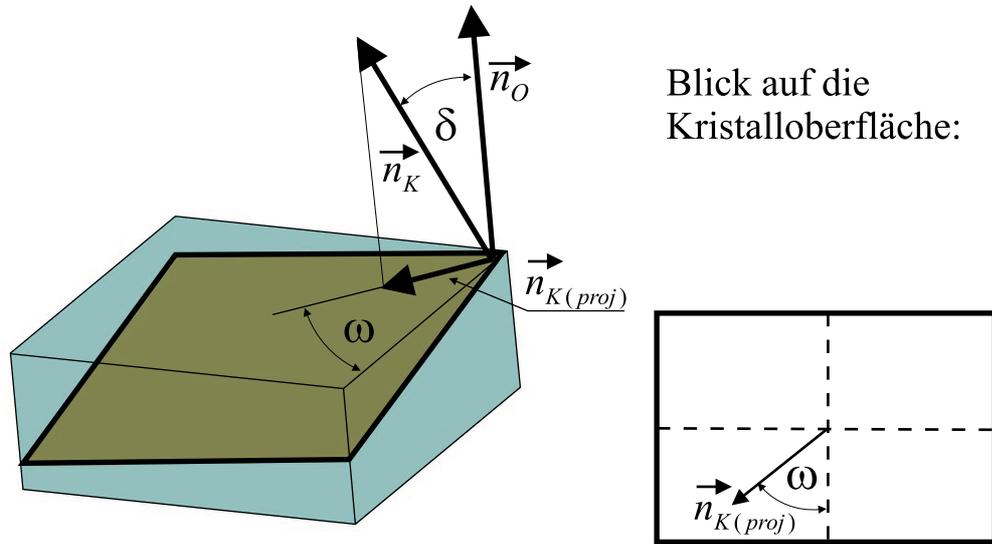


Abbildung 4.9: Lage der Reflexionsebenen im Kristall. δ ist der Winkel zwischen den Normalenvektoren der Oberfläche und der Reflexionsebene. ω gibt die Richtung der Verkipfung bezüglich einer Kristallkante an.

der Kristall für eine gegebene Einfallsrichtung der Röntgenstrahlung (=a/b) anstelle des Winkels ξ (keine Verkipfung) in einen neuen Winkel ξ' gebracht werden muss, um die Verkipfung zwischen Oberfläche und Gitter zu kompensieren. Beide Effekte hängen von der Größe und dem Vorzeichen des Verkipfungswinkels ab. Ein Vergleich der beiden Diagramme in Abb. 4.10 zeigt die Auswirkung unterschiedlicher Vorzeichen. Eine Erklärung für den neuen Verlauf der a/b-Funktion liefert die um den Verkipfungswinkel erweiterte geometrische Darstellung, wie sie in Abb. 4.11 gezeigt ist. Die beiden Lichtreferenzen entstehen durch Reflexion an der polierten Oberfläche des Kristalls und sind wie zuvor in der virtuellen Bildebene fixiert (Strahlengänge für Übersichtlichkeit nicht eingezeichnet). Da die Röntgenstrahlung an der um den Winkel δ verkippten Netzebenen reflektiert werden, ist die Reflexionsrichtung von Röntgenstrahlung gegenüber derjenigen des sichtbaren Lichts gleicher Einfallsrichtung (gestrichelte Linie) um 2δ verschieden. Dies muss auch in der virtuellen Bildebene, die eine Spiegelung an der Kristalloberfläche (nicht Netzebenen) ist, berücksichtigt werden. Die Kurvenform des sich nun ergebenden a/b-Verhältnisses wird mit folgender Formel beschrieben:

$$\frac{a}{b}(\xi) = \frac{p - L * \tan(\alpha(\xi)) + X(\xi)}{q + L * \tan(\alpha(\xi)) - X(\xi)} \quad (4.5)$$

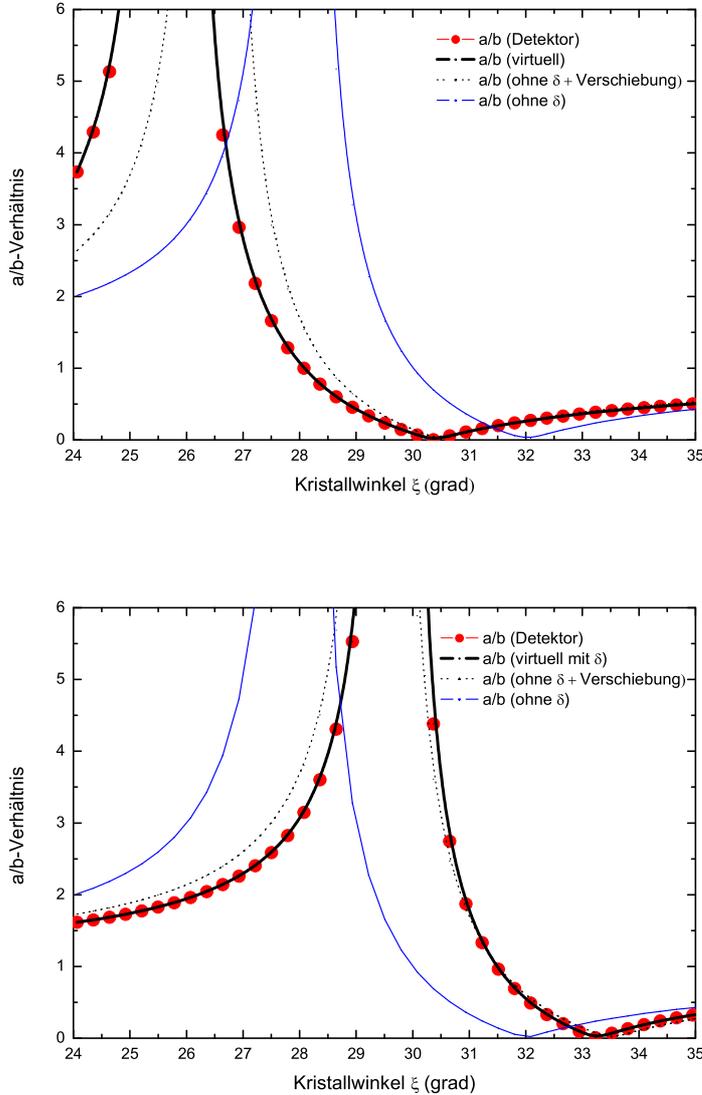


Abbildung 4.10: Verlauf des a/b-Verhältnisses (rote Punkte) mit einem Verkippungswinkel von 3° (oben) bzw. -3° (unten). Verlauf ohne Verkippungswinkel (blaue durchgezogene Linie). Diese wurde in beiden Diagrammen entlang der Abszisse verschoben, um die unterschiedliche Kurvenform zu verdeutlichen (schwarz punktierte Linie). Die schwarze Kurve erhält man mit der Fitfunktion, die den Verkippungswinkel berücksichtigt (siehe Gl. 4.5). Der bewusst groß gewählte Winkelbereich entlang der Abszisse (der Röntgenstrahl in Abb. 4.7 verläuft somit auch ausserhalb der Lichtstrahlen, was in einer Messung nur selten der Fall ist) führt zu einer klaren Demonstration der Auswirkungen auf den Kurvenverlauf.

Unter Anwendung des Sinussatzes und $\alpha(\xi) = \Theta - \delta - \xi$ hat die Korrekturstrecke $X(\xi)$ folgende Gestalt:

$$X(\xi) = \left(\frac{L}{\cos(\Theta + \delta - \xi)} - \frac{((L - D) \cdot \sin(\xi))}{\sin(\pi - \Theta - \delta)} \right) \cdot \frac{\sin(2 \cdot \delta)}{\sin(\frac{\pi}{2} - \delta + \Theta - \xi)} \quad (4.6)$$

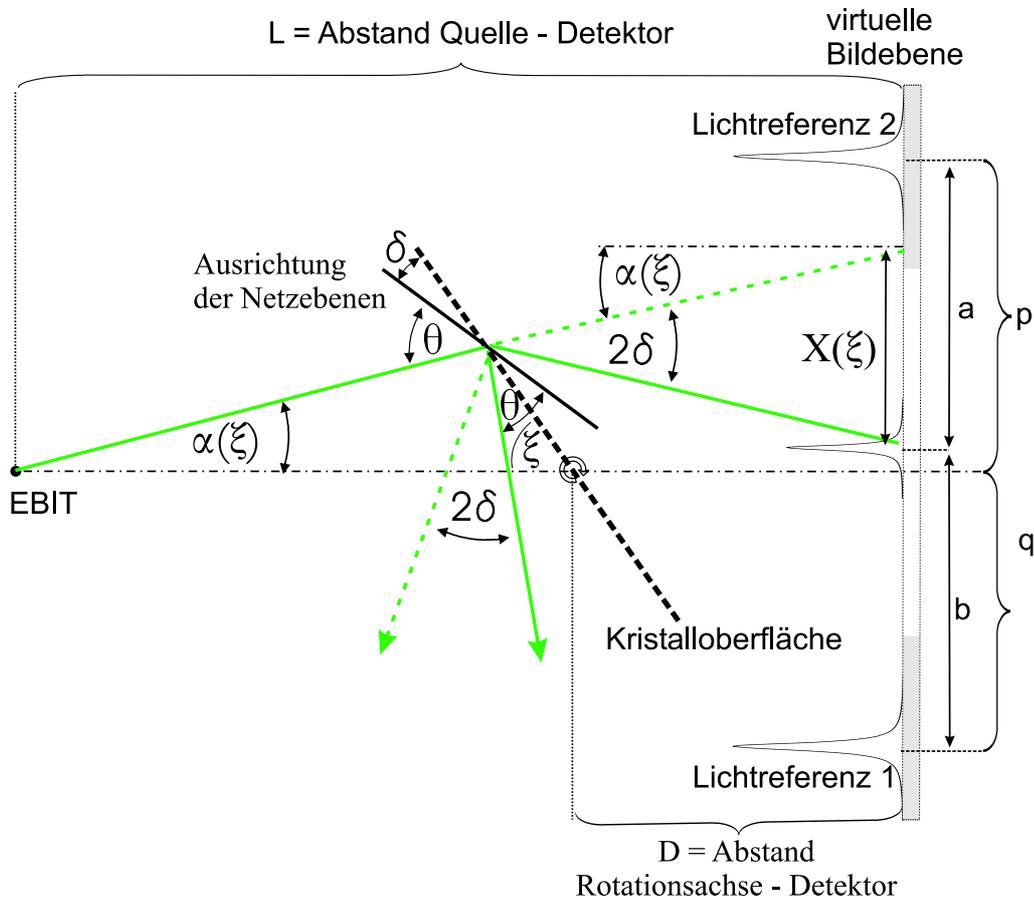


Abbildung 4.11: Durchgezogene Linien stellen den Röntgenstrahlengang unter Beachtung des Verkipfungswinkels dar, wohingegen die gestrichelte Linie den Strahlenverlauf ohne eine Verkipfung der Netzebenen um den Winkel δ zeigt. Der Detektor (nicht eingezeichnet) wird an der Kristalloberfläche (Spiegelachse) in die virtuelle Bildebene projiziert (weitere Erklärungen siehe Abb. 4.1).

Diese Funktion gibt nun sowohl Krümmung als auch Verschiebung des a/b-Verhältnisses in Abb. 4.10 exakt wieder, wie die jetzt vorhandene Übereinstimmung der Funktionswerte (rote Punkte) mit dem Kurvenverlauf, wie er sich auf dem Detektor ergibt, zeigt. Eine quantitative Analyse ergibt, dass der aus dem Verkipfungswinkel entstehende Fehler für Relativmessungen wie sie in [Bru05] durchgeführt wurden klein ist ($\Delta E \leq 0.5$ ppm). Bei der dort zusätzlich vorhandenen fehlerhaften Positionierung der Lichtquelle ist der Fehlerbeitrag durch den Verkipfungswinkel vernachlässigbar. Für Absolutmessungen der angestrebten Genauigkeit muss jedoch der Verkipfungswinkel berücksichtigt werden. Sofern der Winkel δ für den jeweils verwendeten Kristall nicht durch eine separate Messung bestimmt wurde, geht er als freier Parameter in die Datenauswertung ein.

Der Abstand D von der Rotationsachse des Kristalls zur Detektoroberfläche ist eine

weitere Größe, die für die Analyse der Daten benötigt wird; auch sie sollte als freie Variable durch den Fit bestimmt werden, da dieser Abstand nicht hinreichend genau bekannt ist und zusätzlich durch die im Experiment vorhandene Exzentrizität von Kristall- und Detektorrotation variiert. Da nun der Verlauf der a/b-Graphen unter Einbeziehung des Verkippungswinkels nicht nur von der Länge L des Spektrometers und dem Abstand der Lichtreferenzpunkte p und q abhängt, sondern zusätzlich auch vom Abstand D und dem Winkel δ selbst, ergeben sich bei der Auswertung durchaus große Fehlerbalken für die einzelnen Parameter. Hierdurch erhält man für die zu ermittelnde Winkeldifferenz γ unzulässig große Fehler. Dieses Problem der erhöhten Anzahl an freien Fitparametern, oder Freiheitsgrade, lässt sich bestenfalls nur durch eine erheblich gesteigerte Zählstatistik, d.h. Messdauer, ausgleichen. Die für die Variablen D und δ erhaltenen Werte, bei einer Analyse experimenteller Daten, in der sie als freie Parameter eingingen, entsprechen durchaus den Gegebenheiten des Experiments, doch gestaltet sich die Auswertung unter diesen Bedingungen langwieriger, und das Ergebnis besitzt nicht die angestrebte Genauigkeit und Reproduzierbarkeit. Anstatt den Verkippungswinkel erst in der Datenauswertung zu berücksichtigen, gibt es bei bekannter Orientierung der Verkippung eine einfache Möglichkeit, Auswirkungen auf die Messung auf ein vernachlässigbares Maß zu reduzieren. Grundsätzlich kann die Verkippung δ zwischen Oberfläche und Netzebenen (bzw. zwischen den Normalenvektoren dieser Flächen), wie Abb. 4.9 zeigt, beliebig zu einer Kristallkante orientiert sein. In der Untersuchung des Einflusses auf die a/b-Methode wurde jedoch immer nur die Streuebene betrachtet und somit die Projektion δ' des Verkippungswinkels auf die Streuebene. Durch geeignete Rotation des Kristalls stehen aber Verkippungswinkel δ und Streuebene senkrecht aufeinander, und das Ergebnis einer solchen Projektion ergibt Null ($\delta' = 0$) (Abb. 4.12), d.h. die Geometrie entspricht wieder dem verkippungsfreien Fall.

Um den Kristall entsprechend montieren zu können, wurde ein neuer Kristallhalter entwickelt (Abschnitt 5.3.2), der beim Einbau die geforderte Ausrichtung des Kristalls mit einer Genauigkeit von $\pm 1^\circ$ erlaubt.

Die absolute Genauigkeit, mit der sich die Orientierung ω der Verkippung δ bezüglich einer Kristallkante bestimmen lässt, nimmt mit dem Ausmaß der Verkippung zu, bzw. ist um so geringer je kleiner die Verkippung ist. Der nach der Projektion in die Streuebene verbleibende, von Null verschiedene Verkippungswinkels δ' ist das Produkt aus dem Wert der Verkippung δ und der Fehlorientierung $\Delta\omega$ und daher nahezu konstant. Die Unsicherheit $\Delta\omega$ der Orientierung der Verkippung für die durch [E.F] bereits vermessenen Kristalle liegt im Bereich von 1° bis 4° ; addiert man hierzu quadratisch den Fehler durch die nicht exakte Ausrichtung des Kristalls beim Einbau ($\pm 1^\circ$), entsteht ein Gesamtfehler, der nicht wesentlich größer ist als ohne Ausrichtungsfehler. Der nach geeigneter Montage der Kristalle verbleibende,

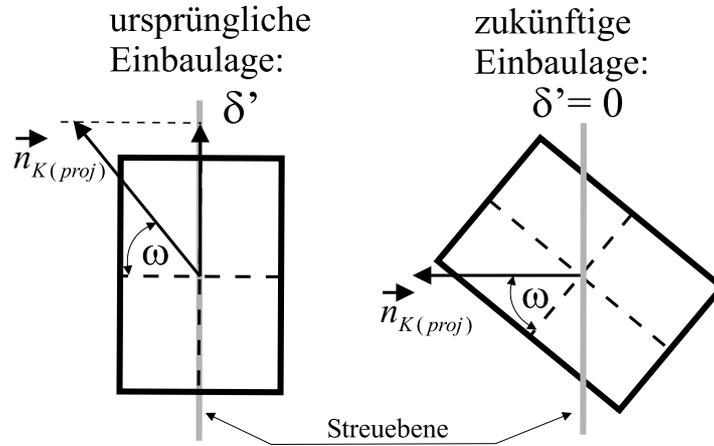


Abbildung 4.12: Bei geeigneter Kristallausrichtung ist die Projektion δ' des auf die Oberfläche projizierten Netzebenennormalenvektors $\vec{n}_{K(proj)}$ auf die Streuebene gleich null.

und für die Auswertung zu berücksichtigende maximale Verkippungswinkel δ' ist in Tabelle 4.1 aufgelistet.

Tabelle 4.1: Verkippungswinkel δ diverser Kristalle und ihr maximal anzunehmender Beitrag δ' innerhalb der Streuebene. Zum Fehler der Orientierungsbestimmung $\Delta\omega$ wurde ein Ausrichtungsfehler des Kristalls von 1° quadratisch addiert.

Kristall	Winkel δ	$\Delta\omega$	$\delta' = \delta \cdot \sin(\Delta\omega)$
Silizium 111	0.0585°	$\pm 2^\circ$	$2.29 \cdot 10^{-3}^\circ$
Silizium 220	0.026°	$\pm 4^\circ$	$1.87 \cdot 10^{-3}^\circ$
Quarz 31-40	0.103°	$\pm 1^\circ$	$2.53 \cdot 10^{-3}^\circ$

Simulationen der a/b-Methode zeigen, dass für Absolutmessungen mit dem Bond-Verfahren solch kleine Verkippungswinkel innerhalb der Streuebene zwar einen Beitrag (~ 0.5 ppm) zum Gesamtfehler der Messung liefern, dieser jedoch bei einer angestrebten Präzision von ~ 1 ppm noch akzeptabel ist. Bei der Datenanalyse kann somit wieder die a/b-Funktion (4.2), welche vom verkippungsfeien Fall ausgeht, verwendet werden, was die Auswertung deutlich vereinfacht und zudem die gewünschte Genauigkeit der Ergebnisse gewährleistet.

4.3 3-dimensionale Betrachtung

Bisher wurde bei der Simulation wie auch bei der Herleitung der a/b-Methode in Abschnitt 4.1 immer nur die Streuebene betrachtet. Da jedoch sowohl der Kristall,

als auch der Detektor und die Quelle eine Ausdehnung senkrecht zu dieser Ebene besitzen, muss eine evtl. vorhandene Auswirkung auf die gemessenen Bragg-Winkel quantitativ ermittelt werden. Eine Begrenzung dieser Ausdehnung, die z.B. in der optischen Spektroskopie angewendet wird [Sor05], ist hier aufgrund des geringen Photonenflusses nicht möglich. Es wird sich zeigen, dass diese erweiterte Geometrie zu einer systematischen Verschiebung des Röntgenreflexes auf dem Detektor gegenüber dem zweidimensionalen Fall führt. Misst man, wie in [Bru05], mit Hilfe einer Referenzlinie, hat eine solche systematische Verschiebung einen meistens vernachlässigbar kleinen Effekt auf das Ergebnis der Messung, da, wie aus folgendem ersichtlich, diese Verschiebung für die Referenz und die zu vermessende Linie nahezu gleich ist und somit die ermittelte Bragg-Winkeldifferenz unverändert bleibt. Beim Bond-Verfahren hingegen hebt sich die erwähnte Verschiebung des Nachweispunktes in der gemessenen Winkeldifferenz γ nicht auf, sondern beeinflusst bei der Reflexion nach oben und unten (Abb. 3.17) die Messung gleich doppelt.

4.3.1 Linienkrümmung auf dem Detektor

Betrachtet man, wie in Abbildung 4.13 angegeben, eine Anordnung bestehend aus einer punktförmigen Quelle, einem ausgedehnten Kristall und einem Detektor, werden auch solche Röntgenstrahlen detektiert, die nicht innerhalb der ursprünglichen Streuebene verlaufen, und die somit nicht senkrecht auf die Rotationsachse des Kristalls treffen. Stattdessen schließen diese Strahlen mit der senkrecht zur Kristalloberfläche orientierten Streuebene den Winkel κ ein. Die Gitterkonstante d erscheint für diesen Strahlengang um den Faktor $1/\cos(\kappa)$ vergrößert. Da aber die Wellenlänge λ konstant ist, ergibt sich (in die ursprüngliche Streuebene zurückprojiziert) für die Reflexion der Röntgenstrahlung ein neuer Bragg-Winkel θ' (siehe Abb. 4.14). Für den Winkel α' den die Röntgenstrahlung nun mit der Hauptachse einschließt, gilt: $\alpha' = \theta' - \theta$.

Mit Hilfe des Bragg-Gesetzes kann der Winkel α' wie folgt berechnet werden:

$$\lambda = \text{const.} = 2d \sin(\theta) = \frac{2d \sin(\theta')}{\cos(\kappa)} . \quad (4.7)$$

Durch Umformen und Einsetzen erhält man

$$\alpha'(\kappa) = \arcsin(\sin(\theta) \cdot \cos(\kappa)) - \theta . \quad (4.8)$$

Die Spiegelung des Detektors an der Kristalloberfläche in die virtuelle Bildebene liefert wie in Abschnitt 4.1 eine Vereinfachung der vorliegenden Geometrie (Abb. 4.14), woraus sich direkt die Krümmung der Röntgenlinie auf der Detektoroberfläche ergibt. Die Verschiebung ΔY auf dem Detektor ist dann gegeben durch: $\Delta Y =$

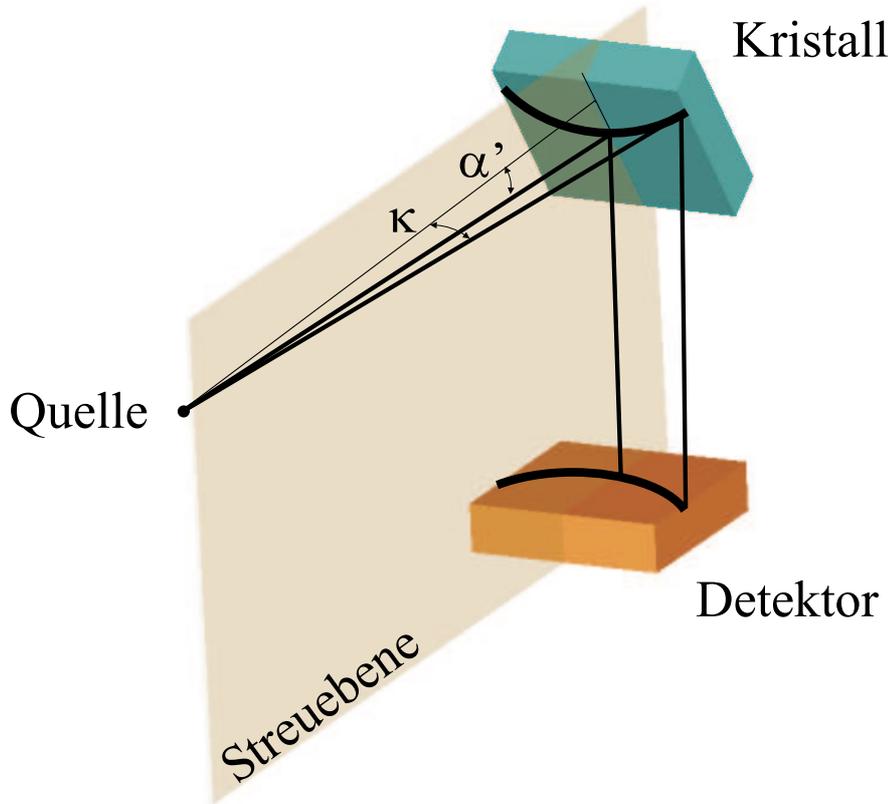


Abbildung 4.13: Unterschiedlicher Strahlengang der von einer punktförmigen Quelle emittierten Röntgenphotonen mit der Wellenlänge λ , bedingt durch die Projektion der Gitterkonstanten auf die Einfallrichtung.

$L \cdot \tan(\alpha'(\kappa))$. Für die im hiesigen Experiment vorliegenden Abmessungen, nämlich einer Länge von $L=1600$ mm und einer Detektorbreite von 25 mm, ist die Krümmung der Röntgenstrahlung auf dem Detektor für die Bragg-Winkel 30° und 60° in Abb. 4.15 dargestellt. Der Schwerpunkt der gekrümmten Linie entlang der Y-Achse ergibt sich aus dem Mittelwert der einzelnen Funktionswerte. Dieser Korrekturwert K kann in die Formel für das a/b-Verhältnis eingefügt werden:

$$\left| \frac{a}{b}(\xi) \right| = \left| \frac{p - L \tan(\xi_i - \theta) + K}{q + L \tan(\xi_i - \theta) - K} \right| . \quad (4.9)$$

Misst man unter Verwendung einer Referenzlinie, deren Bragg-Winkel θ nur um wenige Grad vom Bragg-Winkel der zu messenden Linie variiert, wie z.B. in [Bru05], sind die Korrekturwerte nahezu gleich und haben für beide Kristallstellungen identische Vorzeichen. Deshalb muss in solchen Messungen keine Korrektur durchgeführt werden. Bei Absolutmessungen mit dem Bond-Verfahren ist jedoch das unterschiedliche Vorzeichen des Korrekturwertes $K \rightarrow (-K)$ je nach Reflexionsrichtung (Detek-

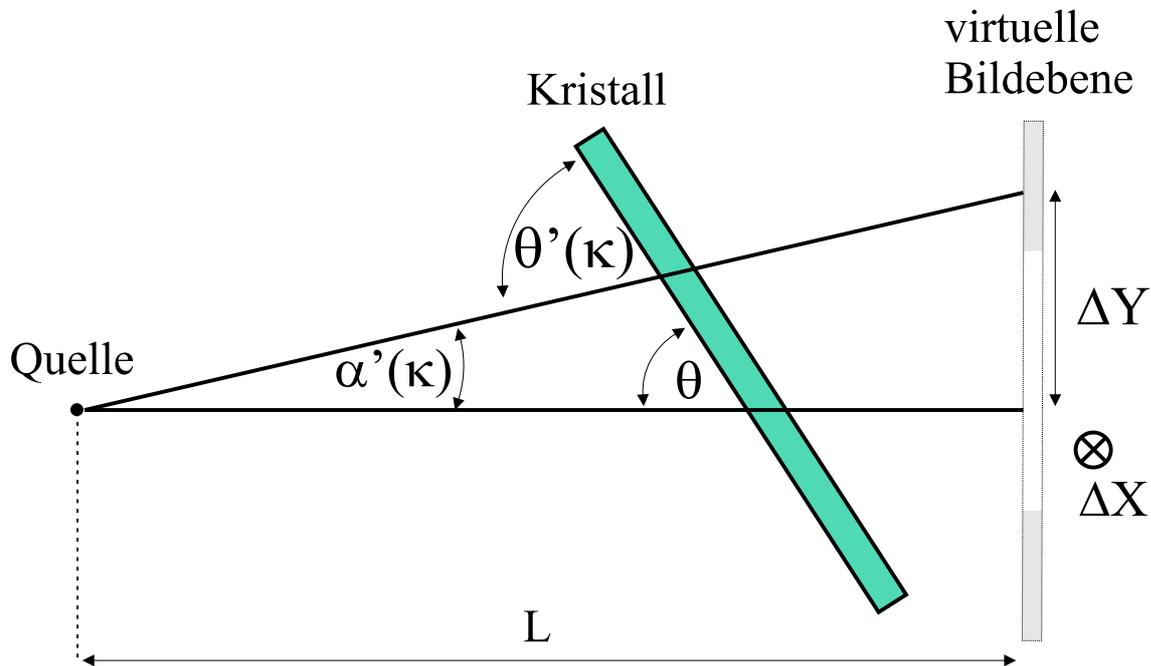


Abbildung 4.14: Unterschiedlicher in die Streuebene (Abb. 4.13) zurückprojizierter Strahlengang der Röntgenphotonen mit der Wellenlänge λ , bedingt durch die Projektion der Gitterkonstanten auf die Einfallrichtung.

tor 1, Detektor 2) zu beachten. Beim Auswerten der Daten ergeben sich dann wieder die richtigen Winkel ξ , aus deren Differenz der Drehwinkel γ berechnet wird. Die zu berücksichtigende Abweichung kann direkt angegeben werden: hierzu wird der Mittelwert $\bar{\alpha}'$ der Winkel $\alpha'(\kappa)$ für alle κ gebildet. Der tatsächliche Bragg-Winkel ist dann durch $\theta = \theta' - \bar{\alpha}'$ gegeben.

4.3.2 Axiale Ausdehnung der Quelle

Bisher wurde für die Herleitung der Form des Röntgenreflexes auf der Detektoroberfläche eine punktförmige Röntgenquelle angenommen, woraus eine übersichtliche Geometrie resultiert. Tatsächlich handelt es sich aber bei der EBIT um eine Linienequelle von etwa 40 mm Länge. Unterteilt man die Quelle der Länge nach in viele infinitesimal kleine Elemente, erhält man erneut punktförmige Quellen, für die wiederum die Geometrie aus Abschnitt 4.3.1 gültig ist. Wird der Linienschwerpunkt für jedes Quellsegment bestimmt, ergibt der Mittelwert aus allen Quellsegmenten den gesamten Schwerpunkt des Röntgenreflexes auf dem Detektor. Zu beachten ist hierbei, dass für jeden Quellpunkt die Grenzen des Winkelintervalls $[\alpha_{min}, \alpha_{max}]$, innerhalb dessen die Röntgenstrahlung auf den Detektor trifft, verschieden sind. Die Intervallgrenzen ergeben sich aufgrund der Größe und Position der Quelle, des Kri-

4.3. 3-dimensionale Betrachtung

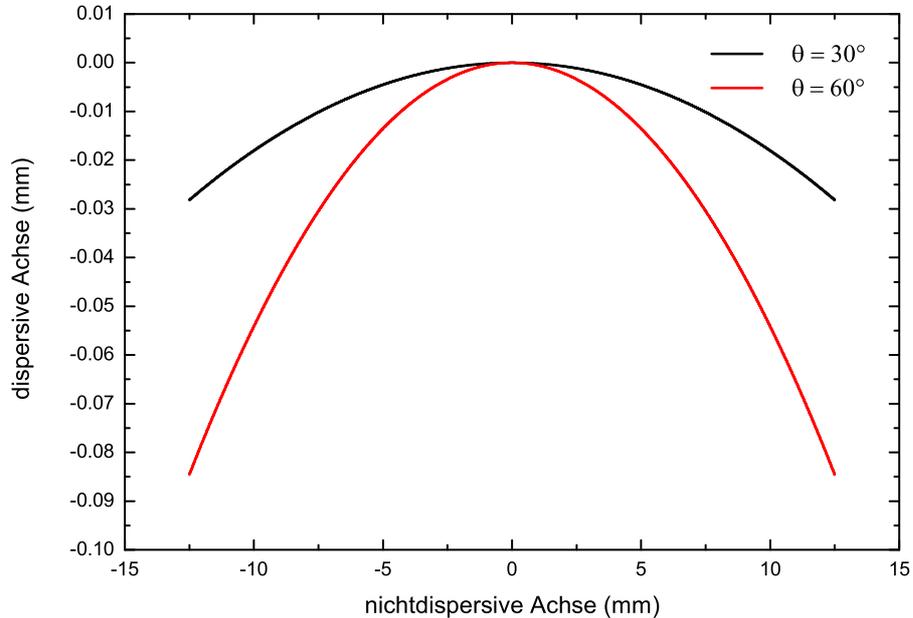


Abbildung 4.15: Linienkrümmung der Röntgenstrahlung auf dem Detektor für die Bragg-Winkel 30° und 60° bei einem Abstand Quelle-Detektor von 1600 mm.

stalls und des Detektors, wie in Abb. 4.16 zu sehen ist. Jedoch müssen diese Werte nicht mit höchster Präzision bekannt sein, wie dies für eine direkte Bestimmung des Bragg-Winkel notwendig wäre (Abschnitt 3.2.1), sondern eine relativ geringe Genauigkeit von etwa ± 0.5 mm genügt, da der Einfluss auf die Intervallgrenzen durch den großen Abstand von Quelle zum Detektor im Vergleich zur Kristall- und Detektorgröße klein ist. Quellpunkte ausserhalb des Fallenzentrums liefern einen größeren Beitrag zur Verschiebung des Linienschwerpunktes auf dem Detektor als das Fallenzentrum selbst, da ein Teil der Röntgenstrahlen aus diesen Quellpunkten unter einem größeren Winkel κ auf den Kristall trifft, und somit die Projektion der Gitterkonstante $d' = d / \cos \kappa$ sich zunehmend auf den Winkel α' auswirkt. Abbildung 4.17 zeigt den Verlauf der Röntgenstrahlung auf dem Detektor für die drei verschiedenen Quellpunkte aus Abb. 4.16 und die dazugehörige Verschiebung ΔY des Linienschwerpunktes entlang der dispersiven Achse. Die Summation über alle Quellpunkte führt zusätzlich zu einer Verbreiterung des aufintegrierten Röntgenreflexes und ist bei der Bestimmung der Halbwertsbreiten und somit z.B. bei der Berechnung des Auflösungsvermögens der Kristalle zu beachten. Im Experiment ist die eigentliche Gestalt des Röntgenreflexes, nämlich eine Überlagerung gekrümmter Linien, aufgrund der dazu nicht ausreichenden Zählstatistik nicht erkennbar. Die

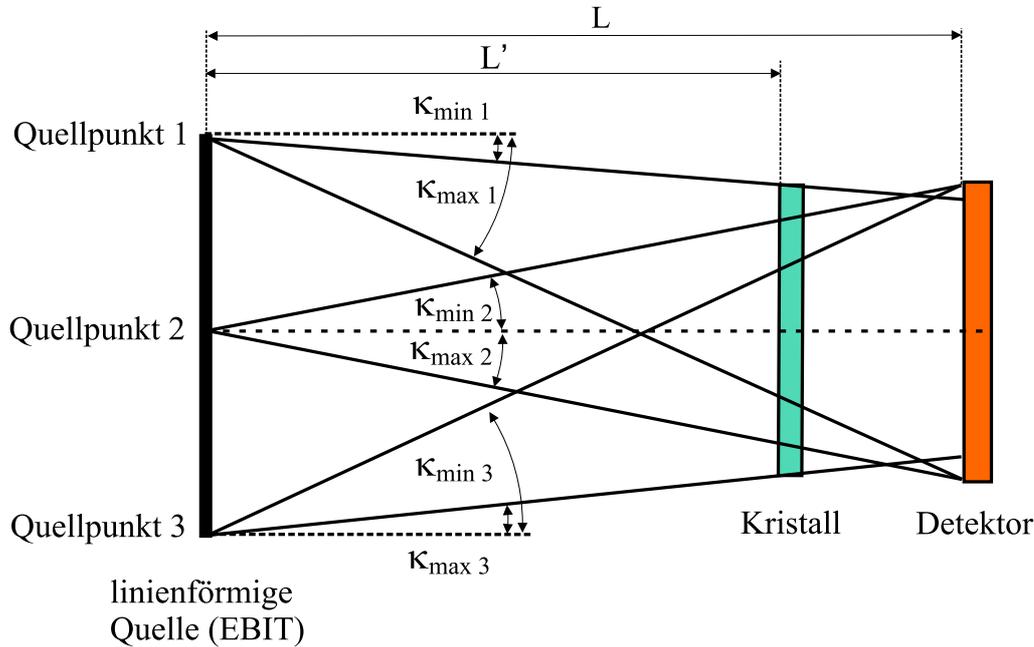


Abbildung 4.16: Intervallgrenzen der einzelnen Quellpunkte innerhalb derer die Röntgenstrahlung vom Detektor nachgewiesen wird.

Tabelle 4.2: Korrekturwinkel $\bar{\alpha}'$ die durch die Krümmung des Röntgenreflexes auf dem Detektor und durch die linienförmig ausgedehnte Quelle entstehen und die bei einer Absolutwellenlängenmessung zu berücksichtigen sind.

Element	Übergang	Energie (eV)	Θ (Si111)	$\bar{\alpha}'$ (10^{-3}°)
Chlor	$Ly_{\alpha 1}$	2962	41.8	1.86
Chlor	w	2790	45.1	2.08
Argon	$Ly_{\alpha 1}$	3323	36.5	1.54
Argon	w	3140	39	1.68

Krümmung einer, von einer nahezu punktförmigen Röntgenquelle erzeugten Linie wurde mit dem ursprünglichen, in dieser Arbeit modifizierten Spektrometer und mit Hilfe einer intensiven Röntgenquelle in [Bra03] gezeigt.

Die Winkelkorrekturen $\bar{\alpha}'$, die sich insgesamt aus der senkrecht zur Streuebene orientierten Ausdehnung der Quelle, des Kristalls und des Detektors ergeben, wurden für die in dieser Arbeit gemessenen Röntgenübergänge entsprechend ihrer Bragg-Winkel berechnet und sind in Tabelle 4.2 aufgelistet. Bei der Bestimmung dieser Korrekturwinkel wurde eine symmetrische Anordnung von Quelle, Kristall und Detektor bezüglich der Streuebene angenommen, was im Experiment sichergestellt werden muss, da sonst die Intervallgrenzen $[\alpha_{min}, \alpha_{max}]$ der Simulation nicht mit den tat-

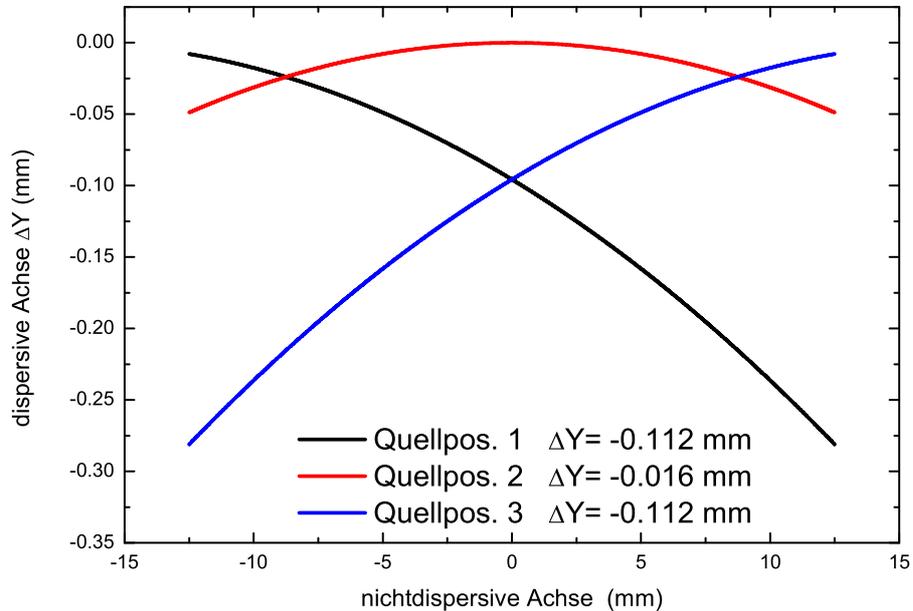


Abbildung 4.17: Verlauf des Röntgenreflexes auf dem Detektor für die Quellpunkte aus Abb. 4.16. Angegeben sind die Linienschwerpunkte (y-Achse), die aufgrund der Symmetrie für Quellpunkt 1 und 3 gleich sind.

sächlichen Grenzen übereinstimmen.

4.3.3 Integrationsvektor des Detektors

Eine systematische Fehlerquelle, die sich aus der Kombination von a/b-Methode und Bond-Verfahren ergibt und Einfluss auf das a/b-Verhältnis und somit auf das Ergebnis der Messung hat, wird durch die unterschiedliche Ausrichtung der Detektoren bezügl. der Steuebene verursacht. Wie in Abb. 4.18 zu sehen ist, führt eine Integration der detektierten Photonen entlang verschiedener Richtungen aufgrund der Position der Lichtreferenzpunkte, die nicht unbedingt exakt auf der Symmetrieachse (Projektion der Steuebene) liegen, zu unterschiedlichen a/b-Verhältnissen. Bei der Montage der Detektoren kann deren Ausrichtung in Bezug auf die Symmetrieachse nur mit einer Genauigkeit von $\Omega \sim \pm 3^\circ$ durchgeführt werden. Es ist daher notwendig, diese Ausrichtung durch eine Messung zu bestimmen, damit anschließend die Integration senkrecht zur Streuebene durchgeführt werden kann. Somit kann für beide Detektoren das entsprechend des Kristallwinkels ξ richtige a/b-Verhältnis berechnet werden.

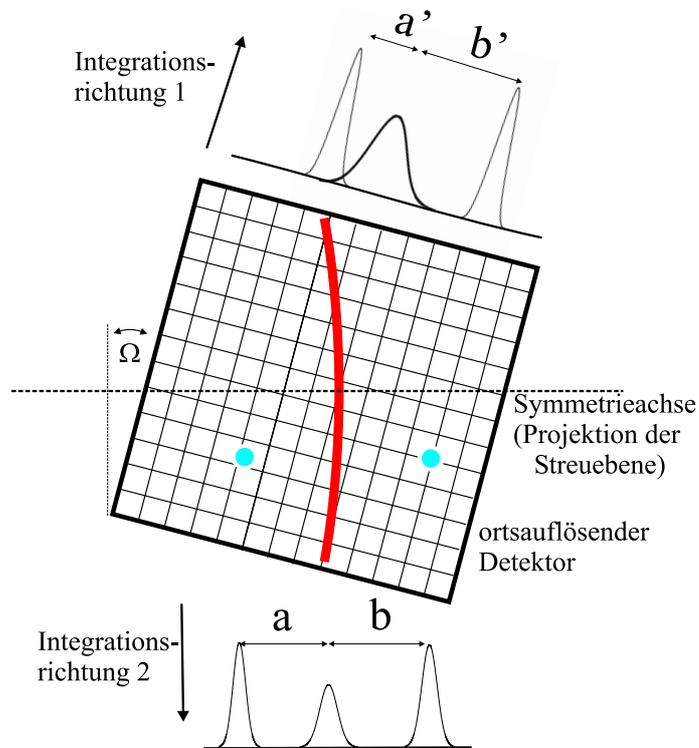


Abbildung 4.18: Der Einfluss der Integrationsrichtung in Bezug auf die Symmetrieebene auf das a/b-Verhältnis. Der Detektor ist bezügl. der Symmetrieachse um den Winkel Ω gedreht.

Kapitel 5

Aufbau des Spektrometers

Die Anforderungen an das Spektrometer wie sie in [Bra03] dargestellt sind und die zur Planung und zum Aufbau der ursprünglichen Version des Geräts führten, haben sich durch den Plan, Absolutmessungen mit der Bond-Methode durchzuführen zum Teil erheblich verändert. So war die Entwicklung einer neuen Hauptkammer notwendig, die anstatt eines Transmissionsports zwei gegenüberliegende Anschlussmöglichkeiten für die Dektoren (in Reflexion) bietet. Der belüftungsfreie Kristallwechsel im Spektrometer, der durch die verschiedenen einsetzbaren Kristalle ein effizientes Überstreichen eines großen Messbereiches gewährleistete, wurde zugunsten von Stabilität und Reproduzierbarkeit verworfen. Dafür wurde eine neue Kristallrotationseinheit aufgebaut. Mit der Entwicklung der in Abschnitt 4.1 beschriebenen a/b-Methode entstand ein vorläufiger Lichtaufbau, der die notwendigen Lichtreferenzpunkte für die in [Bru05] vorgestellten Messungen hinreichend genau erzeugte, jedoch ohne den für die Bond-Methode dringend erforderlichen Überlapp von Röntgen- und Lichtquelle mit ausreichender Genauigkeit zu gewährleisten (siehe Abschnitt 4.2.1). Hierzu wurde ein neuer Lichtaufbau entwickelt, der eine entsprechende Justagevorrichtung besitzt und die erforderliche Stabilität aufweist.

Für Messungen mit geringem Photonenfluss ist es notwendig, den Raumwinkel unter dem die Photonen reflektiert werden, so weit wie möglich zu vergrößern. Aus diesem Grund kann das Spektrometer direkt an der EBIT montiert werden. Auf der anderen Seite wird ein hohes Auflösungsvermögen durch einen großen Abstand zwischen der Röntgenquelle und dem Kristall erreicht. Ein neues Strahlrohr, welches die Verbindung zwischen EBIT und Spektrometer herstellt, wurde so konzipiert, dass selbst bei unterschiedlichen Abständen der geforderte Überlapp von Röntgen- und Lichtquelle erhalten bleibt (Abschnitt 5.4). Wie in der ersten Spektrometerversion sollten sich Kristall und Detektor im Ultrahochvakuum (UHV) befinden, wodurch die Absorption oder Streuung der Röntgenstrahlung z.B. durch Luft vermieden wird;

desweiteren wird hierdurch eine Verschmutzung des Detektors verhindert, welche zu einer verringerten Effizienz führt. Bei Bedarf kann aufgrund der hervorragenden UHV Bedingungen im Spektrometer ein direkter, fensterfreier Zugang zur EBIT, in der ebenfalls solch ein Vakuum herrscht, hergestellt werden. Die wesentlichen Elemente des neuen, verbesserten Spektrometers und ihre Funktion werden im folgenden beschrieben.

5.1 Hauptkammer

Die Hauptkammer des Spektrometers, an der alle weiteren Elemente befestigt sind, besitzt eine Form, die den Anschluß der beiden Detektoreinheiten für das Bond-Verfahren optimiert; dabei soll der Kristall so nah wie möglich an den Öffnungen platziert sein, damit der reflektierte Röntgenstrahl nicht durch die Hauptkammerwände teilweise ausgeblendet wird und somit der abdeckbare Winkelbereich des Spektrometers zu sehr eingeschränkt würde. Deshalb wurde die in Abb. 5.1 zu sehende flache Bauform gewählt. Membranbälge stellen die flexible und UHV-taugliche Verbindung zwischen der Hauptkammer und den Detektoreinheiten her. Die Beweglichkeit der Bälge ist jedoch beschränkt und daher ist auch das überstreichbare Winkelintervall relativ zur Oberflächennormale (spannungsfreie Position der Bälge) auf $\pm 30^\circ$ begrenzt. Durch die Ausführung als gleichschenkliges Trapez im Vergleich zum Rechteck wird der Messbereich des Spektrometers mit Hilfe zweier verschiedener Montagerichtungen bezügl. der EBIT erweitert. Da die Ober- und Unterseite der Hauptkammer um 12° bezüglich der horizontalen Achse geneigt sind, ergibt sich je nach Ausrichtung der Hauptkammer zur Röntgenquelle ein durch die Detektoren erfassbarer Bereich relativ zur Vertikalen von $(-42..+18)^\circ$ bzw. $(-18..+42)^\circ$ (siehe Abbildung 5.1). Die hieraus resultierenden Braggwinkelbereiche, innerhalb derer mit diesem Spektrometer Messungen durchgeführt werden können, sind $(24..54)^\circ$ und $(36..66)^\circ$. Auf beiden Seiten der Hauptkammer befindet sich entlang der Kristall- bzw. Detektorrotationsachse konzentrisch zu dieser ein Flansch zur Montage des Kristallhalters sowie gegenüberliegend zum Anschluß einer Turbomolekularpumpe. Senkrecht zu dieser Achse befinden sich ebenfalls auf gegenüberliegenden Seiten jene Flansche, mit denen das Spektrometer, je nach benötigtem Messbereich, an der EBIT angeschlossen wird. Der jeweils nicht benutzte Anschluss steht für weitere Diagnostik zur Verfügung. So kann durch ein dort montiertes Glasfenster z.B. die Ausrichtung der Detektoren bzgl. der Kristallnormalen (Streuebene) mit Hilfe eines zuvor justierten HeNe-Laserstrahls gemessen werden (siehe Abschnitt 4.3.3).

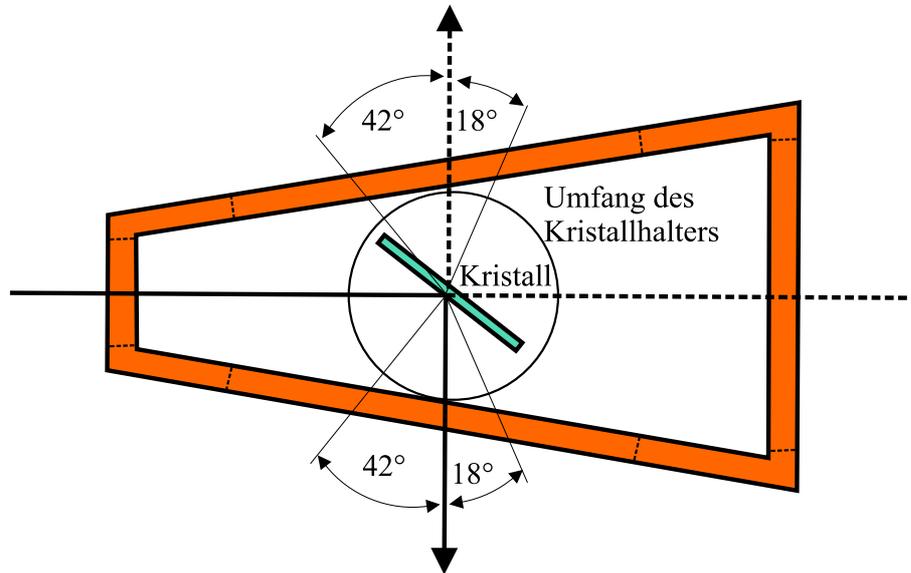


Abbildung 5.1: Form der Spektrometerhauptkammer mit erfassbarem Winkelbereich der Detektoren. Öffnungen in der Kammer für die Membranbälge und zum Anschluß an die EBIT sind gestrichelt in die Kammerwand gezeichnet. Je nach benötigtem Messbereich kommt die Röntgenstrahlung von links oder von rechts.

5.2 Detektoreinheit

Die Detektoreinheit, die für dieses Experiment gewählt wurde, muß verschiedene Funktionen erfüllen. Zum einen hat sie die Aufgabe, die Röntgenstrahlung mit einer möglichst hohen Quanteneffizienz nachzuweisen, sodass auch Prozesse mit geringen Photonenströmen untersucht werden können. Zum anderen dient sie zur Detektion der Lichtreferenzstrahlen, welche für die in Abschnitt 4.1 eingeführte a/b-Methode benötigt werden. Dies erfordert eine spektrale Sensitivität nicht nur im Röntgen- sondern auch im optischen Bereich. Für Langzeitmessungen, welche die erforderliche Zählstatistik für Präzisionsmessungen liefern, ist ein ausgezeichnetes Signal-Rauschverhältnis gefordert, umso einen möglichst reduzierten Untergrund zu gewährleisten. Eine CCD-Kamera (Charge-Coupled-Device) als Detektor erfüllt diese essentiellen Anforderungen und bietet die notwendige zweidimensionale Ortsauflösung zum Einsatz der a/b-Methode im Zusammenhang mit einer senkrecht zur Streuebene ausgedehnten Quelle, wie z.B. die EBIT. Die Detektormatrix der beiden eingesetzten CCD-Kameras besteht aus 1024×1024 (Roper Scientific CH 360) bzw. 2048×2048 (Princeton Instruments PI-SX:2048B) Einzeldetektoren (Pixel). Jedes einzelne Pixel ist an sich ein eigener pn-Halbleiterdetektor (siehe Abschnitt 3.1.1), der aufgrund seines energieauflösenden Detektionsmechanismus durchaus eine grobe Bestimmung der Photonenenergie erlaubt. Hierdurch ist es möglich, die nach-

gewiesenen Ereignisse nach Photonen innerhalb des erwarteten Energiebereichs sowie nach unerwünschtem Untergrund zu unterscheiden. Erzeugt wird letzterer z.B. durch kosmische Strahlung. Bei einem CCD-Chip wird die im pn-Übergang durch die Absorption eines Photons erzeugte freie Ladung nicht, wie bei einem Halbleiterdetektor üblich, direkt in ein elektrisch messbares Signal umgewandelt, sondern sie wird gespeichert und über die gesamte Aufnahmezeit akkumuliert. Dies erschwert die Bewertung der einzelnen Ereignisse bei starken Röntgenquellen, da ein Pixel während der Belichtung mehrere Photonen absorbieren kann und somit die in ihm gespeicherte Ladung der Summe der während der Aufnahme absorbierten Photonenenergie entspricht. Somit lässt sich die Energie der einzelnen Photonen nicht nachträglich ermitteln. Dieses Problem kann bei Anwendungen mit hohem Photonenfluss durch Verkürzung der Aufnahmedauer eingeschränkt werden. Diese wird so gewählt, dass eine Doppelbelichtung ein und desselben Pixels mit einer so geringen Häufigkeit auftritt, dass sie für die Messung unerheblich ist. Die in den jeweiligen Pixeln gespeicherte Ladung wird am Ende einer Aufnahme Pixel für Pixel einem Analog-Digitalwandler zugeführt, wodurch ein für die weitere Auswertung geeigneter digitaler Wert erzeugt wird. Da während einer Belichtung auch freie Ladungen im pn-Übergang durch thermische Anregung entstehen, was zu einem unerwünschten Untergrund führt, werden die Detektoren auf -110°C gekühlt. Diese Temperatur entspricht einem Optimum zwischen verringertem Untergrund und reduzierter Elektronenmobilität. Sie wird über ein geregeltes Peltierelement konstant gehalten, welchem ein Wärmebad auf Flüssig-Stickstofftemperatur (-193°C) zur Verfügung steht. Ein automatisches Stickstoff-Nachfüllsystem erlaubt lange Messreihen von bis zu 24 Stunden, was störende Einflüsse wie z.B. Erschütterungen, welche die Präzision der Messung verringern, reduziert.

Die CCD-Kameras werden auf den sog. Kamerawagen montiert, welche durch Schienen geführt werden. Diese Schienen verlaufen konzentrisch um die Rotationsachse des Kristalls, wodurch sich eine nahezu konstante Strahlweglänge ergibt, wie sie zur Reduktion verschiedener Fehlerquellen erforderlich ist (Abschnitt 4.2). Die Positionierung der Kamerawagen wird mit Schrittmotoren, die über einen Computer angesteuert werden, durchgeführt. Dabei wird die aktuelle Position durch ein kommerziell erhältliches Winkelmessgerät (Heidenhain ERA 880C) mit einer Systemgenauigkeit von 3.5 Winkelsekunden ($\sim 10^{-3}^{\circ}$) bestimmt. Dies erlaubt eine hinreichend genaue Einstellung der Detektorposition, um weitere Fehlerquellen aufgrund einer falschen Positionierung der Kamera ausschließen zu können.

5.3.

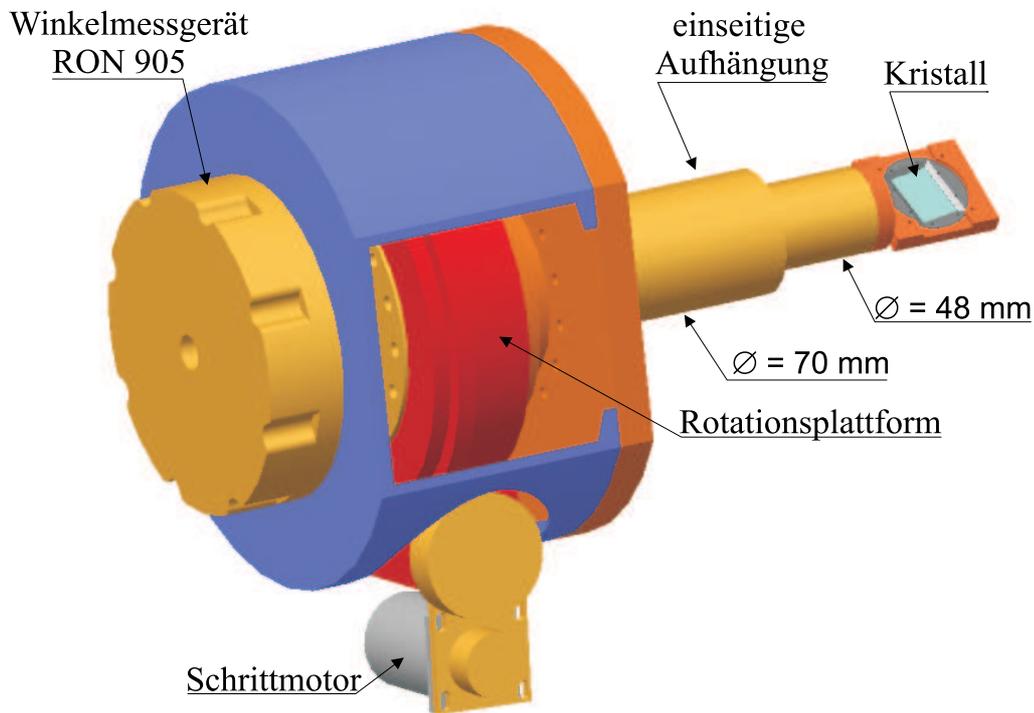


Abbildung 5.2: Kristallrotationseinheit mit Kristallhalter, Rotationsplattform und Winkelmessgerät.

5.3 Kristallrotationseinheit

Die gewünschten Braggwinkel für die jeweilige Reflexionsrichtung (nach oben oder unten) werden mittels der Kristallrotationseinheit eingestellt und der dabei überstrichene Winkel mit höchster Präzision erfasst. Die Kristallrotationseinheit besteht hierzu im wesentlichen aus den drei Elementen Kristallhalter, Rotationsplattform und Winkelmessgerät, deren Anordnung in Abb. 5.2 zu sehen ist. Die Rotationsplattform ist eine kommerzielle Vakuumkomponente (Vacuum Generators RP100M) in der Nenngröße CF100. Sie stellt die drehbare, UHV taugliche, mechanische Verbindung zwischen dem Kristall im Vakuum und der Spektrometerkammer her. Da durch sie die Position des Kristalls definiert wird, muss sie eine hohe mechanische Stabilität aufweisen. Angetrieben wird die Plattform über ein Getriebe mittels eines Schrittmotors. Hieraus ergibt sich für die Positionierung des Kristalls eine Schrittweite von 0.0025° .

5.3.1 Die Winkelmessung

Das für die Kristalldrehung verwendete Winkelmessgerät RON 905 der Firma Heidenhain ist ein inkrementeller Messgeber, der eine absolute Genauigkeit von $(5 \cdot 10^{-5})^\circ$ erreicht. Da die zu messenden Winkeldifferenzen γ mehr als 60° betragen, ist der aus der Winkelmessung resultierende Anteil am Gesamtfehler einer Messung kleiner als 1 ppm. Das Protokoll der Kalibrierung des Winkelmessgerätes befindet sich im Anhang A dieser Arbeit. Das Winkelmessgerät ist über einen Metallzylinder mit einem Durchmesser von 280 mm (siehe Abbildung 5.2) mit dem feststehenden Teil der Rotationsplattform und somit mit der Spektrometerkammer verbunden. Dies erlaubt es, die Kristallrotationseinheit als ganzes für einen Kristallwechsel zu entfernen, ohne dass die konzentrische Ausrichtung des Winkelmessgerätes zur Rotationsplattform verloren geht. Die Übertragung des Drehwinkel der Rotationsplattform zum Winkelmessgerät übernimmt ein verdrehsteifer Wellbalg, der kleinste Abweichungen dieser soeben erwähnten Ausrichtung ausgleicht. Torsionstests des Wellbalgs ergaben, dass mit diesem Aufbau der tatsächliche Drehwinkel des Kristallhalters innerhalb der Ablesegenauigkeit der Winkelmessung $(5 \cdot 10^{-5})^\circ$ übertragen wird.

5.3.2 Der Kristallhalter

Der neu entwickelte Kristallhalter erlaubt beim Einbau des Kristalls dessen azimutale Ausrichtung, wodurch der Beitrag des Verkippungswinkels δ zwischen Netzebenen und Oberfläche minimiert wird (Abschnitt 4.2.2). Eine Ausrichtung (bei einer Winkelgenauigkeit von $\pm 1^\circ$) ist durch eine drehbare Kristallfassung, die mit einer Noniusskala versehen ist, möglich (siehe Abb. 5.3). Der gesamte Kristallhalter wird einseitig gelagert, so dass eine mögliche Torsion des Kristallhalters, welche zu einer nicht reproduzierbaren Drehung des Kristalls während einer Messung führen würde [BBT⁺05], vermieden wird. Durch Verzicht auf einen in der ersten Version des Spektrometers für den Kristallwechsel verwendeten Z-Manipulator [Bra03], wird ein resultierendes Drehmoment verhindert und somit die durch die Relaxation mechanischer Spannungen verursachte Verdrehung der Kristallorientierung während der Messungen erheblich reduziert. Das Ergebnis dieser Maßnahmen ist in Abb. 5.4 dargestellt. Die hohle Ausführung der einseitigen Kristallaufhängung mit einem Durchmesser von 70 mm bzw. 48 mm (Abb. 5.2) gewährleistet eine hohe Steifigkeit bei geringem Gewicht und erlaubt von aussen einen guten Zugang zum Kristallhalter, wodurch dieser mit Hilfe eines Kühlmittels temperaturstabilisiert werden kann (Abb. 5.3). Da sich der Kristall ausschliesslich mit dem Kristallhalter in thermischem Kontakt befindet, lässt sich durch solch eine Maßnahme auch die Temperatur des

5.3. Kristallrotationseinheit

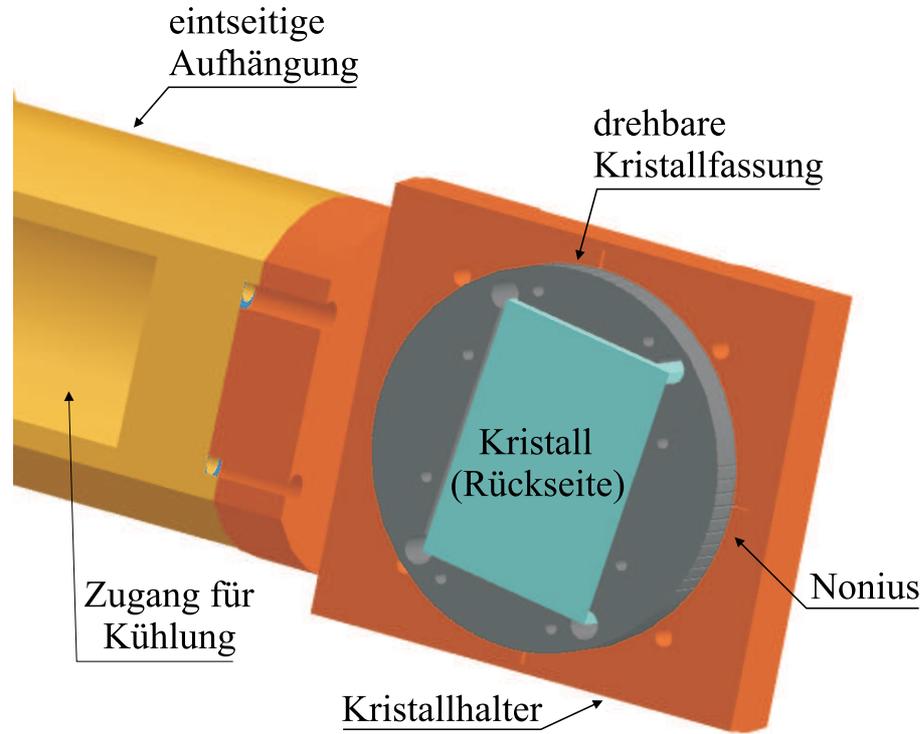


Abbildung 5.3: Kristallhalter mit Nonius zur Ausrichtung des Kristalls.

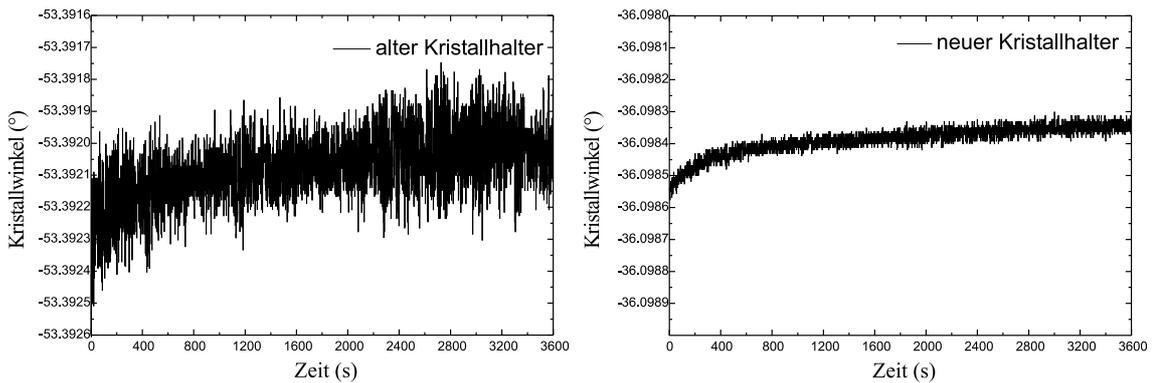


Abbildung 5.4: Kristallwinkelverlauf während einer Messung. Links: alter Kristallhalter mit Z-Manipulator. Rechts: neuer Kristallhalter.

Kristalls stabilisieren, was für Präzisionsmessungen im ppm Bereich notwendig ist.

5.4 Die optische Justiervorrichtung

Die optische Justiervorrichtung stellt die für die a/b-Methode notwendigen Lichtreferenzstrahlen zur Verfügung. Die Lichtreferenzstrahlen können nicht innerhalb der EBIT generiert werden, da dort einerseits kein Platz vorhanden ist, andererseits zusätzliche Elemente nahe der Falle die dort herrschenden elektrischen- und magnetischen Felder sowie die thermische Abschirmung des supraleitenden Magneten stören würden. Aus diesem Grund wird ein Spalt ausserhalb der EBIT verwendet, und das vom Spalt austretende Licht über einen Spiegel so in den Röntgenstrahlengang eingekoppelt, dass das Bild des Spaltes in der Fallenregion liegt. Dieser Spalt ist mechanisch fest mit dem EBIT Kryostaten verbunden, und somit ist seine Position unabhängig vom Abstand des Spektrometers zur EBIT. Bevor jedoch eine Messung mit der a/b-Methode durchgeführt werden kann, muss der optische Überlapp von Spalt und der Ionenwolke in der Fallenregion sichergestellt werden. Eine Abbildung der Ionenwolke wird daher benötigt. Hierzu wird zuerst sichtbares Licht, welches von den Ionen in der Falle ausgesandt wird, mit einer Linse gesammelt und mit einer zweiten, identischen Linse auf die CCD-Kamera fokussiert (Abb. 5.5). Die Position der Ionen steht somit in direkter Relation zur Position des Bildes auf dem Detektor. Anschließend wird der Spalt mit einer LED beleuchtet und das durch ihn hindurchtretende Licht über besagten Spiegel in den Strahlengang des von den Ionen stammenden Lichts umgelenkt. Das Licht des Spaltes wird wieder durch dieselben Linsen gesammelt und fokussiert wie das Ionenlicht. Nun wird die horizontale Position des Spaltes so lange variiert (dies entspricht einer vertikalen Verschiebung Δy in Abschnitt 4.2.1), bis sein Bild an der exakt gleichen Stelle wie das der Ionenwolke erscheint. Hierzu ist die gesamte Spaltvorrichtung auf einem optischen Verschiebetisch mit Mikrometerschraube montiert. Stimmen beide Bildpositionen überein, ist der geforderte vertikale Überlapp von Licht- und Röntgenquelle gewährleistet. Damit kein chromatischer Abbildungsfehler aufgrund der unterschiedlichen Wellenlängen des Lichts von Ionen und LED entsteht, werden achromatische Linsen verwendet. Ein Aufnahme von den Ionen und dem Spalt ist zusammen mit den Projektionen auf die dispersive Achse in Abbildung 5.6 zu sehen. Der horizontale Überlapp wird durch gleiche Abstände des Spaltes und der Röntgenquelle zum Umlenkspiegel sichergestellt. Hierbei wird jedoch nur eine Präzision von ± 5 mm gefordert, was bei der Montage der optischen Justiervorrichtung problemlos sichergestellt werden kann. Während der Bestimmung der Position der Ionenwolke werden die Vakua von EBIT und Spektrometer durch ein Interferenzfilter (440 nm, 3 nm Bandbreite) getrennt, das zusätzlich das Streulicht welches von der geheizten Elektronenkanone und von den Vakuumdruckmessröhren emittiert wird unterdrückt, und dadurch den störenden Untergrund reduziert. Ist der Überlapp beider Bilder, also von Ionenwol-

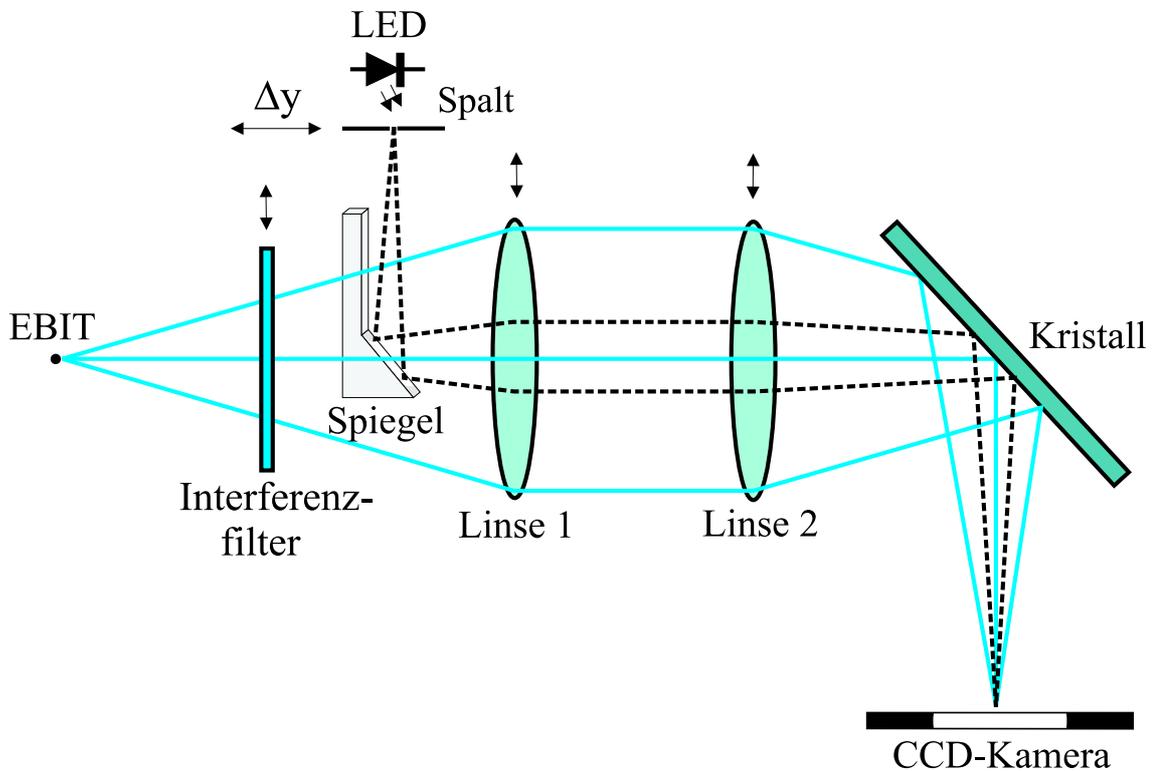


Abbildung 5.5: Abbildung der EBIT-Ionen und des Spaltes (virtuelle Ionenfalle) auf die CCD-Kamera. Die Position des Spaltes ist so gewählt, dass die Bilder auf der Kamera exakt übereinander liegen.

ke und Lichtspalt eingestellt, werden die Linsen durch zwei Manipulatoren aus dem Strahlengang entfernt. Die Lichtreferenzstrahlen für die a/b Methode werden mit einem Helium-Neon-Laser erzeugt. Als Strahlen dienen die ersten Nebenmaxima eines Interferenzmusters. Dieses wird mit Hilfe eines Transmissionsgitters generiert, das direkt auf dem Spalt befestigt ist. Durch den relativ großen Strichabstand des Gitters von 0.2 mm im Vergleich zur Wellenlänge des Laser (632 nm) ergeben sich für die Lichtstrahlen sehr kleine Öffnungswinkel $\beta_{1,2}$. Jedoch können somit beide Lichtstrahlen trotz der kleinen Detektoroberfläche von $(25 \times 25) \text{ mm}^2$ im Abstand von 1600 mm detektiert werden (siehe Abb. 5.7). Die Spaltbreite von 1 mm führt dazu, dass 5 Linien des Gitters beleuchtet werden. Hierdurch entstehen ausreichend gute und Trennung und Kontrast der Minima und Maxima des Interferenzmusters, was die Bestimmung ihrer Lage bei der Auswertung vereinfacht. Das Bild des Interferenzmusters und die dazugehörige Projektion ist in Abbildung 5.8 zu sehen. Bei der Festlegung des Überlapps kann, bei der gegebenen Spaltbreite und einem Ionenwolkendurchmesser von $< 0.2 \text{ mm}$ in der EBIT, deren beider Schwerpunkte auf etwa 0.05 mm genau bestimmt werden. Damit die Öffnungswinkel $\beta_{1,2}$ der Lichtstrahlen bezüglich der Hauptachse angepasst werden können, d.h. damit $\beta_1 \approx \beta_2$ ist (Ab-

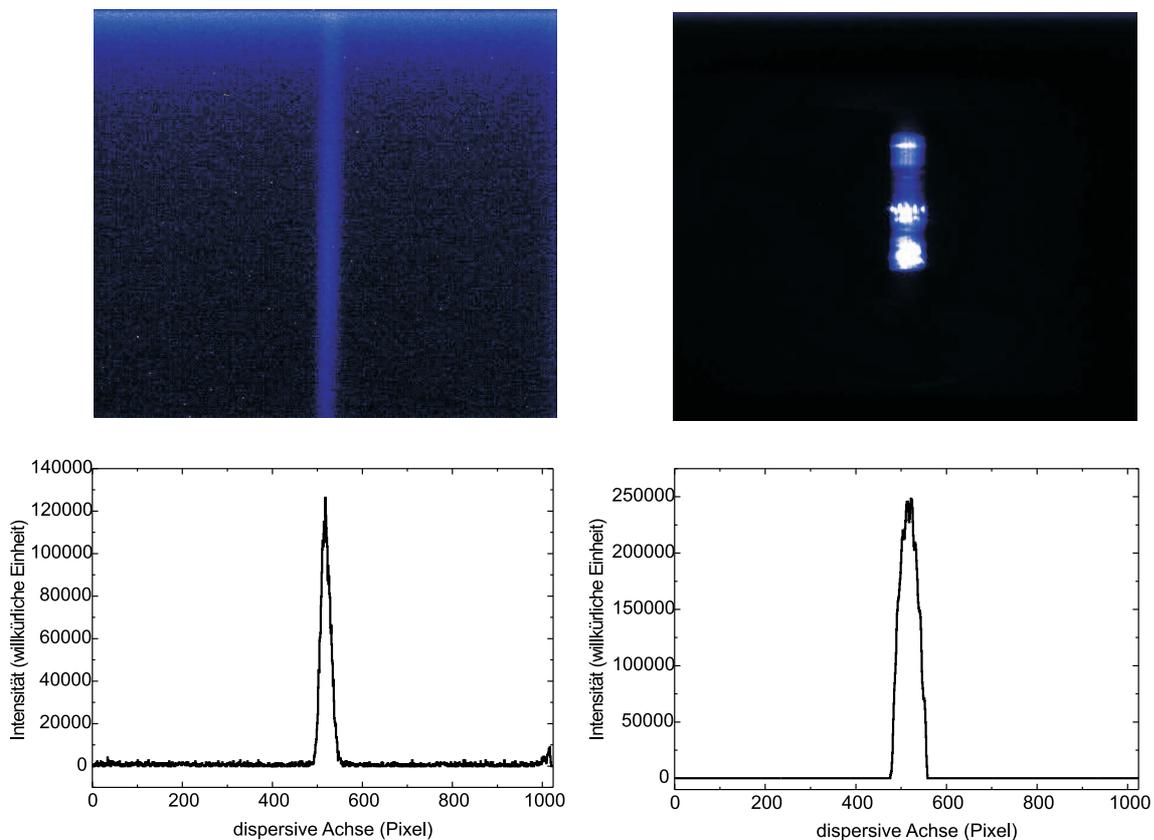


Abbildung 5.6: Links oben: Aufnahme der Ionen (mit erhöhtem thermischen Untergrund im oberen CCD-Bereich). Links unten: Projektion der Ionenaufnahme auf die dispersive Achse zur Bestimmung der Ionenwolkenposition. Rechts oben: Aufnahme des mit einer LED ungleichmäßig beleuchteten Spaltes. Zu erkennen ist die Struktur des Transmissionsgitters. Rechts unten: Die dazugehörige Projektion auf die dispersive Achse.

schnitt 4.2.1), kann die optische Justier Vorrichtung um einige Grad gedreht werden.

Um die Ausrichtung zu erleichtern, das Gewicht der optischen Justier Vorrichtung zu reduzieren und ihre Temperatur konstant zu halten, wurde der verwendete Helium-Neon-Laser, der sich bei Betrieb erwärmt, ausserhalb des die optische Justier Vorrichtung einschließende Gehäuses platziert. Das Laserlicht wird dorthin mittels einer Einzelmodenfaser (Single-Mode-Fiber) übertragen, an deren Enden sich jeweils eine Linse zum Ein- und Auskoppeln des Lichts befindet. Damit bei einer Drehung der optischen Justier Vorrichtung der zuvor sichergestellte optische Überlapp der Quellen nicht verloren geht, befindet sich der Drehpunkt direkt beim Spalt, d.h. die Position der virtuellen Quelle ändert sich bei solch einer Drehung nicht. Die einzelnen Komponenten der optischen Justier Vorrichtung sind in Abb. 5.9 zu sehen. Nach der Ausrichtung der optischen Justier Vorrichtung wird zum Schutz des im Fallenbereich herrschenden UHV mit Hilfe eines Manipulators der Interferenzfilter durch eine Be-

5.4. Die optische Justiervorrichtung

rylliumfolie mit einer Dicke von $25\ \mu\text{m}$ ersetzt, die eine Trennung der Vakua gewährleistet. Der Interferenzfilter würde die Röntgenstrahlung in diesem Bereich nahezu vollständig absorbieren, wohingegen die Berylliumfolie für 3 keV Röntgenstrahlung ein Transmissionsvermögen von $\sim 91\%$ besitzt [XROS]. Folie und Filter sind in einen Schieber montiert, der mit Hilfe eines Verschiebemanipulators in die entsprechenden Stellungen gebracht wird. Eine weitere geeignete Schieberstellung erlaubt zudem eine durchgängige Verbindung, damit nach der Montage des Strahlrohrs das verbleibende Volumen zwischen Schieber und EBIT-Anschlußventil evakuiert werden kann. Auch die Linsen sind jeweils an einem weiteren Verschiebemanipulator befestigt, um sie zum Vermessen der Ionenwolkenposition in den Strahlengang zu bringen. Zum Nachweis der Röntgenstrahlung werden sie aus dem gleichen Grund wie der Interferenzfilter entfernt. An den Linsenhaltern befinden sich Arretierungen, die eine immer

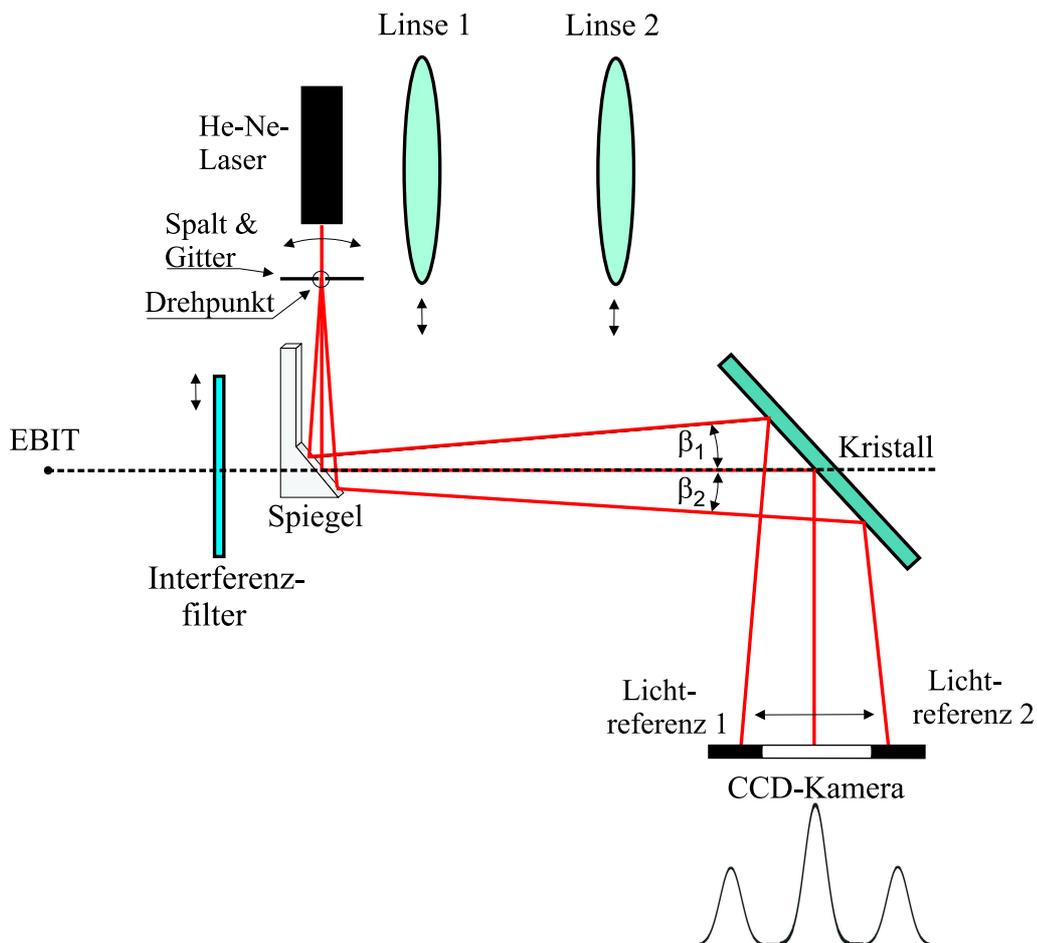


Abbildung 5.7: Lichtreferenzlinien, die durch die ersten Seitenmaxima eines Transmissionsgitters gebildet werden. Die Richtung des Strahlengangs kann durch Drehen des Spaltes und Lasers angepasst werden.

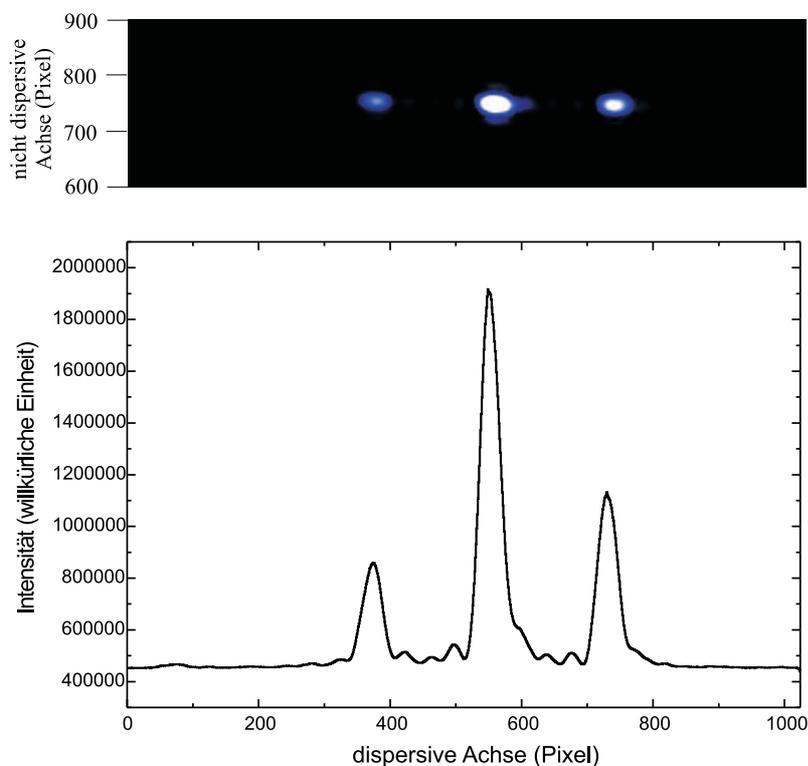


Abbildung 5.8: Oben: Interferenzmuster zur Erzeugung der Lichtreferenzstrahlen. Unten: Projektion des Interferenzmusters auf die dispersive Achse. Es ist eine Überlagerung des eigentlichen Interferenzmusters (Transmissionsgitter) mit der Interferenz des Einzelspaltes zu erkennen.

gleiche Linsenposition im Strahlengang gewährleisten; hierdurch werden Fehler bei der Bestimmung des Überlapps vermieden. Zusätzlich kann hiermit zusammen mit der optischen Justiervorrichtung die mechanische Langzeitstabilität und Reproduzierbarkeit des Spektrometers getestet werden, indem in regelmäßigen Abständen die Positionen der Ionenabbildung und des Spaltbildes kontrolliert werden.

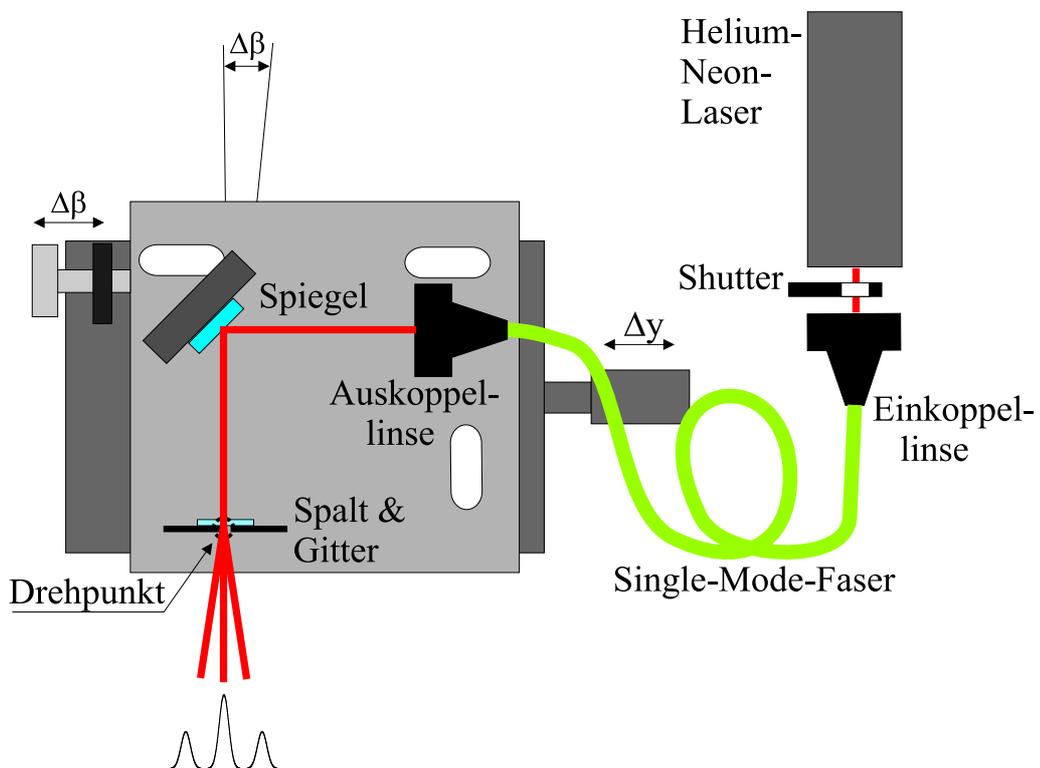


Abbildung 5.9: Schema der optischen Justiervorrichtung zur Erzeugung der Lichtreferenzstrahlen (siehe Text). Über die in weiß dargestellten Langlöcher wird, nachdem die Winkel $\beta_{1,2}$ eingestellt sind, der Lichtaufbau für die weiteren Messungen fixiert.

Kapitel 6

Absolut- und Relativmessungen an Cl^{15+} , Cl^{16+} , Ar^{16+} und Ar^{17+}

Mit dem neu aufgebauten Spektrometer, das erstmals Absolutmessungen mit der a/b Methode in Kombination mit dem Bond-Verfahren erlaubt, wurden erste Testmessungen durchgeführt, um dessen Potential zu demonstrieren. Hierzu wurden die Energien der Lyman- α_1 Übergänge in wasserstoffartigem Chlor und Argon, bzw. die der w Übergänge (Gabriel-Notation [Gab72], siehe Tabelle 6.2) in heliumartigem Chlor und Argon vermessen. Dabei kam die neue optische Justiervorrichtung (siehe Abschnitt 5.4) zum Einsatz. Bei den Testmessungen wurde zusätzlich eine neue Tragekonstruktion verwendet, die eine erhöhte mechanische Stabilität des Spektrometers gewährleistet.

6.1 Aspekte der Datenanalyse

6.1.1 Überlapp von Röntgen- und Lichtquelle

Durch die neue optische Justiervorrichtung kann der benötigte räumliche Überlapp der Lichtreferenzlinienquelle und der Röntgenquelle präzise eingestellt werden (siehe Abschnitt 4.2.1), was mit der zuvor verwendeten Lichtreferenzlinienquelle [Bru05] nicht möglich war. Die Lichtreferenzlinien wurden dort durch Abbildung eines fest montierten Doppelspaltes mittels einer Linse erzeugt. Die Quellposition in Bezug zur Röntgenquelle konnte nur geometrisch abgeschätzt, jedoch nicht variiert oder justiert werden. Der optische Überlapp im neuen Aufbau wird, wie in Abschnitt 5.4 erklärt, mit Hilfe von zwei achromatischen Sammellinsen überprüft. Diese bilden zum einen das Licht der Ionen im Fallenvolumen und zum anderen den Spalt auf

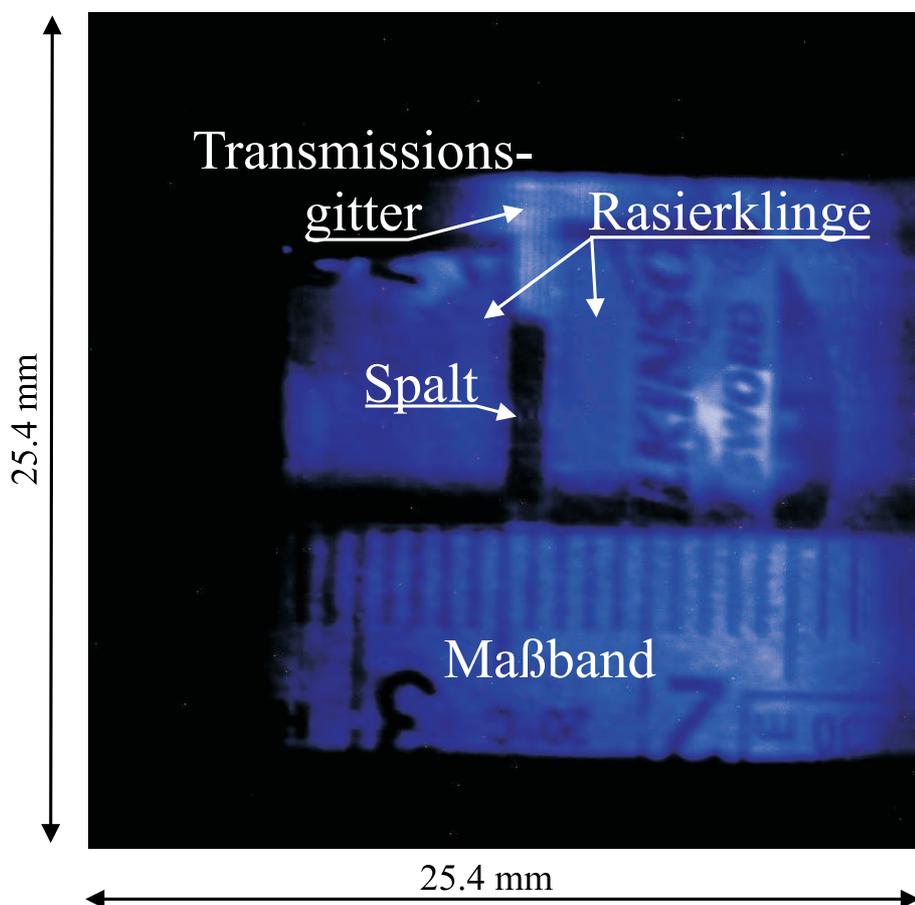


Abbildung 6.1: Abbildung des Spaltes auf dem Detektor. Zu erkennen sind ein Maßband, die Rasierklingen zur Spaltbegrenzung und die Linien des Transmissionsgitters.

die Oberfläche der CCD-Kamera ab. Um eine scharfe Abbildung des Spaltes und der Ionenwolke zu erhalten ist eine Positionierung der Linsen im richtigen Abstand vom Fallenvolumen, Spalt und der CCD-Kamera notwendig. Diese Abstände werden durch die Montage festgelegt und können anschließend nicht mehr verändert werden. Die erreichte Abbildungsqualität ist dabei, wie Abbildung 6.1 entnommen werden kann, sehr gut. Man erkennt darin die Struktur des verwendeten Beugungsgitters gerade noch, die eine Periodizität von 5 Strichen pro Millimeter aufweist. Mit Hilfe des zusätzlich abgebildeten Maßbandes und der bekannten Detektorgröße von $(25.4 \times 25.4) \text{ mm}^2$ berechnet sich das Abbildungsverhältnis zu $1:(0.87 \pm 0.05)$.

Justage und Stabilität des optischen Überlapps

Die Lage der Ionenwolke im Fallenvolumen wurde zur Festlegung des optischen Überlapps mit von den Ionen emittiertem sichtbarem Licht der Wellenlänge $\sim 441 \text{ nm}$

Tabelle 6.1: Relative Position der Intensitätsmaxima des Ionen- und des Spaltlichts.

Zeitpunkt	Ionenposition (Pixel)	Spaltposition (Pixel)
Ausrichtung	517.0 ± 0.1	517.4 ± 0.1
nach vier Tagen	519.3 ± 0.1	517.1 ± 0.1

[Sor05], das vom verbotenen M1-Übergang ($1s^2 2s^2 2p \ ^2P_{1/2} \rightarrow 2p \ ^2P_{3/2}$) in borartigem Argon (Ar^{14+}) stammt, bestimmt. Zur effizienten Produktion dieser Ionen wird die Elektronenstrahlenergie auf etwa 900 eV eingestellt. In einem ersten Schritt wird die Ionenwolke mit einer Belichtungszeit von etwa 5 Minuten aufgenommen. Nach der anschließenden Integration der Ereignisse entlang der nichtdispersiven Achse des CCD-Detektors erhält man die relative Position des Fallenzentrums durch einen Gaußfit, der die beobachtete Intensitätsverteilung hinreichend genau wiedergibt (siehe Abbildung 6.2 oben). Die in der Abbildung dargestellte Intensitätsverteilung weist eine FWHM von $455 \mu\text{m}$ auf, die bei dem gegebenen Abbildungsverhältnis einer Quellgröße von $520 \mu\text{m}$ entspricht. Anschließend wird der Spalt, und damit auch das darauf montierte Transmissionsgitter mit einer LED beleuchtet. Währenddessen wird ein Bild mit ca. 10 Sekunden Belichtungszeit aufgenommen. In diesem Fall ergibt abermals ein Gaußfit die Lage der Spaltmitte, mit zwar verminderter, aber dennoch ausreichender Qualität. Die Ursache hierfür liegt in der durch die einzelnen Striche des Transmissionsgitters sich ergebenden Maxima und Minima, die im Intensitätsprofil der Projektion erkennbar sind (siehe Abbildung 6.2 unten). Durch einen mit einer Mikrometerschraube ausgestatteten Verschiebetisch, lässt sich nun die relative Lage des Spalts so einstellen, bis ein ausreichend genauer optischer Überlapp zwischen dem Bild des Spaltes und dem der Ionenwolke hergestellt ist. Die Reproduzierbarkeit und Stabilität des Überlapps wurde geprüft. In der Tabelle 6.1 sind die Positionen der Intensitätsmaxima des Ionen- und des Spaltlichts zum Zeitpunkt der Spaltausrichtung und vier Tage später angegeben. Innerhalb dieser Zeit wurde eine Vielzahl von Röntgenspektren der zu vermessenden Übergänge aufgenommen. Während dieser Messungen nahmen die Detektoren und der Kristall ständig neue Positionen ein, um die entsprechenden Werte der a/b Verhältnisse zu erfassen. Zuvor war es jedoch notwendig die Linsen zu entfernen und das Interferenzfilter durch die Berylliumfolie zu ersetzen. Beides geschieht durch reproduzierbare Vorrichtungen mittels Manipulatoren. Zur erneuten Prüfung des Überlapps werden diese Elemente wieder in den Strahlengang eingebracht. Die nur geringfügige Abweichung ($58 \mu\text{m}$ auf 1.6 m Entfernung) der absoluten Position der Intensitätsmaxima des Ionenlichts zu beiden Zeitpunkten zeigt hierbei die sehr gute Reproduzierbarkeit des Kristall-

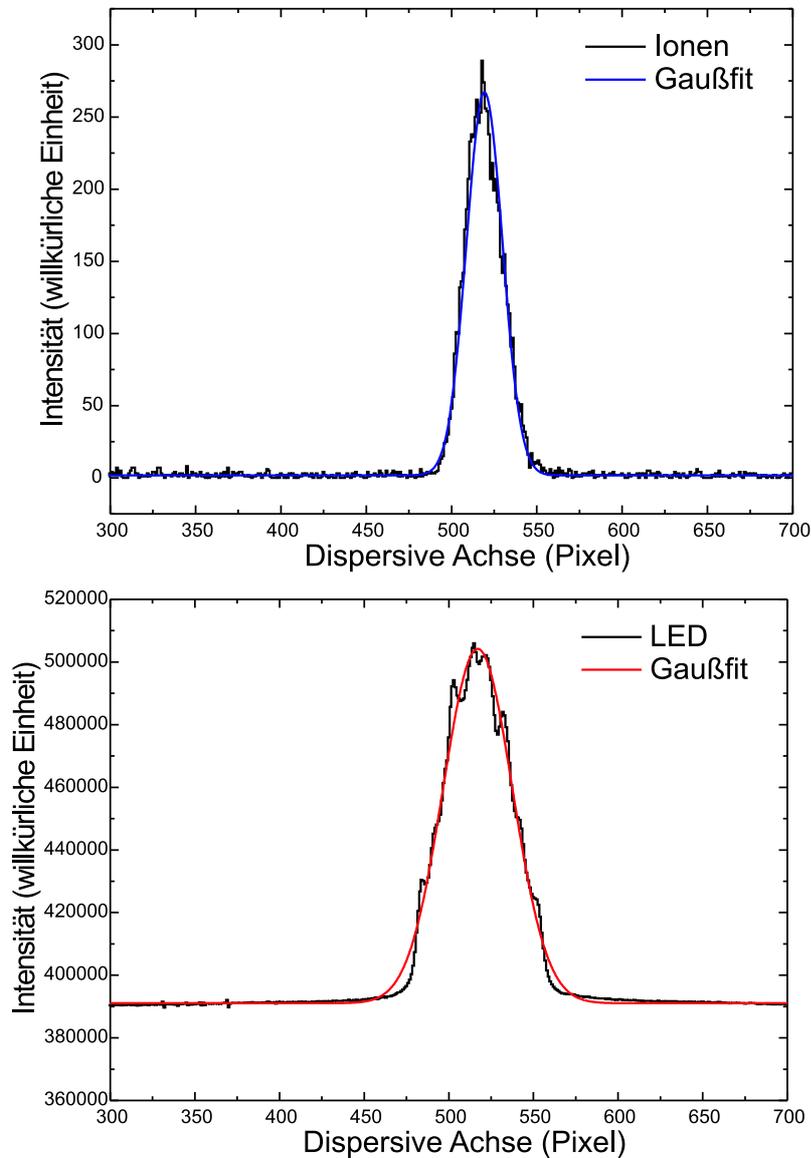


Abbildung 6.2: Intensitätsverteilung der Aufnahme der Ionen (oben) und des Spalts (unten) entlang der dispersiven Achse des Detektors zusammen mit einem Gaußfit zur Positionsbestimmung.

und Detektorwinkels, sowie die hohe Präzision der Linsenpositionierung und deren Ausrichtung. Die absolute Differenz der Maxima von Ionen- und Spaltlicht gibt die Genauigkeit an, mit der der optische Überlapp eingestellt wurde. Zur Bewertung der Stabilität des optischen Überlapps ist die Konstanz dieser Differenz entscheidend, da ihre Veränderung auf eine relative Verschiebung der Spaltposition im Vergleich zur Ionenwolke hindeutet. Die Differenz vergrößert sich um $(1,8 \pm 0.2)$ Pixel, bzw. $(46 \pm 5) \mu m$. Diese Verschiebung lässt sich sehr wahrscheinlich durch die Änderung des Füllstandes des Helium-Dewars erklären, da diese zu einer geringfügigen Abwei-

chung der Temperatur der Magnetaufhängung und somit zu einer Veränderung der Fallenposition bezüglich des Aussenflansches der EBIT führt. Auch der gemessene Unterschied der Raumtemperatur von (± 1.5 °C), der die Position der optischen Justagevorrichtung geringfügig beeinflussen kann, trägt zu einer Verschiebung bei. Ein zusätzlicher Beitrag zur gemessenen Differenz entsteht durch die nicht gleichmäßige Ausleuchtung des Spalts, die eventuell bei beiden Messungen leicht unterschiedlich war. Der Vergleich der Veränderung des Überlapps von (46 ± 5) μm mit dem, aus den Simulationsrechnungen erhaltenen, und für eine Präzision von 1 ppm geforderten Überlapp ($|\Delta y| \leq 0.5$ mm, siehe Abschnitt 4.2.1) zeigt jedoch, dass die Einstellbarkeit und Stabilität dessen für die angestrebte Messgenauigkeit vollkommen ausreichend ist.

6.1.2 Stabilität der Quellposition

Zur Produktion von borartigem Argon das genügend sichtbares Licht emittiert, ist wie bereits erwähnt, eine Strahlenergie von ca. 900 eV und ein Strahlstrom von ca. 100 mA notwendig. Da diese Strahlparameter sich von denen zur Produktion und Speicherung von wasserstoffartigem Argon stark unterscheiden (6-15 keV und 300-400 mA), ist zu prüfen, ob sich die Fallenposition in Abhängigkeit der EBIT Betriebsparameter verändert. Ist dies nicht der Fall, kann gewährleistet werden, dass der zuvor eingestellte Überlapp bei der zur Aufnahme der Röntgenspektren optimierten Strahlenergie noch vorhanden ist. Um den geforderten Überlapp bei verschiedenen Energien sicherstellen zu können, darf die Position des Fallenvolumens nicht von der Strahlenergie bzw. dessen Stromstärke abhängen. Hierzu wurde die Position des Röntgenreflexes der vergleichsweise intensiven w Linie von heliumartigem Argon auf der CCD-Kamera, in Abhängigkeit der Strahlenergie im Bereich 3.5 bis 12.5 keV bestimmt (siehe Abbildung 6.3). Zu beachten ist hierbei, dass während der Messung weder die CCD-Kamera noch der Kristall bewegt wurden. Jedoch ist eine leichte Veränderung ihrer Lage nicht völlig auszuschließen. Bereits ein Temperaturanstieg von 1 K führt zu einer Verschiebung des Röntgenreflexes von circa 0.5 Pixel. Während einer Messreihe ist es notwendig die CCD-Kamera alle 4 Stunden automatisch mit Flüssigstickstoff nachzufüllen. Hierbei entstehen durch den Gasdruck Kräfte und Vibrationen an der Kamera, die ebenfalls zu einer gewissen Veränderung ihrer Position führen, deren Ausmaß jedoch nur schwer abzuschätzen ist. Insgesamt ist aus dieser Messung in anbetracht der genannten Fehlerquellen kein eindeutiger Zusammenhang zwischen der Position des Linienschwerpunktes auf der Kamera, und somit der Quellposition und Strahlenergie, zu erkennen. Von früheren systematischen Untersuchungen, z.B. an der EBIT des Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL) [UBLUW99] ist es außerdem bekannt, dass die Lage des

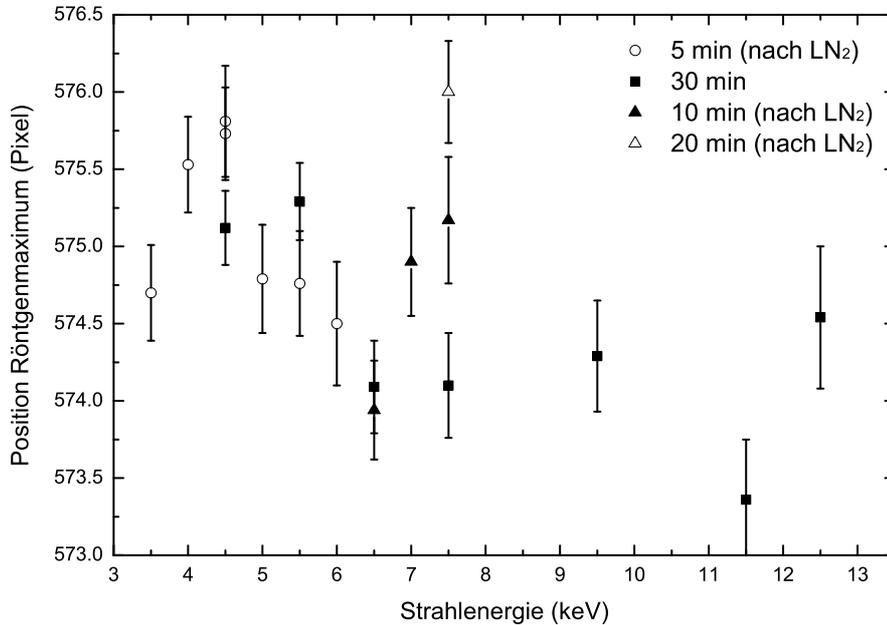


Abbildung 6.3: Position des Maximums der reflektierten Röntgenstrahlung des w Übergangs in heliumartigem Argon in Abhängigkeit der Elektronenstrahlenergie der EBIT.

Elektronenstrahls sehr stabil bezüglich Änderungen der Strahlenergie ist, da seine Lage im wesentlichen durch die zentralen Feldlinien des supraleitenden Magneten bestimmt ist. Jedoch zeigt weder die in dieser Arbeit durchgeführte Messung, noch die vom LLNL, die Güte der Extrapolation zu sehr kleinen Energien, da die minimal eingestellte Strahlenergie 3.5 keV bzw. 15 keV beträgt.

Der für die a/b-Methode geforderte und bei niedriger Strahlenergie (~ 900 eV) eingestellte Überlapp von $\Delta y \leq 0.5$ mm bleibt nach einer Anhebung der Strahlenergie auf (6 - 15) keV sicherlich erhalten, da die Quellposition sich um maximal ± 1.5 Pixel ($\sim \pm 38 \mu\text{m}$) verschiebt.

6.1.3 Messabfolge und Datenanalyse

Zur Aufnahme der a/b Verhältnisse bei verschiedenen Kristallwinkeln wurde eine Messabfolge erstellt, die in etwa das Intervall $a/b = [0, 2 \dots 5]$ überstreicht. Dabei nähern sich die Messpunkte von beiden Seiten ($a/b > 1$, $a/b < 1$) alternierend so nahe wie möglich dem Verhältnis $a/b=1$ (siehe Abbildung 6.5, dort alternieren die Messpunkte um $a/b = 1.35$). Dies gewährleistet, dass sich Erschütterungen und Tem-

6.2. Experimentelle Bestimmung verschiedener Übergangsenergien in hochgeladenen Ionen

peraturschwankungen auf beide Bereiche ($a/b < 1$, $a/b > 1$) gleichmäßig auswirken. Daher ist keine systematische Veränderung der Krümmung der a/b Kurve zu erwarten. Dies könnte sonst bei der Datenauswertung zu einem veränderten Winkel θ_i^* und somit zu einer falschen Winkeldifferenz γ , aus der schließlich die Übergangsenergie ermittelt wird, führen. Der ständige Wechsel zwischen den Detektoren 1 und 2 (siehe Abbildung 3.17) verringert ebenfalls die Auswirkungen von möglichen Langzeitdrifts.

Ein einzelner Schritt der Messabfolge besteht immer aus einer Aufnahme der Lichtreferenzlinien (~ 10 s), des Röntgenspektrums ((15 - 60) min) und abschliessend wieder der Lichtreferenzlinien (~ 10 s). Während dieser Aufnahmen werden im Sekundentakt der aktuelle Kristallwinkel ξ und Detektorwinkel ausgelesen und abgespeichert. Bei der Auswertung der Lichtreferenzaufnahmen werden die auf dem Detektor nachgewiesenen Photonensignale entlang der für Röntgenstrahlung nichtdispersiven Achse aufsummiert (siehe Abschnitt 5.4). Die Aufnahmen der Röntgenspektren werden hingegen erst Pixelweise durch die Wahl geeigneter Diskriminatorschwellen vom Untergrund der Ausleseelektronik sowie von kosmischer Strahlung bereinigt [Bru05]. Da die Signale der einzelnen Pixel erst danach zu einer Projektion aufsummiert werden, entsteht ein besseres Signal-Rausch-Verhältnis. Die so erhaltenen Projektionen der Lichtreferenzlinien sowie die Röntgenspektren werden mit Gaußfunktionen gefittet, und so die Positionen der jeweiligen Maxima bestimmt. Aus den Positionen der Lichtreferenzlinien und der Röntgenlinie werden die a/b Verhältnisse berechnet, die zur Bestimmung der Bragg-Winkel und daraus der Übergangsenergien benötigt werden.

6.2 Experimentelle Bestimmung verschiedener Übergangsenergien in hochgeladenen Ionen

In ersten Testmessungen wurden die Lyman- α_1 Übergänge in wasserstoffartigem Chlor und Argon vermessen. Diese wurden gewählt, da sie sich theoretisch sehr genau berechnen lassen (siehe Kapitel 1). Zudem ist die Lyman- α_1 Linie in Argon der bisher mit höchster relativer Präzision (5 ppm) vermessene Übergang in hochgeladenen Ionen [BDFL85] und eignet sich daher besonders zum Test des Spektrometers sowie der Kombination aus a/b - und Bond-Methode. Gleichzeitig wurden die w Übergänge von heliumartigen Chlor und Argon untersucht, welche aufgrund der Ladungszustandsverteilung in der Falle bei den für die Vermessung der Lyman- α Übergänge nötigen Elektronenstrahlenergien simultan beobachtet werden können. Aufgrund ihrer starken Linienintensität sind bei w vergleichsweise kurze Aufnahmezeiten (~ 15 min) möglich. Dadurch treten Fehler, welche bei langen Messabfolgen durch z.B. Tem-

Tabelle 6.2: Berechnete Übergangsenergien der in dieser Arbeit vermessenen Röntgenlinien.

Element	Übergang	Bezeichnung	Energie (eV)
Cl^{16+}	$2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$	Ly- α_1	2962.352 [JS85]
Cl^{15+}	$1s\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$	w	2789.659 [ASY+05]
Ar^{17+}	$2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$	Ly- α_1	3322.991 [JS85]
Ar^{16+}	$1s\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$	w	3139.582 [ASY+05]
Ar^{16+}	$1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$	z	3104.148 [ASY+05]

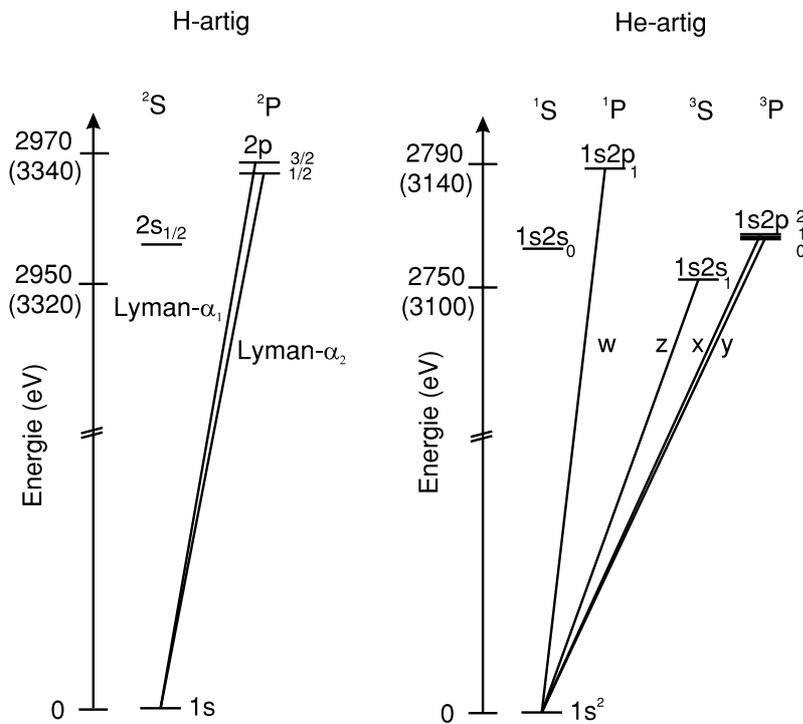


Abbildung 6.4: Grotrian-Diagramm für wasserstoff- und heliumartige Ionen. Die angegebenen Energien beziehen sich auf Chlor (Argon). Die Übergänge im heliumartigen Ion sind entsprechend der Gabriel-Notation [Gab72] gekennzeichnet.

peraturschwankungen verursacht werden, nur vermindert auf. Der z Übergang in heliumartigem Argon wurde ebenfalls, aufgrund hinreichender Intensität, als Testlinie verwendet. In Tabelle 6.2 sind die theoretisch berechneten Übergangsenergien angegeben. Abbildung 6.4 zeigt die Übergänge in einem Grotrian-Diagramm.

6.2. Experimentelle Bestimmung verschiedener Übergangsenergien in hochgeladenen Ionen

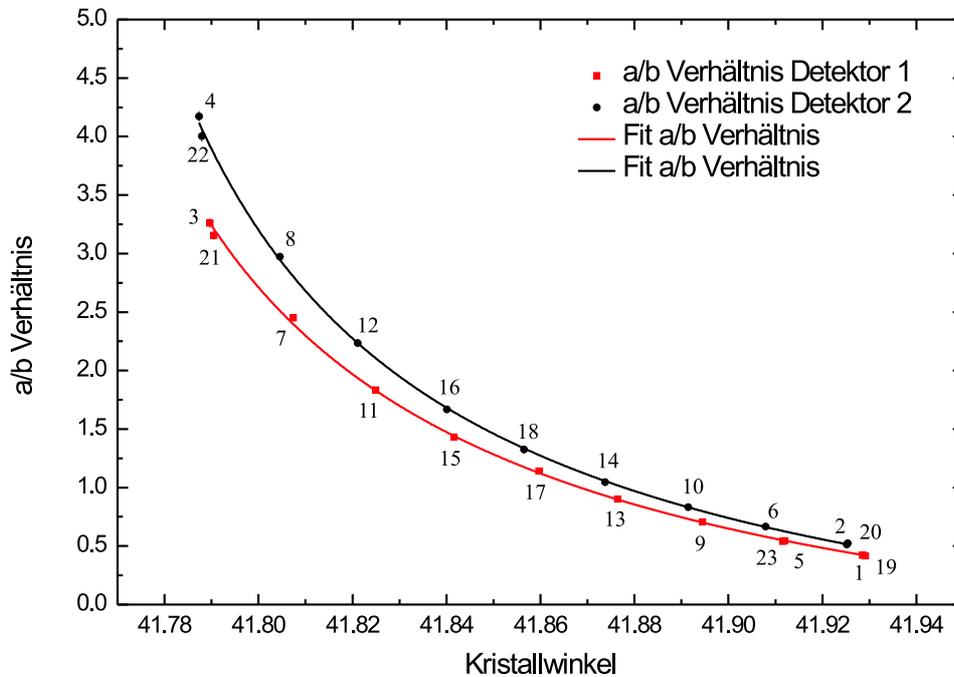


Abbildung 6.5: a/b Verhältnisse der Lyman- α_1 Messung von wasserstoffartigem Chlor

6.2.1 Energie der Lyman- α_1 und w Übergänge in Chlor

In Abbildung 6.5 sind die berechneten a/b Verhältnisse beider Detektoren aus der Lyman- α_1 Messung von wasserstoffartigem Chlor in Abhängigkeit vom Kristallwinkel ξ , zusammen mit den Fits der jeweiligen a/b Funktion (4.2), zu sehen. Die Fehler der a/b Verhältnisse sowie der Fehler des Kristallwinkels sind kleiner als die Punktgröße und daher im Graphen nicht erkennbar. Die Zahlen an den einzelnen Messpunkten geben die zeitliche Reihenfolge, in der sie aufgenommen wurden, an. In dieser Messung alternieren die Messpunkte um ein a/b Verhältnis von etwa 1.35. Die Auswertung dieser Daten ergibt den in Tabelle 6.3 angegebenen Bragg-Winkel θ für die Lyman- α_1 und w Linie. Dabei wurde jeweils einmal die in Kapitel 4 genau beschriebene, energieunabhängige Korrektur der Linienkrümmung von 36 ppm vorgenommen oder aber diese nicht berücksichtigt.

Bei der Berechnung der entsprechenden Wellenlänge λ mit Hilfe des modifizierten Bragg-Gesetzes (siehe Gleichung (3.8)) ist der Brechungsindex des Kristalls zu beachten (siehe Tabelle 3.1). Die Gitterkonstante $2d_{111} = 6.27120273(18) \text{ \AA}$ des Silizium-Kristalls bei 22.5 °C [MT00] muss auf die Durchschnittstemperatur ((21

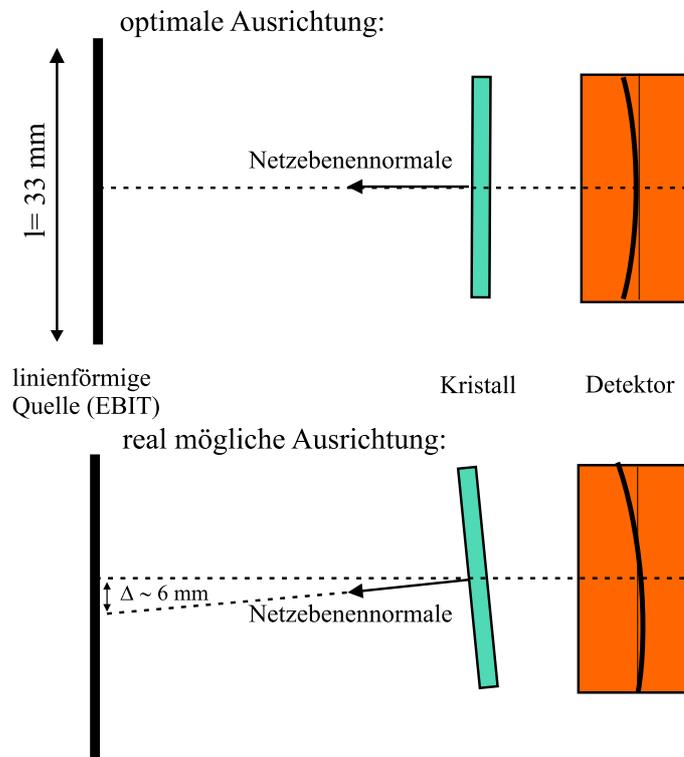


Abbildung 6.6: Oben: Zur Berechnung der Linienkrümmungskorrektur angenommene ideale Ausrichtung von Quelle, Kristall und Detektor. Unten: Mögliche Ausrichtung der Komponenten. l : Länge der Driftröhre.

± 1) °C) dieser Messreihe korrigiert werden. Hierzu wird der lineare Ausdehnungskoeffizient $\alpha = (2.56 \pm 0.03) \cdot 10^{-6} \text{K}^{-1}$ für Silizium bei Raumtemperatur [MT00] verwendet. Die Umrechnung der ermittelten Wellenlänge λ in die entsprechende Übergangsenergie erfolgt mit der Konstante $hc = 1.23984191 \cdot 10^{-6} \text{ eV m}$ [MT00]. Als Ergebnis der Absolutmessungen wird in Tabelle 6.3 der Mittelwert aus dem Resultat der direkten Messung und dem anschließend linienkrümmungskorrigierten Wert angegeben. Der Gesamtfehler setzt sich zusammen aus dem statistischen Fehler der jeweiligen Messung und der Hälfte des Beitrags der Linienkrümmungskorrektur. Diese Vorgehensweise begründet sich darin, dass die Linienkrümmungskorrektur unter idealen, im Experiment nicht zwangsläufig vorhandenen, Voraussetzungen bestimmt wurde. Stimmen diese Annahmen nicht mit den Gegebenheiten des experimentellen Aufbaus überein, resultiert daraus immer eine zu hoch bestimmte Übergangsenergie. Die optimale Geometrie ist zusammen mit einer real möglichen Ausrichtung von Quelle, Kristall und Detektor, in Abbildung 6.6 zu sehen. Unter bestmöglichen Bedingungen liegt die Verbindungsgerade, welche von der Quellmitte zur Mitte der CCD-Kamera verläuft, innerhalb der Streuebene, deren Normalenvektor wiederum idealerweise durch die Kristallrotationsachse gegeben ist. Eine gut mit den mechansi-

6.2. Experimentelle Bestimmung verschiedener Übergangsenergien in hochgeladenen Ionen

schen Toleranzen verträgliche, beispielhaft angenommene Winkelunsicherheit zwischen der Streuebene und der Verbindungsgeraden von nur $\pm 0.3^\circ$ führt aufgrund der Projektion der Gitterkonstante ($d' = d/\cos(0.3^\circ)$) bereits zu einer Abnahme der Übergangsenergie um 14 ppm. Eine solche Fehlausrichtung ist auf jeden Fall realistisch, denn die angenommene Winkelunsicherheit entspricht bei einem Abstand Kristall-Driftröhren von etwa 1.3 m einer lateralen (d.h. in Abbildung 6.6 einer vertikalen) Fehlpositionierung der Driftröhrenmitte zur nominellen Hauptachse von etwa 6 mm. Dies liegt durchaus innerhalb des mechanischen Spiels der Spektrometernaufstellung bezüglich der Driftröhren der EBIT. Wie man der Abbildung 6.6 auch entnimmt, führt ein geringfügig schräg stehender Kristall zu einer geringeren Linienkrümmungskorrektur, da die Reflexe auf dem Detektor, gegenüber dem Idealfall, einen anderen Verlauf einnehmen. Dies führt zu einer Verringerung der gemessenen Übergangsenergie. Die Größe dieses Effekts kann bisher allenfalls abgeschätzt werden. Mit Sicherheit darf jedoch angenommen werden, dass aufgrund des mechanischen Aufbaus die Summe der beiden Korrekturen (Projektion der Gitterkonstanten und geringere Linienkrümmungskorrektur) das eigentliche Maß der Linienkrümmungskorrektur, dass unter ideal angenommener Geometrie bestimmt wurde, nicht überschreitet. Dies rechtfertigt die Verwendung des genannten Mittelwertes mitsamt Fehlerangaben. Die Bedeutung der Fehlausrichtung für die Absolutmessungen wurde erst am Ende dieser Arbeit, nach Unterdrückung aller anderen systematischen Fehlerquellen erkannt. Deshalb ist ihre Größe bis jetzt nicht genau bekannt und konnte somit in den bisherigen Messungen wie bereits erklärt nur als Obergrenze berücksichtigt werden. Zur Zeit läuft ein Experiment zur Bestimmung dieser Ausrichtung mittels eines Lasers. Hierzu wird dieser senkrecht zur Kristalloberfläche justiert und anschließend die Lage der Driftröhren relativ zur Kristallnormalen bestimmt.

Mit der zuvor beschriebenen Vorgehensweise wurde auch die Energie der w Linie von heliumartigem Chlor bestimmt. Die Durchschnittstemperatur bei dieser zweiten Messung betrug $(22 \pm 1)^\circ\text{C}$. Die Ergebnisse beider Messungen sind in Tabelle 6.3 aufgelistet. Die angegebenen Winkel, zusammen mit deren Fehlern, erhält man aus dem a/b Fit. Die Fehlerangaben der Übergangsenergien der direkten Messung sowie die der linienkrümmungskorrigierten Werte sind die aus der Messung folgenden jeweiligen statistischen Abweichungen (13 meV bzw. 16 meV) in denen implizit eventuelle Fehler durch schwankende Gitterkonstanten aufgrund von Variationen in der Raumtemperatur (± 1 K) von 2.5 eV enthalten sind.

6.2.2 Energie der Lyman- α_1 , w und z Übergänge in Argon

Wie im letzten Abschnitt für die Übergänge Lyman- α_1 und w in wasserstoffartigem bzw. heliumartigem Chlor beschrieben, wurden Messungen der Lyman- α_1 , w und z

Tabelle 6.3: Ergebnisse der Chlormessung ohne und mit systematischer Korrektur $\bar{\alpha}'$ der Linienkrümmung (siehe Abschnitt 4.3.2), sowie der daraus resultierenden Mittelwerte.

	Bragg-Winkel θ °	Lyman- α_1 (eV)	w (eV)
Theorie	-	2962.352 [JS85]	2789.659 [ASY+05]
Korrektur	Messungen November 2005		
ohne $\bar{\alpha}'$	41.87311(5)	2962.305(13)	-
mit $\bar{\alpha}'$	41.87125(5)	2962.412(13)	-
Mittelwert	-	2962.359(55)	-
ohne $\bar{\alpha}'$	45.13704(5)	-	2789.640(16)
mit $\bar{\alpha}'$	45.13704(5)	-	2789.741(16)
Mittelwert	-	-	2789.691(53)

Linien in Argon vorgenommen und ausgewertet. Die Ergebnisse sind in Tabelle 6.4 angegeben. Dabei sind die Testmessungen vom November 2005 mit '1' und die erst kürzlich im April 2006 durchgeführten Wiederholungsmessungen mit '2' bezeichnet.

6.2.3 Diskussion der Ergebnisse der Absolutmessungen

Ein direkter Vergleich der erhaltenen Übergangsenergien für Chlor und Argon mit weiteren Absolutmessungen ist nicht möglich, da weltweit nur zwei solche Messungen existieren, nämlich die der Lyman- $\alpha_{1,2}$ Linie in Mg^{11+} und Si^{13+} [HFK+98], [TKB+02]. Ausschließlich diese verwenden, wie die hier vorgestellten Messungen, keine Referenzlinie, koppeln damit die erhaltenen Wellenlängen direkt an die SI-Einheit Meter und sind deshalb Absolutmessungen im eigentlichen Sinne. Notwendig sind solche Absolutmessungen höchster Präzision aufgrund der experimentellen Ungenauigkeiten die unter Verwendung des derzeitigen, satellitenbehafteten Röntgenstandards entstehen (siehe Kapitel 3). Zudem stellen sie mit Erreichen einer ausreichenden Präzision (≤ 1 ppm) die derzeit einzige Möglichkeit dar, einen Röntgenstandard zu definieren, der auf theoretisch hoch genau berechenbaren Übergangsenergien basiert. Abbildung 6.7 zeigt die Resultate der Lyman- α_1 Linie von Chlor und Argon (aus Tabelle 6.3 bzw. 6.4), zusammen mit den zwei weiteren vorhandenen Absolutmessungen. Um die Ergebnisse für die verschiedenen Elemente in einem Graphen darstellen zu können, ist dort die relative Abweichung der Resultate von den theoretischen Vorhersagen [JS85] in ppm aufgetragen. Aus der Abbildung geht klar hervor, dass die hier erzielte Genauigkeit in der absoluten Wellenlängenbestimmung in ihrem relativen Fehler bereits die beiden bisher vorliegenden Messwerte unter-

6.2. Experimentelle Bestimmung verschiedener Übergangsenergien in hochgeladenen Ionen

Tabelle 6.4: Ergebnisse der Argonmessungen ohne und mit systematischer Korrektur $\bar{\alpha}'$ der Linienkrümmung (siehe Abschnitt 4.3.2), sowie der daraus resultierenden Mittelwerte.

	Bragg-Winkel θ	Lyman- α_1 (eV)	w (eV)	z (eV)
Theorie	-	3322.991 [JS85]	3139.582 [ASY+05]	3104.148 [ASY+05]
MessNr./Korr	Messungen			
1 / ohne $\bar{\alpha}'$	36.5156(2)	3322.947(27)	-	-
1 / mit $\bar{\alpha}'$	36.5140(2)	3323.068(27)	-	-
Mittelwert	-	3323.008(66)	-	-
2 / ohne $\bar{\alpha}'$	36.5152(6)	3322.975(5)	-	-
2 / mit $\bar{\alpha}'$	36.5137(6)	3323.095(5)	-	-
Mittelwert	-	3323.035(60)	-	-
1 / ohne $\bar{\alpha}'$	39.03548(1)	-	3139.544(13)	-
1 / mit $\bar{\alpha}'$	39.03380(1)	-	3139.657(13)	-
Mittelwert	-	-	3139.601(58)	-
2 / ohne $\bar{\alpha}'$	39.035116(4)	-	3139.568(5)	-
2 / mit $\bar{\alpha}'$	39.03304(4)	-	3139.682(5)	-
Mittelwert	-	-	3139.625(57)	-
1 / ohne $\bar{\alpha}'$	39.5674(3)	-	-	3104.137(16)
1 / mit $\bar{\alpha}'$	36.5140(3)	-	-	3104.249(16)
Mittelwert	-	-	-	3104.193(58)

bietet.// Die erhaltenen Messwerte ohne Linienkrümmungskorrektur für Argon vom November 2005 und April 2006 zeigen innerhalb ihrer Fehlergrenzen eine hervorragende Übereinstimmung. In Anbetracht der Tatsache, dass das Spektrometer in der Zwischenzeit für Umbaumaßnahmen entfernt und anschließend wieder montiert wurde, demonstriert dies eine ausgezeichnete Reproduzierbarkeit des Messvorgangs, sowie die Robustheit des gesamten experimentellen Aufbaus. Die im April durchgeführte Messung mit einer Dauer von nur 2 Tagen und dem erzielten, statistischen Fehler von 1.5 ppm zeigt das prinzipielle Potential der Apparatur. Noch kürzere Messzeiten (~ 24 Stunden) bei gleichbleibender Präzision ergeben sich bei intensiveren Linien, wie z.B. der ebenfalls vermessenen w Linie in heliumartigem Argon. Beim Fehler des Mittelwertes, der ja aus der Unsicherheit der Linienkrümmungskorrektur bestimmt wurde, ist in naher Zukunft eine deutliche Verringerung zu erwarten, denn mit den zur Zeit andauernden, bereits genannten Messungen der realen Ausrichtung von Quelle, Kristall und Detektor kann diese Korrektur ausreichend genau bestimmt werden. Hierzu genügt bei dem vorhanden Abstand Quelle-Kristall (1.3 m) bereits ei-

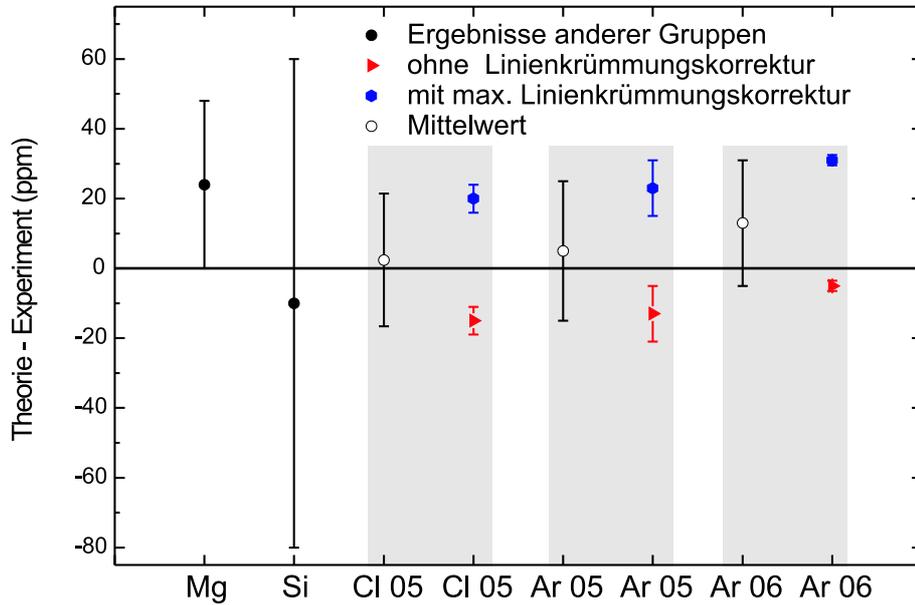


Abbildung 6.7: Relative Abweichungen der Absolutmessungen der Lyman- α_1 Übergänge in Cl^{16+} und Ar^{17+} von den Vorhersagen der Theorie [JS85], im Vergleich zu den einzigen weiteren vorhandenen Absolutmessungen, nämlich der Lyman α_1 Linie in Mg^{11+} [HFK⁺98] und Si^{13+} [TKB⁺02].

ne Genauigkeit von ± 1 mm, welche keine experimentelle Herausforderung darstellt. Aufgrund der damit noch verbundenen, maximal möglichen Projektion der Gitterkonstanten ergibt sich ein größtmöglicher systematischer Fehler von 0.3 ppm. Dieser zusammen mit den letztlich verbleibenden Unsicherheiten der Linienkrümmungskorrektur, welche dann eine ähnliche Größe aufweisen, erlaubt einen Gesamtfehler, verursacht durch Fehlansrichtung, von etwa 1 ppm.

Die Summenspektren zeigen bisher keinen Hinweis auf Satelliten, die einen systematischen Fehler verursachen würden und somit die erreichbare Präzision beschränken (siehe Abschnitt 2.2 und 3.3). Ein Spektrum der Lyman- $\alpha_{1,2}$ Übergänge von Ar^{17+} ist zusammen mit theoretisch berechneten Positionen (Energien) von Satelliten [Vai78] in Abbildung 6.8 dargestellt. Lediglich der nach Tabelle 6.5 als Satellit “6” bezeichnete Übergang hat aufgrund seiner Energie möglicherweise einen Einfluss auf die durch einen Datenfit bestimmte Position der Lyman- α_1 Linie. Die Intensität dieses Satelliten kann mit Hilfe von Satellit “2” abgeschätzt werden, da beide den gleichen angeregten Zustand besitzen. Jedoch weist Satellit “2”, bei dem es sich um einen elektrischen Dipolübergang handelt, eine um den Faktor ~ 100 höhere Übergangswahrscheinlichkeit auf gegenüber dem magnetischen Dipolübergang (Satellit “6”) auf [Vai78]. Dessen Amplitude wurde durch einen weiteren Gaußfit mit annähernd entsprechender Energie bestimmt. Im Vergleich zu der Amplitude der Lyman- α_1 Linie beträgt dessen Intensität weniger als 0.4 % und daher die des Satelliten “6” <

6.2. Experimentelle Bestimmung verschiedener Übergangsenergien in hochgeladenen Ionen

Tabelle 6.5: Notation der Übergänge (Satelliten) in Abbildung 6.8.

Satellit	Übergang
1	$2p^2 \ ^1D_2 \rightarrow 1s2p \ ^3P_2$
2	$2s2p \ ^1P_1 \rightarrow 1s2s \ ^1S_0$
3	$2p^2 \ ^1D_2 \rightarrow 1s2p \ ^3P_1$
4	$2p^2 \ ^1S_0 \rightarrow 1s2p \ ^1P_1$
5	$2p \ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s \ ^2S_{1/2}$
6	$2s2p \ ^1P_1 \rightarrow 1s2s \ ^3S_1$
7	$2p \ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s \ ^2S_{1/2}$
8	$2p^2 \ ^1S_0 \rightarrow 1s2p \ ^3P_1$

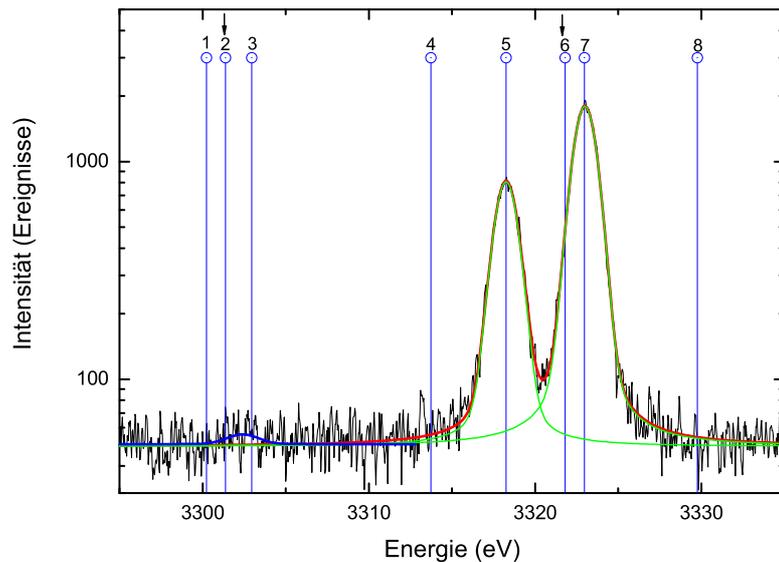


Abbildung 6.8: Summenspektrum der Lyman- $\alpha_{1,2}$ Übergänge von Ar^{17+} . Die blauen vertikalen Linien geben die Lage möglicher Satelliten an [Vai78]. Die blaue Linie ist ein Gaußfit möglichst nahe an Satellit “2”.

$4 \cdot 10^{-5}$. Für die in dieser Arbeit durchgeführten Absolutmessungen besteht somit keine Beeinträchtigung der derzeitigen Genauigkeit durch Satelliten. Jedoch ist in Zukunft eine gesteigerte Statistik nötig, um eventuell vorhandene Satelliten, bzw. deren Einfluss auf das Messergebnis im sub ppm Bereich vollständig ausschließen zu können.

In Zukunft ist für Absolutmessungen mit dem vorhandenen Spektrometer aufgrund der soeben diskutierten Fehlerbetrachtungen und unter der Annahme, dass keine weitere, systematische und signifikante Fehlerquelle vorhanden ist, durchaus eine Präzision von etwa 1 ppm zu erwarten. Die für Lyman- α_1 von Chlor und Argon in [JS85] angegebenen Unsicherheiten der theoretischen Rechnungen betragen ~ 0.25 ppm. Stimmen bei einer Messgenauigkeit von 1 ppm Theorie und Experiment überein, was noch verifiziert werden muss, stellen die Messungen keine neue Herausforderung an die Berechnung von wasserstoffartigen Ionen mit mittlerer Kernladungszahl Z . Im Gegensatz hierzu, weichen wie sich im Folgenden noch zeigen wird die theoretischen Vorhersagen für heliumartige Ionen aufgrund der unterschiedlichen verwendeten Ansätze und der schwer zu berechnenden Elektronenkorrelation signifikant voneinander ab. Hier ist ein entscheidender Beitrag durch Absolutmessungen bereits im Bereich von wenigen ppm zu erwarten.

Die hohe Qualität der bereits bisher durchgeführten Absolutmessungen wird ebenfalls im Vergleich der Ergebnisse mit den Werten von Relativmessungen offensichtlich, obwohl diese experimentell meist viel einfacher zu realisieren sind, da eine Vielzahl von systematischen Fehlerquellen nicht in dem Maße zum Vorschein treten. Abbildung 6.9 zeigt einen solchen Vergleich zusammen mit der besten theoretischen Vorhersage für die Lyman- α_1 Linie in wasserstoffartigem Chlor. Zu beachten ist, dass für die Gegenüberstellung der Ergebnisse eine Korrektur der Messwerte von Källne [KKRS84], Richard [RSD⁺84] und Deslattes [DSJ85] durchgeführt werden muss. Diese drei Messungen benutzen die gleichen Referenzlinien, nämlich die K_α Übergänge in Argon zur Absolutkalibration. Die Energiewerte dieser Übergänge ($K_{\alpha 1} = 2957.813(8)$ eV und $K_{\alpha 2} = 2955.684(13)$ eV) wurden durch eine erneute Messung nach unten korrigiert. Die aktuellen Literaturwerte betragen [DK03]: $K_{\alpha 1} = 2957.682(16)$ eV und $K_{\alpha 2} = 2955.566(16)$ eV. Die berechnete Dispersion in den genannten Experimenten kann weiterhin als zutreffend angenommen werden, da die Energiedifferenz zwischen der $K_{\alpha 1}$ und $K_{\alpha 2}$ Linie innerhalb der Fehlergrenzen konstant bleibt. Deshalb wurden die Werte der Lyman- α_1 Linie dieser drei Experimente um den Mittelwert der Energieverschiebung (~ 125 meV) von $K_{\alpha 1}$ und $K_{\alpha 2}$ korrigiert.

Dies zeigt nochmals deutlich wie notwendig Absolutmessungen sind, da nur mit ihrer Hilfe eine Übertragung von Unsicherheiten oder gar Messfehlern der ansonsten notwendigen Referenzlinien ausgeschlossen ist. Im Fall der Lyman- α_1 von Cl^{16+} ist das Ergebnis besser als das aller bisherigen Relativmessungen, mit Ausnahme von [Bru05], welches mit der ersten Version des Spektrometers erzielt wurde, und der Relativmessung der vorliegenden Arbeit, die im Folgenden noch vorgestellt wird. Die für den Lyman- α_1 Übergang erhaltene Energie stimmt soweit mit den Messungen anderer Gruppen überein, jedoch sind die derzeitigen Unsicherheiten der

6.2. Experimentelle Bestimmung verschiedener Übergangsenergien in hochgeladenen Ionen

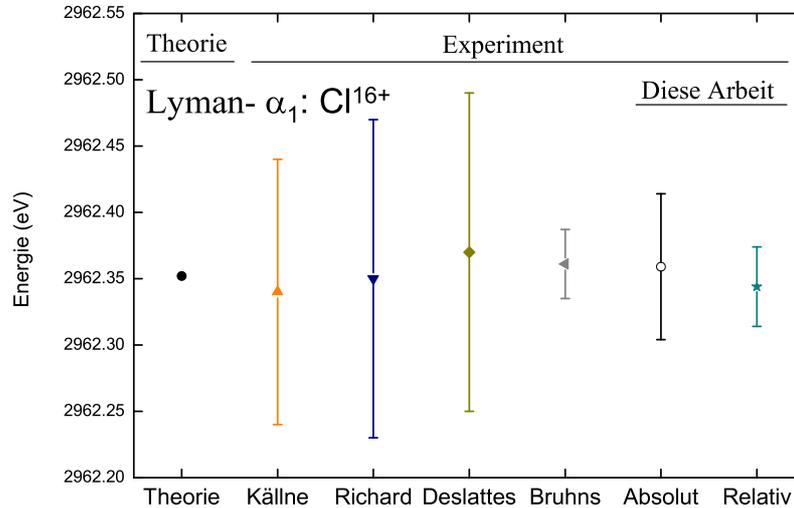


Abbildung 6.9: Vergleich der Ergebnisse der Übergangsenergie der Lyman- α_1 Linie in wasserstoffartigem Chlor dieser Arbeit mit einer theoretischen Vorhersage und anderen experimentellen Messungen: Theorie [JS85], Källne [KKRS84], Richard [RSD⁺84], Deslattes [DSJ85], Bruhns [Bru05]. Die Ergebnisse von Källne, Richard und Deslattes wurden aufgrund des neuen Wertes, der in diesen Arbeiten verwendeten Referenzlinie (Argon K_α), korrigiert.

hier durchgeführten Absolutmessung um einen Faktor 3.5 größer als die der besten Relativmessung [BDFL85]. Trotzdem handelt es sich hierbei um eine unabhängige Bestätigung aller bisher durchgeführten Experimente, sowie auch der theoretischen Vorhersagen von [JS85]. Der sich andeutende Unterschied zwischen den Ergebnissen „Absolut 05“ und „Absolut 06“ (vergleiche Abbildung 6.10) begründet sich wiederum in der zwischenzeitigen Verschiebung des Spektrometers.

Bei der w Linie vom heliumartigen Chlor kann nur ein Vergleich mit der eigenen Relativmessung, deren Erläuterung im Abschnitt 6.2.4 folgt, und theoretischen Vorhersagen, wie in Abbildung 6.11 zu sehen, durchgeführt werden, da dieser Übergang erstmalig vermessen wurde. Die Absolutmessung stimmt dabei innerhalb ihrer Fehlergrenzen mit der Theorie und hervorragend mit der Relativmessung überein. Bei der z Linie in heliumartigem Argon weicht der Wert der in dieser Arbeit durchgeführten Absolutmessung von dem in [Bru05] angegebenen um 1.05σ ab (siehe Abbildung 6.12). Jedoch bestätigt die im gleichen Graphen dargestellte Relativmessung die in dieser Arbeit erhaltene Übergangsenergie der Absolutmessung.

Dieselben Verhältnisse liegen auch bei der w Linie von heliumartigem Argon, dargestellt in Abbildung 6.13, vor, wobei hier die Diskrepanz zwischen der nun vorhandenen Absolutmessung und dem Wert von [Bru05] noch deutlicher zum Vorschein

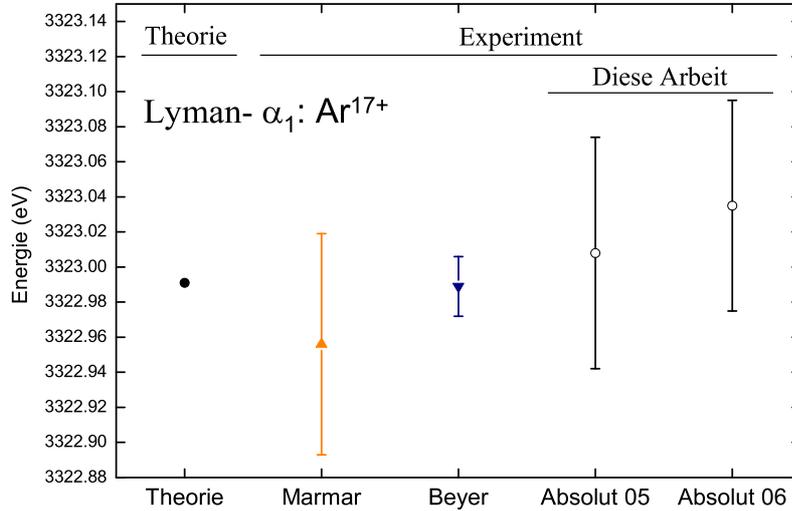


Abbildung 6.10: Vergleich der Ergebnisse der Übergangsenergie der Lyman- α_1 Linie in wasserstoffartigem Argon dieser Arbeit mit einer theoretischen Vorhersage und experimentellen Messungen: Theorie [JS85], Marmar [MRK⁺86], Beyer [BDFL85].

kommt (1.4σ). Eine Erklärung wird bei der Diskussion der Relativmessungen (Abschnitt 6.2.5) gegeben.

6.2.4 Relativmessungen an Cl^{15+} , Cl^{16+} und Ar^{16+}

Die bei den Messungen gewonnenen, absoluten Bragg-Winkel erlauben zwar einerseits die Bestimmung von absoluten Übergangsenergien, jedoch lassen sich andererseits auch Differenzwinkel berechnen und somit eine Relativmessung (wie in [Bru05]) durchführen. Wegen der im Detail in Kapitel 5 diskutierten, vielfältigen Verbesserungen, die in den Aufbau des neuen Spektrometers einfließen, sind dabei zuverlässigere Ergebnisse zu erwarten. Insbesondere hat eine Verdrehung des Spektrometers, abhängig von der jeweiligen Detektorposition, inzwischen keine Auswirkung mehr auf den hier gemessenen Differenzwinkel γ und daher auch nicht auf den Bragg-Winkel θ , sowie auf die Übergangsenergie. Besonders ausgeprägt ist dieser Effekt beim Vergleich der Lyman- α_1 Energien von Cl^{16+} und Ar^{17+} , da aufgrund der großen Energiedifferenz von 361 eV hier die Detektorpositionen am unterschiedlichsten sind. Auch eine Drehung des Spektrometers zwischen den Messungen der beiden Elemente wirkt sich hier nicht auf das Ergebnis aus, wohingegen es in [Bru05] fatale Folgen hätte.

Im Gegensatz zu den in [Bru05] vorgenommenen Relativmessungen, wo direkt die Bragg-Winkeldifferenz zwischen beiden Linien ermittelt wurde, soll hier jedoch nun die Summe aller systematischen Abweichungen in einen Korrekturwinkel übersetzt, und dieser dann entsprechend des Bragg-Winkels auf die weiteren Messungen angewandt werden. Diese Vorgehensweise entspricht einer Absolutmessung mit allen notwendigen Korrekturen, wobei für die Bestimmung des Korrekturwinkels eine Referenzlinie benötigt wird und es sich somit letztlich um eine Relativmessung handelt. Als Referenz dient einerseits die in [BDFL85] gemessene Energie des Lyman- α_1 Übergangs in Argon, die über die $K\alpha_{1,2}$ Übergänge in atomarem Kalium an den derzeitigen Röntgenstandard gebunden ist, und sich deshalb auch die hier aus den Relativmessungen erhaltenen Ergebnisse auf diesen Standard beziehen. Andererseits wurde in einer zweiten Auswertung die theoretisch berechnete Argon Lyman- α_1 Übergangsenergie verwendet, wodurch ein Vergleich zwischen den theoretischen Vorhersagen für wasserstoffartiges Argon und den Rechnungen für heliumartiges Argon möglich wird. Der Korrekturwinkel ist im ersten Fall die Differenz aus dem mit Hilfe von [BDFL85] berechneten und dem absolut gemessenen Bragg-Winkel, im zweiten die Differenz aus dem theoretisch berechneten [JS85] und dem absolut gemessenen Bragg-Winkel, der bei beiden Vorgehensweisen keine weiteren Korrekturen (z.B. Linienkrümmung, Projektion der Gitterkonstanten) enthalten darf. Die so erzielten Werte des Lyman- α_1 Übergangs in H-artigem Chlor, der w Linie in He-artigem Chlor (Referenzlinie: Lyman- α_1 , Chlor [JS85]) sowie der w und der z Linie in He-artigem Argon sind in der Tabelle 6.6 zusammen mit den besten theoretischen Vorhersagen aufgelistet.

6.2.5 Diskussion der Ergebnisse der Relativmessungen

Die im November 2005 durchgeführten Relativmessungen weisen aufgrund der kurzen Messzeit der Referenzlinie (Lyman- α_1 , Argon) und der daraus resultierenden geringen Statistik größere Fehler auf. Deshalb ist ein Vergleich zwischen den Werten, die man mit den zwei unterschiedlichen Referenzen ([BDFL85] und [JS85]) erzielt wenig aussagekräftig. Das Ergebnis des Lyman- α_1 Übergangs in H-artigem Chlor wurde bereits in Abbildung 6.9 dargestellt. Es stimmt mit den Messungen anderer Gruppen schon aufgrund derer großen Fehlerbalken sowie mit den Vorhersagen der Theorie, überein. Hervorzuheben ist jedoch die Konformität mit dem Ergebnis von [Bru05], welches durch die unterschiedlichen verwendeten Spektrometer und Messvorschriften beider Messungen hiermit bestmöglich bestätigt wird.

Zur Festlegung der Energie des w Übergangs in He-artigem Chlor wurde als Referenz der theoretisch berechnete Wert der Lyman- α_1 in H-artigem Chlor verwendet, da hierdurch ein Vergleich der Vorhersagen innerhalb desselben Elementes ermöglicht

Tabelle 6.6: Ergebnisse der Relativmessungen der Lyman- α_1 in Cl^{16+} , der w Linie in Cl^{15+} und Ar^{16+} , sowie der z Linie in Ar^{16+} . Als Referenz dienen die beiden Werte der Lyman- α_1 (Ar^{17+}), 3322.989(17) eV [BDFL85] und 3322.991 eV [JS85], mit Ausnahme der w Linie in Cl^{15+} , welche sich auf die Energie der Lyman- α_1 in Cl^{16+} , 2962.352 eV [JS85] bezieht und mit '*' gekennzeichnet ist.

Theorie	Ly- α_1 : Cl^{16+} (eV)	w : Cl^{15+} (eV)*	w : Ar^{16+} (eV)	z : Ar^{16+} (eV)
[JS85]	2962.352	-	-	-
[ASY ⁺ 05]	-	2789.659	3139.582	3104.148
[Dra88]	-	-	3139.577	3104.142
[PJS94]	-	-	3139.582	3104.148
[CCJS94]	-	-	3139.61(2)	-
Ref.-Linie	Messungen November 2005			
[BDFL85]	2962.342(34)	-	-	-
[JS85]	2962.344(30)	-	-	-
[JS85]*	-	2789.684(21)	-	-
[BDFL85]	-	-	3139.584(34)	-
[JS85]	-	-	3139.586(30)	-
[BDFL85]	-	-	-	3104.172(34)
[JS85]	-	-	-	3104.174(30)
Ref.-Linie	Messungen April 2006			
[BDFL85]	-	-	3139.581(18)	-
[JS85]	-	-	3139.583(6)	-

wird. Hierdurch kann z.B. die Korrelation der Elektronen untersucht werden. Das Ergebnis dieser Relativmessung ist in Abbildung 6.11 zu sehen, wobei sich eine Abweichung von 25 meV zeigt, die geringfügig ausserhalb der 1σ Fehlergrenze liegt.

Die Abbildung 6.12 zeigt einen Vergleich des Messwertes der z Linie in He-artigem Argon, der wiederum relativ zum Lyman- α_1 Übergang des gleichen Elements bestimmt wurde, mit theoretischen Vorhersagen sowie der Messung von [Bru05]. Dieser deutet auf eine höhere Übergangsenergie hin als bisher angenommen wurde. Jedoch lässt sich eine verlässliche Aussage nur mit gesteigerter, leicht zu realisierender Messstatistik und somit kleinerem Fehler treffen.

Bei der Messung im April 2006 wurde für die Referenzlinie (Lyman- α_1 , Argon) sowie für die w Linie eine deutlich höhere Zählstatistik erzielt. Dadurch erlaubt ein Vergleich der Ergebnisse, die aufgrund unterschiedlicher für die Referenzlinie verwendeter Literaturwerte ([BDFL85] und [JS85]) entstehen, physikalisch relevante Aussagen. Beide Resultate sind zusammen mit den Energiewerten anderer Grup-

6.2. Experimentelle Bestimmung verschiedener Übergangsenergien in hochgeladenen Ionen

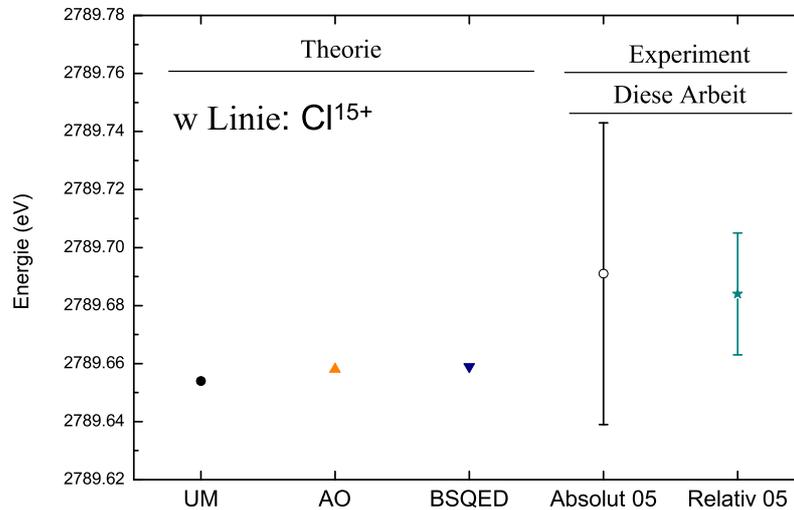


Abbildung 6.11: Vergleich der Ergebnisse der Absolut- und Relativmessung der Übergangsenergie der w Linie in heliumartigem Chlor dieser Arbeit mit verschiedenen theoretischen Vorhersagen: UM [Dra88], AO [PJS94], BSQED [ASY⁺05].

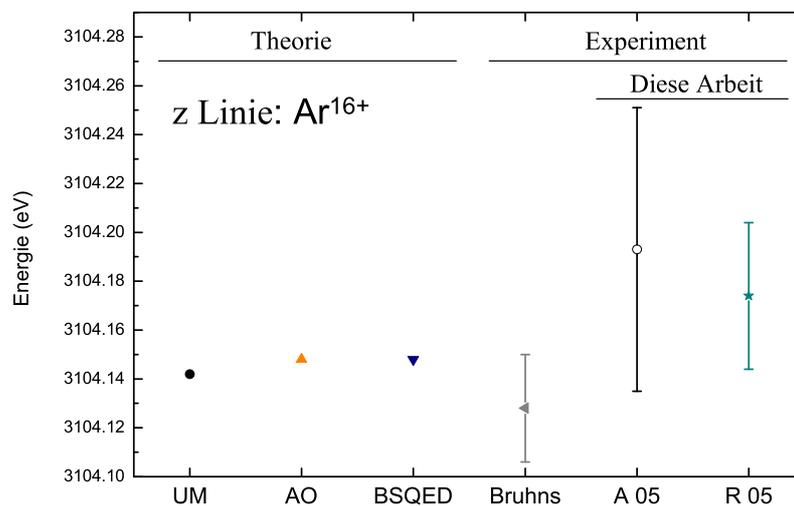


Abbildung 6.12: Vergleich der Ergebnisse der Übergangsenergie der z Linie in heliumartigem Argon dieser Arbeit mit theoretischen Vorhersagen: UM [Dra88], AO [PJS94], BSQED [ASY⁺05], und einer Messung: Bruhns [Bru05].

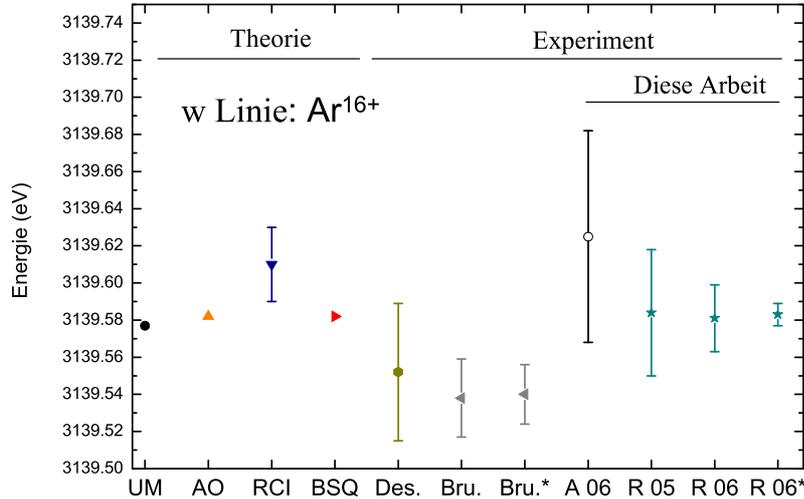


Abbildung 6.13: Vergleich der Ergebnisse der Übergangsenergie der w Linie in heliumartigem Argon dieser Arbeit mit theoretischen Vorhersagen und experimentellen Messungen: UM [Dra88], AO [PJS94], RCI [CCJS94], BSQ [ASY⁺05], Des. [DBF84], Bru. [Bru05] (relativ zu [BDFL85]), Bru.* [Bru05] (relativ zu [JS85]), Diese Arbeit: A 06: Absolut April 06, R 05: (relativ zu [BDFL85]) Nov. 05, R 06: (relativ zu [BDFL85]) April 06, R 06*: (relativ zu [JS85]) April 06.

pen und verschiedenen theoretischen Vorhersagen in Abbildung 6.13 dargestellt. Die Tatsache, dass die Resultate der Relativmessungen R 05 und R 06 hervorragend übereinstimmen (sie weichen um nur 3 meV (1 ppm) voneinander ab) obwohl das Spektrometer zwischenzeitlich verschoben wurde zeigt, wie auch bei den Absolutmessungen, die hohe Reproduzierbarkeit und Robustheit des Spektrometers. Vergleicht man die Ergebnisse der Messungen Bru. [Bru05] und R 06, so weichen diese um $\sim 1.6 \sigma$ voneinander ab. Die Diskrepanz wird noch deutlicher bei der Gegenüberstellung der Resultate Bru.* und R 06*, die beide die theoretisch berechnete Energie des Lyman- α_1 Übergangs (Ar^{17+}) als Referenz verwenden, und beträgt $\sim 2.5 \sigma$. Erklären lässt sich diese Abweichung mit der in [Bru05] vermuteten Verdrehung des Spektrometers in Abhängigkeit der jeweiligen Detektorposition.

Mit der Relativmessung R 06* wurde die höchste je erzielte Genauigkeit (2 ppm) bei der Bestimmung der Energie eines Röntgenübergangs in hochgeladenen Ionen erreicht. Gegenüber [Bru05] stellt sie eine Verbesserung um den Faktor 3 dar. Da wie bereits erwähnt bei R 06* der Wert von [JS85] als Referenz dient, ist ein direkter Vergleich der theoretischen Vorhersagen für wasserstoffartiges Argon mit denen für heliumartiges Argon möglich. Dabei stimmen die theoretischen Werte der AO (all order) Rechnungen [PJS94] und BSQED (bound state QED) Rechnungen [ASY⁺05]

6.2. Experimentelle Bestimmung verschiedener Übergangsenergien in hochgeladenen Ionen

mit der Relativmessung R 06* ausgezeichnet überein. Innerhalb der experimentellen Unsicherheit trifft dies auch noch für die UM (unified method) Rechnungen [Dra88] zu. Hingegen besteht keine Übereinstimmung mit den RCI (relativistic configuration interaction) Vorhersagen [CCJS94].

Insgesamt wurden neben den vermessenen Absolutwerten, welche aufgrund der noch ungenügend genau bekannten Ausrichtung von Quelle, Kristall und Detektor nicht die endgültig angestrebte Genauigkeit erreichen konnten, im Rahmen dieser Arbeit eine ganze Reihe, einer davon erstmals, hochpräziser Relativwerte ermittelt, welche die Präzision der bisher zur Verfügung stehenden Resultate [Bru05] durchweg erreichen, in einem Fall sogar um den Faktor 3 unterschreiten. Die hier mit einem vollständig neuen Spektrometer erhaltenen Ergebnisse, die wie in der vorangegangenen Diskussion dargestellt, genauer sein sollten als die in [Bru05] gemessenen Werte, stellen damit ein wichtige, unabhängige Überprüfung vorausgegangener Experimente dar.

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

Ziel dieser Arbeit war es eine Apparatur zu entwickeln, mit deren Hilfe Absolutwellenlängenmessungen von Röntgenübergängen in hochgeladenen Ionen mittlerer Kernladungszahl Z mit einer Genauigkeit von wenigen ppm möglich werden. Solch präzise Messungen sind zur Zeit nur mit Kristallspektrometern realisierbar. Die Anforderung einen großen Energiebereich zu erfassen, zusammen mit dem niedrigen zur Verfügung stehenden Photonenfluss, stellten dabei eine besondere Herausforderung dar. Erstere konnte durch die Verwendung ebener Kristalle, die eine Erweiterung des Messbereichs durch Rotation erlauben, erfüllt werden. Hierbei ist zu erwähnen, dass nur bei Verwendung von ebenen Kristallen die gewünschte Präzision aufgrund der mit ihnen zu erreichenden kleinen Abbildungsfehler erzielt werden kann. Diese wiederum erfordern jedoch eine Kollimation der Röntgenstrahlung, um ihre Einfallrichtung zu definieren, was zu einer erheblichen der Anzahl der für die Messung nutzbaren Photonen führt. Dieses Dilemma traditioneller Kristallspektrometertechnologie, nämlich die ohnehin niedrige Röntgenintensität durch Kollimationsspalte weiter vermindern zu müssen, um höchste Auflösung zu erreichen, konnte mittels der in dieser Arbeit zusammen mit H. Bruhns [Bru05] entwickelten Methode, die räumliche Referenzlinien sichtbaren Lichts nutzt um die Richtung der einfallenden Röntgenstrahlung zu bestimmen, erstmals grundsätzlich gelöst werden. Entscheidend ist hierbei, dass die Lichtreferenzstrahlen an der Oberfläche des polierten Kristalles unter jedem beliebigen Winkel spekulär reflektiert werden, wohingegen Reflexion für Röntgenstrahlung nur unter der Bragg-Bedingung möglich ist. Die Tatsache, dass in dieser neuen Methode die eingeführten Lichtstrahlen aus dem gleichen geometrischen (virtuellen) Ursprung wie die Röntgenstrahlen stammen, erlaubt die einfache, trigonometrische Berechnung der jeweiligen Einfallrichtung. Benötigt wird hierzu das Abstandsverhältnis der Linienschwerpunkte von Licht- und Röntgenstrahlung auf dem ortsauflösenden Detektor. Durch das Verfahren wird gleichzeitig die Empfind-

lichkeit auf die meisten Justier- und Positionierfehler mit relativ einfachen Mitteln in den ppm Bereich reduziert. Diese Methode wurde mit Erfolg erstmals in einer Relativmessung der Übergänge $1s\ 2p\ ^1P_1 \rightarrow 2s^2\ 1^1S_0$ (w) und $1s\ 2s\ ^3S_1 \rightarrow 1s^2\ 1^1S_0$ (z) in heliumartigen Argon angewendet [Bru05].

Eine neue, entscheidend verbesserte Apparatur, welche zum Ziel hatte Absolutmessungen durchführen zu können ohne auf problematische Röntgenstandards zurückgreifen zu müssen, ist im Rahmen dieser Arbeit entstanden. Auf der Grundlage der Erfahrungen mit dem in meiner Diplomarbeit entwickelten und aufgebauten Kristallspektrometer sowie der Relativmessungen zusammen mit H. Bruhns wurde ein komplett neues Spektrometer entworfen, aufgebaut und getestet, welches die Bond-Methode und das verbesserte a/b Verfahren gleichzeitig zur Anwendung kommen lässt. Hierzu war die Planung und der Bau einer neuen Spektrometerhauptkammer notwendig, die zwei gegenüberliegende Öffnungen für Messungen in Reflexion besitzt. Dabei wurde eine trapezförmige Geometrie gewählt, die einen noch größeren Messbereich im Vergleich zur ersten Spektrometerausführung erlaubt. Der ursprünglich in beiden Arbeiten verwendete optische Aufbau, der die Lichtreferenzlinien mit Hilfe eines fest montierten Spaltes erzeugte, wurde durch eine optische Justagevorrichtung ersetzt, welche nun einen optischen Überlapp der Röntgen- mit der Lichtreferenzlinienquelle gewährleistet und damit systematische Fehler erheblich reduziert. Ein neu aufgebautes UHV-Strahlrohr, welches das Spektrometer mit der EBIT verbindet beinhaltet von außen in den Strahlengang einbringbare Linsen und ein Interferenzfilter. Beides wird zur Aufnahme der Ionenwolke im Sichtbaren benötigt. Der für die a/b Methode erforderliche Überlapp von Lichtreferenz- und Röntgenquelle lässt sich dadurch, mit für ppm Messungen gut ausreichender Genauigkeit einstellen.

Eine in dieser Arbeit entwickelte Vektorsimulation des Spektrometers trug maßgeblich zum Erkennen potentieller Fehlerquellen bei, wie z.B. die Exzentrizität der Kristallrotation und der nicht vermeidbare Verkippungswinkel zwischen den Reflexionsebenen des Kristalls und dessen Oberfläche. Ebenfalls lässt sich mit Hilfe der Simulationen das Ausmaß der jeweiligen Fehleinstellungen auf das Messergebnis ermitteln, oder zumindest abschätzen. Die Resultate der Simulationen flossen in den Bau der optischen Justagevorrichtung und in die Datenanalyse ein. Dadurch ist für zukünftige Absolutwellenlängenmessungen eine Präzision von 1 ppm in greifbare Nähe gerückt.

Zum Test des neuen Röntgenkristallspektrometers, insbesondere der neuartigen Kombination aus Bond-Verfahren mit der Lichtreferenzlinienmethode, wurden erste Absolutmessungen der Lyman- α_1 Übergänge in wasserstoffartigem Chlor und Argon durchgeführt, da diese theoretisch sehr genau berechnet werden können. Diese Rechnungen selbst sollen in Zukunft mit dem absehbaren Erreichen der experimentellen Präzision von angestrebt 1 ppm unter Verwendung dieses Spektrometer überprüft

werden. Bei Übereinstimmung zwischen Experiment und Theorie mögen dann die Lyman- α_1 Übergänge in wasserstoffartigen schweren Ionen einen neuen, konsistenten Satz von Röntgenwellenlängenstandards liefern. In heliumartigen Chlor und Argon wurden die w bzw. bei Argon zusätzlich die z Linie vermessen, da diese bei den EBIT-Parametern, welche für die Lyman- α_1 Übergänge eingestellt werden, mit ausreichender Intensität vorhanden sind. Solche Messungen geben Aufschluss über die Elektronenkorrelation in Zweielektronensystemen.

Die Ergebnisse der Testmessungen weisen trotz, einer bereits erkannten, noch nicht korrigierbaren Fehlerquelle, eine Qualität (18 ppm) auf, die mit den bisher einzigen durchgeführten Absolutmessungen an hochgeladenen Ionen, nämlich der Lyman- α_1 Linien in Mg^{11+} (24 ppm) [HFK⁺98] und Si^{13+} (70 ppm) [TKB⁺02] durchaus vergleichbar ist, bzw. diese bereits übertrifft. Diese zum Vergleich herangezogenen Messungen wurden mit Hilfe eines quasimonolithischen Kristalls, wie er in Abschnitt 3.4.1 beschrieben wird, durchgeführt. Die Resultate zeigen auch, dass es in nächster Zeit zum ersten Mal seit über 20 Jahren möglich sein wird, die bisher mit Abstand präziseste Relativmessung eines Röntgenübergangs in hochgeladenen Ionen (Lyman- α_1 in Argon), durchgeführt von H.F. Beyer *et al.* [BDFL85], absolut zu überprüfen. Durch den großen Bragg-Winkelbereich des Spektrometers, in Verbindung mit unterschiedlichen, an das SI-System angeschlossene Kristallorientierungen werden sich solche Messungen nicht nur auf Chlor und Argon beschränken, sondern auf alle Elemente von Phosphor ($Z = 15$) bis hin zu Eisen ($Z = 26$), eventuell sogar bis Krypton ($Z = 36$), erweiterbar sein.

Die ebenfalls in dieser Arbeit realisierten Relativmessungen liefern bereits wertvolle physikalische Resultate. Im Fall des Lyman- α_1 Übergangs von Cl^{16+} bestätigen sie hervorragend die Ergebnisse von [Bru05] bei einer ähnlichen experimentellen Unsicherheit (11 ppm) sowie auch die der ausgeführten Absolutmessung. Die w Linie in Cl^{15+} wurde erstmalig vermessen und zwar mit einer Präzision von 7.5 ppm. Dabei deuten sich Abweichungen von den vorhandenen, theoretischen Vorhersagen an, die Aktuellste hiervon wurde im Rahmen der „bound state QED“ [ASY⁺05] generiert. Mit Hilfe der gesteigerten Zählstatistik zukünftiger Messungen ist diese Abweichung leicht zu verifizieren. Die gleiche Situation liegt bei dem für die z Linie in Ar^{16+} mit einer Genauigkeit von 10 ppm erhaltenen Wert vor. Allerdings decken sich die Ergebnisse der Relativmessung der w Linie des gleichen Ions ausgezeichnet mit den gleichen theoretischen Ansätzen („bound state QED“ [ASY⁺05] und „all order“ [PJS94]), wie sie zur Berechnung der z Linie verwendet werden. Die Vorhersagen der „unified method“ [Dra88] sind innerhalb von 1σ mit dem Messergebnis konform, wohingegen die „relativistic configuration interaction“ [CCJS94] Prognosen nur aufgrund ihrer großen Fehlerangaben eine Abweichung von etwa 1σ erreichen. Für den genannten w Übergang liegt eine hohe Zählstatistik vor, wodurch die erno-

me Präzision von 2 ppm erzielt wird und es sich somit um genaueste Relativmessung einer von hochgeladenen Ionen stammenden Röntgenwellenlänge handelt. Da die EBIT und Speicherringe die einzigen satellitenfreien Röntgenquellen darstellen, ergeben sich aus der Kombination dieser Quellen mit dem nun vorhandenen Röntgenkristallspektrometer völlig neue Perspektiven für die Präzisionsspektroskopie. Wie schon erwähnt, werden somit in nächster Zeit eine Vielzahl von präzise, absolut vermessenen Röntgenwellenlängen als Referenzen zur Verfügung stehen. Diese müssen nicht zwangsläufig aus wasserstoffartigen Ionen stammen, wodurch eine größere Vielfalt erzielt wird. Mit diesen Referenzlinien ist eine deutliche Verbesserung vieler Messergebnisse, die in Relativmessungen gewonnen wurden und werden, zu erwarten. Speziell unter Verwendung wasserstoffartiger Ionen wird es in Zukunft, bei Erreichen einer Präzision von < 1 ppm möglich sein, einen neuen Röntgenstandard zu etablieren, dessen Wellenlängen im Gegensatz zu den bisherigen mit hoher Genauigkeit theoretisch berechnet werden können. Dieser Standard wird dann unter anderem als Referenz für Mikrokalorimeter dienen, die aufgrund des großen, simultan erfassbaren Spektralbereiches, bei bald möglichen, relativ ausgedehnten Detektorflächen, eine entscheidende Erweiterung der Möglichkeiten in der Röntgenspektroskopie eröffnen sollten.

Anhang A

Anhang

A.1 Farbtafeln

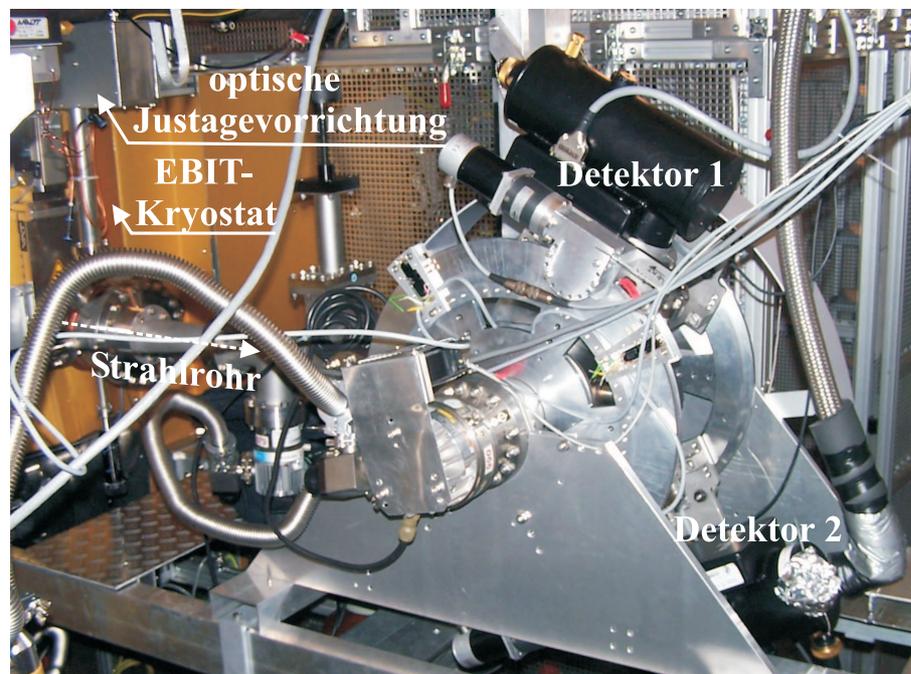


Abbildung A.1: Das neue Bondspektrometer an der Heidelberger EBIT. Die Kristallrotations-einheit mitsamt dem Winkelmessgerät befindet sich auf der abgewandten Seite.

A.2 Orientierung der Kristallebenen

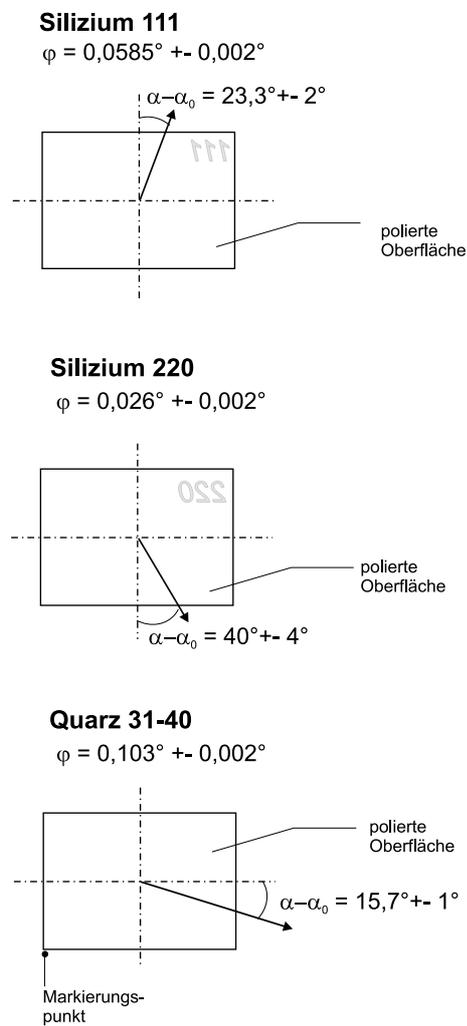


Abbildung A.2: Messergebnisse der Orientierungsbestimmungen, welche in der Gruppe von E. Förster durchgeführt wurden [För].

A.3. Winkelmessgerät RON 905

A.3 Winkelmessgerät RON 905

20877394

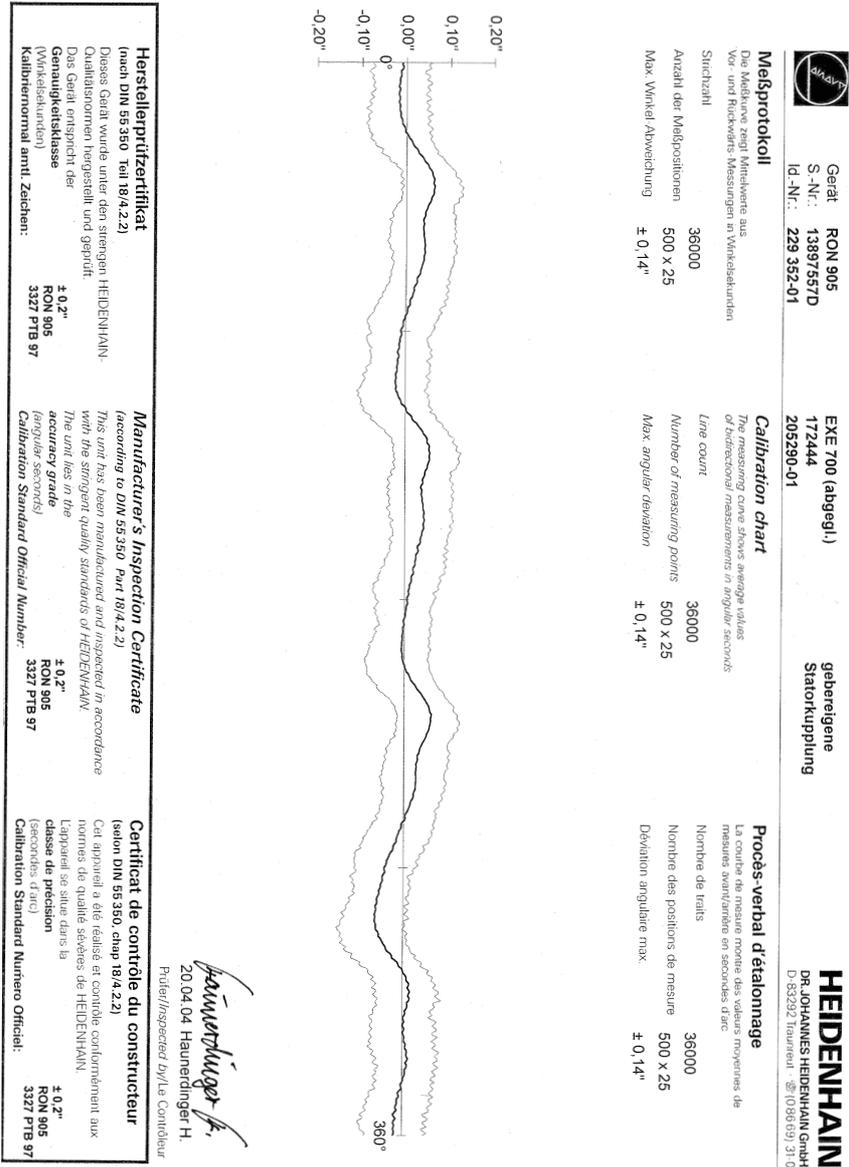


Abbildung A.3: Messprotokoll des Winkelmessgeräts RON 905 der Firma Heidenhain.

Literaturverzeichnis

- [AGIS03] ANAGNOSTOPOULOS, D.F. ; GOTTA, D. ; INDELICATO, P. ; SIMONS, L.M.: Low-Energy X-Ray Standards from Hydrogenlike Pionic Atoms. In: *Phys. Rev. Lett.* 91 (2003), 240801
- [And33] ANDERSON, C.D.: The Positive Electron. In: *Physical Review* 43 (1933), 491–494
- [Ang04] ANGELI, I.: A consistent set of nuclear rms charge radii: properties of the radius surface $R(N, Z)$. In: *At. Data Nucl. Data Tables* 87 (2004), 185–206
- [AS65] ABRAMOWITZ, M. (Hrsg.) ; STEGUN, I.A. (Hrsg.): *Handbook of Mathematical Functions, With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*,. Dover, New York : Courier Dover Publications, 1965
- [ASY⁺05] A.N.ARTEMYEV ; SHABAEV, V.M. ; YEROKHIN, V.A. ; PLUNIEN, G. ; SOFF, G.: QED calculation of the $n = 1$ and $n = 2$ energy levels in He-like ionse. In: *Phys. Rev. A* 71 (2005), 062104
- [BB13] BRAGG, W. H. ; BRAGG, W.L.: The reflection of x-rays by crystals. In: *Proc. Ray. Soc. A* 88 (1913), 428–438
- [BBT⁺05] BRAUN, J. ; BRUHNS, H. ; TRINCZEK, M. ; CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J.R. ; ULLRICH, J.: Novel technique for high-precision Bragg-angle determination in crystal x-ray spectroscopy. In: *Rev. Sci. Instrum.* 76 (2005), 073105
- [BDE⁺81] BECKER, P. ; DORENWENDT, K. ; EBELING, G. ; LAUER, R. ; LUCAS, W. ; PROBST, R. ; RADEMACHEER, H.J. ; REIM, G. ; SEYFRIED, P. ; SIEGERT, H.: Absolute Measurement of the (220) Lattice Plane Spacing in a Silicon Crystal. In: *Phys. Rev. Lett.* 46 (1981), Nr. 23, 1540–1543

- [BDFL85] BEYER, H.F. ; DESLATTES, R.D. ; FOLKMANN, F. ; LAVILLA, R.E.: Determination of the 1s Lamb shift in one-electron argon recoil ions. In: *J.Phys.B: At. Mol. Phys.* 18 (1985), 207–215
- [BIS⁺89] BRIAND, J.P. ; INDELICATO, P. ; SIMIONOVICI, A. ; VINCENTE, V. S. ; LIESEN, D. ; DIETRICH, D.: In: *Europhys. Lett.* 9 (1989), 225
- [BJ03] BRANDSEN, B.H. ; JOACHAIN, C.J.: *Physics of Atoms and Molecules*. second edition. Essex : Pearson Education Limited, 2003
- [BLB⁺94] BEYER, H.F. ; LIESEN, D. ; BOSCH, F. ; FINLAYSON, K.D. ; JUNG, M. ; KLEPPER, O. ; MOSHAMMER, R. ; BECKERT, K. ; EICKHOFF, H. ; FRANZKE, B. ; NOLDEN, F. ; SPÄDTKE, P. ; STECK, M. ; MENZEL, G. ; DESLATTES, R.D.: X rays from radiative electron capture of free cooling electrons for precise Lamb-shift measurements at high Z: Au⁷⁸⁺. In: *Phys. Lett. A* 184 (1994), 435–439
- [BMI⁺83a] BRIAND, J. P. ; M.TAVERNIER ; INDELICATO, P. ; MARRUS, R. ; GOULD, H.: High-Precision Spectroscopic Studies fo Lyman α Lines of Hydrogenlike Iron: A Measurement of the 1s Lamb Shift. In: *Phys. Rev. Let.* 50 (1983), March, Nr. 11, 832–835
- [BMI⁺83b] BRIAND, J.P. ; MOSSÉ, J.P. ; INDELICATO, P. ; CHEVALLIER, P. ; GIRARD-VERNHET, D. ; CHETIOUI, A. ; RAMOS, M.T. ; DESCLAUX, J.P.: Spectroscopy of hydrogenlike and heliumlike argon. In: *Phys. Rev. A* 28 (1983), September, Nr. 3, 1413
- [Boh13] BOHR, N.: On the Constitution of Atoms and Molecules. In: *Philosophical Magazine* 26 (1913), July, Nr. 6, 1–25
- [Boh14] BOHR, N.: The spectra of helium and hydrogen. In: *Nature* 92 (1914), 231–232
- [Bon60] BOND, W.L.: Precision Lattice Constant Determination. In: *Acta Cryst.* 13 (1960), 814–818
- [Bra03] BRAUN, Johannes: “Entwicklung eines Kristallspektrometers für röntgenspektroskopische Untersuchungen an hochgeladenen Ionen”, Universität Heidelberg, Diplomarbeit, 2003
- [Bru05] BRUHNS, H.: *High precision x-ray spectroscopy on highly charged argon ions*. Germany, Universität Heidelberg, Diss., 12 2005

- [BS03] BEYER, H. F. ; SHEVELKO, V. P. ; REVILL, J. (Hrsg.) ; LAURENSEN, S. (Hrsg.): *Introduction To The Physics Of Highly Charged Ion*. Dirac House, Temple Back, Bristol BS1 6BE, UK : Institute of Physics Publishing, 2003
- [BSB⁺] BEYER, H.F. ; STÖHLKER, Th. ; BANAS, D. ; LIESEN, D. ; PROTIT'Č, D. ; BECKERT, K. ; BELLER, P. ; BOJOWALD, J. ; BOSCH, F. ; BRŁUCHLE, W. ; FŁORSTER, E. ; FRANZKE, B. ; GUMBERIDZE, A. ; HAGMANN, S. ; HOSZOWSKA, J. ; INDELICATO, P. ; KLEPPER, O. ; KLUGE, H.-J. ; KINDLER, B. ; KLONIG, St. ; KOZHUHAROV, Chr. ; LOMMEL, B. ; MA, X. ; MANIL, B. ; MOHOS, I. ; ORASIT'Č-MUTHIG, A. ; NOLDEN, F. ; POPP, U. ; SIMIONOVICI, A. ; SIERPOWSKI, D. ; SPILLMANN, U. ; STACHURA, Z. ; STECK, M. ; TACHENOV, S. ; TRASSINELLI, M. ; TRAUTMANN, N. ; WARCZAK, A. ; WEHRHAN, O.: Towards the 1s Lamb Shift via Chrystal Spectrometry. In: *scientific report 2003* <http://mac02.gsi.de/FOCAL/Focal2.html>
- [BU88] BÜHLER, M. ; UMLAUF, E.: In: *Europhys. Lett.* 5 (1988), 297
- [Can] CANIZARES, C. R. *HETG*.
http://space.mit.edu/HETG/instrument_description.html
- [CCJS94] CHENG, K.T. ; CHEN, M. H. ; JOHNSON, W.R. ; SAPIRSTEIN, J.: Relativistic configuration-interaction calculations for the ground state and $n = 2$ singlet states in heliumlike ions. In: *Phys. Rev. A* 50 (1994), Nr. 1, 247
- [DBF84] DESLATTES, R.D. ; BEYER, H.F. ; FOLKMANN, F.: Precision x-ray wavelength measurements in helium-like argon recoil ions. In: *J.Phys.B: At. Mol. Phys.* 17 (1984), L689–L694
- [Dem98] DEMTRÖDER, W.: *Experimentalphysik 4 (Kern-, Teilchen- und Astrophysik)*. Berlin : Springer-Verlag, 1998
- [Dir30] DIRAC, P.A.M.: A Theory of Electrons and Protons. In: *Proc. Roy. Soc.* A126 (1930), 360
- [DK03] DESLATTES, R.D. ; KESSLER, E.G.: X-ray transition energies: new approach to a comprehensive evaluation. In: *Rev. Mod. Phys.* 75 (2003), 35–99

- [Dra88] DRAKE, G.W.F.: Theoretical energies for the $n=1$ and 2 states of the helium isoelectronic sequence up to $Z=100$. In: *Can. J. Phys.* 66 (1988), 586
- [DSJ85] DESLATTES, R.D. ; SCHUCH, R. ; JUSTINIANO, E.: Application of decelerated bare nuclei to precision spectroscopy of one-electron ions. In: *Phys. Rev. A* 32 (1985), 1911–1913
- [E.F] E.FÖRSTER. *private Kommunikation mit E.Förster*
- [EGS01] EIDES, M.I. ; GROTCHE, H. ; SHELYUTO, V.A.: Theory of light hydrogenlike atoms. In: *Physics Reports* 342 (2001), 63–261
- [Ens01] ENSS, C.: Calorimetric Detection of X-Rays. In: *Journal of Low Temperature Physics* 124 (2001), Nos. 1/2
- [Ewa82] EWALD, P.P. ; BONNELLE, C. (Hrsg.) ; MANDE, C. (Hrsg.): *Advances in X-Ray Spectroscopy*. Pergamon, 1982
- [Fis04] FISCHER, M.C.: *Höchstauflösende Laserspektroskopie an atomarem Wasserstoff*, LMU München, Diss., May 2004
- [FKKM01] FLOWERS, J.L. ; KLEIN, H. A. ; KNIGHT, D.J.E. ; MARGOLIS, H.S. *Hydrogenic Systems for Calculable Frequency Standards: Status and Options*. NPL Report CBTLM 11. March 2001
- [FKZ⁺04] FISCHER, M. ; KOLACHEVSKY, N. ; ZIMMERMANN, M. ; HOLZWARTH, R. ; UDEM, T. ; HÄNSCH, T.W. ; ABGRALL, M. ; GRÜNERT, J. ; MAKSIMOVIC, I. ; BIZE, S. ; MARION, H. ; PEREIRA DOS SANTOS, F. ; LEMONDE, P. ; SANTARELLI, G. ; LAURENT, P. ; CLAIRON, A. ; SALOMON, C. ; HAAS, M. ; JENTSCHURA, U.D. ; KEITEL, C.H.: New Limits on the Drift of Fundamental Constants from Laboratory Measurements. In: *Phys. Rev. Lett.* 92 (2004), 230802
- [FLD⁺04] FLEISCHMANN, A. ; LINCK, M. ; DANILYAROV, T. ; ROTZINGER, H. ; ENSS, C. ; SEIDEL, G.M.: Metallic magnetic calorimeters: detectors for high resolution x-ray spectroscopy. In: *Nucl. Instrum. Meth. A* 520 (2004), 27–33
- [För] FÖRSTER, E. *x-ray optics group of the University of Jena*. <http://www.physik.uni-jena.de/xro/vorlesung/xro.html>
- [Gab72] GABRIEL, A.H.: Dielectronic satellite spectra for highly-charged helium-like ion lines. In: *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 160 (1972), 99

- [GLN⁺01] GOIDENKO, I. ; LABZOWSKY, L. ; NEFIODOV, A. ; PLUNIEN, G. ; SOFF, G. ; ZSCHOCKE, S.: Evaluation of the Two-Photon Self-Energy Correction for Hydrogenlike Ions. In: *Hyperfine Interactions* 132 (2001), 397–400
- [GSB⁺05] GUMBERIDZE, A. ; STÖHLKER, T. ; BANAS, D. ; BECKERT, K. ; BELLER, P. ; BEYER, H.F. ; BOSCH, F. ; HAGMANN, S. ; KOZHUHAROV, C. ; LIESEN, D. ; NOLDEN, F. ; MA, X. ; MOKLER, P.H. ; STECK, M. ; SIERPOWSKI, D. ; TASHENOV, S.: Quantum Electrodynamics in Strong Electric Fields: The Ground-State Lamb Shift in Hydrogenlike Uranium. In: *Phys. Rev. Lett.* 94 (2005), 223001
- [GV93] GERTHSEN ; VOGEL: *Physik*. Bd. 17. Springer- Verlag Berlin Heidelberg, 1993
- [Hám33] VON HÁMOS, L.: Röntgenspektroskopie und Abbildung mittels gekrümmter Kristallreflektoren I. Geometrisch-optische Betrachtungen. In: *Ann. Phys.* 17(5) (1933), 717–725
- [Hám34] VON HÁMOS, L.: Röntgenspektroskopie und Abbildung mittels gekrümmter Kristallreflektoren II. Beschreibung eines fokussierenden Spektrographen mit punktgetreuer Spaltabbildung. In: *Ann. Phys.* 19(5) (1934), 253–260
- [Har06] HARMAN, Z. *private Kommunikation*. 2006
- [HFD⁺97] HÖLZER, G. ; FRITSCH, M. ; DEUTSCH, M. ; HÄRTWIG, J. ; FÖRSTER, E.: $K\alpha_{1,2}$ and $K\beta_{1,3}$ emission lines of the 3d transition metals. In: *Physical Review A* 56 (1997), December, Nr. 6, 4554
- [HFK⁺98] HÖLZER, G. ; FÖRSTER, E. ; KLÖPFEL, D. ; BEIERSDORFER, P. ; BROWN, G. V. ; CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J.R. ; WIDMANN, K.: Absolute wavelength measurement of the Lyman- α transitions of hydrogenic Mg^{11+} . In: *Phys. Rev. A* 57 (1998), February, Nr. 2, 945–948
- [IHM⁺00] IRWIN, K.D. ; HILTON, G.C. ; MARTINIS, J.M. ; DEIKER, S. ; BERGREU, N. ; NAM, S.W. ; RUDMAN, D.A. ; WOLLMAN, D.A.: In: *Nucl. Instrum. Methods A* 184 (2000), 444
- [JS85] JOHNSON, W.R. ; SOFF, G.: The Lamb shift in hydrogen-like atoms, $1 < Z < 110$. In: *At. Data Nucl. Data Tables* 33 (1985), Nr. 2, 405–446

- [KHFB97] KLÖPFEL, D. ; HÖLZER, G. ; FÖRSTER, E. ; BEIERSDÖRFER, P.: A quartz quasimonolith for absolute x-ray wavelength measurements. In: *Rev. Sci. Instrum.* 68 (1997), July, 3669–3675
- [KKRS84] KÄLLNE, E. ; KÄLLNE, J. ; RICHARD, P. ; STÖCKLI, M.: Precision measurement of the H-like x-ray spectrum of Cl and the 1s Lamb shift. In: *J. Phys. B.: At. Mol. Phys.* 17 (1984), L115–L120
- [Leo93] LEO, W.R. ; SPRINGER (Hrsg.): *Techniques for Nuclear and Particle Physics Experiments*. 2. New York : Springer, 1993
- [LR47] LAMB, W.E. ; RETHERFORD, R. C.: Fine Structure of the Hydrogen Atom by a Microwave Method. In: *Physical Review* 72 (1947), 241–243
- [Moh92] MOHR, P. J.: Self-energy correction to one-electron energy levels in a strong Coulomb field. In: *Phys. Rev. A* 46 (1992), 4421–4424
- [MPS98] MOHR, P.J. ; PLUNIEN, G. ; SOFF, G.: QED corrections in heavy atoms. In: *Phys. Rep.* 293 (1998), 227–369
- [MRK+86] MARMAR, E.S. ; RICE, J.E. ; KÄLLNE, E. ; KÄLLNE, J. ; LAVILLA, R.E.: Precision measurement of the 1s Lamb shift in hydrogenlike argon. In: *Phys. Rev. A* 33 (1986), January, Nr. 1, 774–777
- [MT00] MOHR, P.J. ; TAYLOR, B.N.: CODATA Recommended Values of the Fundamental Physical Constants: 1998. In: *Reviews of Modern Physics* 72 (2000), Nr. 2, 351–495
- [MTW+03] MIRONOV, V. ; TRINCZEK, M. ; WERDICH, A. ; MARTÍNEZ, A.J. G. ; GUO, P. ; ZHANG, X. ; BRAUN, J. ; LÓPEZ-URRUTIA, J.R. C. ; ULLRICH, J.: Test of a laser ion source at the Heidelberger electron beam ion trap. In: *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B* 205 (2003), 183–186
- [NHR+00] NIERING, M. ; HOLZWARTH, R. ; REICHERT, J. ; POKASOV, P. ; UDEM, T. ; WEITZ, M. ; HÄNSCH, T.W. ; LEMONDE, P. ; SANTARELLI, G. ; ABGRALL, M. ; LAURENT, P. ; SALOMON, C. ; CLAIRON, A.: Measurement of the Hydrogen 1S – 2S Transition Frequency by Phase Coherent Comparison with a Microwave Cesium Fountain Clock. In: *Phys. Rev. Lett.* 84 (2000), 5496–5499
- [NLPS96] NEFIODOV, A. V. ; LABZOWSKY, L. N. ; PLUNIEN, G. ; SOFF, G.: Nuclear polarization effects in spectra of multicharged ions. In: *Phys. Lett. A* 222 (1996), 227–232

- [PJS94] PLANTE, D.R. ; JOHNSON, W.R. ; SAPIRSTEIN, J.: Relativistic all-order many-body calculations of the $n=1$ and $n=2$ states of heliumlike ions. In: *Phys. Rev. A* 49 (1994), May, Nr. 5, 3519–3530
- [PMGS89] PLUNIEN, G. ; MÜLLER, B. ; GREINER, W. ; SOFF, G.: Nuclear polarization contribution to the Lamb shift in heavy atoms. In: *Rhys. Rev. A* 39 (1989), Nr. 10, 5429–5431
- [RSD⁺84] RICHARD, P. ; STÖCKLI, M. ; DESLATTES, R.D. ; COWAN, P. ; LAVILLA, R.E. ; JOHNSON, B. ; JONES, K. ; MERON, M. ; MANN, R. ; SCHATNER, K.: Measurement of the $1s$ Lamb shift in hydrogenlike chlorine. In: *Phys. Rev. A* 29 (1984), 2939–2942
- [Rut11] RUTHERFORD, E.: The scattering of alpha and beta particles by matter and the structure of the atom. In: *Philosophical Magazine* 21 (1911), 669–688
- [Sch26] SCHRÖDINGER, E.: An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules. In: *Physical Review* 28 (1926), Nr. 6, 1049–1070
- [Sha93] SHABAEV, V.M.: Finite nuclear size corrections to the energy levels of the multicharged ions. In: *J. Phys. B* 26 (1993), 1103–1108
- [SMG⁺92] STÖHLKER, Th. ; MOKLER, P.H. ; GEISSEL, H. ; MOSHAMMER, R. ; RYMUZA, P. ; BERNSTEIN, E.M. ; COCKE, C.L. ; KOZHUHAROV, C. ; MÜNZENBERG, G. ; NICKEL, F. ; SCHEIDENBERGER, C. ; STACHURA, Z. ; ULLRICH, J. ; WARCZAK, A.: Ground state transitions in one- and two-electron Bi projectiles. In: *Phys. Lett. A* 168 (1992), 285–290
- [Sor05] SORIA ORTS, R.: *Isotopic effect of B-like and Be-like argon ions*, Universität Frankfurt, Diss., 2005
- [TBI⁺85] TAVERNIER, M. ; BRIAND, J. P. ; INDELICATO, P. ; LIESEN, D. ; RICHARD, P.: Measurement of the ($1s$) Lamb shift of hydrogen-like krypton. In: *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 18 (1985), L327–L330
- [TCM⁺00] TARBUTT, M.R. ; CROSBY, D. ; MYERS, E.G. ; NAKAMURA, N. ; OHTANI, S. ; SILVER, J.D.: X-ray spectroscopy of hydrogen-like ions in an electron beam ion trap, proceedings of the Hydrogen atom II meeting, 2000
- [Tea92] TEAM, JET: FUSION ENERGY PRODUCTION FROM A DEUTERIUM-TRITIUM PLASMA IN THE JET TOKAMAK. In: *NUCLEAR FUSION* Vol.32, No2 (1992), 187–203

-
- [TKB⁺02] TSCHISCHGALE, J. ; KLÖPFEL, D. ; BEIERSDORFER, P. ; BROWN, G.V. ; FÖRSTER, E. ; SCHULTE-SCHREPPING, H. ; UTTER, S.B.: Absolute wavelength measurement of the Lyman- α transition of hydrogen-like silicon. In: *Can. J. Phys.* 80 (2002), 867–874
- [TV01] THOMPSON, A.C. ; VAUGHAN, D. *X-Ray Data Booklet*. LBNL/PUB-490 Rev.2. 2001
- [UBLUW99] UTTER, S.B. ; BEIERSDORFER, P. ; LÒPEZ-URRUTIA, J.R. C. ; WIDMANN, K.: Position and size of the electron beam in the high-energy electron beam ion trap. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 428 (1999), 276–283
- [UC17] UHLER, H.S. ; COOKSEY, C. D.: The K series of the X-Ray spectrum of Gallium. In: *Phys. Rev.* 10 (1917), 645–652
- [Vai78] VAINSHTEIN, L. A.: Wavelengths and transition probabilities of satellites to resonance lines of H- and He-Like Ions. In: *Atomic Data and Nuclear Tables* 21 (1978), Nr. 1
- [XROS] FOR X-RAY OPTICS, Center ; SOURCE, Advanced L.: *Center for X-Ray Optics and Advanced Light Source*. – <http://www-cxro.lbl.gov/>
- [YAB⁺03] YEROKHIN, V.A. ; ARTEMYEV, A. N. ; BEIER, T. ; GOIDENKO, I. A. ; LABZOWSKY, L. N. ; NEFIODOV, A. V. ; PLUNIEN, G. ; SHABAEV, V. M. ; SOFF, G.: Towards tests of QED in Lamb-shift measurements of highly charged ions. In: *X-Ray Spectrom.* 32 (2003), Nr. 2, 83–88
- [ZMM82] ZSCHORNACK, G. ; MÜLLER, G. ; MUSIOL, G.: Geometrical Aberrations in Curved Bragg Crystal Spectrometers. In: *Nucl. Instr. Meth.* 200 (1982), 481–490