

# INAUGURAL–DISSERTATION

zur

Erlangung der Doktorwürde

der

Naturwissenschaftlich–Mathematischen

Gesamtfakultät

der

Ruprecht–Karls–Universität Heidelberg

vorgelegt von

**Dipl.–Phys. Michael Schnell**

aus Konstanz

Tag der mündlichen Prüfung: 12. Februar 2003



**Di- und trielektronische  
Rekombination  
an berylliumähnlichen Ionen**

Gutachter: **Prof. Dr. Andreas Wolf**  
**Prof. Dr. Heinz Jürgen Kluge**



## Zusammenfassung

Am Testspeicherring TSR wurden Rekombinationsexperimente an berylliumähnlichen Ionen mit energiescharfen, freien Elektronen mittels der merged-beam Technik durchgeführt. Neben der dominanten dielektronischen Rekombination (DR) wurde erstmalig der Prozeß der trielektronischen Rekombination (TR) für  $\Delta N = 0$  Übergänge nachgewiesen, bei welcher der strahlungslose Elektroneneinfang unter gleichzeitiger Anregung zweier Targetelektronen erfolgt. Die Stärke des TR-Wirkungsquerschnitts hängt stark ab von der Abwesenheit erlaubter Verlustkanäle, über welche der dreifach angeregte TR-Zwischenzustand in die Kontinua einfach angeregter Targetelektronenkonfigurationen zerfallen kann. Entlang einer TR-Rydbergserie fallen die Resonanzstärken beim Überschreiten der DR-Seriengrenzen um jeweils mehrere Größenordnungen ab. Die experimentellen Spektren zeigen einen bevorzugten Zerfall der Rumpfelektronen innerhalb gleicher Spinmultiplizitäten. Oberhalb der Triplett DR-Seriengrenzen werden daher innerhalb der experimentellen Empfindlichkeit keine Triplett TR-Resonanzen und jenseits der Singulett DR-Seriengrenze auch keine Singulett TR-Resonanzen mehr beobachtet. Mit AUTOSTRUCTURE erstellte Modellspektren ermöglichen im Vergleich mit den experimentellen Daten ein tieferes Verständnis für den TR-Prozeß. Es konnte gezeigt werden daß mit zunehmender Kernladungszahl das Interkombinationsverbot für die Autoionisation aufgrund der intermediären Kopplung nicht mehr strikt gilt. Bei den schweren Ionen lassen sich aufgrund der zunehmenden Aufspaltung der einfach angeregten Triplettzustände zu den Dipolübergängen analoge Auswahlregeln erkennen. Insgesamt wird der TR-Wirkungsquerschnitt jedoch für höhere Drehimpulsquantenzahlen des Valenzelektrons von der Theorie prinzipiell unterschätzt.

## Abstract

At the TSR storage-ring recombination experiments have been carried out on beryllium-like ions with the merged-beam technique. In addition to the dominant dielectronic recombination (DR), the process of trielectronic recombination (TR) has been observed for  $\Delta N = 0$  transitions for the first time. In this case the radiationless electron-capture is accompanied by a simultaneous excitation of two core-electrons. The strength of the TR-cross-section depends strongly on the absence of allowed loss-channels, through which the triply excited intermediate TR-state can decay into the continua of singly excited core-electrons. Along a TR-Rydberg series the resonance-strength drops by several orders of magnitude crossing the DR-series-limits. The experimental spectra show a preferred decay of the core-states to states with identical spin-multiplicity. Thus above the triplet DR-series-limits no triplet TR-resonances and above the singlet DR-series-limits also no singlet TR-resonances can be observed within the experimental sensitivity. Model-spectra calculated with AUTOSTRUCTURE provide a deeper understanding of the process of TR. It could be shown that with increasing nuclear charge the inter-combination selection rule for autoionisation does not strictly hold due to the intermediate coupling. For the heavier ions selection rules can be made out analog to dipole-transition due to the splitting of the singly excited triplet states. The TR-cross-section gets underestimated by theory for higher angular momenta of the valence-electron.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen zur Dielektronischen Rekombination</b>	<b>5</b>
2.1	Dielektronische Rekombination . . . . .	5
2.2	Wirkungsquerschnitt . . . . .	6
2.3	DR-Resonanzlagen . . . . .	7
2.4	Trielektronische Rekombination . . . . .	9
2.4.1	$\Delta N = 1$ Übergänge . . . . .	10
2.4.2	$\Delta N = 0$ Übergänge . . . . .	13
2.5	Berechnung des Wirkungsquerschnitts . . . . .	18
<b>3</b>	<b>Experimenteller Aufbau</b>	<b>21</b>
3.1	Der Heidelberger Schwerionenspeicherring TSR . . . . .	21
3.2	Der Elektronenkühler . . . . .	24
3.3	DR-Meßprinzip . . . . .	26
3.4	Bestimmung der Schwerpunktsenergie . . . . .	28
3.5	Elektronenstrommessung . . . . .	30
3.6	Spannungsmessung . . . . .	30
3.7	Spannungsregelung . . . . .	34
3.8	Ratenkoeffizient . . . . .	42
3.9	Fehlerdiskussion . . . . .	43
3.9.1	Ratenkoeffizient . . . . .	43
3.9.2	Relativenergie . . . . .	44
<b>4</b>	<b>Rekombinationsspektren Be-ähnlicher Ionen</b>	<b>47</b>
4.1	$\text{Cl}^{13+}$ . . . . .	47
4.1.1	Experimentelles Ratenkoeffizientenspektrum . . . . .	47
4.1.2	Theoretische Modellspektren . . . . .	54
4.2	$\text{Cu}^{25+}$ . . . . .	61
4.3	$\text{F}^{5+}$ . . . . .	65
4.3.1	$\Delta N = 0$ Anregungen . . . . .	66

## Inhaltsverzeichnis

---

4.3.2	$\Delta N \geq 1$ Anregungen . . . . .	69
4.4	$\text{Fe}^{22+}$ . . . . .	72
4.4.1	$\Delta N = 0$ Anregungen . . . . .	72
4.4.2	$\Delta N = 1$ Anregungen . . . . .	75
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung und Diskussion</b>	<b>79</b>
<b>A</b>	<b>Numerische Berechnung des Ratenkoeffizienten</b>	<b>83</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>89</b>

# Kapitel 1

## Einleitung

Das Verständnis der Elektron–Ion Rekombinationsprozesse ist eine wichtige Grundlage, um Eigenschaften von Hochtemperatur– und Nuklearfusionsplasmen erklären zu können. Die sich im Gleichgewicht mit konkurrierenden Ionisationsvorgängen ergebenden Einstellungen von Temperatur und Ionisierungsgrad lassen sich in der Theorie nur durch die genaue Kenntnis der jeweiligen Wirkungsquerschnitte modellieren. Auch in Plasmen, welche sich nicht im thermischen Gleichgewicht befinden, wie bei solaren Eruptionen und *Flares*, ist die Berücksichtigung der radiativen Stabilisierungen, welche den Prozeß der dielektronischen Rekombination (DR) begleiten und als DR Satelliten Linien in der Spektroskopie auftreten, für die erfolgreiche Beschreibung von spektroskopischen Beobachtungen unerlässlich. Die dielektronische Rekombination fand erstmals 1943 in der Fachliteratur Erwähnung und zwar bei der quantitativen Beschreibung von Rekombinationsprozessen in der Ionosphäre [1]. Bei mittleren bis hohen Temperaturen und bei moderaten Plasmadichten dominiert die dielektronische Rekombination jene Vorgänge, welche den Ionisierungsgrad durch Elektroneneinfang reduzieren [2]. Erste experimentelle Ergebnisse zur DR aus Elektron–Ion Stoßexperimenten lagen zu Beginn der achtziger Jahre vor und bereiteten einer Vielzahl nachfolgender, aufwendiger Experimente den Weg. In gegenseitiger Befruchtung von Experiment und Theorie folgten genaueren Messungen immer sophisticatedere theoretische Modellierungen.

Seit etwas mehr als einem Jahrzehnt dient der Heidelberger Testspeicherring TSR zusammen mit dem Elektronenkühler als ein hervorragendes Instrument, dielektronische Rekombinationsspektren mittels der *merged beam* Technik in brillianter Energieauflösung aufzunehmen. Bisheriges Hauptaugenmerk in der Untersuchung von DR, welche bei niedrigen Kollisionsenergien mit Intraschalenübergängen  $\Delta N = 0$  verbunden ist, galt den Elementen der isoelektronischen Lithiumsequenz. Beim DR–Prozeß wird dabei ein Einelektronenübergang im Targetion von  $1s^22s$  nach  $1s^22p$  induziert. Als konsequente Fortsetzung in der Untersuchung von Ionen mit einer überschaubaren Anzahl von Elektronen werden seit kurzem DR–Messungen an berylliumähnlichen Elementen am TSR durchgeführt, wobei noch ein zweites Valenzelektron in die  $2s$  Schale hinzukommt. Somit liegt ein System vor, bei dem neben den der DR eigentümlichen

## Kapitel 1. Einleitung

---

Einelektronenübergängen auch Zweielektronenübergänge von  $1s^2 2s^2$  nach  $1s^2 2p^2$  stattfinden können. Wird dies analog zur DR durch strahlungslosen Elektroneneinfang induziert und erfolgt anschließend radiative Stabilisation, so bezeichnet man diesen Prozeß als trielektronische Rekombination (TR), da drei Elektronen gleichzeitig in Wechselwirkung treten.

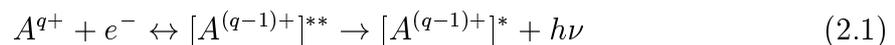
In vorliegender Arbeit werden die gemessenen Rekombinationsspektren von vier verschiedenen Ionen der isoelektronischen Berylliumsequenz vorgestellt. Es handelt sich dabei um  $F^{5+}$ ,  $Cl^{13+}$ ,  $Fe^{22+}$  und  $Cu^{25+}$ , welche einen weiten Bereich der Kernladungszahl  $Z$  abdecken. Bei allen vier Ionen konnte erstmalig der Prozeß der trielektronischen Rekombination unmittelbar nachgewiesen werden. In der Tat wurde damit nicht nur zum ersten Mal TR beobachtet, sondern es stellte sich heraus, daß bei niedrigen Kollisionsenergien die TR einen nicht unerheblichen Beitrag zum Gesamtwirkungsquerschnitt der Elektron–Ion Rekombination liefert. Daher soll im Rahmen dieser Arbeit hauptsächlich auf das Phänomen der TR eingegangen werden. Zum Vergleich wurden theoretische Modellspektren mit dem Programmpaket AUTOSTRUCTURE erstellt, welche einen tieferen Einblick in die Mechanismen des TR–Prozesses ermöglichen.

## Kapitel 2

# Grundlagen zur Dielektronischen Rekombination

### 2.1 Dielektronische Rekombination

Zu Beginn der dielektronischen Rekombination (DR) zwischen einem Ion und einem freien Elektron im Kontinuum dieses Ions findet ein strahlungsloser, resonanter Einfangprozeß statt. Dabei wird ein Rumpfelektron des Ions beim Stoß mit dem Kontinuums-elektron über Elektron–Elektron Wechselwirkung angeregt. Gleichzeitig geht das Kontinuums-elektron in einen gebundenen Zustand des rekombinierten Ions über. Aus Energieerhaltungsgründen entspricht die Summe aus der anfänglichen kinetischen Energie und der hinzugewonnenen Bindungsenergie des eingefangenen Elektrons ungefähr der Anregungsenergie des Rumpfelektrons. Der resonanzartige Charakter des strahlungslosen Elektroneneinfangs ist dadurch bedingt, daß dies aufgrund der Diskretisierung der Bindungsenergie nur für bestimmte kinetische Energien erfüllt ist. Die doppelt angeregten Zustände des auf diese Weise rekombinierten Ions sind immer instabil gegenüber Augerzerfall, dessen Endprodukte, ein freies Elektron und das abgeregte Rumpfelektron im Ion, wieder dem Ausgangszustand des strahlungslosen Elektroneneinfangs entsprechen. Daher stellt dieser Elektroneneinfang im Grunde genommen den zeitinversen Prozeß der Autoionisation dar und beide zusammen bilden zwischen Kontinuum und gebundenen Zuständen einen reversiblen Prozeß. Erst nach einem zweiten Schritt durch radiative Abregungen, welche unterhalb der ersten Ionisationsschwelle enden, ist das rekombinierte Ion stabil und die dielektronische Rekombination,



ist abgeschlossen. Die Stabilisierung kann, falls Zwischenniveaus vorhanden sind, kaskadenförmig ablaufen, was durch jeweils neue Verzweigungsverhältnisse zwischen Autoionisation und Photoemission den Gesamtprozeß außerordentlich komplex gestaltet. Aufgrund der langen Lebensdauern des in hohe Rydbergzustände eingefangenen Elektrons geschieht die radiative Relaxation in der Regel jedoch durch das angeregte Rump-

felektron.

## 2.2 Wirkungsquerschnitt

Die dielektronische Rekombination wird formal als resonanter Streuprozess behandelt. Nach Fermis „Goldener Regel“ ergibt sich der Wirkungsquerschnitt für den Übergang eines freien Elektrons vom Kontinuum in einen stabilen gebundenen Zustand zu:

$$\sigma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\rho_f}{\phi_e} |M_{if}|^2 \quad (2.2)$$

wobei  $\phi_e = p_e/m_e$  der Fluß für ein freies Elektron im Normierungsvolumen im Anfangszustand  $i$  und  $\rho_f$  die Zustandsdichte der Photonen im Endzustand  $f$  ist. Für einen Zweistufenprozess, wie die DR, erfolgt die Auswertung des Übergangsmatrixelementes  $M_{if}$  mit den Methoden der zeitabhängigen Störungsrechnung zweiter Ordnung, wobei Einfang und nachfolgende Stabilisierung sequentiell über Zwischenzustände ablaufen [3]. Erfolgt die DR über ein einziges Zwischenniveau, wie in der *isolated resonance approximation* [4] gefordert, das heißt einzelne Resonanzen dürfen sich nicht überlappen, und läßt man den direkten Einfangprozess über Strahlungsrekombination (RR) wegfallen, erhält das Betragsquadrat des Matrixelements folgendes Aussehen [5]:

$$|M_{i \rightarrow d \rightarrow f}|^2 = \frac{|\langle f|D|d\rangle|^2 \cdot |\langle d|V|i\rangle|^2}{(E_i - E_d)^2 + (\frac{\Gamma_d}{2})^2} \quad (2.3)$$

Dabei sind  $E_i$  und  $E_d$  jeweils die Gesamtenergien des Elektron-Ion Systems im Anfangszustand  $i$  bzw. im Zwischenzustand  $d$  des rekombinierten, doppelt angeregten Ions. Die jeweiligen Matrixelemente beschreiben den Elektroneneinfang von  $i$  nach  $d$  über die Zweielektronen-Coulombwechselwirkung  $V$  und den Dipolzerfall  $D$  von  $d$  in den Endzustand  $f$ . Der Ausdruck im Nenner entspricht dem Lorentzprofil einer Resonanz im Breit-Wigner Formalismus und trägt der endlichen Lebensdauer des intermediären Niveaus Rechnung mit dessen Halbwertsbreite  $\Gamma_d$ . Über die Lebensdauer-Halbwertsbreitebeziehung erhält man die gesamte Zerfallsrate, die sowohl Autoionisation als auch radiative Übergänge enthält:

$$A_{ges} = A_r + A_a = \frac{\Gamma_d}{\hbar} \quad (2.4)$$

Über die Matrixelemente des Elektron-Elektron Wechselwirkungsoperators  $V$  für den Elektroneneinfang und des Dipoloperators  $D$  für den radiativen Zerfall erhält man die jeweiligen Übergangsraten wiederum aus Fermis „Goldener Regel“:

$$A_r(d \rightarrow f) = \frac{2\pi}{\hbar} \rho_f |\langle f|D|d\rangle|^2 \quad (2.5)$$

$$A_{cap}(i \rightarrow d)\Delta E = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle d|V|i\rangle|^2 = \frac{g_d}{2g_i} \frac{1}{\rho_e} A_a(d \rightarrow i) \quad (2.6)$$

Unter Anwendung des Prinzips des detaillierten Gleichgewichts läßt sich gemäß Beziehung 2.6 die Einfangrate  $A_{cap}(i \rightarrow d)$  durch die entsprechende Autoionisationsrate  $A_a(d \rightarrow i)$  ersetzen. Mit der Zustandsdichte  $\rho_e = 4\pi m_e p / (2\pi\hbar)^3$  freier Elektronen im Kontinuum und nach Integration über die Resonanzkurve im Energieintervall  $\Delta E$  erhält man den gemittelten Gesamtwirkungsquerschnitt einer einzelnen Resonanz [6]:

$$\bar{\sigma}^{DR}(E_r)\Delta E = \frac{\pi^2 \hbar^3}{m_e} \frac{g_d}{2g_i} \frac{1}{E_r} \cdot A^{DR} \quad (2.7)$$

mit der Rate:

$$A^{DR} = A_a(d \rightarrow i) \cdot \frac{\sum_f A_r(d \rightarrow f)}{\sum_{i'} A_a(d \rightarrow i') + \sum_{f'} A_r(d \rightarrow f')} \quad (2.8)$$

$E_r$  wird als Resonanzenergie bezeichnet und entspricht dem Energieunterschied des Ions im Anfangszustand mit  $N$  Elektronen und der Bindungsenergie der  $N + 1$  Elektronen des rekombinierten Ions im Zwischenzustand  $d$ . Das Verhältnis der statistischen Gewichte der jeweiligen Zustände  $g_d/2g_i$  leitet sich aus dem Verwenden der Autoionisationsrate anstelle der Einfangrate ab. Der Summenausdruck in  $A^{DR}$  entspricht der Fluoreszenzausbeute für Photonenzerfälle.

In der Regel sind dem rekombinierten Ion radiative und Autoionisationsübergänge zu verschiedenen Endzuständen erlaubt, so daß über alle möglichen Kanäle summiert werden muß. Dabei wird im Zähler nur über radiative Zerfälle summiert, die unterhalb der ersten Ionisationsschwelle enden, da in erster Linie nur diese zur dielektronischen Rekombination beitragen. Um die Gesamtzerfallsrate zu erhalten, werden im Nenner alle Übergänge zu Zuständen unterhalb von  $d$  miteinbezogen, auch die, die oberhalb der ersten Ionisationsschwelle weiterhin ionisieren können.

Wie aus Gleichungen 2.7 und 2.8 ersichtlich, benötigt man in dieser Näherung zur theoretischen Ermittlung des DR–Wirkungsquerschnitts letztendlich die Resonanzenergien bzw. Bindungsenergien und die Übergangsraten der jeweiligen Zustände, die im Rahmen von Atomstrukturberechnungen ermittelt werden.

## 2.3 DR–Resonanzlagen

Für Atome und Ionen mit mehreren Elektronen wird die ungekoppelte Gesamtwellenfunktion der Elektronen als Produktwellenfunktion aus den Einzelelektronenorbitalen in den Quantenzahlen  $nl$  ausgedrückt. Ein Set aus mehreren Orbitalen heißt Elektronenkonfiguration und wird in der Schreibweise  $n_1 l_1 n_2 l_2 \dots n_n l_n$  dargestellt. Elektronen mit den gleichen Orbitalen  $nl$  heißen äquivalent zueinander. Die Elektronen koppeln zu Zuständen mit Gesamtdrehimpuls  $J$  und zugehöriger Gesamtmagnetquantenzahl  $M$ . Diese Zustände definieren die einzelnen Energieniveaus in einem Atom oder Ion. Die

## Kapitel 2. Grundlagen zur Dielektronischen Rekombination

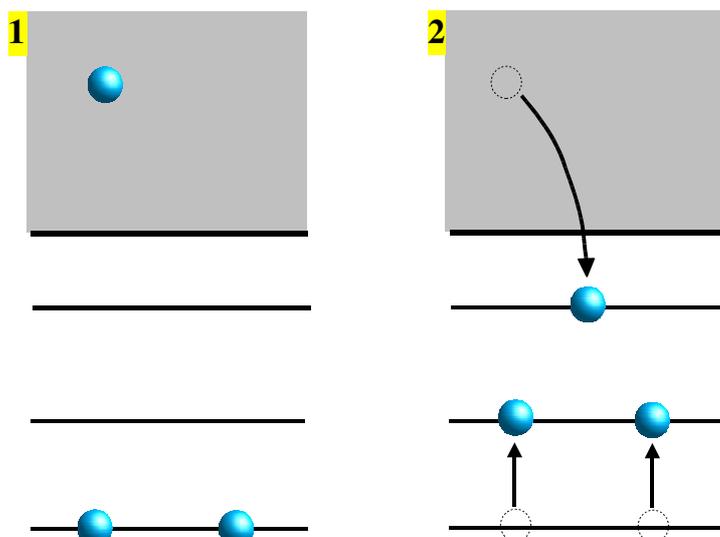
---

gewichtet gemittelte Energie aus allen Energieniveaus einer Konfiguration definiert die Schwerpunktsenergie einer Konfiguration. Diejenige Konfiguration, welche das niedrigste Energieniveau beinhaltet, ist die Grundzustandskonfiguration. Alle anderen liegen energetisch darüber und bilden angeregte Zustände. Im Spezialfall von Konfigurationen, welche sich nur durch die Quantenzahlen eines angeregten Elektrons unterscheiden, bildet sich eine sogenannte Rydbergserie von Konfigurationen aus.

Das System aus einem freien Elektron und einem berylliumartigen Ion, wie in dieser Arbeit untersucht, bildet insgesamt borähnliche Elektronenkonfigurationen. In solchen Systemen ist die Grundzustandskonfiguration  $1s^2 2s^2 2p$ . Die Schwerpunktsenergien der zugehörigen Rydbergserie  $1s^2 2s^2 nl$  aus einfach angeregten Konfigurationen konvergieren mit  $n \rightarrow \infty$  zu der ersten Ionisationsschwelle. Die nächst höher angeregte Rydbergserie aus doppelt angeregten Konfigurationen  $1s^2 2s 2p nl$  endet an entsprechend höheren Ionisationsschwellen, gefolgt von den Seriengrenzen der dreifach angeregten  $1s^2 2p^2 nl$  Konfigurationen usw. Die relativen Lagen der einzelnen höheren Ionisationsschwellen zur ersten Ionisationsschwelle entsprechen den Anregungsenergien der Elternkonfigurationen  $1s^2 2l 2l'$  im berylliumartigen System. Als natürliche Erweiterung der diskreten Rydbergserien schließt sich eine kontinuierliche „Serie“ von Konfigurationen  $1s^2 2l 2l' \epsilon l''$  an, mit einem Elektron der kinetischen Energie  $\epsilon$  und dem relativen Bahndrehimpuls  $l''$  im Kontinuum des ionisierten Atoms bzw. Ions mit der berylliumähnlichen Elektronenkonfiguration  $1s^2 2l 2l'$ .

Abb. 2.1 zeigt ein solch erweitertes Energiediagramm, welches die Kontinuumszustände repräsentiert (graue Fläche) sowie die gebundenen borähnlichen Zustände, beim Stoß zwischen dem berylliumartigen System und einem freien Elektron. Für unser Experiment erweist es sich als sinnvoll, die Energie relativ zum Grundzustand des berylliumähnlichen Ions anzugeben. Mit dieser Energiefestlegung haben alle darüber liegenden gebundenen Zustände des rekombinierten Ions, die über Elektroneneinfang bevölkerbar und instabil gegenüber Autoionisation sind, ebenso wie die Kontinuumszustände einen positiven Energiewert. Alle darunter liegenden Zustände besitzen negative Energien und sind stabil. Der Elektron-Ion Zustand im Kontinuum kann unter Resonanzbedingung an einen gebundenen doppelt angeregten Zustand des rekombinierten Ions koppeln. In vorliegendem Beispiel befindet sich das freie Elektron in dem Kontinuum, in welchem das Ion im Grundzustand  $2s^2$  vorliegt. Ist die Resonanzbedingung erfüllt, das heißt die kinetische Energie des Kontinuumelektrons liegt in der Nähe des doppelt angeregten Zustands, so kann das Elektron eingefangen werden, unter gleichzeitiger Anregung eines Rumpfelektrons. Stimmt man kontinuierlich die kinetische Elektronenenergie durch, kann das gesamte Energiespektrum der angeregten Zustände oberhalb der ersten Ionisationsschwelle abgetastet werden.





**Abb. 2.2:** Schematische Darstellung des trielektronischen Einfangs. Man versteht darunter einen strahlungslosen Elektroneneinfang unter gleichzeitiger Anregung von zwei gebundenen Elektronen. Der daraus resultierende gebundene Zustand ist dreifach angeregt.

---

### 2.4.1 $\Delta N = 1$ Übergänge

Bisheriger Schwerpunkt theoretischer Untersuchungen des dreifachen Augerzerfalls war der dreifach angeregte Zustand in der  $2s^22p$  Konfiguration der L-Schale lithiumähnlicher Ionen. Solche hochangeregten Zustände werden z.B. in Einzelkollisionsprozessen schneller hochgeladener Ionen an dünnen Heliumgastargets produziert und in hoher Auflösung spektroskopiert [7]. Nebenbei können diese Zustände auch über den mit der Dreielektronen-Autoionisation verwandten Prozeß der Doppelautionisation zerfallen, indem zwei Elektronen emittiert werden und das dritte Elektron in den Grundzustand übergeht [8].

Der Endzustand des Dreielektronen-Augerzerfalls wird über  $\Delta N = 1$  Übergänge durch Auffüllen der beiden Löcher in der K-Schale erreicht. Im *independent-particle* Modell, d.h. die Elektronen bewegen sich unabhängig voneinander in einem von den anderen gebundenen Elektronen erzeugten mittleren Coulombpotential, verschwindet in erster Ordnung Störungsrechnung das Matrixelement des Zweielektronenoperators der Coulombwechselwirkung für die Dreielektronen-Autoionisation, da sich die Wellenfunktionen des Anfangs- und des Endzustandes um mehr als zwei Einzelelektronenorbitale unterscheiden [9]:

$$\left\langle \psi_f(1s^2\epsilon l) \left| V = \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right| \psi_i(2s^22p) \right\rangle = 0 \quad (2.9)$$

Für die Berechnung von Dreielektronen-Autoionisationsraten ist die Berücksichtigung von Korrelationseffekten bei den Rumpfelektronen daher zwingend erforderlich. Mittels

## 2.4. Trielektronische Rekombination

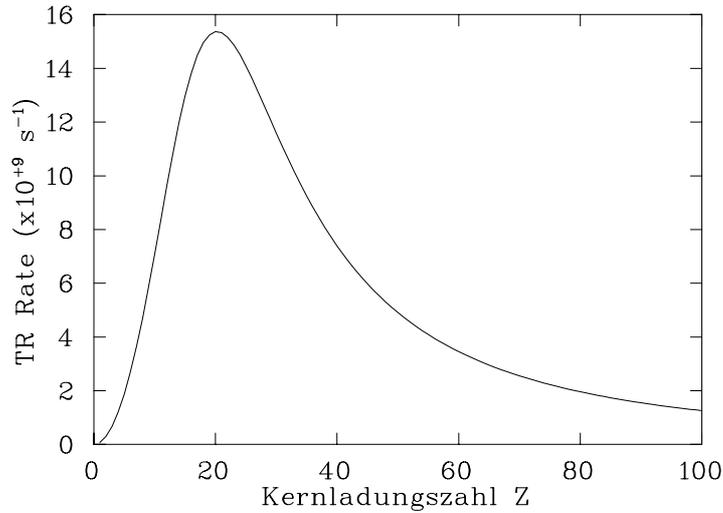
Störungsrechnungen zweiter Ordnung [10, 11] erhält man einen endlichen Wert für das Matrixelement. Dabei wird der Dreielektronen–Augerzerfall über Zwischenzustände berechnet, die sequentiell durch Einelektronübergänge erreicht werden. In der *many body perturbation theory* (MBPT) sind dabei auch Matrixelemente enthalten, die durch das Shake–Modell beschrieben werden [9]. Verstanden wird der Shake–Down Mechanismus als ein sequentieller Zerfall, bei dem nach einer normalen Autoionisation ein zunächst unbeteiligtes drittes *spectator* Elektron aufgrund der plötzlichen Veränderung des Elektronenpotentials abgeregt wird. Alternativ bzw. zusätzlich kann die Dreielektronen–Autoionisationsrate auch über Einbeziehung von Konfigurationsmischungen sowohl im Anfangs– als auch im Endzustand bestimmt werden, da die Relaxation des Elektronenrumpfes teilweise in der Konfigurationsmischung enthalten ist [12]. Allerdings haben bei leichten Ionen ( $Z \lesssim 10$ ) für kleine Projektilladungen und kleine Kollisionsenergien die Ergebnisse der Störungsrechnung zweiter Ordnung in den Matrixelementen, wie z.B. Shake–Effekte, einen stärkeren Einfluß auf Zweielektronenübergänge als Konfigurationsmischungen alleine [13, 14].

Die  $Z$ –Abhängigkeit der  $\Delta N = 1$  TR–Rate  $A^{TR}$  läßt sich nach Gleichung 2.8 aus den  $Z$ –Abhängigkeiten der an der Bildung und Stabilisierung der  $2s^2 2p$  Konfiguration beteiligten Einzelraten herleiten. Die Einfangrate wird durch die Dreielektronen–Autoionisationsrate  $A_{3a}$  bestimmt. Im Gegensatz zur normalen Autoionisation, die in der ersten Näherung von der Kernladungszahl  $Z$  unabhängig ist [15], weist die Dreielektronen–Autoionisation eine  $Z^{-2}$ –Abhängigkeit auf [10]. Für die radiative Stabilisierung kommt nur der Zweielektronenübergang, bei dem zwei Elektronen unter Aussendung eines Photons in den Grundzustand übergehen, in Frage, da die Dipolübergänge  $2s^2 2p \rightarrow 1s 2s 2p$  bzw.  $1s 2s^2$  zur sofortigen Autoionisation führen. Die Zwei–Elektronen–ein–Photon Rate  $A_{2r}$  steigt dabei mit  $Z^2$  an. Beschränkt man sich nur auf die beiden Übergänge  $A_{2r}$  und  $A_{3a}$  so erhält man folgende  $Z$ –Abhängigkeit der TR–Rate [10]:

$$A^{TR} = \frac{A_{3a}(2s^2 2p \rightarrow 1s^2 \epsilon l) \cdot A_{2r}(2s^2 2p \rightarrow 1s^2 2l)}{A_{3a}(2s^2 2p \rightarrow 1s^2 \epsilon l) + A_{2r}(2s^2 2p \rightarrow 1s^2 2l)} = \frac{0.126 \cdot 10^{13} Z^2}{Z^4 + 0.168 \cdot 10^5} \quad (2.10)$$

Anders als bei der DR, die bei leichten Ionen mit  $Z^4$  anwächst und zu schwereren Ionen hin ein asymptotisches Verhalten zeigt [16], weist die TR–Rate ein eindeutiges Maximum bei  $Z = 20$  auf, s. Abb. 2.3.

Im Experiment jedoch reicht für  $\Delta N = 1$  Übergänge die Anregungsenergie dreifach angeregter Zustände lithiumähnlicher Ionen auch für die normale Autoionisation aus. In Gleichung 2.10 kommt daher zu der Summe im Nenner noch die Rate  $A_a$  der Autoionisation von  $2s^2 2p \rightarrow 1s 2s \epsilon l$  bzw.  $1s 2p \epsilon l$  hinzu. Nimmt man weiterhin an, daß die Autoionisationsrate wesentlich stärker als alle anderen Übergangsraten ist, wird durch diesen zusätzlichen Zerfallskanal der Wirkungsquerschnitt für TR in erster Linie auf



**Abb. 2.3:** Trielektronische Rekombinationsrate für  $\Delta N = 1$  Anregungen der Rumpfelektronen in heliumähnlichen Ionen in Abhängigkeit der Kernladungszahl  $Z$ .

---

das Verhältnis von Dreielektronen–Autoionisation zu herkömmlicher Autoionisation  $R = \frac{A_{3a}}{A_a}$  gedrückt. Rechnungen prognostizieren für Lithium noch etwa ein Verhältnis von  $R = 0.8 \cdot 10^{-3}$  [11], während mit wachsender Ordnungszahl das Verhältnis aufgrund der alleinigen  $Z$ –Abhängigkeit der Dreielektronen–Autoionisation immer kleiner wird. So zeigen Abschätzungen für heliumähnliches  $\text{Ar}^{16+}$  und  $\text{Kr}^{34+}$ , daß das Verhältnis  $R$  schon bei  $\approx 10^{-7}$  liegt [12].

Der experimentelle Nachweis von  $\Delta N = 1$  Zweielektronenübergängen durch TR oder in mit der TR eng verwandten Streuprozessen gestaltet sich daher recht schwierig. In Elektronenstoß–Ionisationsexperimenten von freien Elektronen an  $\text{Li}^+$  Ionen konnten einerseits direkt über Doppelanregung der beiden K–Schalen Elektronen ein normal autoionisierender Zustand und andererseits über resonanten Elektroneneinfang ein dreifach angeregter Zustand erzeugt werden. Allerdings wurde in beiden Fällen keine radiative Stabilisierung beobachtet [8]. Die Produktion dreifach angeregter Zustände durch Innerschalen–Doppelionisation in Ion–Atom Stößen an Argon und Chlor [17], sowie durch die Neutralisation von  $\text{C}^{6+}$  und  $\text{N}^{7+}$  an einer Ni–Oberfläche [18] ermöglichte bisher die direkte Beobachtung von Dreielektronen–Autoionisation. Ein direkter Nachweis von TR sowie des zur TR direkt verwandten RT2E Prozesses (resonanter Elektronen Transfer bei gleichzeitiger Anregung zweier Elektronen in Ion–Atom Stößen) konnte bisher noch nicht erbracht werden. Die entsprechenden Experimente an heliumähnlichem  $\text{Kr}^{34+}$  [19, 20] lieferten nur Obergrenzenabschätzungen für die Dreielektronen–Autoionisationsraten.

Die Ausführung von DR–Experimenten an berylliumähnlichen Ionen ist daher von besonderem Interesse, da es das einfachste System darstellt, bei dem eine korrelierte

Zweielektronenanregung vom Grundzustand aus innerhalb der L-Schale möglich ist. Dabei können auch dreifach angeregte Zustände unterhalb der Schwelle für normale Autoionisation gebildet werden, aufgrund der relativ niedrigen Anregungsenergie von der  $2s^2$  in die  $2p^2$  Konfiguration. Das heißt die Anregungsenergie eines einzelnen  $2p$  Elektrons reicht nicht aus, ein in einem hinreichend tiefen Zustand gefangenes Rydberg-elektron ins Kontinuum zu befördern. Durch den Wegfall des normalen Autoionisationskanals spielt für die TR-Rate das ungünstige (kleine) Verhältnis der Dreielektronen- zur normalen Autoionisation keine Rolle. Falls wie bei  $\Delta N = 1$  bei leichten Ionen die Dreielektronen-Autoionisationsrate größer ist als die Summe aller möglichen radiativen Zerfälle [11], wird analog zur DR die TR-Rate in erster Näherung durch die radiative Zerfallrate unter die erste Ionisationsschwelle bestimmt. Folglich beobachtet man unter obengenannten Bedingungen im Energiespektrum TR-Resonanzen mit zu DR-Resonanzen vergleichbaren Stärken.

### 2.4.2 $\Delta N = 0$ Übergänge

Analog zu  $\Delta N = 1$  TR bei heliumähnlichen Ionen verschwindet auch bei berylliumähnlichen Ionen das Matrixelement für  $\Delta N = 0$  TR im *independent particle modell*:

$$A_a(1s^2 2p^2 nl \rightarrow 1s^2 2s^2 \epsilon l') = 0 \quad (2.11)$$

In berylliumähnlichen Ionen kann aufgrund der starken Mischung der  $2s^2$  Konfiguration mit der  $2p^2$  Konfiguration, im Anfangszustand wie auch im Endzustand, dennoch eine korrelierte Zweielektronenanregung stattfinden. Um das besondere Verhalten der TR im Vergleich zur DR zu beschreiben, soll zunächst einmal im nächsten Abschnitt auf die Skalierungen der einzelnen Wirkungsquerschnitte eingegangen werden.

#### Skalierung von $\Delta N = 0$ DR und TR

Für den einfachsten Fall von DR und TR soll nur ein radiativer Übergang und ein Autoionisationskanal bzw. ein Dreielektronen-Autoionisationskanal für TR als vorhanden angesehen werden. Mit Gleichung 2.7 bzw. 2.8 gilt zunächst für den DR-Wirkungsquerschnitt :

$$\sigma^{DR} \propto \frac{1}{E} \frac{A_a \cdot A_r}{A_a + A_r} = \frac{1}{E} \cdot \begin{cases} A_r & \text{für } A_a \gg A_r \\ A_a & \text{für } A_r \gg A_a \end{cases} \quad (2.12)$$

Für den TR-Wirkungsquerschnitt erhält man, falls man annimmt, daß mindestens ein radiativer Dipolübergang zur Stabilisierung führt und man somit den wesentlich

## Kapitel 2. Grundlagen zur Dielektronischen Rekombination

---

langsameren Zwei-Elektronen-ein-Photon Übergang vernachlässigen kann:

$$\sigma^{TR} \propto \frac{1}{E} \frac{A_{3a} \cdot A_r}{A_{3a} + A_a + A_r} = \frac{1}{E} \cdot \begin{cases} \frac{A_{3a}}{A_a} \cdot A_r & \text{für } A_a \gg A_{3a}, A_r \\ A_{3a} & \text{für } A_r \gg A_a, A_{3a} \end{cases} \quad (2.13)$$

In der Regel übersteigt bei schweren Ionen die radiative Rate die Raten der normalen Autoionisation und der Dreielektronen-Autoionisation, so daß letztere den Wirkungsquerschnitt bestimmen. Die DR-Resonanzstärke liegt dann um Größenordnungen über der TR-Resonanzstärke. Für leichte bis mittelschwere Ionen ist die herkömmliche Autoionisationsrate wesentlich größer als die radiative Rate vor allem bei  $\Delta N = 0$  [21]. Der TR-Wirkungsquerschnitt wird bei Anwesenheit eines möglichen normalen Autoionisationskanals auch bei leichten bis mittelschweren Ionen im Vergleich zur DR stark verringert, wie aus Gleichungen 2.12 und 2.13 ersichtlich ist:

$$\sigma^{TR} \approx \frac{A_{3a}}{A_a} \cdot \sigma^{DR} \quad (2.14)$$

Ist bei der TR jedoch keine normale Autoionisation möglich, und nimmt man  $A_{3a} \gg A_r$  an, sind die Resonanzstärken für TR und DR vergleichbar, da beide Wirkungsquerschnitte gleichermaßen allein durch  $A_r$  bestimmt sind:

$$\sigma^{TR} \approx \sigma^{DR} \propto \frac{1}{E} \cdot A_r \quad (2.15)$$

Falls die radiative Relaxation hauptsächlich über die Rumpfelektronen abläuft, fallen sowohl DR als auch TR im Energiespektrum mit  $1/E$  ab. Je nach Gültigkeit von 2.14 oder 2.15 weist also der TR-Wirkungsquerschnitt ein stark unstetiges Verhalten im Energiespektrum auf, d.h. im Gegensatz zur DR fällt die TR in Stufen ab, die einen Unterschied von mehrere Größenordnungen ausmachen können, nimmt man vergleichbare Ratenverhältnisse  $R$  der Dreielektronen- zur normalen Autoionisation an wie bei  $\Delta N = 1$  Übergängen. Verläuft die Stabilisierung des intermediären Zwischenzustandes über Kaskadenzerfälle, kann vor allem in Hinblick auf die TR die Abschätzung aus Beziehungen 2.14 und 2.15 zusammenbrechen. Führt z.B. ein relativ schneller radiativer Übergang des Elektronenrumpfes innerhalb der gleichen Multiplizität (Triplett oder Singulett) zu Zuständen oberhalb der Ionisationsgrenze, so wird die Fluoreszenzausbeute wegen der darauffolgenden schnelleren Autoionisation reduziert und damit auch der Wirkungsquerschnitt. Rechnungen im Rahmen dieser Arbeit haben allerdings gezeigt, daß die gesamte radiative Rate zu Zuständen oberhalb der Ionisationsgrenze maximal die Hälfte der radiativen Gesamtrate ausmacht. Unter der Voraussetzung, daß alle Zustände oberhalb der Ionisationsschwelle autoionisieren, wird der Gesamtwirkungsquerschnitt höchstens um einen Faktor zwei abgeschwächt. Für die prinzipielle Energieabhängigkeit des TR-Wirkungsquerschnitts spielt dies nur eine untergeordnete

## 2.4. Trielektronische Rekombination

Rolle.

Die  $Z$ -Skalierung der Autoionisation läßt sich für nicht allzu große  $Z$  ( $Z < 40$ ) [21] in der nichtrelativistischen Coulombnäherung für gebundene und Kontinuumsorbitale aus den Radialintegralen  $R^k$  [15] im Matrixelement des Elektron–Elektron Wechselwirkungsoperators herleiten:

$$A_a \propto |R^k|^2 = \left| \int_0^\infty \int_0^\infty P_{nl}(r_1) P_{n'l'}(r_2) \frac{r_1^k}{r_1^{k+1}} P_{n''l''}(r_1) P_{\epsilon l'''}(r_2) dr_1 dr_2 \right|^2 \quad (2.16)$$

Die  $Z$ -Abhängigkeit steckt in der Normalisierung der Radialwellenfunktionen  $P_{nl}(r)$  der wasserstoffähnlichen Einzelektronenorbitale:

$$P_{nl}(r) = Z^{1/2} P_{nl}^H(Zr) \quad (2.17)$$

mit  $P_{nl}^H(r)$  als Radialwellenfunktion des Wasserstoffelektrons. Das Kontinuumsorbital  $P_{\epsilon l}(r)$  des Projektilelektrons erhält in der Normalisierung eine  $\epsilon^{-1/4}$  Abhängigkeit in der Kollisionsenergie. Die relativistische Spin–Orbit Wechselwirkung ist bei kleinen und mittleren  $Z$  vernachlässigbar. Damit ist die  $l$ -Aufspaltung einer  $n$ -Mannigfaltigkeit ausreichend in der Coulombnäherung beschrieben und die Anregungsenergie geht für  $\Delta N = 0$  linear in  $Z$  und somit auch näherungsweise die Resonanzenergie. Daher ist anders als für  $\Delta N = 1$  Übergänge die Autoionisation bei  $\Delta N = 0$  gemäß Beziehungen 2.16 und 2.17  $Z$ -abhängig:

$$A_{a,\Delta n=0} \propto Z^{1/2} \quad (2.18)$$

Die  $Z$ -Abhängigkeit der radiativen Dipolrate läßt sich aus der Energieabhängigkeit  $\omega^3$  und den Radialanteilen der Matrixelemente herleiten. Für  $\Delta N = 0$  Dipolübergänge ergibt sich eine Proportionalität zu  $Z$ . Nach 2.12 erhält der DR–Wirkungsquerschnitt demnach folgende  $Z$ -Skalierungen:

$$\sigma_{\Delta n=0}^{DR} \propto \begin{cases} Z^0 & \text{für } A_a \gg A_r \\ Z^{-1/2} & \text{für } A_a \ll A_r \end{cases} \quad (2.19)$$

Mit Hilfe von Störungsrechnungen in zweiter Ordnung [10] kann auch eine Abschätzung der  $Z$ -Abhängigkeit des TR–Wirkungsquerschnitts gemacht werden. Die Matrixelemente der Dreielektronen–Autoionisation erhalten in zweiter Ordnung Störungstheorie folgendes Aussehen:

$$M_{3a} = \sum_n \frac{\langle \phi_i | V | \phi_n \rangle \langle \phi_n | V | \phi_f \rangle}{E_i - E_n} \quad (2.20)$$

Dabei werden Anfangs– und Endzustand der ungestörten Wellenfunktionen  $\phi_i$  und  $\phi_f$  über angeregte Zwischenzustände  $\phi_n$  in Einzelektronenübergänge der Coulombwechselwirkung  $V$  miteinander verbunden. Im Nenner stehen die Energieeigenwerte  $E_i$  und

## Kapitel 2. Grundlagen zur Dielektronischen Rekombination

---

$E_n$  des Anfangszustandes und der Zwischenzustände. Die  $Z$ -Abhängigkeit der Matrixelemente im Zähler lassen sich analog aus den Radialintegralen in 2.16 abschätzen. Während das erste Matrixelement einen gebunden-gebunden Übergang beschreibt und daher mit  $Z$  geht, stellt das zweite gerade die herkömmliche Autoionisation dar, deren  $Z$ -Abhängigkeit zuvor dargelegt wurde. In der Summe von  $M_{3a}$  tragen diejenigen Glieder stark zum Gesamtmatrixelement bei, bei denen die Differenz von  $E_i$  und  $E_n$  klein wird. Da  $E_n$   $Z^2$ -abhängig ist, weist indirekt auch der Nenner in den Summengliedern dieselbe  $Z^2$ -Abhängigkeit auf. Folglich gilt für die Dreielektronen-Autoionisation:

$$A_{3a} \propto |M_{3a}|^2 \propto Z^{-1} \quad (2.21)$$

und der TR-Wirkungsquerschnitt skaliert somit nach 2.13:

$$\sigma_{\Delta n=0}^{TR} \propto \begin{cases} Z^{-3/2} & \text{für } A_a \gg A_{3a}, A_r \\ Z^{-2} & \text{für } A_r \gg A_a, A_{3a} \end{cases} \quad (2.22)$$

bzw. falls keine normale Autoionisation möglich ist nach 2.15:

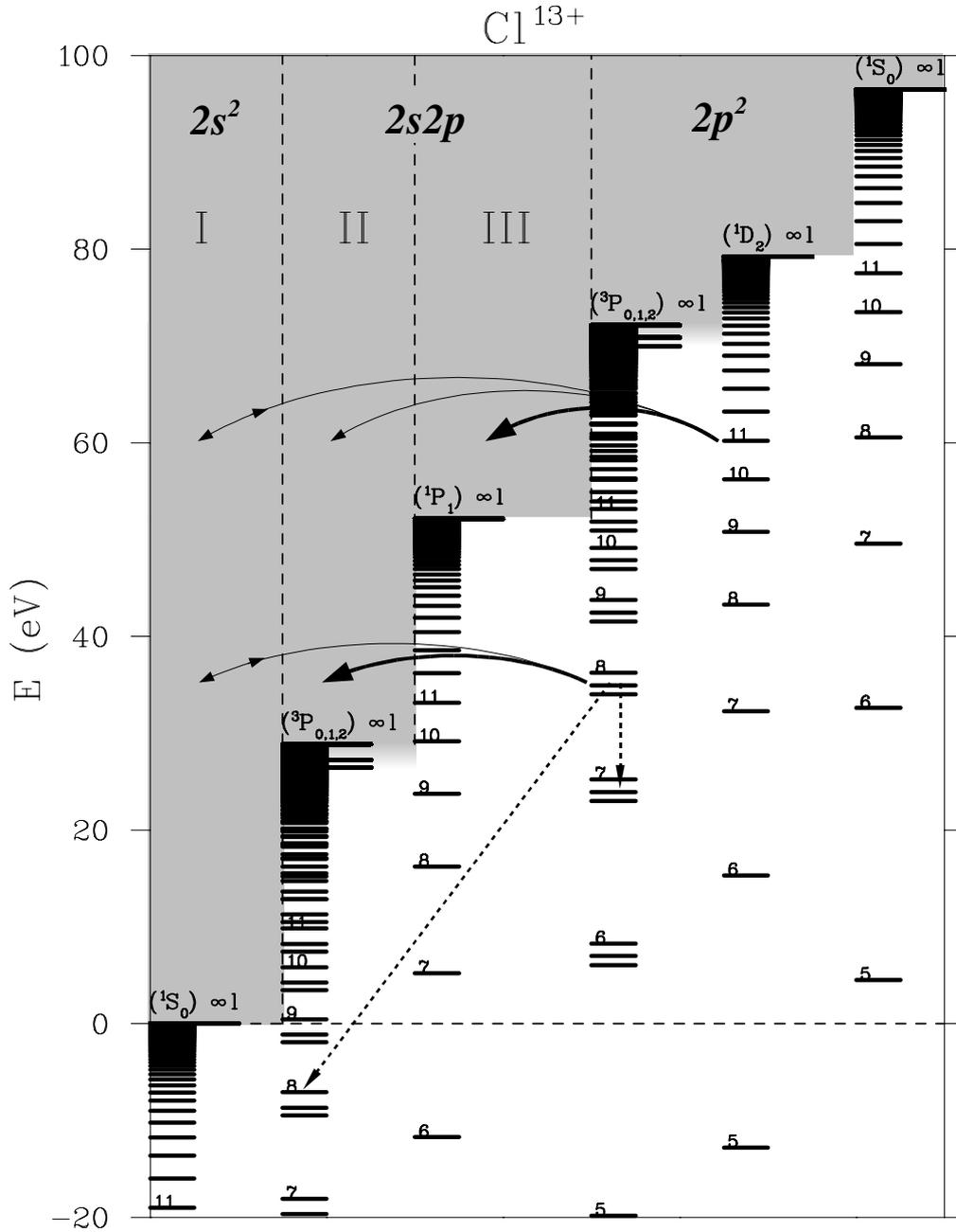
$$\sigma_{\Delta n=0}^{TR} \propto Z^0. \quad (2.23)$$

### DR und TR an berylliumähnlichen Ionen

Das besondere Verhalten der TR im Vergleich zu DR, welches im vorherigem Abschnitt abgehandelt wurde, soll nun konkret an berylliumähnlichen Ionen nachgezeichnet werden.

Abb. 2.4 zeigt das Energiediagramm für DR und TR an berylliumähnlichem  $\text{Cl}^{13+}$ . Die Rydbergseriengrenzen entsprechen den Anregungsenergien von der  $2s^2$  Konfiguration des Grundzustandes in die  $2s2p$  und  $2p^2$  Konfigurationen. Im LS-Schema koppeln die beiden  $2s$  Rumpfelektronen im Grundzustand zu einem Singulett  $^1S_0$  Term. Die in der  $\Delta N = 0$  DR einfach angeregte  $2s2p$  Konfiguration koppelt zu drei Triplett  $^3P_{0,1,2}$  Termen und einem höher gelegenen Singulett  $^1P_1$  Zustand. Die für  $\Delta N = 0$  über die TR zweifach angeregten  $2p^2$  Elektronen liefern insgesamt fünf Terme, bestehend aus je drei Triplett  $^3P_{0,1,2}$  und den beiden Singulett  $^1D_2$  und  $^1S_0$  Termen.

Der Anfangszustand besteht aus einem freien Elektron im Kontinuum (I) des  $\text{Cl}^{13+}$  Ions im Grundzustand. Bei passender kinetischer Energie des Kontinuumelektrons können schon in der Nähe der ersten Ionisationsschwelle Niveaus von dreifach angeregten Zuständen  $2p^2nl$  bevölkert werden. Unterhalb der Anregungsenergie in die  $2s2p(^3P_j)$  Niveaus steht dem eingefangenen Elektron als Augerzerfallskanal nur der dem Einfang analoge Prozeß über die Dreielektronen-Autoionisation zurück in das Kontinuum I offen. Oberhalb jedoch kommt ein weiterer Verlustkanal in das Kontinuum II der Triplettzustände der einfach angeregten  $2s2p$  Rumpfelektronenkonfiguration



**Abb. 2.4:** Energieniveauschema für DR und TR an berylliumähnlichem  $\text{Cl}^{13+}$ . Die Nulllinie ist zur Übereinstimmung mit dem TSR Experiment an der ersten Ionisationsgrenze von  $\text{Cl}^{12+}$  und gleichzeitig dem Grundzustand von  $\text{Cl}^{13+}$  festgelegt. Die Pfeile symbolisieren die verschiedenen Verzweigungsmöglichkeiten der gebundenen und Kontinuumszustände. Die Kopplung der gebundenen Zustände mit den verschiedenen Kontinua durch Autoionisation bzw. strahlungslosen Elektroneneinfang ist durch die gebogenen Pfeile angezeigt. Die dicken Linien zeigen dabei eine hohe Übergangswahrscheinlichkeit, die dünnen eine niedrige. Die gestrichelten Pfeile stellen mögliche radiative Übergänge dar.

hinzu. Da in der Coulombwechselwirkung spinändernde Übergänge verboten sind, werden Tripletzustände bevorzugt in das Kontinuum II zerfallen, das erreicht werden kann, ohne daß die Rumpfelektronen ihren Spin ändern müssen. Sollte wie bei  $\Delta N = 1$  auch für  $\Delta N = 0$  Übergänge die normale Autoionisation wesentlich schneller ablaufen als Dreielektronen-Autoionisation und radiative Relaxation, werden diejenigen TR-Resonanzen, die über einen  $2p^2(^3P_j)nl$  intermediären Zustand gebildet werden, stark unterdrückt. Die Singulett Rumpfelektronenzustände  $^1S_0$  und  $^1D_2$  können in erster Linie nicht in die entsprechenden Tripletzustände zerfallen, so daß die zugehörigen TR-Resonanzen beim Überschreiten der  $^3P_j$  Anregungsschwelle in ihrer Stärke kaum beeinflußt werden. Auch für DR-Resonanzen, deren intermediäre Zwischenzustände  $2s2p(^1P_1)nl$  energetisch durchaus in der Lage wären in die  $2s2p(^3P_{0,1,2})\epsilon l$  Kontinuumszustände zu zerfallen, wird wegen des Interkombinationsverbots keine signifikante Abschwächung der Resonanzstärke beobachtet. Ein weiteres Kontinuum (III) öffnet sich oberhalb der  $2s2p(^1P_1)nl$  Seriengrenze, in welches nun auch die Singulett Terme der dreifach angeregten Zwischenzustände zerfallen können. Im Experiment erwartet man daher oberhalb dieser Grenze schließlich auch keine Singulett TR-Resonanzen in relevanter Stärke mehr.

Sowohl wegen der Konfigurationsmischungen, als auch aufgrund der Tatsache, daß bei mittelschweren bis schweren Ionen die reine LS-Kopplung über die intermediäre Kopplung zur reinen jj-Kopplung übergeht, sind alle LS-Notationen zu den Energieniveaus nur als ein Hauptbeitrag im LS-Kopplungsschema zum jeweiligen Gesamtzustand zu verstehen. Für das allgemeine Verständnis des energieabhängigen Verhaltens der TR reichen Erläuterungen im Rahmen des LS-Bildes weitgehend aus, ohne gravierende Einbußen im Wahrheitsgehalt der getroffenen Aussagen zu machen. Allerdings werden in den dieser Arbeit zugrunde liegenden Atomstrukturrechnungen selbstverständlich sowohl Konfigurationsmischung als auch intermediäre Kopplung miteinbezogen.

## 2.5 Berechnung des Wirkungsquerschnitts

Die für die DR- und TR-Wirkungsquerschnitte benötigten Berechnungen der Energieniveaus der intermediären Zustände sowie deren entsprechender Autoionisations- und radiativen Raten wurden im Rahmen dieser Arbeit mit dem Programmpaket AUTOSTRUCTURE [22] durchgeführt, welches eine Erweiterung des Atomstrukturprogramms SUPERSTRUCTURE [23] darstellt. Die Energieniveaus können für sämtliche Atome und Ionen sowohl im LS-Kopplungsschema als auch für die intermediäre Kopplung (IC) berechnet werden. Konfigurationsmischungen werden durch sinnvolle Auswahl an Inputkonfigurationen berücksichtigt. Die Radialanteile der Einzelelektronenorbitale werden in einem statistischen Modellpotential, welches wahlweise mit der Thomas-Fermi Methode errechnet oder mittels Slater-Typ Orbitalen in einem Hartree-

## 2.5. Berechnung des Wirkungsquerschnitts

---

Potential ermittelt wird, berechnet. Alternativ können auch separat über ein selbstkonsistentes Hartree–Fock Potential ermittelte Wellenfunktionen an AUTOSTRUCTURE übergeben werden. Für die Kontinuum–gebunden Zustände werden die Kontinuumswellenfunktionen mittels der *distorted–wave* Näherung im Potential des Targetions gerechnet. Dabei bleibt das Potential des Targetions ungestört durch das Kontinuumelektron. Über die Partialwellenzerlegung erhält man die Festlegung der einzelnen orbitalen Drehimpulse des Kontinuumelektrons. Aus Gründen der Energieerhaltung wird im Resonanzfall die Summe aus kinetischer Energie des Kontinuumelektrons und der Bindungsenergie des Targetions gleichgesetzt mit der Bindungsenergie des rekombinierten Ions. In der Basis von gekoppelten Mehrelektronenwellenfunktionen, welche den semi-relativistischen Breit–Pauli Hamiltonoperator diagonalisieren, werden Anfangszustand, Zwischenzustand und Endzustand entwickelt. Die so präparierten Zustände werden in die Berechnung der Matrixelemente der Autoionisation und radiativen Übergänge eingesetzt und liefern die gewünschten Raten. Da nur in erster Ordnung Störungsrechnung die Matrixelemente in AUTOSTRUCTURE berechnet werden, sind endliche Beiträge von Dreielektronen–Autoionisation und damit der trielektronischen Rekombination nur über die Einbeziehung von Konfigurationsmischung der Targetkonfigurationen zu erhalten. Bei hohen Rydbergzuständen wird der Rechenaufwand sehr hoch, so daß man für die Ratenberechnung Näherungen von Skalierungsgesetzen verwendet.



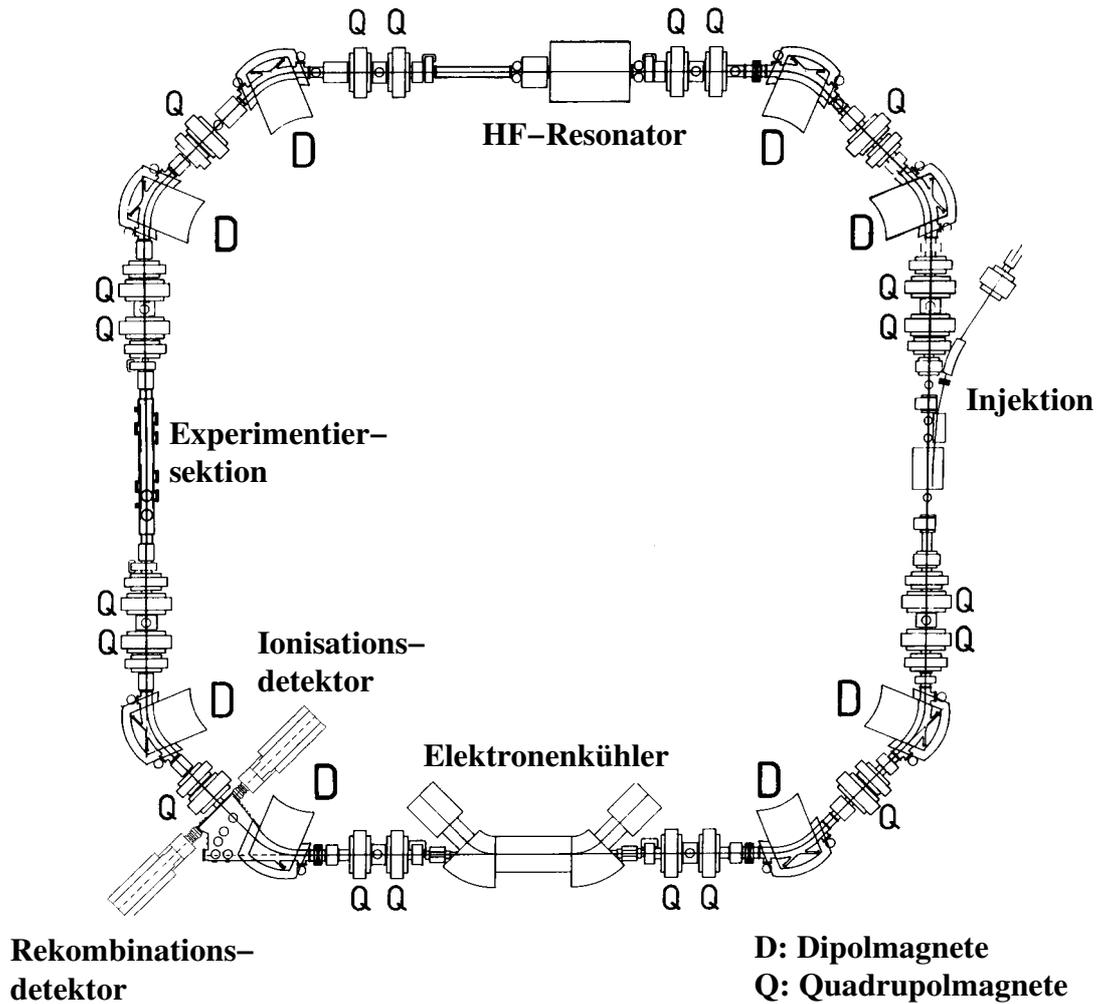
## Kapitel 3

# Experimenteller Aufbau

### 3.1 Der Heidelberger Schwerionenspeicherring TSR

Der Schwerionenspeicherring TSR (s. Abb. 3.1) dient zur Akkumulation und Speicherung einer Vielzahl atomarer und molekularer Ionen [24]. Die Ionenstrahlführung besteht aus vier symmetrischen Einheiten mit jeweils zwei  $45^\circ$  Dipolmagneten zur Ablenkung und fünf Quadrupolen zur Fokussierung. In den geraden, fast feldfreien Verbindungsstücken sind Injektion bzw. Extraktion, Elektronenkühler, Experimentierstrecke, Strahldiagnose und HF-Resonator untergebracht. Sein Umfang beträgt insgesamt 55.4 m. Die Ionen werden von einer linearen Beschleunigerstruktur geliefert, bestehend aus einem 12 MV Tandem Van-de-Graaff-Beschleuniger und nachfolgenden 40 HF-Driftröhrenresonatoren als Nachbeschleuniger. Die Dipole des TSR liefern eine maximale magnetische Ringsteifigkeit von  $B\rho = 1.5 \text{ Tm}$ , wobei  $B$  das Magnetfeld im Dipolmagneten ist und  $\rho$  dessen Krümmungsradius darstellt. Damit ist der TSR ausgelegt, Ionen mit einem Ladung-zu-Masseverhältnis von  $q/m = 0.5$  bis zu Energien von 30 MeV/u zu speichern. Zwei magnetische Septa und ein elektrostatisches Septum ermöglichen die Injektion der Ionen in den Speicherring. Mittels der sogenannten Multiturninjektion, bei der sukzessive die Sollbahn der zirkulierenden Ionen am Ort der Injektion nach innen verschoben wird, so daß Platz für nachfolgende eingeschossene Ionen frei wird, wird der transversale Phasenraum der Ionen im Ring aufgefüllt. Wichtig dabei ist vor allem, daß die horizontale Emittanz des injizierten Strahls wesentlich kleiner ist als die Akzeptanz des TSR. In der Regel läßt sich somit der Ionenstrom um einen Faktor von 30 erhöhen.

Zur weiteren Akkumulation von gespeicherten Ionen wird in der nächsten geraden Sektion ein Elektronenkühler verwendet, welcher zur Ionenkühlung vorgesehen ist, indem er einen intensiven, kalten Elektronenstrahl liefert, der kollinear mit den zirkulierenden Ionen überlagert wird und als Kältereservoir dient. Innerhalb eines Zeitbereiches von Sekunden wird der Phasenraum des Ionenstrahls erheblich komprimiert, so daß weitere Injektionen in den frei gewordenen Phasenraum folgen können. Diese mehrfache Multiturninjektion und darauffolgende Elektronenkühlung, Ecoolstacking genannt [25],



**Abb. 3.1:** Schematische Zeichnung des Testspeicherrings TSR. Rechts befindet sich die Einschubsektion. Im Uhrzeigersinn folgen die Kühlersektion, die Experimentierstrecke, an welcher zuletzt das  $\text{Li}^+$  Relativitätsexperiment [26] durchgeführt wurde, und die Strahldiagnosektion. Darüber hinaus ist in der letzten Sektion ein HF-Resonator integriert, welcher zur Beschleunigung oder longitudinalen Phasenraumkomprimierung der Ionen dient. Das in Kürze fertiggestellte, auf Schienen bewegliche Elektronentarget kommt in der Experimentiersektion zum Einsatz und kann innerhalb kürzester Zeit ein- und ausgebaut werden. Im Zusammenhang mit dem Target ist eine tangentielle Verlängerung der Experimentierstrecke zur Detektion neutraler Fragmente aus der dissoziativen Rekombination von Molekülen geplant.

erhöhen den Ionenstrom um einige Größenordnungen. Zur optimalen Ausnutzung des Ecoolstackingprinzips kann durch leichtes Abbremsen der Ionen im Elektronenkühler der Strahlorbit aufgrund der endlichen Dispersion am Injektionsort nach innen verschoben werden, was eine räumliche Trennung von direkt injiziertem und gekühltem

### 3.1. Der Heidelberger Schwerionenspeicherring TSR

---

Strahl bewirkt. Somit können Stromstärken von mehreren mA erzielt werden. Typische Strahlströme bei schweren hochgeladenen Ionen liegen im Bereich von mehreren 10 bis 100  $\mu\text{A}$ . Die maximale Anzahl gespeicherter Ionen ist erreicht, wenn sich ein Gleichgewicht aus nachgelieferten Ionen und der Verlustrate durch Einfachstreuung der Ionen untereinander und Elektroneneinfang und -stripping an den Restgasmolekülen, welches sich direkt auf die Lebensdauer der Ionen auswirkt, ausgebildet hat. Mit wachsender Ladung der Ionen gewinnt der Verlustprozeß durch Elektroneneinfang zunehmend an Bedeutung. Die Lebensdauer und auch der maximal speicherbare Strom nimmt daher bei gleichem Ladung-zu-Masse Verhältnis mit zunehmender Ordnungszahl der Ionen ab. Ein exzellentes Ultrahochvakuum von  $10^{-11}$  mbar ermöglicht Lebensdauern, abhängig von Ionensorte und Geschwindigkeit, von einigen Sekunden bis zu mehreren Stunden.

Zur Strahldiagnose kommen diverse Geräte zum Einsatz. Informationen zur Impulsverteilung der Ionen liefert das sogenannte Schottky-Spektrum. „Pickups“ im Ring nehmen durch den geladenen Ionenstrom influenzierte elektrische Ladung auf. Aufgrund lokaler Inhomogenitäten der Ionenstrahlladung erhält man ein Rauschsignal, welches nach Fourieranalyse eine Resonanz im Frequenzspektrum zeigt, deren relative Breite proportional zur Impulsverteilung der Ionen ist.

Zur Ermittlung des Strahlquerschnitts dient ein Strahlprofilmonitor. Die vom Ionenstrahl ionisierten Restgasmoleküle werden durch statische transversale elektrische Felder abgesaugt und an ortsauflösenden Detektoren (*multi channel plates*) registriert. Die daraus gewonnene Information über die horizontale und vertikale Strahlbreite dient unter anderem auch dazu, die Kühlzeit zu ermitteln, da der Durchmesser des gekühlten Ionenstrahls typischerweise mehr als zehnmal kleiner ist als der des ungekühlten. Bei geringen Strahlströmen bis zu einigen  $\mu\text{A}$  dient das Detektorsignal auch zur Strommessung.

Bei höheren Ionenströmen wird ein Gleichstromtransformator [27] benutzt. Um den Weicheisenkern, der das Strahlrohr umschließt, ist eine Erregerspule gewickelt, deren sinusförmiger Wechselstrom eine um die Null symmetrische Hysteresekurve der magnetischen Induktion in der Sättigung erzeugt. An einer zweiten Detektionsspule ist ein Phasendetektor angeschlossen, dessen Meßbereich ein schmales Band um das Doppelte der Erregerfrequenz  $\omega$  legt. Der Sekundärstrom erhält bei einer symmetrischen Hysteresekurve keine Anteile von  $2\omega$ . Die magnetische Induktion durch den Gleichstrom des Ionenstrahls verschiebt aber die Hysteresekurve entlang der Stromachse, so daß für den Sekundärstrom noch  $2\omega$  Frequenzanteile hinzukommen, welche vom Phasendetektor nachgewiesen werden. Durch einen Gegenstrom, der betragsmäßig dem Ionenstrom entspricht, wird diese Verschiebung wieder kompensiert. Bei Nullabgleich wird dieser Gegenstrom als Maß für den Ionenstrom ausgelesen. Die Genauigkeit dieser Strommessung ist aufgrund von Offsetschwankungen auf bis zu  $\pm 1\mu\text{A}$  beschränkt, bei einer

ansonsten sehr guten Linearität.

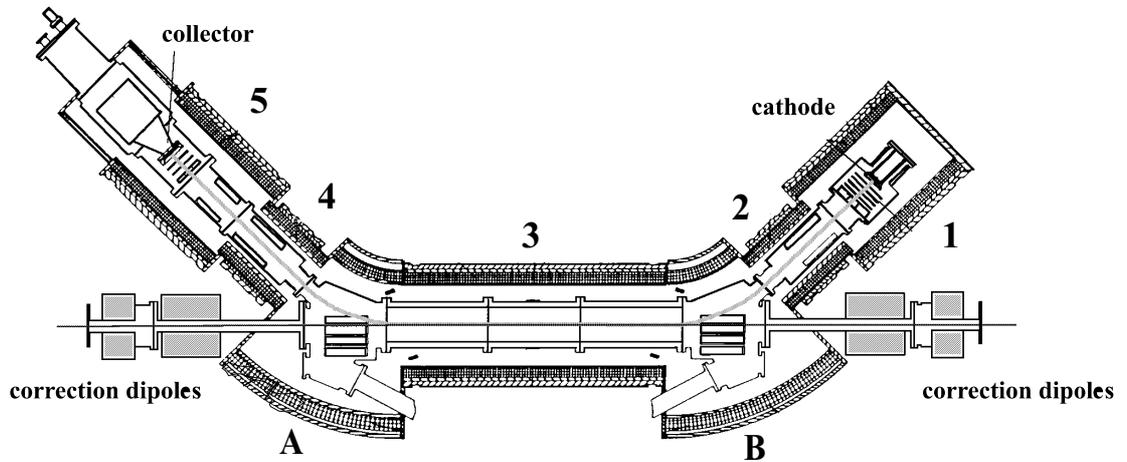
### 3.2 Der Elektronenkühler

Der im vorherigen Abschnitt erwähnte Elektronenkühler (s. Abb. 3.2) dient nicht nur zur Präparation der Ionen, sondern ist auch wesentlicher Bestandteil zur Untersuchung von Elektron-Ion Wechselwirkungen. Die Elektronen werden aus einer beheizten, in Pierce-Geometrie angebrachten Glühkathode (Radius = 0.95 cm), emittiert. Es bildet sich direkt vor der Kathode eine Raumladung aus, deren isotrope thermische Verteilung in etwa der Kathodentemperatur  $T \approx 1300^\circ$  entspricht. Vom Ort der Kathode aus, welche sich auf negativem Hochspannungspotential befindet, werden die Elektronen durch vier hintereinander angebrachte Anoden auf Erdpotential beschleunigt. Mittels unterschiedlicher Potentialbelegung der ersten Anode kann der Elektronenstrom variiert werden. Zur Flugrichtung parallele Magnetfelder wirken der Raumladung entgegen und halten die Elektronen in einem räumlich scharfen Elektronenstrahl zusammen. Durch die longitudinale Beschleunigung erfährt die zum Elektronenstrahl parallele Temperaturkomponente eine starke kinematische Kompression. Der transversale Freiheitsgrad, der im Magnetfeld entkoppelt ist, bleibt unbeeinflusst. Um auch transversal zu kühlen, bedient man sich der Methode der adiabatischen Expansion. Die im Gebiet eines hohen Magnetfeldes erzeugten Elektronen werden dabei hinreichend langsam in ein niedrigeres Feld überführt.

Die Elektronen führen aufgrund der Lorentzkraft eine Zyklotronbewegung senkrecht zur Strahlrichtung mit der Frequenz  $\omega = \frac{eB}{m_e}$  aus. Zusammen mit der longitudinalen Beschleunigung beschreiben die Elektronen eine steigende Spiralbewegung. In einem homogenen Magnetfeld ist aufgrund der Invarianz des mit der Zyklotronbewegung gekoppelten orbitalen magnetischen Moments des Elektrons das Verhältnis  $\frac{E_\perp}{B}$  konstant [28]. Dies gilt auch noch, wenn sich das Magnetfeld ausreichend langsam ohne Wärmeaustausch zwischen den Freiheitsgraden, also „adiabatisch“ ändert. Dabei soll die relative Magnetfeldänderung innerhalb der Steighöhe der Elektronenbahnen klein sein. Die sogenannte adiabatische Expansion durch Verringern des magnetischen Führungsfeldes bewirkt eine Abnahme der transversalen Temperatur, da mit  $E_\perp = kT_\perp$  folgender Ausdruck gilt:

$$k_B T_{f_\perp} = \frac{B_f}{B_i} k_B T_{i_\perp} \quad (3.1)$$

wobei die Indizes der Magnetfelder und Temperaturen für vor (*i*) bzw. nach (*f*) der Expansion stehen. Aufgrund der Konstanz des magnetischen Flusses durch die Querschnittsfläche, die vom Elektronenstrahl eingenommen wird, bläht sich der Strahl auf,



**Abb. 3.2:** Aufrißzeichnung des Elektronenkühlers. Die Zahlen von 1 bis 5 markieren die Solenoidmagnete, welche die Elektronen in einem Elektronenstrahl zusammenhalten, die Buchstaben A und B die Torroidmagnete, die den Elektronenstrahl ein- bzw. auslenken.

und man erhält für die beiden Radien die Beziehung:

$$r_f = \sqrt{\frac{B_i}{B_f}} \cdot r_i \quad (3.2)$$

Der Quotient  $\frac{B_i}{B_f}$  heißt Expansionsfaktor, da er proportional zur Flächenänderung des Elektronenstrahlquerschnitts ist.

Der Elektronenkühler am TSR ist so dimensioniert, daß je nach Parametereinstellungen Elektronenstrahlen von einigen Zentimetern Durchmesser und Stromstärken von bis zu 1 A erzeugt werden können, deren transversale Temperaturen im Bereich von  $kT_{\perp} = 5 - 20$  meV liegen. Die longitudinalen Temperaturen liegen mit  $kT_{\parallel} = 0.06$  meV zwei Größenordnungen darunter. Eigentlich sollte die minimal mögliche Longitudinaltemperatur kleiner sein, jedoch beschränken Relaxationsprozesse die maximal mögliche Abnahme dieser Temperaturkomponente. Die nicht verschwindende Kopplung zwischen den transversalen und longitudinalen Freiheitsgraden aufgrund der schwachen Magnetisierung des Elektronenstrahls liefert dabei den größten Beitrag zur longitudinalen Temperaturerhöhung.

Mittels eines Torroidmagneten wird der Elektronenstrahl in die 1.5 m lange Wechselwirkungszone geleitet. Dort überlagert er die im Ring zirkulierenden Ionen mit gleicher Geschwindigkeit. Mit der Zeit, in der Regel einige Sekunden, kühlen die Elektronen, die ständig neu von der Kathode nachgeliefert werden, durch Coulombwechselwirkung die zunächst heißen Ionen [29]. Im thermischen Gleichgewicht erhält der Ionenstrahl

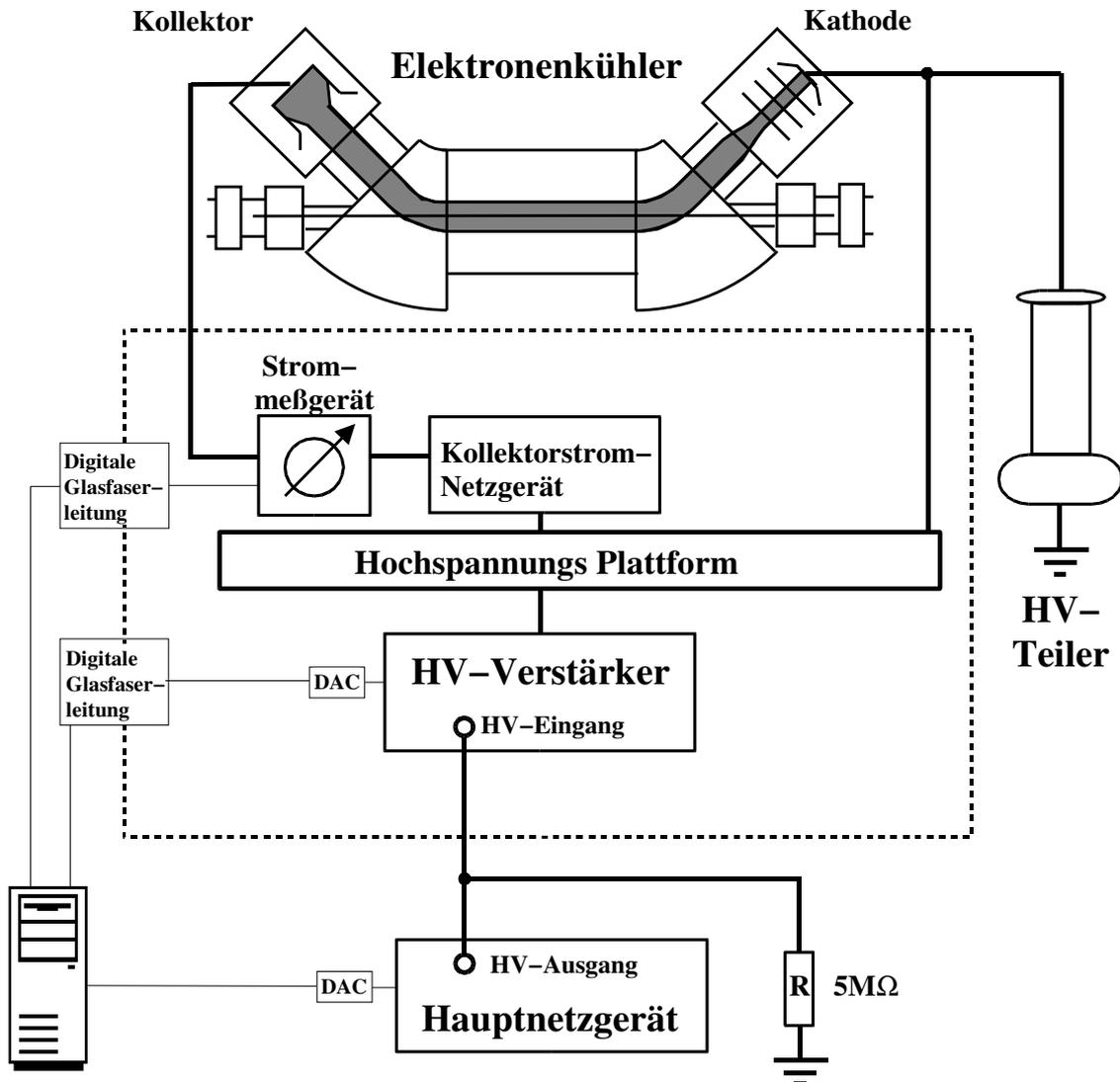
eine Impulsunschärfe von  $\frac{\Delta p}{p} = 10^{-4}$  und einen typischen Durchmesser von 2 mm. Am Ende der Wechselwirkungszone wird der Elektronenstrahl über ein Torroidfeld aus dem Strahlrohr geführt und nach fast vollständigem Abbremsen in dem Kollektor, einem wassergekühlten Faradaybecher, aufgenommen.

### 3.3 DR–Meßprinzip

Der Elektronenkühler dient einerseits zur Erzeugung energiescharfer Ionen als auch als Lieferant kalter Elektronen mit genau definierter Energie und ist damit ein höchst effizientes Instrument zu Untersuchung von Elektron–Ion Wechselwirkungen. Die Elektronen fungieren dabei unter anderem als Target für Elektron–Ion Rekombinationsprozesse. Die in der Wechselwirkungszone umgeladenen Ionen werden im nächsten 45°–Dipolmagneten vom Orbit der gespeicherten Ionen getrennt. In der anschließenden fächerförmigen Rekombinationskammer werden diese von einem in den Rekombinationsstrahl geführten CsJ–Szintillator–Detektor [30] aufgenommen. Die Kathodenspannung, welche die Elektronen ungefähr auf die Ionengeschwindigkeit und somit auf Kühlenergie ( $E_{rel} = 0$ ) beschleunigt, wird von stabilisierten  $-1.25$  kV,  $-5$  kV und  $-12.5$  kV Netzgeräten erzeugt, die je nach erforderlicher Elektronenenergie zum Einsatz kommen, s. Abb. 3.3.

Um auch Raten in Abhängigkeit einer endlichen Relativenergie zwischen Ionen und Elektronen aufzunehmen, ist ein schneller bipolarer Röhrenhochspannungsverstärker an das Kathodennetzgerät aufgestockt. Die analoge Ansteuerung des HV–Verstärkers erfolgt über eine bipolare 12–Bit DAC Camac–Einschubkarte mit maximal  $\pm 10$  V. Je nach eingestelltem Verstärkungsfaktor am HV–Verstärker kann in 12–Bit Auflösung eine Variation des Beschleunigungspotentials von bis zu  $\pm 1000$  V relativ zur Kühlspannung erreicht werden.

Die Aufnahme von Rekombinationsspektren durch eine kontinuierliche Variation der Relativenergie ist mit zweierlei Problemen behaftet. In der Nähe der Kühlenergie ist die Kühlkraft der Elektronen, welche die Ionengeschwindigkeit der Elektronengeschwindigkeit angleicht, besonders effizient. Dieser Mitzieheffekt verringert somit bei kleinen Relativenergien die Relativgeschwindigkeiten und bewirkt ein Ausschmieren der Spektren. Bei hohen Relativenergien spielen Mitzieheffekte aufgrund der praktisch nicht vorhandenen Kühlkraft keine Rolle mehr. Gerade deshalb wird aber auch einem Aufheizen des Ionenstrahls durch *intra-beam-scattering* nicht entgegengewirkt, was wiederum zu einer Verbreiterung der Spektren führt. Um gleichzeitig beide Probleme in den Griff zu bekommen, hat sich als Meßprinzip das sogenannte Wobbeln etabliert. Zu jedem Meßschritt an einer bestimmten Relativenergie werden nach einer gewissen Verweildauer die Elektronen auf Kühlpotential gebracht, um die gute Ionenstrahlqualität zu erhalten. Damit man vernünftige Zählraten erhält, ohne allzu große Einbußen



**Abb. 3.3:** Vereinfachte Darstellung der Hochspannungsbeschaltung des Elektronenkühlers. Das Plattformpotential setzt sich aus den Spannungsbeiträgen des über einen  $5\text{ M}\Omega$  Widerstand stabilisierten Hauptnetzgeräts und des schnellen HV-Verstärkers zusammen. Mit der Plattform verbunden sind die Kathode und ein Stromnetzgerät, welches über den Kollektor den Elektronenstrom im Elektronenkühler nachliefert. Über digitale Glasfaserleitungen werden die Geräte im Hochspannungskäfig (durch die gepunktet umrahmte Fläche angedeutet) angesteuert bzw. ausgelesen.

in der Energieschärfe in Kauf nehmen zu müssen, hat sich als sinnvoller Kompromiß eine Meßdauer von 5 ms herausgestellt. Eine Kühlzeit von 30 ms ist in der Regel ausreichend. Beim nächsten Meßschritt wird eine neue Relativenergie eingestellt, so daß nach etlichen dieser Minizyklen ein komplettes Energieintervall durchgestimmt ist.

Danach wird der Ring erneut mit Ionen gefüllt und der Scanablauf wiederholt. Dies geschieht so lange, bis die Statistik als ausreichend befunden wird. Da mit Erhöhung der Spannung auch der Elektronenstrom zunimmt ( $I_e \propto U_{kath}^{3/2}$ ) und dadurch der Restgasdruck durch unterschiedlich starkes Ausgasen am Kollektor spannungsabhängig ist, wird in der Regel zur Bestimmung der Untergrundrate innerhalb jedes Minizyklus die Relativenergie zusätzlich für einige ms auf einen hohen Wert gesetzt, für den eine vernachlässigbare RR-Rate (radiative Rekombination) und keine DR-Resonanz erwartet wird. Somit kann man für jede einzelne Meßenergie die zugehörige Untergrundrate ermitteln unter der Annahme, daß sich innerhalb der Sprungzeit von der Meß- zur Referenzenergie der Druck nicht nennenswert ändert. Im Experiment steuert den Wobbelzyklus ein spezielles Softwarepaket, Cyril\_NG [31], welches sowohl die Spannungseinstellungen übernimmt als auch sämtliche Meßparameter in einer Computerdatei ablegt.

## 3.4 Bestimmung der Schwerpunktsenergie

Im nichtrelativistischen Fall gilt für die Relativgeschwindigkeiten zwischen Elektronen und Ionen:

$$\vec{v}_{rel} = \vec{v}_e - \vec{v}_i \quad (3.3)$$

Unter idealen Bedingungen sind Ionen- und Elektronengeschwindigkeiten zueinander parallel, so daß — mit Ausnahme des Ein- und Austrittsbereichs des Elektronenstrahls in das Strahlrohr — für die Schwerpunktsenergie keine Winkelabhängigkeiten bestehen. Dabei kann man näherungsweise aufgrund der viel größeren Masse der Ionen das Ruhesystem der Ionen als Schwerpunktsystem annehmen. Die Kollisionsenergie besteht dann genau aus der kinetischen Energie der Elektronen in diesem Bezugssystem:

$$E_{rel} \approx \frac{m_e}{2} v_{rel}^2 \approx \left( \sqrt{E_e} - \sqrt{\frac{m_e}{m_i} E_i} \right)^2 = \left( \sqrt{E_e} - \sqrt{E_c} \right)^2 \quad (3.4)$$

Die Indizes der Laborenergien und Ruhemassen stehen jeweils für Elektronen ( $e$ ) bzw. Ionen ( $i$ ).  $E_c$  entspricht der Laborenergie der Elektronen bei Kühlspannung. Bei der Datenauswertung wird allerdings die exakte relativistische Kollisionsenergie verwendet [32].

Die Elektronenenergie im Laborsystem erhält man aus der angelegten Kathodenspannung, welche mit dem HV-Verstärker variiert werden kann. Hinzu kommt, daß aufgrund der Raumladung des Elektronenstrahls die Elektronen abhängig von ihrer Position innerhalb des Elektronenstrahls ein unterschiedlich reduziertes Beschleunigungspotential sehen. Nach Abzug des Raumladungspotentials erhält man die kinetische Energie der Elektronen im Laborsystem:

$$E_{e(lab)} = (U_{kath} - U_{ri}(r)) e. \quad (3.5)$$

### 3.4. Bestimmung der Schwerpunktsenergie

---

Das Raumladungspotential wird in Abhängigkeit vom Betragsabstand  $r$  von der Strahlmitte angegeben, wenn der Elektronenstrahl als zylindersymmetrisch angenommen wird. Weiterhin setzen wir die Elektronendichte als homogen über den gesamten Strahl verteilt voraus, was experimentell hinreichend erfüllt ist. Bei kollinear, zentriert überlagertem Ionen- und Elektronenstrahl in der Wechselwirkungszone reicht es aus, das Raumladungspotential, welches die Elektronen in der Strahlmitte sehen, zu bestimmen. Unter der Voraussetzung, daß der Ionenstrahldurchmesser deutlich kleiner ist als der des Elektronenstrahls, gilt [33]:

$$U_{rl} = \frac{n_e r_e^2}{4\epsilon_0} \left( 1 + 2 \ln \frac{r_{tube}}{r_e} \right) \quad (3.6)$$

Die Elektronendichte  $n_e$  hängt sowohl vom Elektronenstrom als auch von der Geschwindigkeit der Elektronen ab. Da die Geschwindigkeit über das tatsächliche raumladungskorrigierte Beschleunigungspotential bestimmt wird, muß Gleichung 3.6 iterativ gelöst werden. Dabei wird zunächst eine Elektronengeschwindigkeit aus der angelegten Kathodenspannung bestimmt. Das daraus ermittelte Raumladungspotential wird von der Kathodenspannung abgezogen. Aus dem neuen Wert erhält man wiederum die Elektronengeschwindigkeit, welche eine neue Raumladungskorrektur ermöglicht. In der Regel konvergiert das raumladungskorrigierte Potential nach einigen Iterationen zu einem Endwert innerhalb einer Genauigkeit von  $10^{-5}$ , was im übrigen wesentlich genauer ist als die obigen Annahmen rechtfertigen. Bei typischen Elektronenströmen von etwa 100 mA bei Expansion 9.6 und Beschleunigungsspannungen von  $-2$  kV trägt die Berücksichtigung der Raumladung zu einer Korrektur von bis zu 10 % der angelegten Kathodenspannung bei.

Zur Bestimmung der Relativenergie in den gemessenen Spektren wird zu jeder Messung eine statische Elektronenstrom- und Spannungskalibration durchgeführt, wobei statisch in diesem Zusammenhang bedeutet, daß das System mehrere Sekunden Zeit hat, die eingestellten Werte anzunehmen. Dabei kalibriert man die Stellbits des DAC, welcher den HV-Verstärker ansteuert, gegen die Ausgangsspannung eines präzisen ohmschen Gleichspannungsteilers, dessen Hochspannungsseite auf Plattformpotential liegt und dessen Teilverhältnis mit 1:6050 sehr genau bekannt ist. Zur Bestimmung der Raumladung wird zusätzlich der Elektronenstrom zur jeweiligen Spannung notiert.

Die statische Kalibrierung kann allerdings nur exakt sein, falls während der Messung bei gleichen Steuerbits Kathodenspannung und Elektronenstrom den statisch ermittelten Werten entsprechen. Da aufgrund von kapazitiv bedingten Spannungseinbrüchen am Kathodennetzgerät, die während der Spannungssprünge des HV-Verstärkers auftreten, die statischen Spannungswerte nicht erreicht werden, ist die aus der Kalibration ermittelte Relativenergie nur bis auf einige Prozent genau. Im Rahmen der hier vorgestellten Arbeit wurden deshalb sowohl eine Spannungs- als auch eine Strommessung

eingeführt, die eine schnelle und präzise Erfassung der aktuellen Kathodenspannung bzw. des aktuellen Elektronenstroms während der Messung ermöglichen.

### 3.5 Elektronenstrommessung

Seit kurzem kommt eine sehr präzise Elektronenstrommessung (ECURF3) zum Einsatz, die von W. Arnold vom Strahlencentrum der Universität Gießen entwickelt wurde. Herzstück der Meßeinrichtung ist eine Strom–Frequenzwandlereinheit, welche eine zum Elektronenstrom proportionale Spannungsfrequenz ausgibt. Die Ansteuerung und das Auslesen des Strommessers erfolgt über Lichtwellenleiter, so daß das eigentliche Meßgerät auf Plattformspannung betrieben werden kann. Der Elektronenstrom im Kühler, welcher vom Kollektorstromnetzgerät geliefert wird, wird annähernd verlustfrei und unter minimalem Potentialabfall ( $< 1 \text{ mV}$ ) in einen Leistungsoperationsverstärker in Gegenkopplungsschaltung eingespeist. Neun manuell umschaltbare Meßbereiche ermöglichen die Ausnutzung des optimalen Linearitäts– und Genauigkeitsbereiches des nachfolgenden temperaturgeregelten Spannungs–Frequenz–Wandlers über einen weiten Strombereich von  $0.15 - 1500 \text{ mA}$ . Die Ausgangsfrequenzen sind auf den Eingangstrom kalibriert. Mit den Umrechnungsfaktoren der jeweiligen Meßbereiche kann der Absolutwert des Elektronenstroms über die aufgezeichnete Ausgangsfrequenz bestimmt werden. Die Genauigkeit in allen Meßbereichen ist mit  $\Delta I/I = \pm 2 * 10^{-4}$  angegeben. Das Zeitverhalten der Schaltung ermöglicht mit Anstiegs– und Abfallzeiten von ca.  $25 \mu\text{s}$  schnelle Messungen, so daß im Wobbelscanbetrieb bei DR–Messungen eine verlässliche Strommessung zur Verfügung steht, welche für jeden einzelnen Meßschritt mitgeschrieben wird.

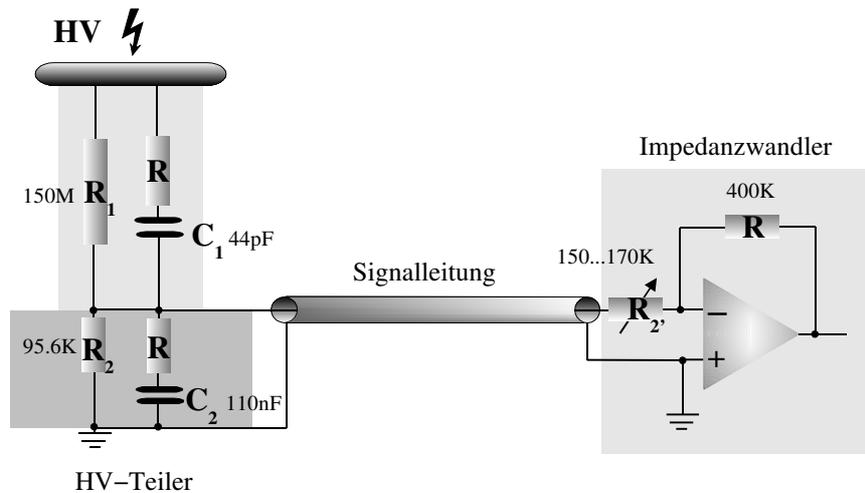
Indirekt kann man auch über die Messung des Elektronenstromes aus der bereits erwähnten Strom–Spannungsbeziehung in Elektronenkühlern die Kathodenspannung bestimmen [29]:

$$I_e = p \cdot U_{kath}^{3/2} \quad (3.7)$$

und damit relative Spannungsschwankungen mit guter Zeitauflösung verfolgen. Die Proportionalitätskonstante  $p$  wird als Perveanz bezeichnet und spiegelt die Feldverteilung innerhalb der Elektronenkanone wieder. Man erhält sie experimentell aus einem Fit der Elektronenstromkalibrierung.

### 3.6 Spannungsmessung

Zur Bestimmung der Schwerpunktsenergie wurde eine Messung der Kathodenspannung etabliert. Ein industriell angefertigter Breitband–Hochspannungsteiler (HVT 40 RCR) der Firma HILO–TEST ermöglicht die Messung von Wechselspannungen bis zu



**Abb. 3.4:** Hochspannungsmößnetzwerk bestehend aus einem ohmsch–kapazitiv gemischten Spannungsteiler und einem über ein abgeschirmtes Koaxialkabel an der Niederspannungsseite verbundenen Impedanzwandler, realisiert durch einen Operationsverstärker in Spannungsfolgerbeschtaltung. Das Stromsignal des Spannungsteilers wird dabei lastfrei am Ausgang des Impedanzwandlers als Spannungssignal ausgelesen.

30 kV und Gleichspannungen bis zu 40 kV mit einem Gleichspannungsteilerverhältnis von 2500 : 1. Die Anstiegszeit von 17 ns, entsprechend einer Bandbreite von 20 MHz, wurde vom Hersteller für eine angelegte Rechteckspannung von 200 V Amplitude angegeben.

Hochspannungsteiler [34] bestehen in der Regel aus hochohmigen Widerständen, um einer Erwärmung durch Leistungsverlust und damit einem spannungsabhängigen Teilverhältnis entgegenzuwirken. Rein ohmsche Spannungsteiler sind zur Messung hochfrequenter Wechselspannungen bzw. Sprungspannungen ungeeignet, da sowohl nicht verschwindende Streu- und Parallelkapazitäten aufgrund der räumlichen Ausdehnung des hochspannungsseitigen Widerstandes als auch kapazitive Belastungen durch die nachfolgende Meßeinrichtung die Sprungantwort verfälschen. In der Regel erreicht die Sprungantwort erst über einen langsamen, exponentiell abklingenden Anstieg die Ausgangsspannung. Darüber hinaus verursachen im Vergleich zu den Parallelkapazitäten große Streukapazitäten nichtlineare und frequenzabhängige Sprungantworten, da die Spannungsverteilung längs des Widerstandes dann nicht mehr linear ist.

Beim ohmsch–kapazitiv gemischten Spannungsteiler wird durch zusätzlich angebrachte Parallelkapazitäten in den Hoch- und Niederspannungssektionen der Einfluß der Streukapazitäten eliminiert.

Ersatzschaltbild 3.4 zeigt den prinzipiellen Aufbau. Bei angelegter Sprungspannung  $U_0$

### Kapitel 3. Experimenteller Aufbau

---

erhält man folgende zeitabhängige Sprungantwort:

$$u_2(t) = U_0 \frac{R_2}{R_1 + R_2} \left[ 1 + \frac{R_1 C_1 - R_2 C_2}{R_2 (C_1 - C_2)} \exp(-t/T) \right] \quad (3.8)$$

wobei die Zeitkonstante

$$T = \frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2} (C_1 + C_2) \quad (3.9)$$

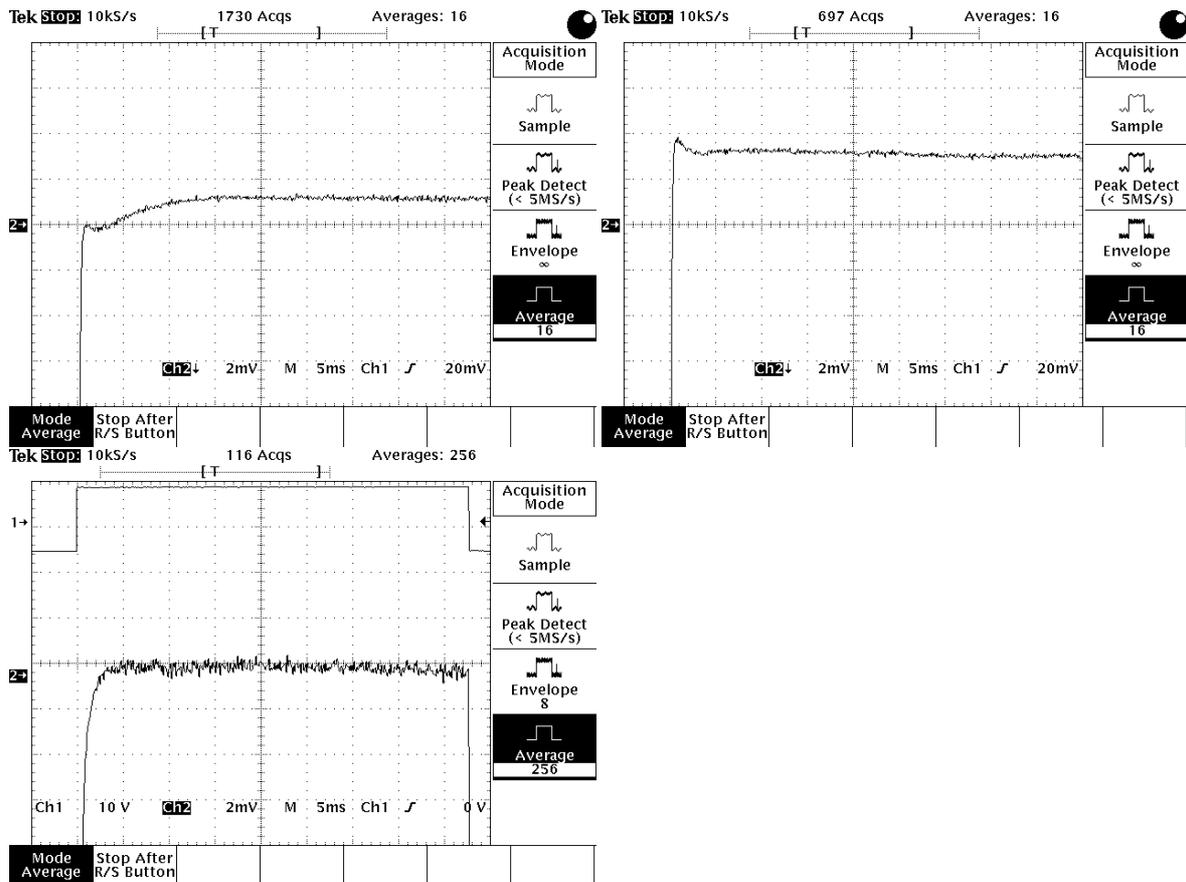
ist. Bei  $t = 0$  wird die Ausgangsspannung durch das unmittelbare Aufladen der Kondensatoren durch das kapazitive Teilverhältnis bestimmt. Im Grenzfall für  $t \rightarrow \infty$  strebt die Ausgangsspannung exponentiell dem durch das ohmsche Widerstandsverhältnis gegebenen Endwert zu. Gleichung 3.8 zeigt, daß bei gleichen Zeitkonstanten für die Umladung der Kondensatoren über die entsprechenden Widerstände im Hoch- und Niederspannungsteil die Zeitabhängigkeit verschwindet. Dies erreicht man dadurch, daß man für frequenzkompensierte Spannungsteiler gleiche Teilverhältnisse von kapazitiven und ohmschen Anteilen fordert.

Der HVT 40 RCR Hochspannungsteiler enthält in der hochspannungsseitigen Sektion einen präzisen Metallschichtwiderstand mit  $150 \text{ M}\Omega$  und einen dazu parallel geschalteten Hochspannungskondensator mit einer Kapazität von  $44 \text{ pF}$ . Zur Vermeidung von Spannungsspitzen ist zu der Kapazität ein Dämpfungswiderstand von  $1.65 \text{ k}\Omega$  in Reihe geschaltet. Der ohmsche Widerstand des Niederspannungsteils setzt sich zusammen aus Widerständen im Teilerfuß und einem variablen Widerstand zum Abgleich des Gleichspannungsteilerverhältnisses, der gleichzeitig als Eingangswiderstand für den Operationsverstärker des Impedanzwandlers dient. Als essentieller Bestandteil und zur Verbindung von Impedanzwandler und Spannungsteiler wird ein speziell dafür abgeglichenes Koaxialkabel benutzt. Die gedämpften Niederspannungskapazitäten bestehen aus parallel angeordneten RC-Gliedern mit einer Gesamtkapazität von  $110 \text{ nF}$ . Der Spannungsteiler ist demnach so dimensioniert, daß dessen Zeitkonstante mit ca.  $6.6 \text{ ms}$  kritischerweise genau im Meßfensterbereich liegt.

Bei Testmessungen des werkseitig abgeglichenen Teilers hat sich herausgestellt, daß ein rein ohmscher Abgleich der Teilverhältnisse durch Verändern des Eingangswiderstands am Impedanzwandler  $R_2'$  zwischen  $153$  und  $160 \text{ k}\Omega$  die geforderte relative Meßgenauigkeit von unter  $0.1\%$  innerhalb der Meßdauer von  $5 \text{ ms}$  nicht ermöglicht, s. Abb.3.5. Der Übergang von kapazitiver Messung zur ohmschen durch Umladung der Kondensatoren, verursacht innerhalb von  $5 - 10 \text{ ms}$  ein Unterschwingen der Sprungantwort bei  $159 \text{ k}\Omega$ , bzw. ein Überschwingen mit darauffolgendem leichten Unterschwingen bei  $153 \text{ k}\Omega$ .

Ein Zusätzliches RC-Glied, parallel geschaltet zu den gedämpften Kapazitäten im Teilerfuß, kompensiert bei entsprechender Dimensionierung dieses Zeitverhalten. Bei empirischen Untersuchungen, die im Rahmen dieser Arbeit getätigt wurden, zeigte sich, daß ein optimales Einschwingverhalten bei  $R = 4.8 \text{ M}\Omega$  und  $C = 1 \text{ nF}$  erzielt wird. Mit

### 3.6. Spannungsmessung



**Abb. 3.5:** Sprungantwort bei angelegter Rechteckspannung mit Amplitude von  $\pm 300\text{ V}$  bei verschiedenen Eingangswiderständen ( $R_2$ ) am Impedanzwandler, oben links:  $159\text{ k}\Omega$  und oben rechts:  $153\text{ k}\Omega$ . Die Amplitude am Ausgang des Impedanzwandlers beträgt  $150\text{ mV}$ . Die Höhe eines Kästchens entspricht  $1.3\%$  der Gesamtamplitude. Das Unterschwingverhalten der Sprungantwort innerhalb der ersten  $10\text{ ms}$  läßt sich durch ohmschen Abgleich am Niederspannungsteil nicht völlig kompensieren und produziert zusätzlich ein Überschwingen. Die untere Kurve zeigt die Sprungantwort nach Optimierung durch ein Zusatz  $RC$ -Glied im Niederspannungsteil. Da die Meßamplitude zusätzlich um einen Faktor  $9.3$  verstärkt wurde, entspricht nun ein Kästchen ungefähr  $0.13\%$  der Gesamtamplitude.

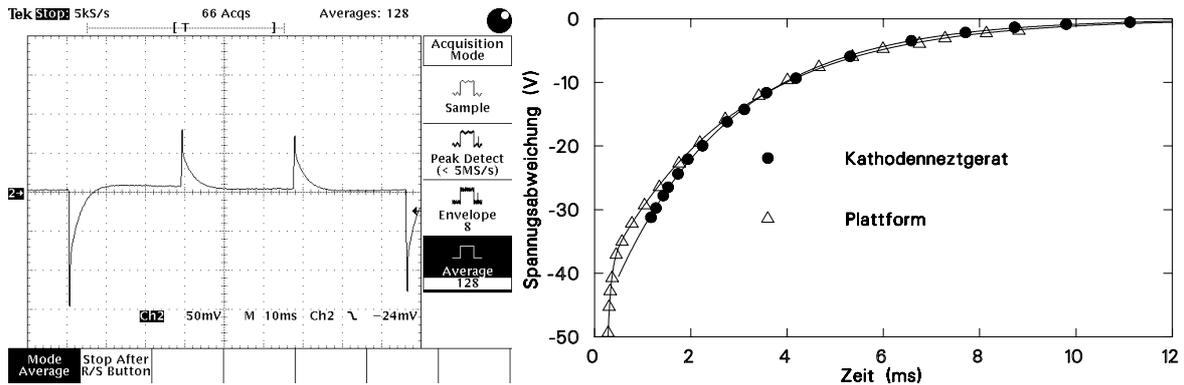
zunächst leicht verzögerter Anstiegszeit wird der Endwert dennoch schneller erreicht und weicht nach  $2\text{ ms}$  weniger als  $0.01\%$  von der Endspannung ab. Für Rekombinationsmessungen ist dies ein akzeptables Verhalten, da eine Verzögerung von  $1.5 - 2\text{ ms}$  nach dem Setzen eines neuen Spannungswerts vor Beginn der eigentlichen Meßphase toleriert werden kann.

### 3.7 Spannungsregelung

Aufgrund der erwähnten kurzzeitigen Spannungseinbrüche am Kathodennetzteil bei Spannungssprüngen mit dem HV-Verstärker wird die aus der Kalibrierung bestimmte Relativenergie während der Messung nicht erreicht. Abb. 3.6 links zeigt die zeitabhängige Potentialänderung am Kathodennetzteilausgang, die mit dem HV-Teiler HVT 40 RCR während des Wobbels gemessen wurde. Die Ausgangsspannung betrug  $-3.39$  kV. In wiederholter Abfolge wurde zunächst die Plattformspannung betragsmäßig um weitere  $1200$  V erhöht, um danach in zwei hintereinander folgenden  $600$  V Sprüngen zurück zur Ausgangsspannung zu gelangen. Die einzelnen Wobbelschritte werden begleitet von Spannungseinbrüchen bzw. -ausbrüchen am Kathodennetzgerätausgang, welcher während der gesamten Messung nominell eine konstante Spannung liefern sollte. Nach jeweils ungefähr  $10$  ms sind diese Störungen abgeklungen. Die Größe dieser Spannungsänderung beträgt zu Beginn  $5\%$  der Sprungamplitude und ist damit annähernd proportional zur Sprungspannung. Die Graphik in Abb. 3.6 rechts zeigt die Abweichung der gemessenen Spannungen von ihren asymptotischen Grenzwerten im Gleichspannungsfall, sowohl am Kathodennetzgerätausgang als auch an der Kathode auf Plattformpotential. Da beide Exponentialkurven sowohl größenmäßig als auch im Zeitverhalten übereinstimmen, kann man daraus schließen, daß der schnelle HV-Verstärker die nominelle Sprungspannung schon erreicht hat, während der Spannungseinbruch am Kathodennetzteil letztendlich den Gesamtspannungsverlauf an der Kathode bestimmt. Da in der Auswertung die statischen Spannungs- und Stromwerte zur Energiebestimmung verwendet werden, sind in der Regel die DR-Spektren im Schwerpunktsystem um  $2 - 3\%$  gestreckt. Deshalb wurde im Rahmen dieser Arbeit eine analoge Spannungsregelung [35, 36] entwickelt, deren Aufgabe es ist, durch kurzzeitiges Übersteuern der Sprungspannung den Potentialeinbruch am Kathodennetzgerät zu kompensieren. Hierbei ist die Etablierung einer präzisen Spannungsmessung, wie im vorhergehenden Abschnitt beschrieben, eine Grundvoraussetzung für eine genaue automatische Spannungsregelung. Prinzipiell besteht die Aufgabe einer Regelung darin, durch fortlaufende Messung einer Regelgröße (Istwert) und Vergleich mit einer Führungsgröße (Sollwert) die Regeldifferenz aus Regelgröße und Führungsgröße auszugleichen. Dies findet innerhalb eines geschlossenen Kreises, dem sogenannten Regelkreis statt. Im Gegensatz zu einer reinen Steuerung bei der nur ein Sollwert gesetzt wird, ist die Regelung in der Lage, Störungen entgegenzuwirken, welche den Istwert beeinflussen.

Im Experiment entspricht das Setzen von gewünschten Spannungswerten während des Wobbels einer Steuerung, während der Spannungseinbruch die Störgröße darstellt. Eingangsgröße eines Regelkreises ist die sogenannte Stellgröße, wie sie auch bei der normalen Steuerung eingesetzt wird. Im Fall des Wobbels setzt sich die Stellgröße, welche die Gesamtspannung der Plattform steuert, zusammen aus der analogen Steu-

### 3.7. Spannungsregelung



**Abb. 3.6:** Zeitliche Variation der Ausgangsspannung des Kathodennetzteils während des Wobbelns, linkes Bild. Die rechte Graphik vergleicht den Verlauf der Gesamtspannung an der Plattform mit dem der Ausgangsspannung am Kathodennetzteil während eines Spannungssprungs mit dem HV-Verstärker. An der Ordinate sind die jeweiligen Spannungsabweichungen der aktuellen Spannungen von ihren statischen Werten im DC-Fall aufgetragen.

erspannung einer DAC-Karte, welche die Kühlspannung am Kathodennetzteil einstellt und aus der Steuerspannung einer zweiten DAC-Karte, welche die Sprungspannung am HV-Verstärker setzt. Bei der Regelung werden beide DAC-Spannungen zunächst im Addierer auf das richtige Verhältnis zueinander skaliert und danach addiert. Durch Subtrahieren des Signals aus der Kathodenspannungsmessung von der Summe der beiden DAC-Spannungen im Vergleich (auch hier muß die entsprechende Skalierung erfolgen) wird die Regeldifferenz ermittelt. Über einen Verstärker wird die Regeldifferenz als neue Stellgröße bzw. Regelgröße an die Regelstrecke — in diesem Fall über eine analoge Lichtleiterstrecke an den HV-Verstärker im Hochspannungskäfig — übertragen. Im Gegenkopplungsmodus schwingt sich die Hochspannung so lange ein, bis die Regelabweichung verschwindet

Eine solche Spannungsregelung wurde realisiert mit einem sogenannten PID-Regler, der aus elektronischen Operationsverstärkern aufgebaut ist. Addier-, Vergleichs- und Verstärkungssektion befinden sich gemeinsam auf einer Platine, deren Spannungsversorgung über ein NIM-Einschubgehäuse erfolgt, s. Abb. 3.7. Die Verstärkersektion setzt sich zusammen aus drei parallelen Operationsverstärkern, die als Proportionalverstärker (P), Integrierer (I) und Differenzierer (D) beschaltet sind. Bei einer reinen Proportionalverstärkung erhält man auch im eingeschwungenen Zustand des Systems eine bleibende Regelabweichung, die umso größer wird, je kleiner die Verstärkung ist. Die maximal mögliche Verstärkung wird erreicht, wenn auch Anteile oberhalb einer kritischen Frequenz verstärkt werden, deren Phasennacheilung  $180^\circ$  übersteigt und durch Mitkopplung eine Dauerschwingung erzeugen. Da die konstante Regelabweichung jedoch keine hochfrequenten Anteile besitzt, wird parallel zur Proportionalverstärkung



quenzgang der komplexen Verstärkung des PID-Reglers:

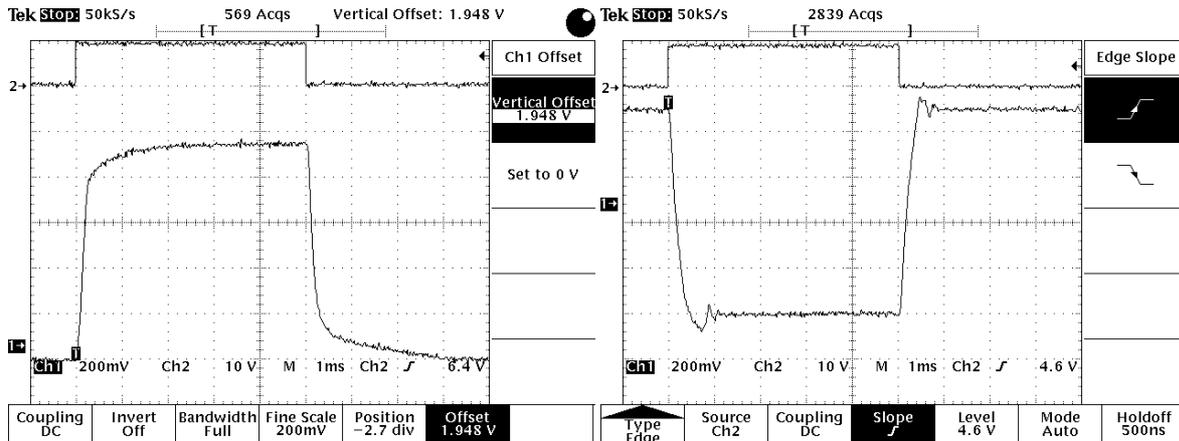
$$A(i\omega) := \frac{U_a(i\omega)}{U_e(i\omega)} = - \left[ \frac{R_{P_1}}{R_{P_2}} + \frac{1}{i\omega \cdot T_I} + \frac{i\omega \cdot T_{D_1}}{1 + i\omega \cdot T_{D_2}} \right] \quad (3.10)$$

Die drei unabhängigen Terme repräsentieren die Proportional-, Differenzier- und Integrierverstärkung. Dabei sind  $T_I = R_I \cdot C_I$  und  $T_{D_{1,2}} = (R_{D_{1,2}} \cdot C_D)$  die Zeitkonstanten des Integrier- bzw. Differenziergliedes. Die Dimensionierung der PID-Verstärkung und deren Zeitkonstanten hängen vom Zeitverhalten des gesamten Regelkreises ab.

Normalerweise sind nicht alle Daten der Regelstrecke bekannt, da diese entweder schwer zu messen sind oder deren genaue Berechnung zu komplex wird. Die additive Schaltung des PID-Reglers eignet sich ideal zur experimentellen Einstellung des Regelkreises ohne genaue Kenntnis aller Streckenparameter, da alle drei Elemente unabhängig voneinander einstellbar sind. Die einzelnen Zeitkonstanten bzw. Verstärkungen werden dabei über verstellbare Widerstände (Potentiometer), mit denen die Operationsverstärker beschaltet sind, variiert. Als Stellgröße verwendet man man eine Rechteckspannung, welche die Sprungspannung am HV-Verstärker einstellt. Zunächst werden die Beiträge der Integrier- und Differenzieranteile minimiert. Die Proportionalverstärkung wird solange erhöht bis die Sprungantwort in Schwingung gerät. Durch Vergrößern der Zeitkonstante des Differenziergliedes wird die Schwingung gedämpft. Zuletzt wird der Integrierbeitrag hinzugenommen. Dabei wird durch Verringern der Integrationszeit die Einschwingdauer optimiert. In der Regel ist beim ideal eingestellten PID-Regler die Zeitkonstante des Integrierers ungefähr zehnmal größer als die des Differenziergliedes.

Da bei kleinen Spannungssprüngen am HV-Verstärker der Endwert schneller erreicht wird als bei großen, weist die Regelstrecke ein von der Amplitude abhängiges Zeitverhalten auf. Daher müßten die Regelparameter für kleine Spannungen anders eingestellt sein als für große, was mit einer analogen Regelschaltung nicht ohne weiteres zu realisieren ist. Darüberhinaus sieht der Regler zu Beginn eines Sprunges aufgrund der Verzögerungszeit in der Regelstrecke eine extreme Regelabweichung, so daß die PID-Sektion nicht nur regeln sondern auch den gesamten Spannungshub aufbringen muß. Da aufgrund des Wobbelalgorithmus die Zeitpunkte und Amplituden der Spannungssprünge von vornherein bekannt sind, wird der Regler durch eine Störgrößenaufschaltung (*feed forward*) ergänzt. Dieses Prinzip findet z.B. auch Verwendung in der technischen Realisierung der automatischen Lenkung selbststeuernder Fahrzeuge [37]. Dabei wird das Stellsignal am Eingang des Reglers verlustfrei abgezweigt und über einen Operationsverstärker, der die PID-Sektion überbrückt, in *feed-forward* Schaltung auf das Ausgangssignal addiert. In der Folge setzt nun ein Großteil der Spannungsänderung ohne Verzögerung ein und der PID-Regler hat in der Sollzeit eine viel geringere Regelabweichung auszugleichen. Dadurch bleibt über einen großen Bereich von Spannungssprüngen die optimale Regeleinstellung erhalten. Hinzu kommt noch, daß sich die Einstellzeiten verkürzen, s. Abb. 3.8.

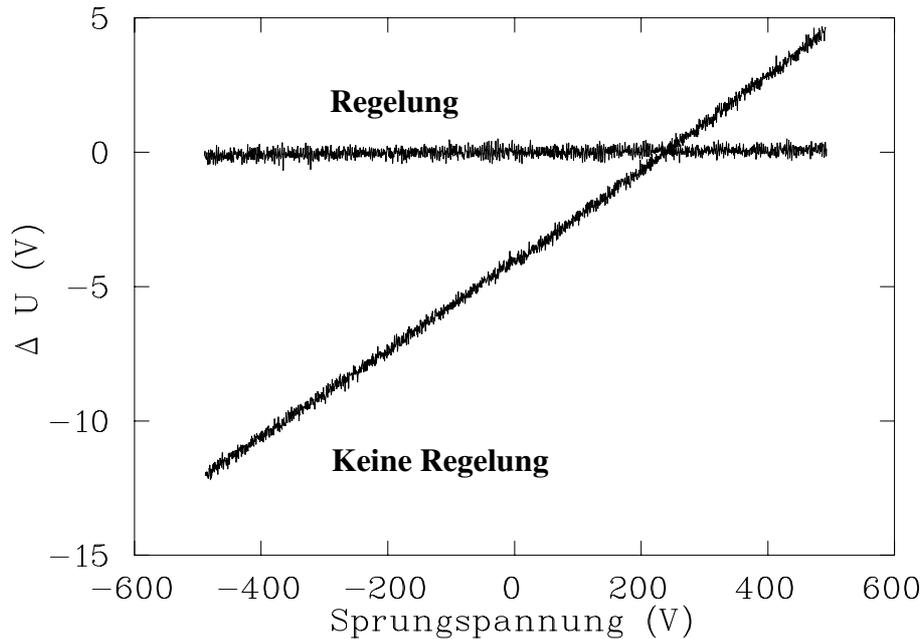
## Kapitel 3. Experimenteller Aufbau



**Abb. 3.8:** Sprungantworten mit und ohne Regelung. Auf einer Plattformspannung von  $-2\text{ kV}$  wird eine Rechteckspannung von ca.  $900\text{ V}$  Amplitude und  $10\text{ ms}$  Periodendauer durch eine analoge Ansteuerung des HV-Verstärkers aufmoduliert. Die linke Oszilloskopaufnahme zeigt den Spannungsverlauf im normalen Steuerungsfall. Während der gesamten Verweildauer auf den beiden Potentialstufen steigt bzw. fällt die Spannung an der Plattform. Der Wert im Gleichspannungsfall wird daher nicht erreicht. Die rechte Aufnahme zeigt den zeitlichen Verlauf des Spannungshubes mit der Regelung, bestehend aus PID-Verstärkung und zusätzlicher Feedforwardschaltung. Zur Ergänzung sind in beiden Aufnahmen über einen zweiten Oszilloskopeingang die entsprechenden Ansteuerspannungen oberhalb der Sprungantworten zu sehen. Daß der Spannungsprung mit Regelung im Gegensatz zu dem ohne Regelung scheinbar abwärts führt, liegt darin begründet, daß in dem Regelfall ein invertierender Ausgang benutzt wurde. Offensichtlich bewirkt die Regelung, daß schon nach etwas mehr als einer Millisekunde die angesteuerten Spannungen konstant auf ihren Gleichspannungswerten bleiben.

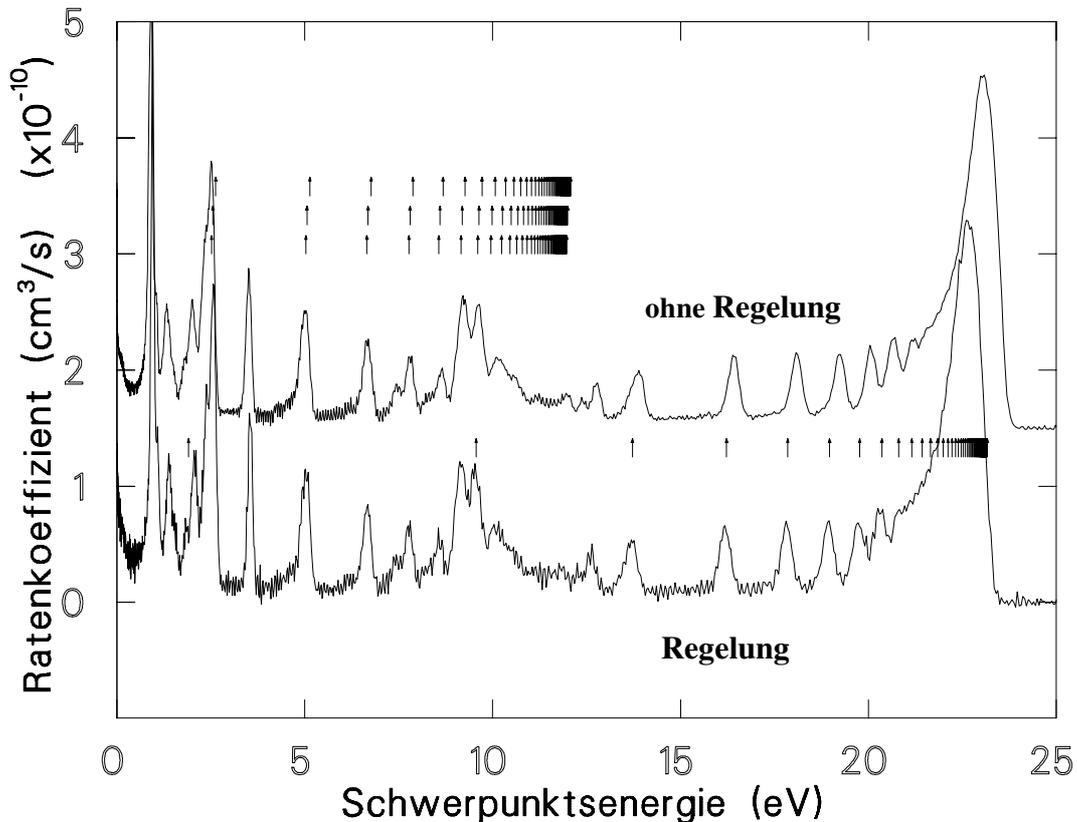
DR-Messungen mit Spannungsregelung haben gezeigt, daß die im Gleichspannungsfall kalibrierte Spannungseichung ausreicht, die Relativenergien der Rekombinationsspektren bis auf  $\lesssim 0.1\%$  Genauigkeit zu bestimmen, wie an der Graphik in Abb. 3.9 zu sehen ist. Abb. 3.10 zeigt den ermittelten Ratenkoeffizienten aus einer DR-Messung an berylliumähnlichen  $\text{F}^{5+}$  Ionen in Abhängigkeit der Relativenergie, welche mittels der herkömmlichen Methode aus der statischen Kalibration bestimmt wird. Der Vergleich zweier Spektren — eines im Steuerungsfall, das andere im Regelungsfall aufgenommen — zeigt, daß im letzteren Fall die Energiepositionen der gemessenen DR-Resonanzen besser mit den zugehörigen Rydbergserien übereinstimmen. Die entsprechenden Anregungsenergien von  $2s^2 \rightarrow 2s2p$  wurden der NIST-Datenbank entnommen und in die Rydbergformel eingesetzt. Im Steuerungsfall ist das Spektrum in der zweiten Hälfte um  $2.5\%$  zu höheren Energien hin verschoben, während sich die Situation im Bereich kleinerer Relativenergien umkehrt und die Resonanzen zu niedrig liegen.

Dieses Verhalten liegt darin begründet, daß bei der in diesem Fall verwendeten Wobbelabfolge zunächst die Referenzmessung bei großer Relativenergie durchgeführt wurde,



**Abb. 3.9:** *Relativspannungen zwischen Meßenergie und Kühlenergie von bis zu  $\pm 500$  V im Laborsystem wurden während des Wobbelns bei DR-Messungen an  $F^{5+}$  sowohl mit normaler Ansteuerung als auch unter Verwendung der Regelung gemessen. Der Wobbelalgorithmus war so eingestellt, daß während eines Minizyklus zunächst ein Sprung um ca. 565 V auf die Referenzenergie durchgeführt und danach die aktuelle Meßenergie eingestellt wurde, um anschließend auf die Kühlenergie bei Relativspannung 0 V zu gelangen. Die Graphik zeigt die Abweichung der gemessenen Spannungssprünge von den Sollwerten, aufgetragen über die im Gleichspannungsfall ermittelten Relativspannungen. Die konstante Kurve bei  $\Delta U = 0$  V repräsentiert die Meßdaten unter Verwendung der Regelung. Die zweite Kurve mit einer deutlichen Steigung zeigt die Spannungsabweichungen im normalen Steuerungsfall.*

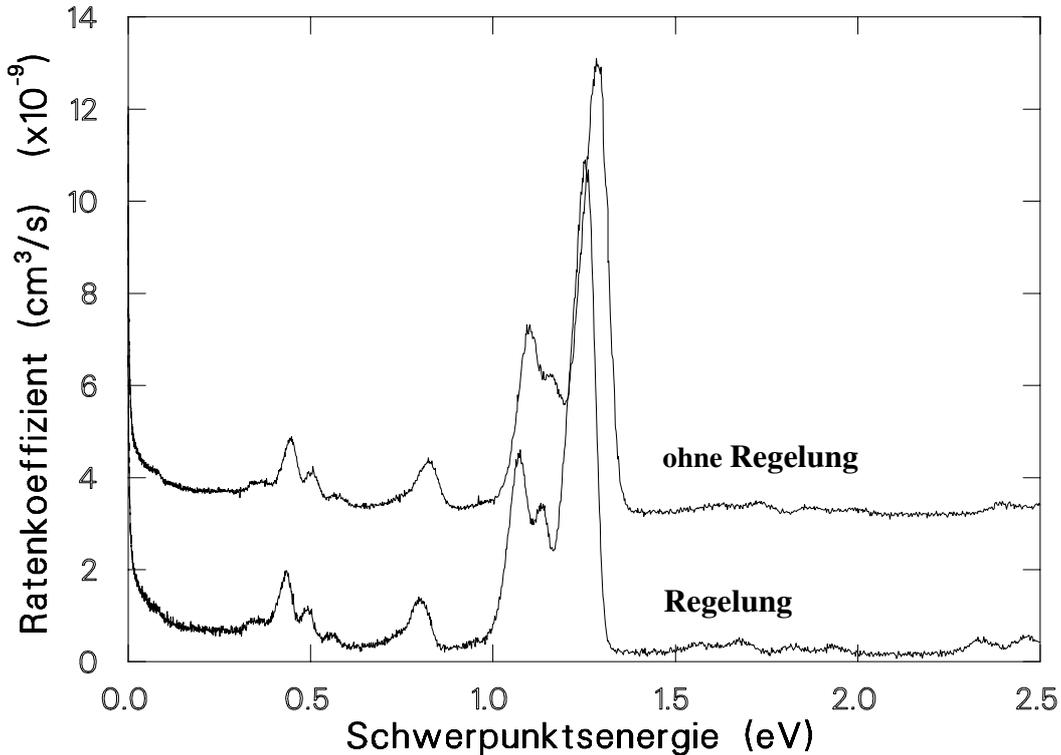
gefolgt von der eigentlichen Messung, während die Kühlung im Anschluß daran erfolgte. Bei hohen Meßenergien wird im Laborsystem die Sollspannung besser erreicht, da sich nach dem zuvor erfolgten Sprung zur Referenzspannung der Spannungseinbruch teilweise erholt hat und der Sprung zur Meßenergie dann nur noch eine kleine Spannungsdifferenz ausmacht. Der große Abstand zur Kühlspannung bewirkt jedoch, daß die eigentliche Relativenergie zu klein wird, was bei der Auswertung zu einem zu höheren Energien hin verzerrten Spektrum führt. Bei kleinen Meßenergien nähert sich die Kühlspannung zwar der Sollkühlspannung im statischem Fall an, jedoch liegt die Spannung bei Messung aufgrund der großen Differenz zu der Referenzspannung über der Sollmeßspannung, so daß die aktuelle Relativenergie zu groß wird und im ausgewerteten Spektrum die Resonanzen zu kleinen Schwerpunktsenergien hin verschoben sind.



**Abb. 3.10:** Vergleich von Regelung und Steuerung im Experiment. Der Plot zeigt die Ratenkoeffizienten von  $F^{5+}$  in Abhängigkeit der Relativenergie. Das untere Spektrum wurde unter Anwendung der Regelung aufgenommen. Die obere Kurve zeigt das Spektrum, aufgenommen mit der herkömmlichen Steuerung. Zum besseren Vergleich wurde sie mit einem Offset versehen. Die senkrechten Pfeile markieren die Lagen der DR-Resonanzenergien die aus der Rydbergformel gewonnen wird. Mit Regelung wird eine sichtbare Verbesserung der Resonanzlagen erzielt.

Aus den Daten der Elektronenstrommessung und der Spannungsmessung lassen sich unabhängig voneinander die tatsächlichen Relativenergien, die während der Messung im Steuerungsfall auftreten, ermitteln. In beiden Fällen erzielte man eine Übereinstimmung mit dem unter Regelungsbedingungen aufgenommenen Spektrum. Darüber hinaus ergaben auch die Auswertungen der Spannungs- und Elektronenstrommessung bei der Regelung ein konsistentes Bild.

Die starke räumliche Trennung zwischen den Quellen für Ansteuerspannungen, dem Meßplatz, dem HV-Verstärker und der eigentlichen Regelung dehnen den gesamten Regelkreis auf über 20 m aus und lassen ihn somit anfällig für Störeinflüsse werden, die sich negativ auf das Regelsignal auswirken können. Die Umgebung des TSR weist aufgrund der hohen Anzahl von Netzgeräten und HF-Sendern eine hohe Dichte an elek-



**Abb. 3.11:** DR-Spektrum von berylliumähnlichem  $\text{Fe}^{22+}$  aufgenommen bei niedrigen Relativenergien. Die untere Kurve zeigt das Ergebnis mit Regelung, die obere mit einem Offset versehen das Spektrum ohne Regelung.

tromagnetischen Störsignalen auf, die über die langen Signalleitungen aufgenommen werden können. Diese Störungen können abhängig von ihrem Entstehungsort deutlich verstärkt werden und in Form von erhöhtem Rauschen zur Verschlechterung des Regelsignals beitragen. Das gleiche gilt auch für nicht ausreichend beseitigte Erdungsschleifen. Außerdem wird ein konstantes Rauschen auf dem Regelsignal umso kritischer, je größer die Verstärkung am HV-Verstärker eingestellt ist.

So haben Messungen an berylliumähnlichem  $\text{Fe}^{22+}$  ergeben, daß für den Regelungsfall bei Verstärkungsfaktor 100 am HV-Verstärker die Energieauflösung schlechter wird als im Steuerungsfall. Bei einer Verstärkung von 20 wird die Auflösung vergleichbar, s. Abb. 3.11.

Die Energieauflösung eines Rekombinationsspektrums ist dann durch die Regelung begrenzt, wenn das Rauschen auf dem Regelsignal eine Resonanzverbreiterung in der Größenordnung der elektronentemperaturbedingten Resonanzbreite bewirkt. Die Suche nach Rauschquellen im Regelkreis und deren Unterdrückung sind derzeit Gegenstand weiterer Untersuchungen.

### 3.8 Ratenkoeffizient

Nachdem die Bestimmung der Relativenergie geklärt worden ist, soll im folgenden auf die Auswertung der direkt aus dem Experiment erhaltenen Rohdaten eingegangen werden. Die am Detektor gemessenen Rekombinationsraten müssen dabei auf eine universelle Größe reduziert werden, die von den spezifischen Gegebenheiten unseres Experiments am TSR unabhängig wird. Aus der Definition des totalen Wirkungsquerschnitts bei Elektron–Ion Streuprozessen,

$$\sigma := \frac{\text{Zahl der Reaktionen pro Zeiteinheit}}{\text{Zahl der Ionen} \times \text{Zahl der Elektronen pro Flächeneinheit pro Zeiteinheit}} \quad (3.11)$$

ergibt sich mit der Rekombinationsrate  $R$ , der homogenen Elektronendichte im Kühler  $n_e$  und der Anzahl der Ionen im Ring  $N_i$  für den Wirkungsquerschnitt im Schwerpunktsystem:

$$\sigma = \frac{R}{N_i \cdot n_e \cdot v_{rel} \cdot \xi} \cdot \gamma^2 \quad (3.12)$$

wobei  $\xi$  als das Verhältnis aus Länge der Wechselwirkungszone und Ringumfang, die Anzahl der Ionen im Ring auf die Wechselwirkungszone normiert. Die Anzahl der Ionen im Ring erhält man aus dem gemessenen Ionenstrom  $I_i$  mit  $N_i = I_i U_{TSR} / v_i q_i$ , wobei  $U_{TSR}$  der Ringumfang und  $v_i$  und  $q_i$  Ionengeschwindigkeit und Ionenladung sind. Die Ionengeschwindigkeit läßt sich aus der Ionenenergie entnehmen. Der Zeitdilationsfaktor  $\gamma$  berücksichtigt die Transformation vom Laborsystem ins Schwerpunktsystem. Die Relativgeschwindigkeit zwischen Ionen und Elektronen ist durch  $v_{rel} = v_i - v_e$  gegeben, mit  $v_e$  als Elektronengeschwindigkeit.

Da die gemessene Rate eine Mittelung über die Geschwindigkeitsverteilung der Elektronen im Schwerpunktsystem enthält, wird als zusätzliche Größe der Ratenkoeffizient  $\alpha$  eingeführt, der einen unmittelbaren Zusammenhang zwischen Messung und Theorie darstellt:

$$\alpha(E_{rel}) := \langle \sigma(E_{rel}) v_{rel} \rangle = \frac{R_{exp}(E_{rel})}{N_i \cdot n_e \cdot \xi} \cdot \gamma^2 \quad (3.13)$$

wobei  $R_{exp} = \int R(v) f(\vec{v}) d^3 v$  ist mit  $f(v)$  als Geschwindigkeitsverteilung der Elektronen [38, 39, 40]. Aus der Messung des Elektronenstroms erhält man die Elektronenstromdichte  $n_e$  und aus dem gemessenen Ionenstrom, der Ionenenergie und der Ladung die Anzahl der Ionen  $N_i$  im Speicherring. Die Rekombinationsrate läßt sich somit auf den Wert des absoluten Ratenkoeffizienten normieren.

Die am Detektor gezählte Rate setzt sich zusammen aus der Rekombination der Ionen mit den freien Elektronen des Elektronenkühlers und dem Elektroneneinfang aus Stößen mit dem Restgas. Hierzu wird zu jedem Meßschritt eine Untergrundrate bei meist hohen Relativenergien aufgenommen. Unter der Annahme, daß sich die Restgas-

rate  $R_{gas}$  zwischen Messung und Referenz nicht ändert, gilt mit Formel 3.12:

$$\begin{aligned} R(E_{mess}) &= \alpha(E_{mess}) n_e(E_{mess}) N_i \xi \gamma^{-2} + R_{gas} \\ R(E_{ref}) &= \alpha(E_{ref}) n_e(E_{ref}) N_i \xi \gamma^{-2} + R_{gas} \end{aligned} \quad (3.14)$$

Um den vom Untergrund bereinigten Ratenkoeffizienten  $\alpha(E_{mess})$  zu erhalten, werden die beiden Gleichungen voneinander abgezogen:

$$\alpha(E_{mess}) = \frac{R(E_{mess}) - R(E_{ref})}{n_e(E_{mess}) N_i \xi \gamma^{-2}} + \alpha(E_{ref}) \frac{n_e(E_{ref})}{n_e(E_{mess})} \quad (3.15)$$

Für DR-Messungen sollte die Referenzenergie so gewählt werden, daß der Ratenkoeffizient  $\alpha(E_{ref})$  minimal wird und somit praktisch gleich Null gesetzt werden kann. Ist dies nicht möglich, muß  $\alpha(E_{ref})$  entweder durch einen theoretischen Wert ersetzt werden oder aus einer anderen Messung mit einem verlässlichen Untergrundabzug bei  $E_{ref}$  entnommen werden.

## 3.9 Fehlerdiskussion

Wegen der recht hohen Elektronen- und Ionenströme und der damit verbundenen hohen Zählrate ist der statistische Fehler bei der Bestimmung des Ratenkoeffizienten wesentlich kleiner als die Ungenauigkeiten, die durch systematische Fehler entstehen. Im Folgendem wird auf die einzelnen Fehlerquellen eingegangen.

### 3.9.1 Ratenkoeffizient

Wie im vorhergehenden Abschnitt beschrieben, gehen in die Bestimmung des Ratenkoeffizienten der Ionenstrom, die Ionenenergie, die Elektronendichte und die relative Länge der Wechselwirkungszone zum Ringumfang sowie die Detektoreffizienz ein. Bei ausreichendem Ionenstrom ( $I_i > 30 \mu A$ ) wird der in Abschnitt 3.1 beschriebene Gleichstromtransformator zur Strommessung herangezogen. Der sich durch langsame Nullpunktsdriften um einige  $\mu A$  im Zeitbereich von Stunden ändernde Nulloffset wird in angemessenen Zeitabständen durch Nullstrommessungen bestimmt. Dabei wird die Ungenauigkeit der Ionenstrommessung durch diese Schwankungen größtenteils auf den Zeitbereich eines Meßzyklusses beschränkt. Eine weitere Unsicherheit liegt in der Bestimmung des absoluten Ionenstromes während der Ionenstromkalibrierung. Dabei werden von Hand gleichzeitig die Ionenstrommeßwerte und die entsprechenden für die Datenaufnahme verwendeten VFC-Werte aufgezeichnet, während der Ionenstrom aufgrund seiner endlichen Lebensdauer im Ring abnimmt. Insgesamt läßt sich der Ionenstrom bis auf eine systematische Abweichung von 10 – 15 % bestimmen.

Die exakte Bestimmung des Elektronenstroms wurde durch den Einsatz des neuen Strommeßgeräts (s. Kap. 3.5) verbessert, indem dessen Aufzeichnungen während der Messung zum einen die statische Elektronenstromkalibrierung überflüssig werden läßt und zum anderen Information über die Dynamik des Elektronenstroms während des Wobbels liefert. Des weiteren übertrifft die verbesserte Strommessung die Meßgenauigkeit des alten Strommeßgerätes, welches nur auf 1 % genaue Werte lieferte. Das elektronische Rauschen des Meßsignals mittelt sich über wiederholtes Messen an gleicher Stelle der Relativenergie heraus und trägt zum Gesamtfehler nur unwesentlich bei. Es bleibt daher nur noch eine Restungenauigkeit bedingt durch die nicht 100 %ige Verlässlichkeit in der Elektronenstrahldurchmesserabschätzung und der ungenauen Kenntnis über den Betrag des Verluststromes im Kühler. Insgesamt ist die Elektronenstromdichte in der Wechselwirkungszone bis auf einige Prozent genau bekannt.

Eine zusätzliche Fehlerquelle liegt in der nicht genauen Kenntnis der Länge der Wechselwirkungszone, die vor allem in den Bereichen der Ein- und Auslenkung des Elektronenstrahls in den Toroidsektionen zu winkelabhängigen Beiträgen von höheren Relativenergien führt. Eine iterative Entfaltung [41] dieser Toroidbeiträge reduziert die Restunsicherheit auf 5 %. In der gleichen Größenordnung liegt die Detektoreffizienz von  $> 95 \%$ . Der Fehler durch den Untergrundabzug ist bei niedrigen Relativenergien aufgrund des günstigen Signal-zu-Untergrund Verhältnisses vernachlässigbar und geht nur in seiner statistischen Abweichung in die Fehlerbewertung ein. Bei hohen Relativenergien ist durch Korrekturen des Untergrundabzuges mit einem Fehler von bis zu 10 % zu rechnen. Insgesamt wird der systematische Fehler des experimentell bestimmten Ratenkoeffizienten „konservativ“ mit 20 % angegeben. Dieser Fehler bezieht sich global auf ein gesamtes gemessenes Spektrum. Die relative Fehlerabweichung der Ratenkoeffizienten innerhalb eines Spektrums liegt deutlich unterhalb von 5 %.

### 3.9.2 Relativenergie

Der Einsatz von Elektronenstrommessung und Spannungsmessung während der Datenaufnahme beim Wobbeln hat einen enormen Fortschritt in der Bestimmung der Schwerpunktsenergie gebracht. Aufgrund des sorgfältigen Abgleichs des HV-Spannungsteilers kann die Abweichung der dynamischen Spannungsmessung von der Kalibrierung im statischen Fall auf  $< 0.1 \%$  angegeben werden. Zum Vergleich wurde einmalig ein zweiter frequenzkompensierter und kalibrierter Spannungsteiler eingesetzt, der von W. Arnold an der Universität Gießen entwickelt wurde. Die aus beiden Messungen ermittelten Absolutwerte der Spannungen wichen dabei weniger als 0.1 % voneinander ab.

Analog zur Strommessung mittelt sich das Rauschen des Meßsignals bei ausreichender Statistik heraus und trägt zur Fehlerbestimmung nicht bei. Als Restunsicherheit

bleiben daher nur noch sekundäre Fehlerquellen. So erfolgt die Bestimmung des Raumladungspotentials unter der Annahme, daß alle Restgasionen, die im Elektronenstrahl gefangen werden und somit das Raumladungspotential reduzieren könnten, von den sogenannten Clearingelektroden im Kühler entfernt werden. Die schon erwähnte Ungenauigkeit in der Bestimmung des Elektronenstromverlustes im Kühler führt auch zu einer Abweichung bei der Bestimmung der Raumladung. Ein endlicher Versatz zwischen Elektronen- und Ionenstrahl verschiebt die Ionen aus dem Minimum des Raumladungspotentials. Des weiteren kann die übliche Bestimmung der Ionenenergie über die Elektronenenergie bei Kühlspannung aufgrund unzureichender Kühlung zwischen den Meßschritten leichte Abweichungen in der Relativenergie verursachen. Bei sehr niedrigen Relativenergien kann es aufgrund von Mitzieheffekten zu Verzerrungen der Energieskala kommen. Nach Auswertung der Meßdaten erhält man Schwerpunktsenergien für die Seriengrenzen der DR-Rydbergserien, die weniger als 0.5% Abweichung von den entsprechenden Anregungsenergien aus spektroskopischen Daten aufweisen.



# Kapitel 4

## Rekombinationsspektren Be-ähnlicher Ionen

### 4.1 $\text{Cl}^{13+}$

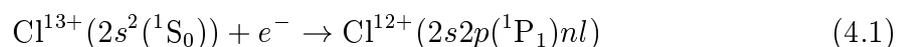
Rekombinationsmessungen an berylliumähnlichem  $\text{Cl}^{13+}$  wurden am TSR durchgeführt. Bei einer Ionenstrahlenergie von 140 MeV wurde zur Elektronenkühlung die entsprechende Beschleunigungsspannung am Elektronenkühler auf 2270 V eingestellt. Der Elektronenstrom betrug 50 mA bei einer Expansion von 9.6. Der maximal speicherbare Strahlstrom betrug  $700 \mu\text{A}$ . Die erzielte Lebensdauer von 90 s ermöglichte einen kompletten Energiescan je Injektion ohne nennenswerte Einbußen in der Zählrate. Der Spannungshub des HV-Verstärkers reichte über das gesamte Energieintervall aus, so daß der Ionenstrahl während der einzelnen Meßschritte zwischengekühlt werden konnte. Die Linienbreite der einzelnen Resonanzen sollte dadurch im wesentlichen nur von der Elektronentemperatur beeinflußt sein.

#### 4.1.1 Experimentelles Ratenkoeffizientenspektrum

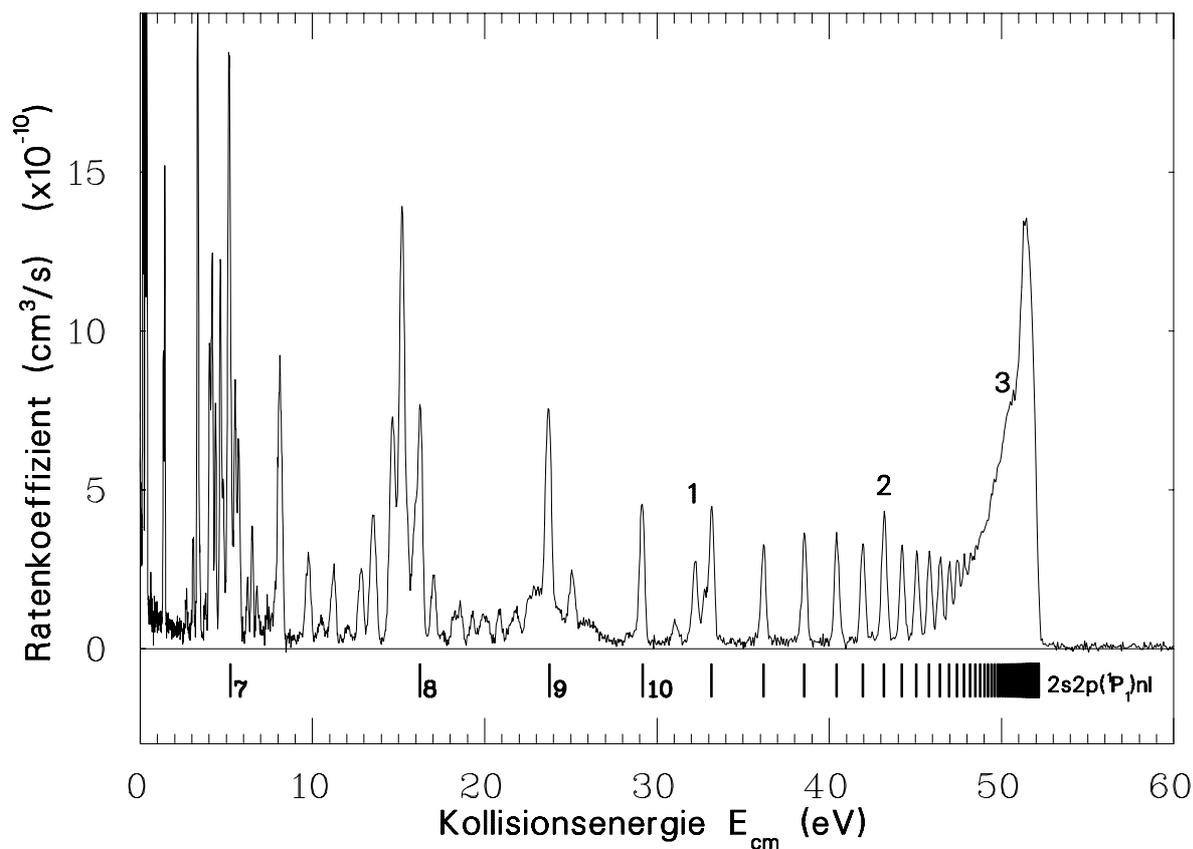
Abb. 4.1 zeigt das gemessene Rekombinationsspektrum. Der Ratenkoeffizient  $\alpha$  ist aufgetragen über der Kollisionsenergie  $E_{cm}$  im Elektron-Ion Schwerpunktsystem. Das Energieintervall erstreckt sich von Relativenergie Null bis zur höchsten Außenschalen  $\Delta N = 0$  Einfachanregung der Elektronenhülle des Targetions, siehe auch Tab. 4.1 .

#### Die $2s2p(^1P_1)nl$ DR-Serie

Das Aussehen des Spektrums wird dominiert von der stärksten DR-Resonanzserie, die aus der Rumpfelektronenanregung in das Singulett  $^1P_1$  Niveau folgt. Der Elektroneneinfang läuft dabei nach folgender Reaktionsgleichung ab:



Für jede einzelne  $n$ -Schale des Rydbergelektrons erscheint im Spektrum, falls die



**Abb. 4.1:** Das gemessene und vom Untergrund bereinigte Rekombinationsspektrum von  $\text{Cl}^{13+}$  als Ratenkoeffizient aufgetragen über die Kollisionsenergie im Schwerpunktsystem. Das Energieintervall deckt alle  $\Delta N = 0$  DR-Resonanzen ab. Unterhalb des Spektrums ist die DR-Rydbergserie für  $2s2p(^1P_1)nl$  geplottet.

$l$ -Aufspaltung kleiner ist als die Energieauflösung, eine Resonanz, deren Energielage genau der Differenz aus der Bindungsenergie des Targetions und der Bindungsenergie des rekombinierten, doppelt angeregten Ions entspricht. Zur Identifizierung dieser einzelnen Resonanzen sind zum Vergleich die  $n$ -abhängigen Energiewerte aus der Rydbergformel als senkrechte Striche unterhalb des Spektrums dargestellt:

$$E_n = E_\infty - \frac{(Z_{\text{eff}})^2 \cdot Ry}{n^2} \quad (4.2)$$

mit der Rydbergkonstanten  $Ry = 13.606 \text{ eV}$  und der Ionenladung  $Z_{\text{eff}} = 13$ . Als Seriergrenzen  $E_\infty$  werden die  $\Delta N = 0$  Anregungsenergien, die für  $\text{Cl}^{13+}$  aus spektroskopischen Daten entnommen wurden, eingesetzt, s. Tab. 4.1. Da bei  $\text{Cl}^{13+}$  die Autoionisationsraten deutlich höher sind als die radiativen Raten, folgt nach Beziehung 2.12, daß der Wirkungsquerschnitt hauptsächlich von der radiativen Rate bestimmt wird. In der LS-Kopplung ist der Übergang von  $2s2p(^1P_1)$  in den Grundzustand  $2s^2(^1S_0)$  ein er-

Konfiguration	Spinmultiplizität	LS-Level	Anregungsenergie (eV)	$n_{min}$
$2s2p$	Triplet	$^3P_0$	26.4657	10
		$^3P_1$	27.2592	10
		$^3P_2$	28.8462	9
	Singulett	$^1P_1$	52.1602	7
$2p^2$	Triplet	$^3P_0$	69.9370	6
		$^3P_1$	70.8682	6
		$^3P_2$	72.1601	6
	Singulett	$^1D_2$	79.2086	6
		$^1S_0$	96.5*	5

\* aus Atomstrukturrechnungen abgeleitet.

**Tab. 4.1:** Anregungsenergien aus spektroskopischen Daten (NIST data base) vom Grundzustand  $2s^2(^1S_0)$  in  $\text{Cl}^{13+}$  für  $\Delta N = 0$ . In der letzten Spalte stehen die Hauptquantenzahlen  $n_{min}$  für die niedrigsten autoionisierenden Rydbergorbitale.

laubter Dipolübergang. Darüber hinaus bildet dieser Dipolzerfall in der Spektroskopie aufgrund der Auswahlregel  $\Delta J = \Delta L = -1$  die Hauptlinie innerhalb eines Multipletts. Die Resonanzen lassen sich bis zur Hauptquantenzahl  $n = 24$  des Rydbergorbitals des eingefangenen Elektrons auflösen. Daran schließt sich ein unaufgelöster Resonanzcluster an, der zunächst mit der Energie ansteigt, um dann bei der Seriegrenze steil abzufallen.

Dieser Anstieg resultiert darin, daß innerhalb eines festen Energieintervalls  $\Delta E$  die Anzahl  $\Delta n$  der Rydbergzustände in der dritten Potenz von  $n$  zunimmt:

$$\Delta E \propto \frac{1}{n^3} \cdot \Delta n. \quad (4.3)$$

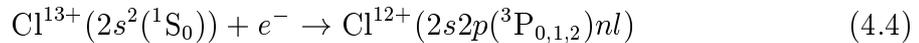
Nimmt man  $\Delta E$  als Energieauflösung im Spektrum an, so werden die Beiträge aller  $\Delta n$  Rydbergzustände aufsummiert. Die Abnahme des Ratenkoeffizienten mit  $1/\sqrt{E}$  wird durch die temperaturbedingte Zunahme von  $\Delta E$  mit  $\sqrt{E}$  wieder kompensiert, so daß der Anstieg der unaufgelösten Resonanzstruktur hauptsächlich durch die Zunahme der Rydbergzustände bestimmt wird.

Die Hauptquantenzahl, bei welcher der Abbruch der Rydbergserien aufgrund von Feldionisationen in den Magneten auf dem Weg von der Wechselwirkungszone zum Rekombinationsdetektor erfolgt, wurde mit  $n_{cut} = 72$  abgeschätzt. Dabei entspricht  $n_{cut}$  dem höchsten Rydbergniveau, welches unterhalb des Feldionisationspotentials liegt [40, 42].

Bereits hier fallen schon einige Unregelmäßigkeiten im Spektrum auf, Resonanzen und Resonanzerhöhungen, welche nicht Bestandteil der Singulett DR-Serie sein können. In Abbildung 4.1 sind diese mit Zahlen gekennzeichnet. Bei  $E_{cm} \approx 32$  eV (1) scheint auf den ersten Blick eine  $l$ -Aufspaltung der  $2s2p(^1P_1)nl$  DR-Resonanz als mögliche Erklärung für die beiden kleineren benachbarten Peaks gegeben. Innerhalb der  $2s2p(^1P_1)nl$  Serie ist jedoch beim nächstniedrigeren  $n = 10$  die  $l$ -Aufspaltung im Spektrum noch nicht aufgelöst zu sehen, obwohl die  $l$ -Aufspaltung zu kleineren  $n$  zunimmt. Somit scheidet diese Erklärung aus. Die nächste augenscheinliche Abweichung ist bei  $E_{cm} \approx 43$  eV (2) zu sehen. Im Gegensatz zum gesetzmäßigen Abfall der aufgelösten DR-Resonanzen mit zunehmender Energie und damit mit zunehmendem  $n$  ist hier eine Erhöhung innerhalb der Rydbergserie auszumachen. Zuletzt ist bei  $E_{cm} \approx 50$  eV (3) eine auffällige Schulter an der zuvor besprochenen Resonanzanhäufung zu erkennen. Da diese eher stetig mit  $E^3$  ansteigen sollte, läßt die Abweichung des Ratenkoeffizienten von der erwarteten Form auf darunterliegende Resonanzen schließen, welche nicht zur Singulett DR-Serie gehören. Die genannten Beispiele sind im übrigen auch nicht den Triplett DR-Serien zuzuordnen, da diese energetisch tiefer liegen.

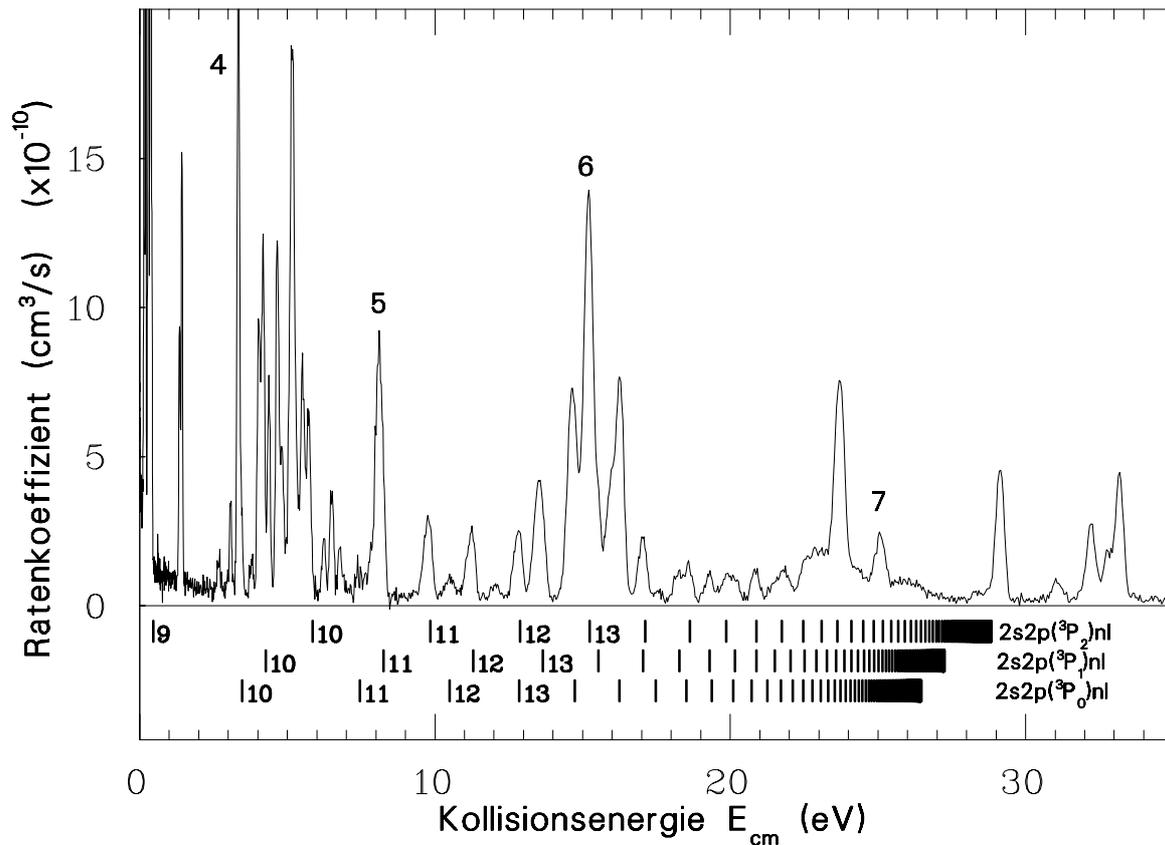
### Die $2s2p(^3P_{0,1,2})nl$ DR-Serien

In der ersten Hälfte des Spektrums bis  $E_{cm} \approx 30$  eV kommen die DR-Resonanzen aus der Anregung in die Triplett  $^3P_{0,1,2}$  Niveaus hinzu, s. Abb. 4.2. Analog zu der Anregung des Targetions in den Singulettzustand erfolgen die Anregungen in die Triplettzustände:



Die Triplett DR-Resonanzen sind deutlich schwächer als die  $(^1P_1)nl$  Resonanzen, da Dipolübergänge zwischen Triplett- und Singulettzuständen in der LS-Kopplung verboten sind. Der Zerfall der Rumpfelektronen ist daher nur über die intermediäre Kopplung möglich. Deshalb trägt zur radiativen Stabilisierung hauptsächlich das eingefangene Elektron in den „langlebigen“ Rydbergzuständen bei [43]. Da die Rate dieser Rydbergstabilisierung eine  $n^{-3}$ -Abhängigkeit aufweist, fallen die Resonanzstärken der Triplett-DR wesentlich schneller mit der Energie ab als die der Singulett-DR Serie. Infolgedessen beobachtet man auch keinen Anstieg des Ratenkoeffizienten zu den Seriengrenzen hin. Vielmehr wird die Zunahme der Rydbergniveaus durch die  $n$ -Abhängigkeit des Ratenkoeffizienten kompensiert, und man beobachtet im Spektrum ein Plateau von unaufgelösten Resonanzen, welches zu den Seriengrenzen hin abfällt.

Auch im Energiebereich der Triplett DR-Serien zeigen sich weitere unerklärte Beiträge. In Abb. 4.2 sind diese durch die Numerierung an den Resonanzen angezeigt. So gehört die Resonanz bei  $E_{cm} \approx 3$  eV (4) höchst unwahrscheinlich allein zum energetisch passenden  $2s2p(^3P_0)10l$  Niveau, da die  $^3P_0$ -Serie die schwächste Triplett DR-Serie im Spektrum ist. Dies kann man auch im Größenvergleich mit den Resonanzen



**Abb. 4.2:** Teilbereich des  $\text{Cl}^{13+}$  Spektrums, in welchem die Beiträge der  $2s2p(^3P_j)nl$  Serien liegen.

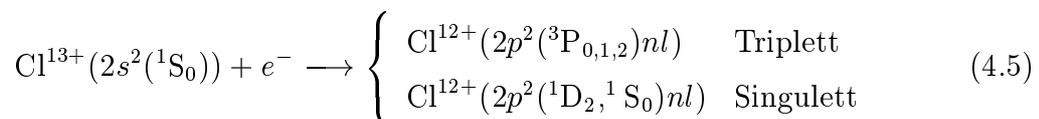
der nächsthöheren  $n$ -Schalen des Rydbergelktrons innerhalb der  $^3P_0$ -Serie nachvollziehen. Die  $2s2p(^3P_1)nl$ -Serie zeigt von  $n = 11$  (5) bis  $n = 13$  ein unstetiges Verhalten, da diese zu  $n = 12$  hin scheinbar viel zu stark abfällt und dann bei  $n = 13$  sogar wieder ansteigt. Auch die Resonanzstruktur bei  $E_{cm} \approx 15$  eV (6) ist zu groß, als daß sie nur von der DR in die  $2s2p$  Triplet P Niveaus herrühren könnte. Der Peak bei  $E_{cm} \approx 25$  eV (7) befindet sich schon in dem Bereich, wo die Triplet P DR-Resonanzen bereits eine unaufgelöste Struktur bilden. Er kann diesen also mit Sicherheit nicht zugeordnet werden. Zuletzt sollte noch die isolierte Resonanz bei  $E_{cm} \approx 1.5$  eV Erwähnung finden, da diese überhaupt keiner DR-Rydbergserie zugehörig ist.

Beiträge von  $\Delta N = 1$  DR, welche im Bereich der  $\Delta N = 0$  Resonanzen liegen könnten, falls dies überhaupt energetisch möglich ist, scheiden als Erklärung für die Abweichungen im Spektrum aus, da dies einem Einfang des Projektilektrons in die  $n = 2$  Schale unter gleichzeitiger Anregung des Targets in die  $3l$  Schale bedeuten müßte. Der dadurch gebildete doppelt angeregte Zwischenzustand  $2s2l3l$  ist allerdings schon in der  $\Delta N = 0$  DR enthalten und kann somit keine zusätzlichen Resonanzen erzeugen.

Desweiteren wurde das Spektrum auf DR–Beiträge untersucht, welche Übergängen, ausgehend von dem metastabilen  $2s2p(^3P_0)$  Level, in die Niveaus der  $2p^2$  Konfiguration entsprechen. Dafür müßte allerdings ein entsprechender Anteil an metastabilen Ionen gespeichert worden sein. Theoretischen Berechnungen zufolge liegt die Lebensdauer der metastabilen  $\text{Cl}^{13+}$  Ionen bei 11.7 s [44]. Eine sinnvoll zeitaufgelöste DR–Messung sollte unterschiedliche DR–Spektren ergeben, je nach dem Zeitpunkt, zu welchem nach der Injektion die Messung gestartet wurde (falls überhaupt metastabile Ionen im Speicherring vorhanden sind). Deshalb wurden für mehrere Zeitintervalle, welche nach der Injektion jeweils zeitlich versetzt begannen, die DR–Spektren aufgezeichnet. Der anschließende Vergleich ergab ein negatives Resultat für die Existenz metastabiler Ionen. Die *off-line* Untersuchung der Spektren mittels der DR–Rydbergserien, wobei die entsprechenden Anregungsenergien von  $2s2p(^3P_0)$  nach  $2p^2(^3P_j)$  zwischen 43.5 eV und 45.69 eV liegen, ergaben keinen konkreten Hinweis auf Übergänge, an denen metastabile Ionen beteiligt sind. Auch im Hinblick auf die erwartungsgemäß unwahrscheinlicheren Anregungen in die Singulett  $2p^2$  Niveaus ergab sich kein Anhaltspunkt für metastabile Ionen.

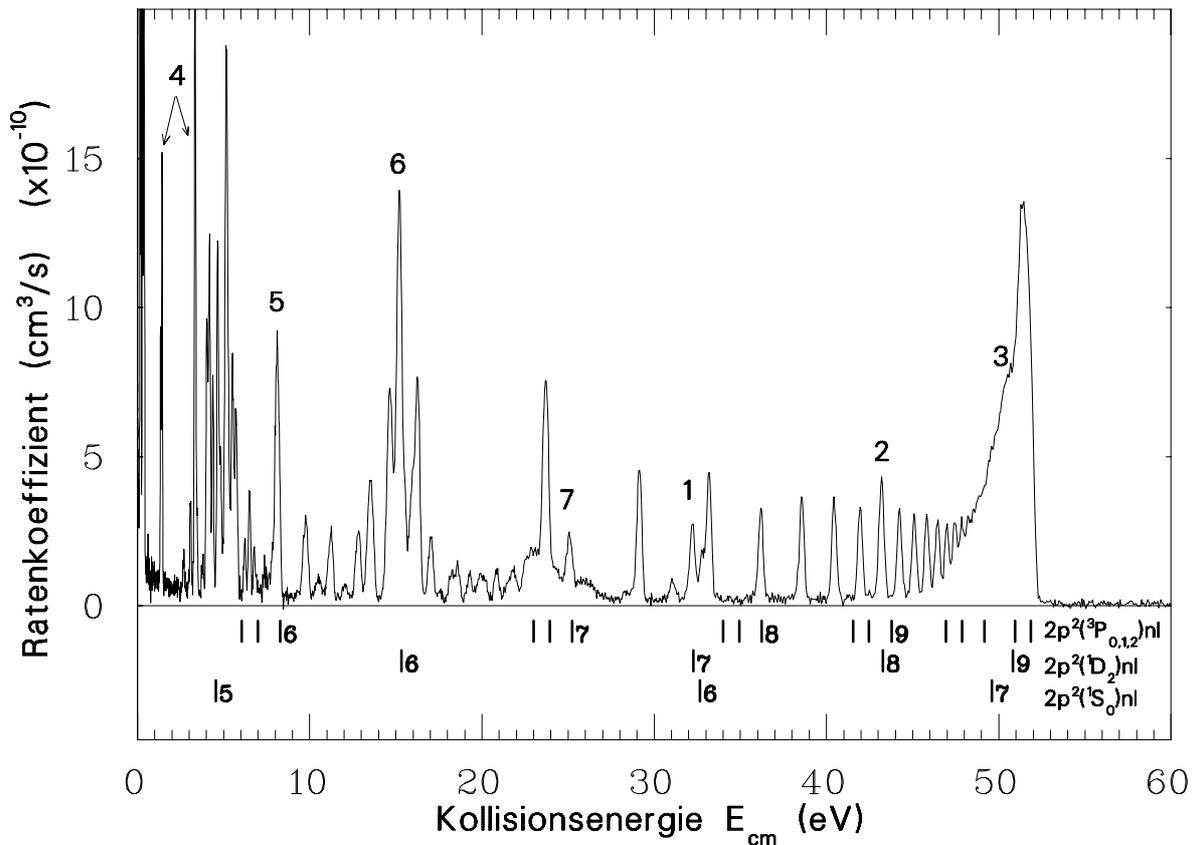
### TR–Resonanzen

Bisher wurde noch nicht die Doppelanregung des Targetions bei Elektroneneinfang in Betracht gezogen, wie sie bei der trielektronischen Rekombination auftreten:



Die jeweiligen Anregungsenergien in die 3 Triplet und 2 Singulett Niveaus erstrecken sich dabei von  $\approx 70$  bis 96 eV. Die zugehörigen Rydbergserien reichen somit für niedrige dreifach angeregte Zustände bis in den Bereich der DR–Resonanzen hinein. Schon mittels der einfachen Rydbergformel für die entsprechenden TR–Serien lassen sich viele derjenigen Resonanzen oder Resonanzerhöhungen, welche bisher unerklärt geblieben sind, der trielektronischen Rekombination zuordnen, s. Abb. 4.3

Zunächst einmal sollen die Singulett TR–Serien besprochen werden. Die niedrigsten TR–Niveaus stammen von den Singulett  $2p^2(^1S_0)5l$  Niveaus. In diesem Bereich befindet sich im Spektrum eine dichte Anzahl von Resonanzen, so daß eine direkte Zuordnung aufgrund der Rydbergformel nicht unbedingt ratsam wäre. Ein eindeutiger Kandidat für eine TR–Resonanz ist jedoch bei  $E_{cm} \approx 15$  eV (6) auszumachen. Diese liegt genau im Bereich der Singulett  $2p^2(^1D_2)6l$  Niveaus. Bei  $E_{cm} \approx 32$  eV (1) kommen sich die beiden Singulett TR–Serien sehr nahe, so daß die zugehörige Resonanz sich aus den Beiträgen beider Serien ergeben könnte. Außerdem liegt die Vermutung nahe, daß die benachbarte kleinere Resonanz auch noch der Singulett TR zugehörig ist. Eindeutig ist die Resonanzerhöhung bei  $E_{cm} \approx 43$  eV (2) der  $2p^2(^1D_2)$  Serie zuzuschreiben mit



**Abb. 4.3:** Gesamtansicht des  $\text{Cl}^{13+}$  Spektrums. Die TR–Rydbergserien sind unterhalb des Spektrums zu sehen.

der Hauptquantenzahl des Rydbergelektrons  $n = 8$ . Auch im Bereich der Schulter der Singulett DR–Resonanzanhäufung sind Beiträge der Singulett TR zu erwarten. Oberhalb der Singulett  $2s2p(^1P_1) \infty l$  DR–Seriengrenze sind offensichtlich weder Singulett noch Triplett TR–Resonanzen im experimentellen Spektrum zu erkennen, obwohl dies energetisch möglich wäre.

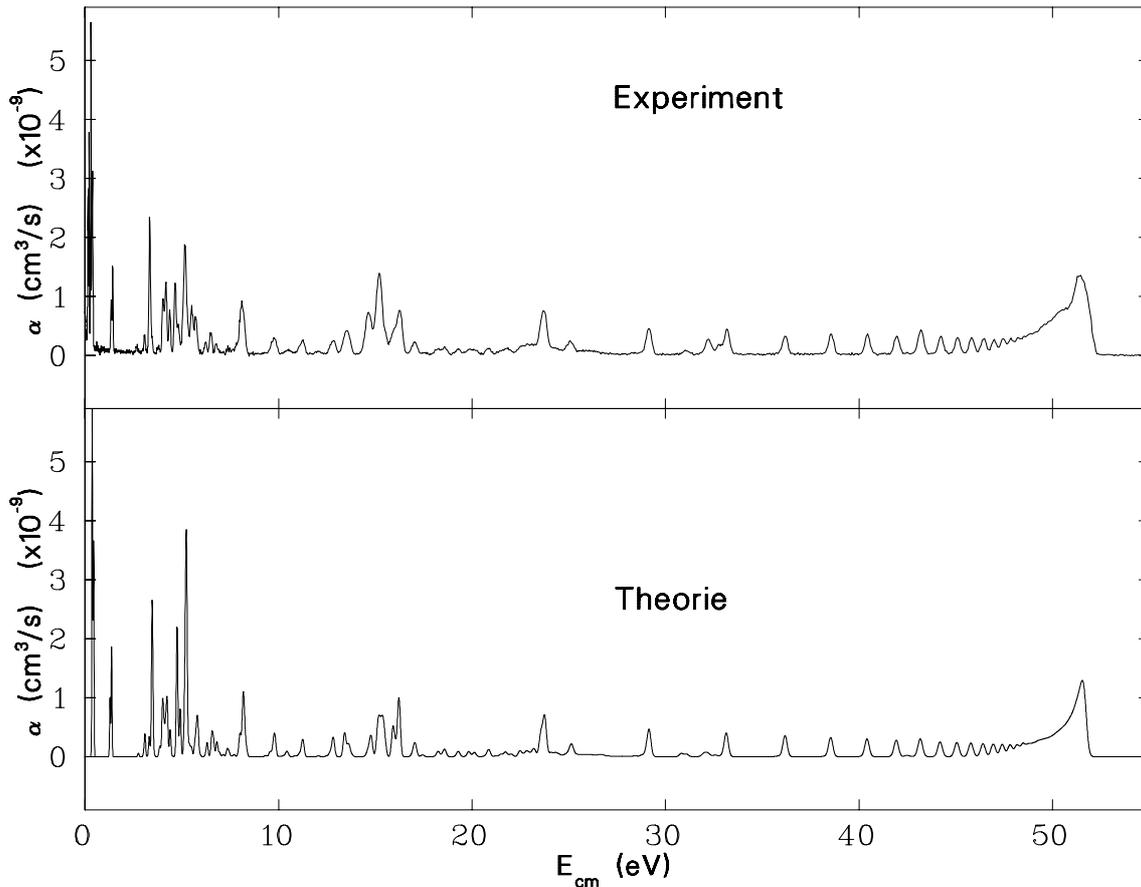
Innerhalb der Triplett TR–Serien liefert die  $2p^2(^3P_2)nl$  Serie scheinbar die größten Beiträge. Ihr können sowohl die Resonanz bei (5) als auch jene bei (7) mit Sicherheit zugeordnet werden, während für die beiden anderen Triplett TR–Serien keine eindeutige Resonanzzuweisung möglich ist. Jenseits der Triplett  $2s2p(^3P_j) \infty l$  DR–Seriengrenzen ist kein Hinweis auf Triplett TR mehr vorhanden. So sind mögliche  $2p^2(^3P_{0,1})8l$  Rekombinationen generell im Spektrum nicht zu sehen, obwohl in diesem Ausschnitt keine DR stattfindet, welche diese überdecken könnte. Ein möglicher Beitrag von  $2p^2(^3P_2)8l$  sollte zumindest die dortige DR–Resonanz erhöhen. In der Tat erfolgt sogar eher eine kleine Abschwächung dieser DR–Resonanz. Allgemein lassen sich oberhalb der Triplett DR–Seriengrenzen im Gegensatz zu den Singulett keine Triplett TR–Resonanzen mehr

erkennen. Insgesamt sind somit bis auf die niedrigsten Beiträge bei (4) alle offensichtlichen nicht-DR-Beiträge der trielektronischen Rekombination zuzuordnen.

### 4.1.2 Theoretische Modellspektren

Um die getroffenen Aussagen zu bestätigen und das Rekombinationsspektrum genauer zu untersuchen, wurden ausführliche Rechnungen mit AUTOSTRUCTURE durchgeführt. Dabei wurden sowohl die Konfigurationsmischung aus den  $2s^2$ ,  $2s2p$  und  $2p^2$  Elektronenkonfigurationen des Targetions als auch die  $2s^22p$ ,  $2s2p^2$  und  $2p^3$  Konfigurationen des rekombinierten Ions unter Verwendung der intermediären Kopplung in die Rechnung miteinbezogen. Kaskadenzerfälle, sowohl über die angeregten Rumpfelektronen als auch über das Rydbergelektron, sind ebenso wie sekundäre Autoionisation, Bestandteil der Rechnung. Aufgrund der Auswahlregeln [15] für den Elektroneneinfang,  $\Delta l = \pm 1$  für DR und  $\Delta l = 0, \pm 2$  für TR, wurden zu jeder Rydbergkonfiguration  $nl$  fünf Kontinuumskonfigurationen aufgestellt. Danach werden in einem zweiten Schritt die relevanten Raten und Energien zur Berechnung des Wirkungsquerschnitts herangezogen. Dabei kann optional für die Anregungsenergien im Targetion auf spektroskopische Daten zurückgegriffen werden, um eine optimale Deckung mit dem gemessenen Spektrum zu erhalten. Es hat sich gezeigt, daß eine solche nachträgliche Energieverschiebung in der Regel notwendig ist, da die berechneten Anregungsenergien je nach Ionensorte und angeregtem Zustand bis zu 5% Abweichung von den spektroskopischen Daten aufweisen. Darüber hinaus erhält man den Ratenkoeffizienten als ein über die Temperatur gefaltetes Produkt aus Wirkungsquerschnitt und Relativgeschwindigkeit bei einer durch den Benutzer festgelegten Elektronentemperatur. Eine weitergehende Beschreibung der Handhabung von AUTOSTRUCTURE wird im Anhang A geliefert. Die in vorliegender Arbeit präsentierten, mit AUTOSTRUCTURE erstellten Modellspektren sollten jedoch nur als vorläufige Ergebnisse der Theorie angesehen werden, da an diesen sehr komplexen Rechnungen fortlaufend Verbesserungen erfolgen. Auch werden in AUTOSTRUCTURE bisher keine Felderhöhungseffekte [45] berücksichtigt. Dabei bewirken nicht verschwindende elektrische Felder in der Wechselwirkungszone eine Ratenerhöhung bei hohen Rydbergquantenzahlen  $n$ . Die Autoionisationsrate fällt innerhalb einer  $n$ -Mannigfaltigkeit stark ab mit zunehmender Drehimpulsquantenzahl  $l$ . Die Stärke des DR-Wirkungsquerschnitts für ein  $n$  ergibt sich folglich aus der Summe der niedrigsten  $l$ -Beiträge. In der Stark-Mischung erhalten die hohen  $l$ -Zustände auch Anteile kleinerer  $l$ -Zustände, was in der Summe noch Beiträge höherer  $l$  hinzukommen läßt.

In Abb. 4.4 ist unten ein gerechnetes Ratenkoeffizientenspektrum, zum Vergleich darüber ist noch einmal das gemessene Spektrum aus Abb. 4.1 zu sehen. Die aus der Temperaturfaltung des Modellspektrums abgeschätzten Werte für die Elektronentem-



**Abb. 4.4:** Vergleich zwischen Theorie und Experiment. Das obere Spektrum zeigt das gemessene Spektrum, vgl. auch Abb. 4.1. Die untere Kurve zeigt den DR-Ratenkoeffizienten einschließlich der TR-Beiträge mit AUTOSTRUCTURE berechnet.

peraturen liegen bei  $kT_{\parallel} \approx 0.14 \text{ meV}$  für den longitudinalen Anteil und  $kT_{\perp} \approx 10 \text{ meV}$  für die transversale Bewegung. Im Gesamtüberblick repräsentiert das Modellspektrum sehr gut das experimentelle Spektrum. Erst bei näherem Hinsehen offenbaren sich einige Abweichungen. In der zweiten Hälfte des Spektrums werden die Resonanzhöhen prinzipiell von der Theorie unterschätzt, während vor allem die Resonanzgruppe bei 5 eV gegenüber dem Experiment überhöht ist.

Hierbei liefern Abbildungen 4.5 bis 4.7 mit vergrößerten Ausschnitten des Spektrums einen genaueren Einblick. Die theoretisch ermittelten Ratenkoeffizienten für DR und TR werden durch rote Kurven dargestellt, während die DR-Beiträge durch die grauen Flächen repräsentiert werden. Prinzipiell sind die Resonanzen der  $2p^2(^1S_0, ^1D_2)nl$  Serien stärker als die der  $2p^2(^3P_{0,1,2})nl$  Serien, da Übergänge zwischen gleichen Spinmultiplizitäten bevorzugt sind. Dennoch liefert die TR in Triplettniveaus unterhalb der Triplet DR-Seriengrenzen einen deutlichen Beitrag, wobei die Resonanzstärken

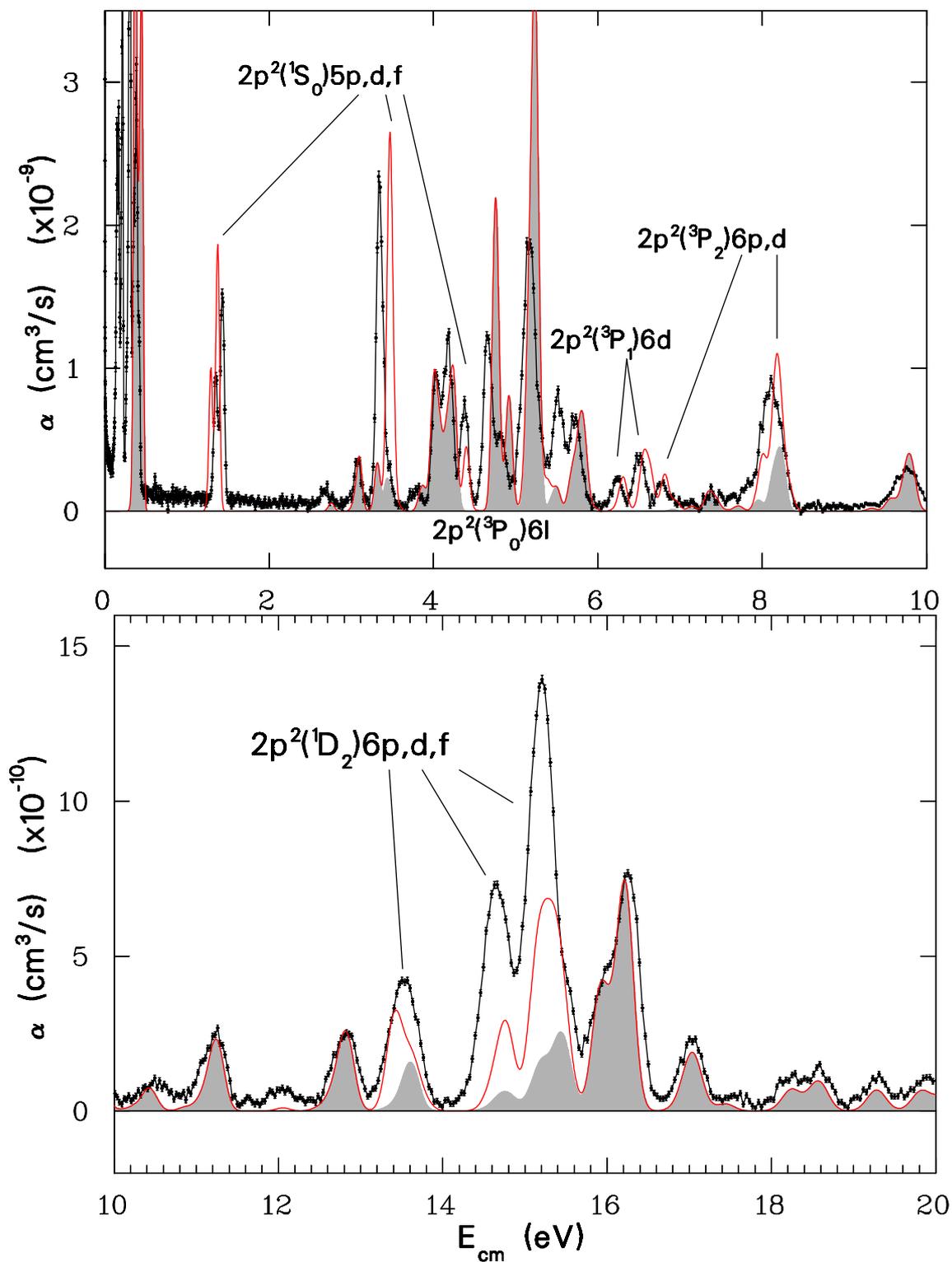


Abb. 4.5: Vergleich von Messung und Theorie des  $Cl^{13+}$  Rekombinationsspektrums von  $E_{cm} = 0 - 10$  eV (oben) bzw.  $10 - 20$  eV (unten). Die gerechneten DR-Beiträge sind durch die graue Fläche wiedergegeben, während bei der roten Kurve die TR-Beiträge miteinbezogen sind.

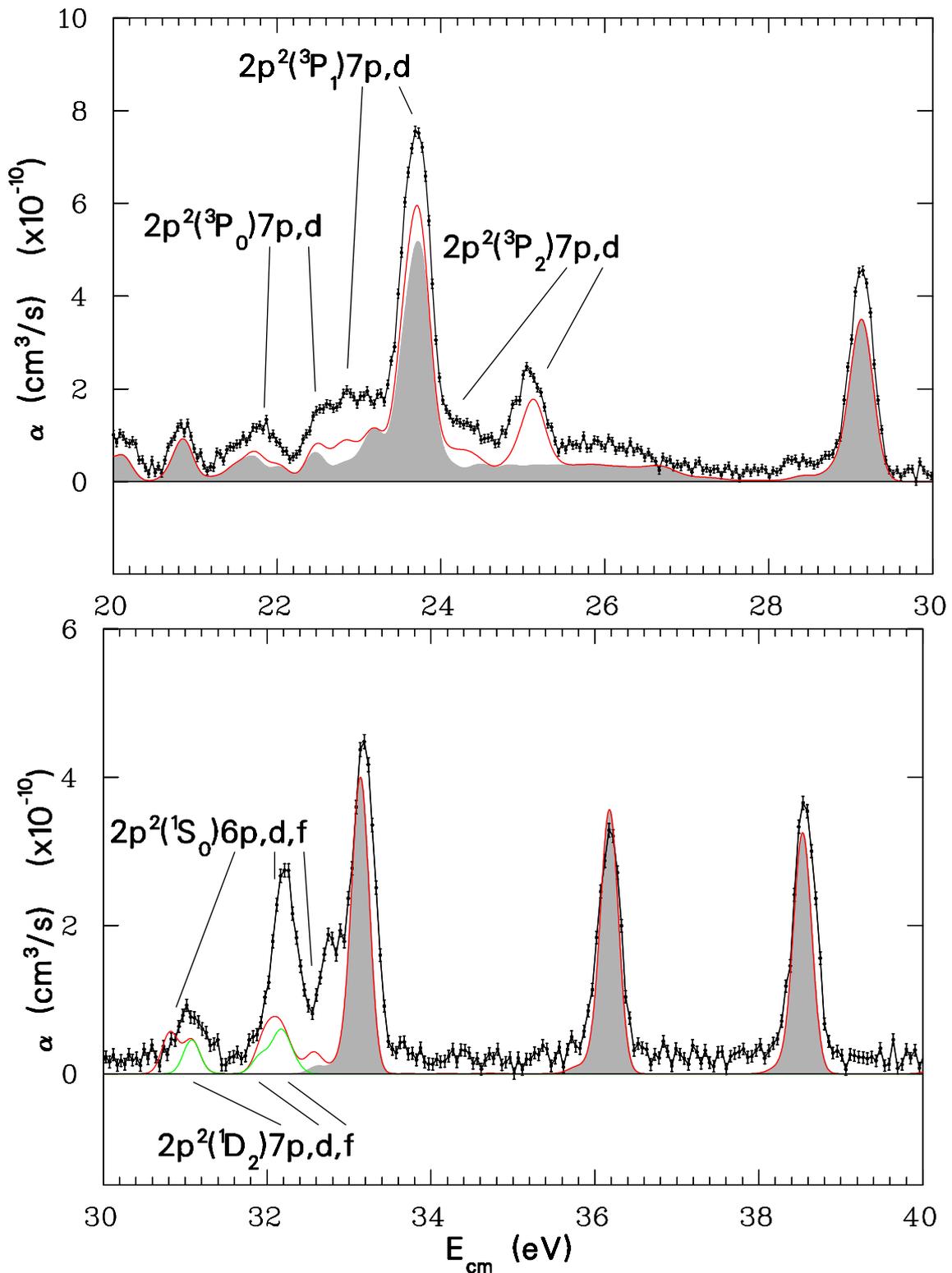


Abb. 4.6: Fortsetzung des  $\text{Cl}^{13+}$  Spektrums von  $E_{\text{cm}} = 20 - 40$  eV. Die grüne Kurve im unteren Bild zeigt den Einzelbeitrag der  $(^1D_2)7l$  Resonanzgruppe.

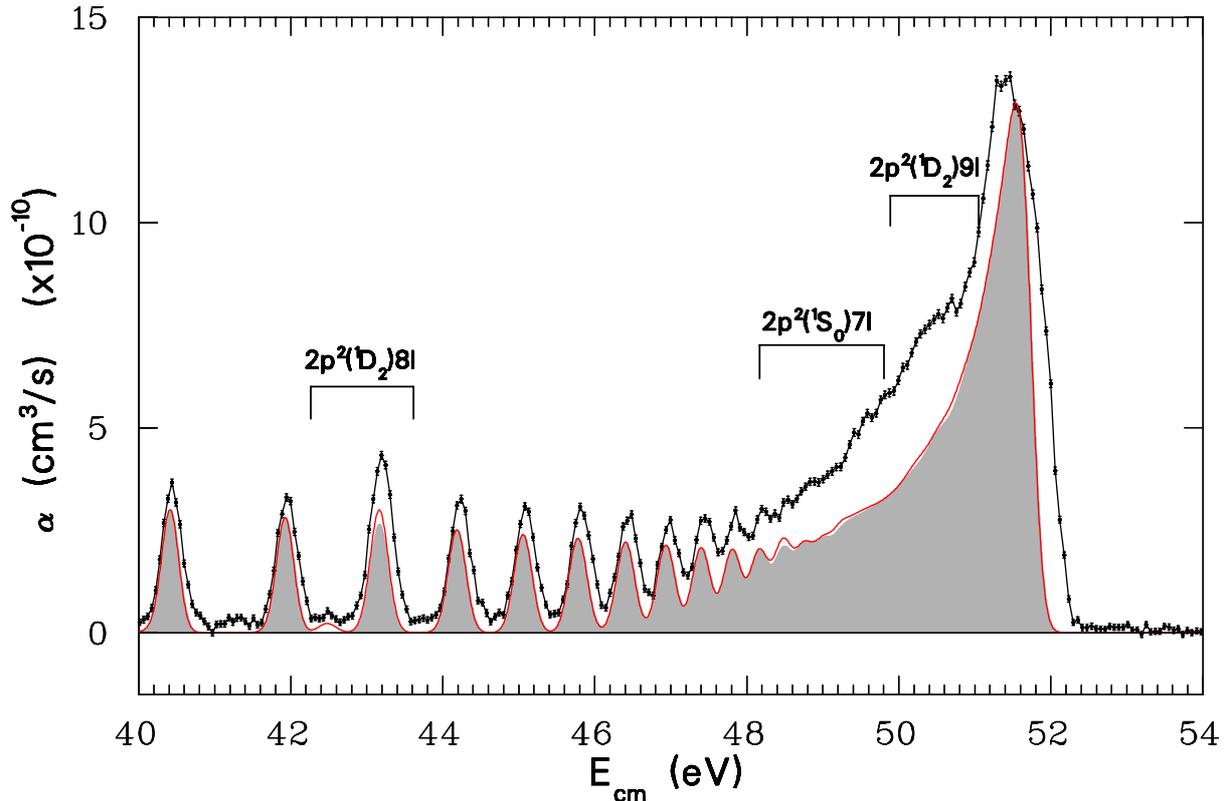
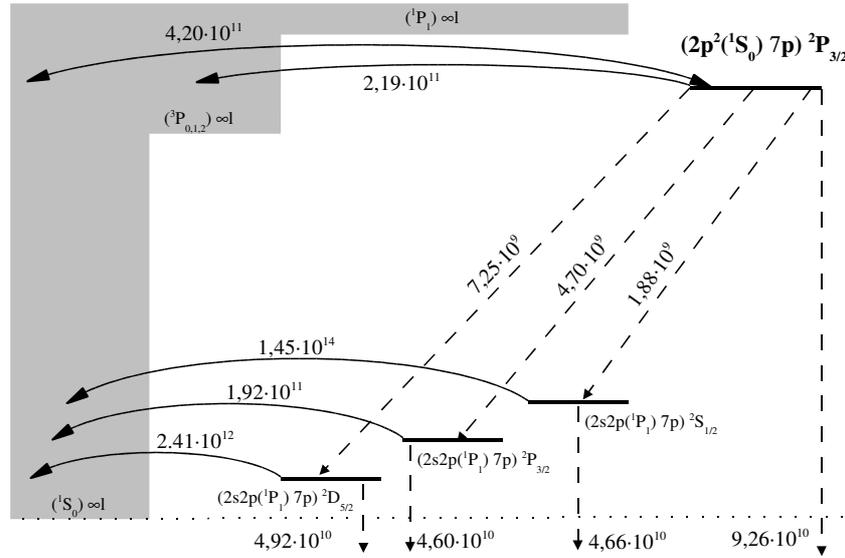


Abb. 4.7: Ausschnitt des  $Cl^{13+}$  Spektrums von  $E_{cm} = 40 - 54$  eV.

mit dem Gesamtdrehimpuls  $J$  des Rumpfelektronenniveaus zunehmen. Aufgrund der relativ niedrigen Hauptquantenzahlen des Rydbergelektrons ist die  $l$ -Aufspaltung der TR-Resonanzen größer als die experimentelle Auflösung. Die einzelnen Peaks sind mit den Quantenzahlen  $nl$  der Orbitale des Rydbergelektrons, welche den Hauptbeitrag zu den einzelnen Peaks liefern, markiert. Innerhalb einer Hauptquantenzahl  $n$  wird für die Triplettsreihen bei  $l = 2$  der Wirkungsquerschnitt maximal, vgl. Abb. 4.6 oben. In der ( $^1S_0$ ) $nl$  Singulettserie liefern  $l = 1$  und  $l = 2$  vergleichbare Stärken, während die ( $^1D_2$ ) $nl$  Serie bei  $l = 3$  ihr Maximum aufweist, s. Abb. 4.5.

Bei niedrigen Energien im Intervall von 1–9 eV sind die gemessenen Resonanzhöhen gut von der Theorie wiedergegeben, jedoch wird mit steigender Hauptquantenzahl  $n$  der TR Wirkungsquerschnitt noch stärker unterschätzt als bei der DR. Besonders deutlich wird dies bei den Singulett TR-Resonanzen bei 15 und 32 eV. Allerdings ist eine globale Unterschätzung der TR durch die Theorie nicht gegeben, vielmehr deutet sich eine  $l$ -Abhängigkeit an. Während für  $p$ -Orbitale der Rydbergelektronen die Abweichung relativ gering ist, wird die Diskrepanz für höhere  $l$  stärker. Diese Tendenz zeigt sich sehr gut bei den Singulett TR-Beiträgen, wie in Abb. 4.5 und 4.6 jeweils in der unteren Graphik zu erkennen ist. Allerdings ist bei  $E_{cm} = 32$  eV keine eindeutige Aussage zu



**Abb. 4.8:** Zerfallsschema des dreifach angeregten  $(2p^2(1S_0)7p)^2P_{3/2}$  Niveaus. Die gebogenen Pfeile repräsentieren die Übergänge zwischen Kontinuum und gebundenen Zuständen, die gestrichelten den Strahlungszerfall. Die entsprechenden Raten wurden AUTOSTRUC-TURE Rechnungen entnommen. Die Angaben zu den Strahlungszerfällen unter die Ionisationsschwelle entsprechen der Summe über alle erreichbaren tieferen Zustände.

treffen, welche der beiden Singulett TR-Serien stärker unterschätzt wird, da sich die  $(1D_2)7l$  und  $(1S_0)6l$  Resonanzen zum Teil überlappen. Zwar ist z.B. für die  $2p^2(1D_2)$  Serie die sekundäre Autoionisation ab  $n = 7$  durch einen zuvor erfolgten erlaubten Dipolübergang in autoionisierende, doppelt angeregte Zustände möglich, für die Annahme einer Überschätzung eines solchen Verlustweges durch die Theorie und damit einer Erklärung für einen zu kleinen Wirkungsquerschnitt ist jedoch kein Anlaß gegeben. Denn schon bei  $n = 6$  ist eine deutliche Abweichung der Theorie von der Messung zu sehen.

Mögliche Zerfallskanäle und die zugehörigen Raten eines bei der TR dreifach angeregten Zwischenzustandes zeigt Abb. 4.8 anhand des  $(2p^2(1S_0)7p)^2P_{3/2}$  Niveaus. Aus Vereinfachungsgründen wurde der radiative Kaskadenzerfall des Rydbergelektrons oberhalb der ersten Ionisationsschwelle weggelassen. Für den radiativen Zerfall der Rumpfelektronen sind die drei dominantesten Linien in die  $2s2p(1P_1)$  Niveaus eingezeichnet. Die Rate des Gesamtwirkungsquerschnitts ergibt sich zu:

$$R_{TR} = A_{3a} \cdot \frac{\sum_{(>)} A_r \cdot \frac{A'_r}{A'_a} + \sum_{(<)} A''_r}{A_{3a} + A_a + A_{r_{ges.}}} \quad (4.6)$$

Dabei entspricht die erste Summe im Zähler den radiativen Raten, die über die  $2s2p(1P_1)$  Niveaus unter die erste Ionisationsschwelle zerfallen, während die zweite

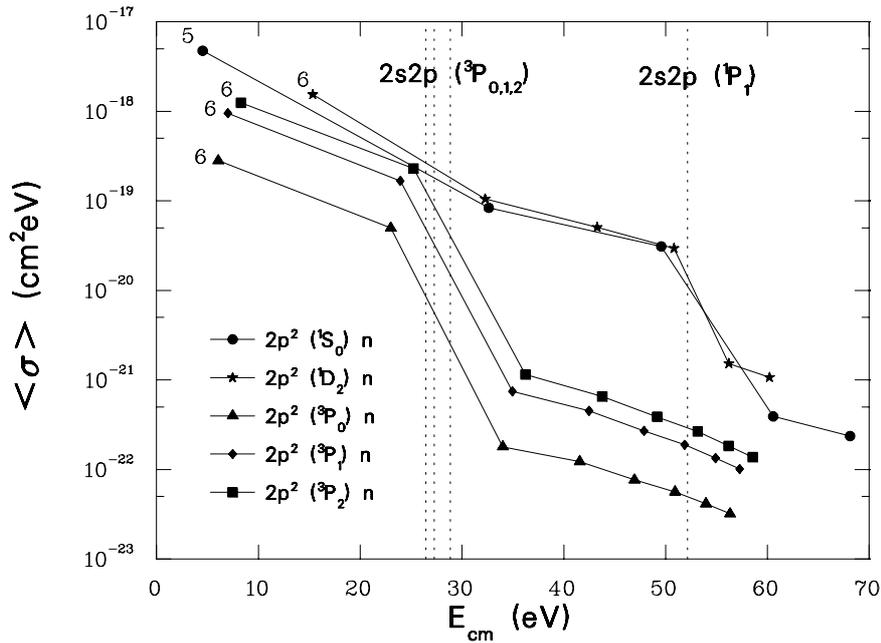


Abb. 4.9: Berechnete Energieabhängigkeit des über die Hauptschalen  $n$  des Rydbergelctrons summierten Wirkungsquerschnitts der Triplet und Singulett TR-Serien.

Summe die Raten der direkten Übergänge unterhalb der Ionisationsschwelle darstellt. Da die Autoionisationsraten der  $2s2p(^1P_1)$  Niveaus wesentlich größer sind als deren radiative Raten, spielt die Stabilisierung über diesen Zweig keine Rolle und kann für eine Abschätzung vernachlässigt werden. Die direkte herkömmliche Autoionisation in das Kontinuum der Triplet P Niveaus der Rumpfelektronen ist von gleicher Größenordnung wie die Dreielektronen-Autoionisation und drückt in diesem Beispiel die Gesamtrate der TR um 30%.

Abb. 4.9 zeigt den berechneten Verlauf des  $n$ -summierten TR-Wirkungsquerschnitts für die einzelnen Rydbergserien, aufgetragen über die Schwerpunktsenergie. Der stufenartige Charakter des TR-Wirkungsquerschnitts  $\sigma^{TR}$  spiegelt sich im Kurvenverlauf deutlich wider. Erwartungsgemäß fällt der Wirkungsquerschnitt oberhalb der  $2s2p(^3P_j)$  Anregungsenergien für die Triplet TR-Resonanzen stark ab. Dabei liegen aufeinanderfolgende  $n$  über drei Größenordnungen auseinander, wenn dabei die  $2s2p$  Triplet P Schwelle überschritten wird, und können deshalb im Experiment oberhalb dieser Schwelle nicht mehr nachgewiesen werden. Der Singulett TR-Wirkungsquerschnitt bricht aufgrund der Auswahlregeln für Autoionisation weniger stark ein und kann daher noch bis zur  $2s2p(^1P_1)$  Seriengrenze im experimentellen Spektrum beobachtet werden. Wird diese Schwelle überschritten, fällt auch der Singulett TR-Wirkungsquerschnitt um fast zwei Größenordnungen ab, während der Triplet TR-Wirkungsquerschnitt stetig bleibt und nicht merklich von dem neu hinzugekom-

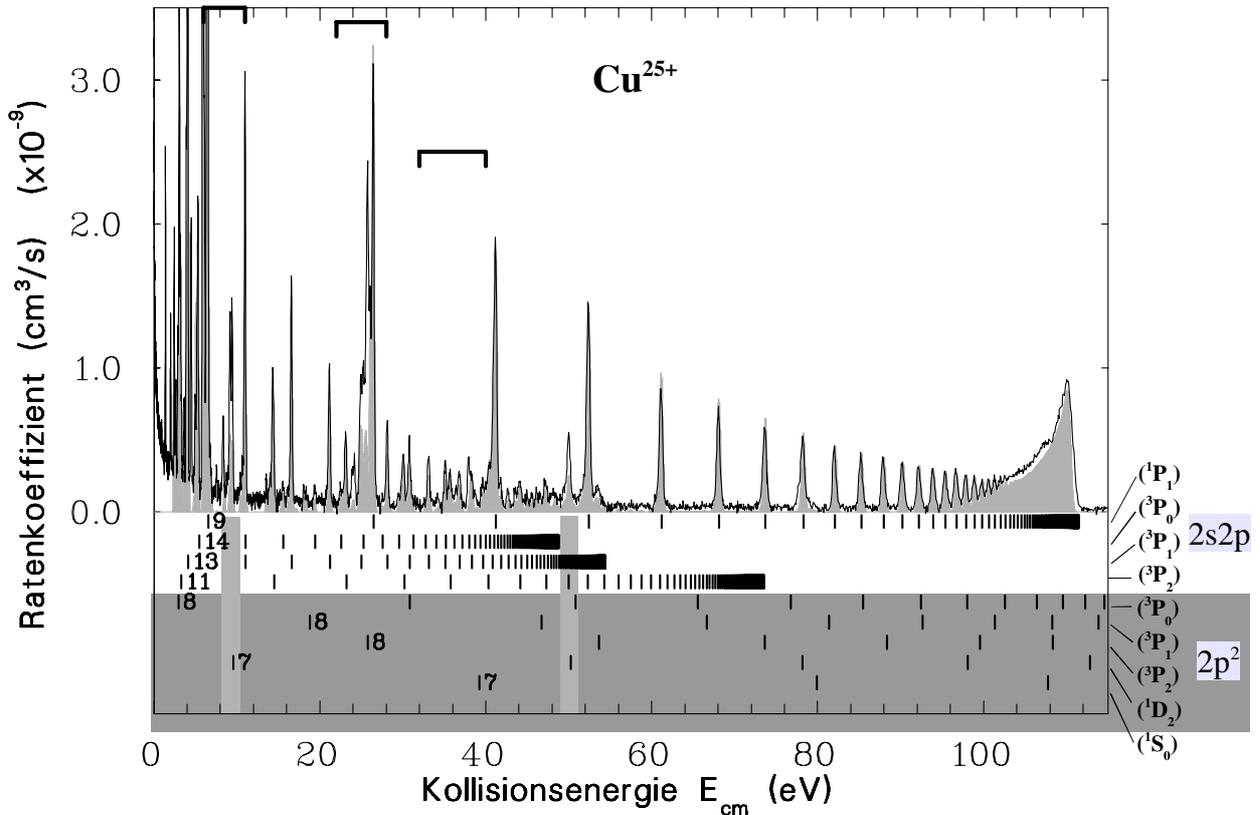
menen Kontinuumskanal beeinflusst wird. Für die Singulett TR–Wirkungsquerschnitte gilt kein ganz striktes Interkombinationsverbot, was sich durch einen auch hier etwas erhöhten Abfall an der Triplett DR–Seriengrenze äußert. Zwischen den jeweiligen DR–Seriengrenzen liegen die TR–Wirkungsquerschnitte in der logarithmischen Y–Achsendarstellung näherungsweise auf einer Geraden und zeigen, was in der Regel für die DR im gesamten Spektrum gilt: eine stetige Abhängigkeit von der Energie.

## 4.2 Cu<sup>25+</sup>

Cu<sup>25+</sup> ist das bisher schwerste berylliumähnliche Ion, an dem DR–Messungen am TSR durchgeführt wurden. Die Ionenenergie und Strahllebensdauer betragen 290 MeV bzw. 49 s. Alle Resonanzen, welche mit der  $2s^2 \rightarrow 2s2p$  Anregung assoziiert sind, konnten innerhalb eines Energiescans abgedeckt werden. Erstmals wurde die Spannungsmessung zur Bestimmung der Schwerpunktsenergie erfolgreich eingesetzt. Zur Bestimmung der experimentellen  $\Delta N = 0$  DR–Seriengrenzen wurden die Energielagen der gemessenen Rydbergresonanzen in die Rydbergformel eingesetzt und ein Fit mit der Seriengrenze als einzigem freien Parameter durchgeführt. Die in Tabelle 4.2 gelisteten Werte für die so aus dem Experiment gewonnenen Anregungsenergien zeigen eine hervorragende Übereinstimmung mit den spektroskopischen Daten. Die leichte systematische Abweichung der experimentellen Werte liegt im Bereich der Unsicherheiten, die durch die spezifischen Gegebenheiten des Experiments bestimmt sind. Diese liegen in der Bestimmung des Elektronenstroms und der räumlichen Lage des Elektronenstrahls sowie in möglichen im Elektronenstrahl eingefangenen Restgasionen, welche das Raumladungspotential beeinflussen. Zudem können Spannungsdriften der Netzgeräte nicht ausgeschlossen werden. Eine eindeutige Zuordnung der Restabweichung zu einer dieser Quellen ist jedoch nicht möglich.

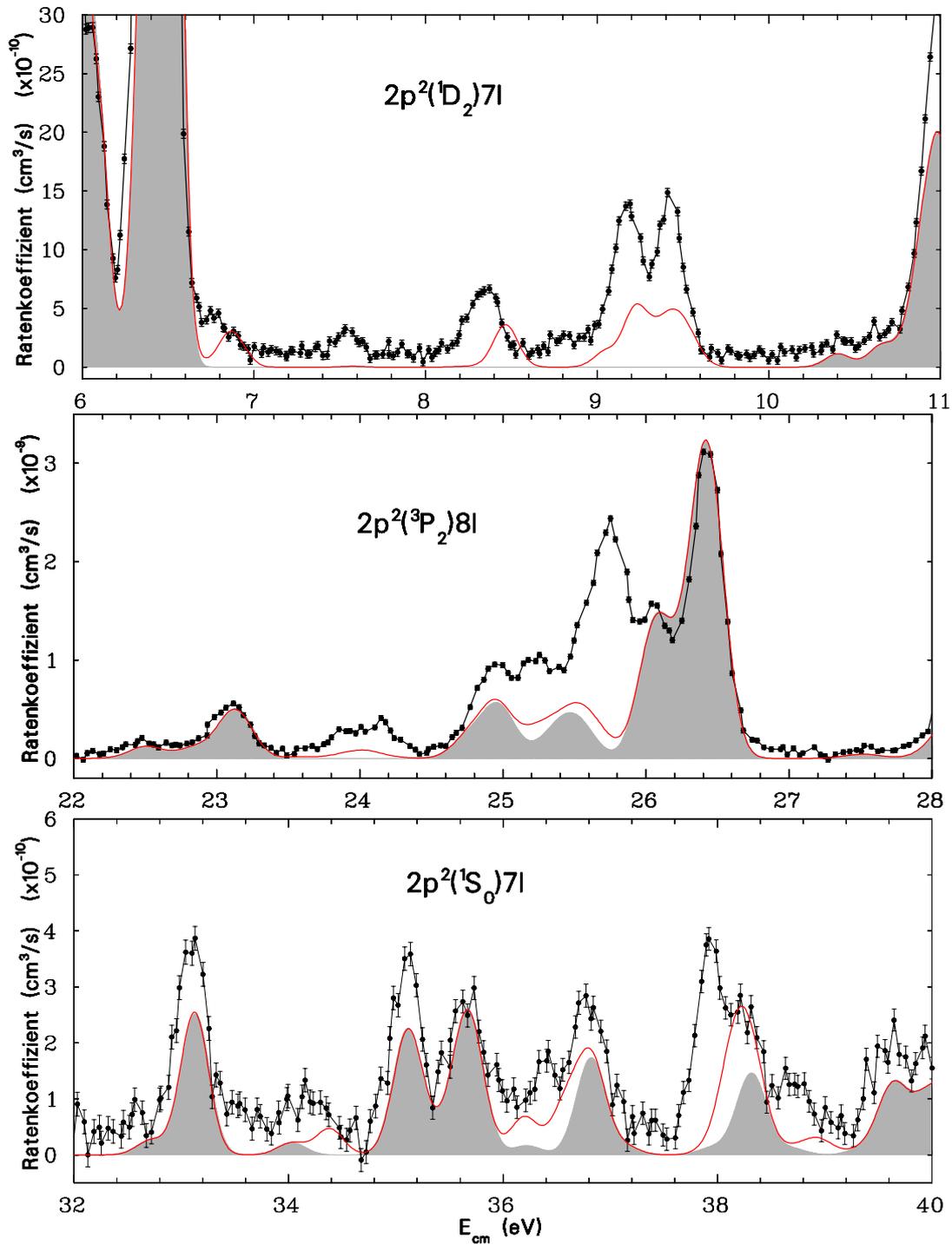
$2s^2 \rightarrow 2s2p$ Anregungsenergie (eV)		
	Spektroskopie	Experiment
<sup>3</sup> P <sub>0</sub>	48.83	48.75 ±0.02
<sup>3</sup> P <sub>1</sub>	54.425	54.36 ±0.01
<sup>3</sup> P <sub>2</sub>	73.558	73.45 ±0.04
<sup>1</sup> P <sub>1</sub>	111.51	111,41 ±0.01

**Tab. 4.2:** Vergleich von den aus dem gemessenen Spektrum ermittelten  $\Delta N = 0$   $2s^2(^1S_0) \rightarrow 2s2p(^iP_j)$  Anregungsenergien in Cu<sup>25+</sup> mit den spektroskopischen Werten.



**Abb. 4.10:** DR- und TR-Ratenkoeffizient von  $\text{Cu}^{25+}$  der  $\Delta N = 0$  Rumpfelektronenanregung. Die durchgezogene Linie zeigt das gemessene Spektrum, die graue Fläche den mit AUTOSTRUCTURE berechneten Ratenkoeffizienten. Unterhalb der Kurven sind die DR- und TR-Rydbergserien geplottet. Die hellgrauen Markierungen unterhalb des Spektrums zeigen TR Resonanzen, die mittels der Rydbergformel identifiziert werden können. Die eckigen Klammern über dem Spektrum zeigen die Energieintervalle an, welche in Abb. 4.11 näher gezeigt werden.

Abb. 4.10 zeigt ein gemessenes Ratenkoeffizientenspektrum von  $\text{Cu}^{25+}$ . Allgemein weisen alle berylliumähnlichen Spektren einen ähnlichen energieabhängigen Verlauf auf. So ist auch das  $\text{Cu}^{25+}$  Spektrum dominiert von den  $2s2p(^1P_1)nl$  DR-Resonanzen, die analog zum  $\text{Cl}^{13+}$  Spektrum eine ansteigende un aufgelöste Resonanzanhäufung zur Seriengrenze hin aufweisen. Die Triplet  $2s2p(^3P_{0,1,2})nl$  DR-Serien lassen sich in der ersten Hälfte deutlich im Vergleich mit der Rydbergformel identifizieren. Eindeutige TR-Resonanzen liegen bei 9 und 50 eV, welche noch unterhalb der  $2s2p(^1P_1)\infty l$  und  $2s2p(^3P_{1,2})\infty l$  Seriengrenzen liegen. Anhand der Rydbergformel gehören beide eindeutig zur Singulett  $2p^2(^1D_2)nl$  Serie und sind mit dem Elektroneneinfang in die  $n = 7$  bzw.  $n = 8$  Schalen assoziiert. Die graue Fläche zeigt den mit AUTOSTRUCTURE



**Abb. 4.11:** Vergleich zwischen experimentellen und mit AUTOSTRUCTURE berechneten DR-Ratenkoeffizienten (graue Fläche) und (DR + TR)-Ratenkoeffizienten (rote Linie) in  $\text{Cu}^{25+}$  für drei verschiedene Energiebereiche.

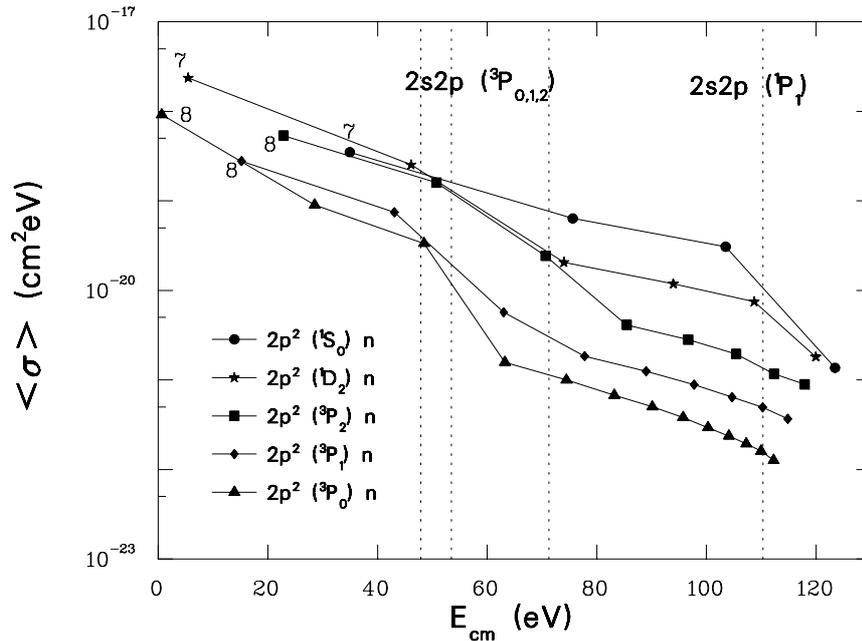


Abb. 4.12: Der über die Energie integrierte und innerhalb einer  $n$ -Mannigfaltigkeit summierte Wirkungsquerschnitt der einzelnen TR-Serien in  $\text{Cu}^{25+}$ .

berechneten Ratenkoeffizienten. Als Elektronentemperaturen wurden  $kT_{\parallel} = 0.23$  meV und  $kT_{\perp} = 13$  meV eingesetzt. Die DR-Resonanzen sind sehr gut in ihrer Größe und Position wiedergegeben. Allerdings zeichnet sich auch hier eine deutliche Unterschätzung der TR-Resonanzen ab.

In Abb. 4.11 kann ein genauere Vergleich zwischen Theorie und Experiment gezogen werden. Die  $2p^2(^1D_2)$  7l Resonanzgruppe zwischen 6 und 10 eV zeigt eine ähnliche Unterschätzung in der Theorie bei größeren Drehimpulsen  $l$  des Rydbergelektrons wie der Ratenkoeffizient der  $2p^2(^3P_2)$  8l Resonanzen bei 25 eV. Im Vergleich dazu scheint der Wirkungsquerschnitt der  $2p^2(^1S_0)$  7l Resonanzen besser, wenn auch etwas kleiner, reproduziert zu sein. Zudem wird die Resonanz bei 38 eV im experimentellen Spektrum von der Theorie nicht erklärt. Insgesamt zeigt sich in diesem Energiebereich eine globale Unterschätzung seitens der Theorie, die auch DR-Resonanzen betrifft.

Abb. 4.12 zeigt den berechneten  $n$ -integrierten Wirkungsquerschnitt der einzelnen TR-Serien in Abhängigkeit der Energie, die aus der Rydbergformel ermittelt wurde. Die zugehörigen Seriengrenzen wurden den entsprechenden AUTOSTRUCTURE Rechnungen entnommen und nicht aus spektroskopischen Daten. Der Grund liegt darin, daß in AUTOSTRUCTURE eine Energiekorrektur mit den spektroskopischen Werten nachträglich durchgeführt wurde, nachdem alle Übergangsraten berechnet wurden. Somit können zunächst einmal TR-Resonanzen, die in der Nähe von DR-Seriengrenzen liegen, nicht das korrekte Verhalten zeigen, je nachdem, ob sie in Wahrheit unter oder

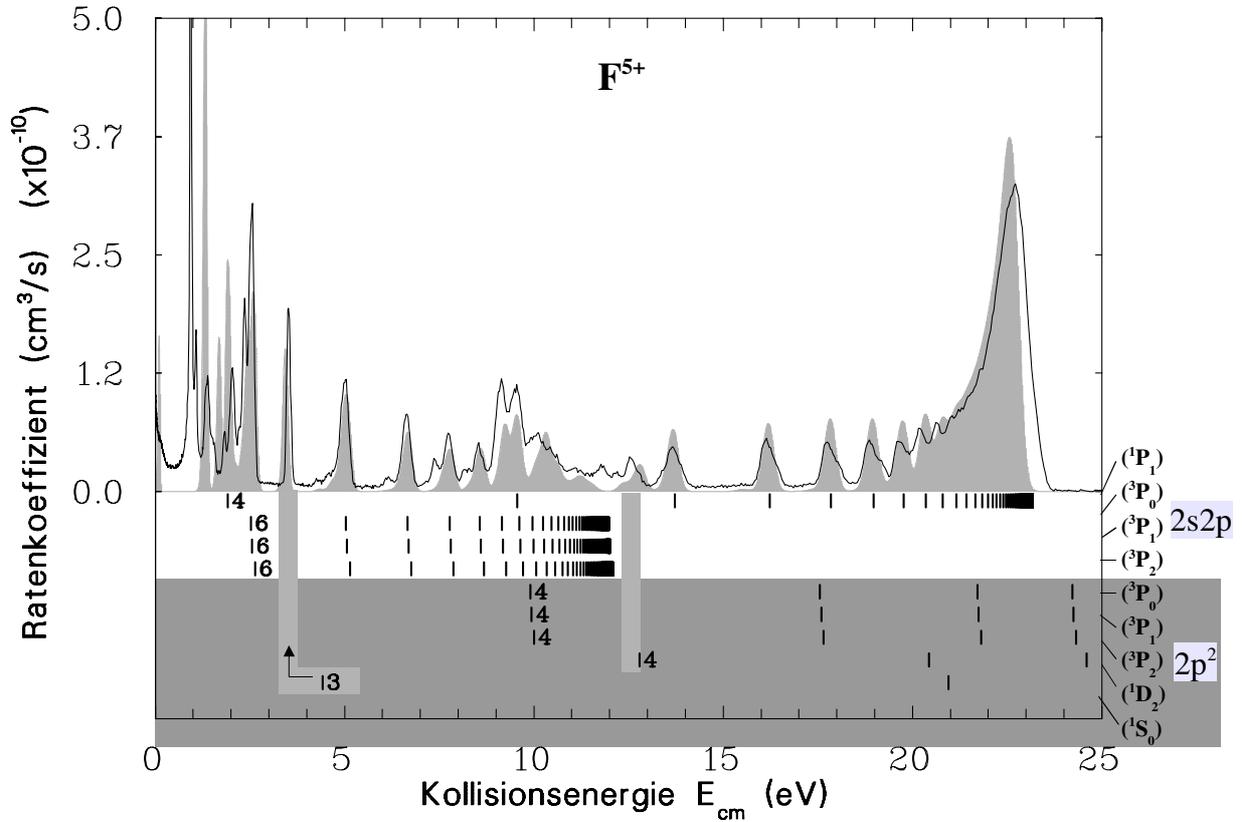
über der Schwelle für die normale Autoionisation liegen.

Der Verlauf der Kurven weist ein ähnliches Verhalten auf wie im  $Cl^{13+}$  Fall. Auch hier brechen die Wirkungsquerschnitte der Triplett TR-Serien nach den Triplett DR-Seriengrenzen stark ein. Ein interessanter Aspekt ist, daß die Triplett DR-Seriengrenzen so weit auseinander liegen, daß einzelne TR-Resonanzen dazwischen vorkommen. So fallen die  $2p^2(^3P_{0,2})nl$  Resonanzen erst nach der  $2s2p(^3P_1)$  Seriengrenze ab. Eine genaue Aussage über die Auswahlregeln läßt sich im LS-Kopplungsbild nicht treffen, da im relativ schweren  $Cu^{25+}$  L und S keine guten Quantenzahlen mehr sind. Jedoch deutet sich ein bevorzugter Zerfall der Rumpfelektronen in den  $2p^2(^3P_{0,1})$  Zuständen unter  $\Delta J = \pm 1$  an, analog zu den Auswahlregeln des Rydberg-elektrons mit  $\Delta l = \pm 1$  bei einem Rumpfelektronenübergang  $2p \rightarrow 2s$ . Die schon bei  $Cl^{13+}$  angedeutete Verletzung des Interkombinationsverbots bei den Singulett TR-Wirkungsquerschnitten zeigt sich bei  $Cu^{25+}$  schon deutlicher. Da in der intermediären Kopplung einerseits  $2s2p(^1P_1)$  und  $2s2p(^3P_1)$  miteinander mischen und daher schon für die ungemischten Singulett  $2p^2nl$  Zustände LS-erlaubte Zerfallskanäle offen sind, andererseits aber auch das  $2p^2(^1D_2)$  Niveau Mischungsbeiträge von  $2p^2(^3P_2)$  und das  $2p^2(^1S_0)$  Niveau  $2p^2(^3P_0)$  Beiträge enthalten, trägt der energieabhängige Verlauf der Singulett  $2p^2nl$  Resonanzen Charakterzüge der Triplett  $2p^2nl$  Serien. Dabei folgt die Singulett ( $^1S_0$ ) TR-Serie eher dem Interkombinationsverbot, während die Singulett ( $^1D_2$ ) TR-Resonanzen deutlich Eigenschaften der Triplett TR-Resonanzen aufweisen, da der  $2p^2(^1D_2)$  Zustand stärker mit dem  $2p^2(^3P_2)$  Zustand mischt als der  $2p^2(^1S_0)$  mit dem  $2p^2(^3P_0)$  Zustand.

### 4.3 $F^{5+}$

$F^{5+}$  ist bisher das leichteste berylliumähnliche Ion, welches für DR- und TR-Experimente am TSR verwendet wurde. Hochauflösende Messungen an  $F^{5+}$  wurden schon Anfang der neunziger Jahre in *single-pass merged beam* Experimenten am Institut für Physik in Aarhus (Dänemark) durchgeführt [46]. Im Gegensatz zu den TSR Messungen besaß der Ionenstrahl bei den älteren Experimenten einen hohen Anteil an metastabilen  $2s2p(^3P_0)$  Zuständen, welche bedingt durch die *single-pass* Anordnung einen beträchtlichen Beitrag zum DR-Wirkungsquerschnitt lieferten. Jedoch wurde damals keine Existenz von TR-Resonanzen erwähnt.

Die Ionenenergie im TSR betrug 66.4 MeV. Die Elektronenkühlereinstellungen erzeugten einen 100 mA großen Elektronenstrom mit einer standardmäßigen Expansion von 9.6.



**Abb. 4.13:** DR und TR  $\Delta N = 0$  Ratenkoeffizientenspektrum von berylliumähnlichem  $F^{5+}$ , aufgetragen über die Kollisionsenergie im Schwerpunktsystem. Die durchgezogene Linie zeigt den experimentellen Verlauf des Ratenkoeffizienten, die graue Fläche den mit AUTO-STRUCTURE berechneten. Die jeweiligen Rydbergserien sind unterhalb der Spektren geplottet.

### 4.3.1 $\Delta N = 0$ Anregungen

Abb. 4.13 zeigt den gemessenen (durchgezogene Linie) und den mit AUTOSTRUCTURE berechneten (graue Fläche) Ratenkoeffizienten für  $\Delta N = 0$  DR und TR. Unter dem Spektrum sind die jeweiligen Rydbergserien geplottet. Der Abbruch der Rydbergserien aufgrund von Feldionisation im separierenden Dipolmagneten beträgt  $n_{cut} = 29$ . Die Resonanzbreiten des gemessenen Spektrums wurden in der Rechnung mit einer longitudinalen Elektronentemperatur von 0.4 meV abgeschätzt — ein etwas schlechterer Wert als bei den übrigen Messungen, da in einem für höhere Relativenergien ungünstigen Wobbelmodus gemessen wurde. Die wahre Elektronentemperatur ist daher kleiner, was bei niedrigen Relativenergien zu einer besseren Auflösung führt. Dennoch ist die experimentelle Auflösung über das gesamte Spektrum gesehen weitaus besser als bei

den älteren Messungen in Aarhus [46].

Die AUTOSTRUCTURE Rechnung weicht teilweise stark von der experimentellen Kurve ab, sowohl in der Resonanzstärke als auch in der Position einzelner Peaks, vor allem bei niedrigen Relativenergien. So ist die TR-Resonanz  $2p^2(^1S_0)3d$  in der Rechnung recht gut in ihrer Höhe wiedergegeben, jedoch zu kleineren Energien hin verschoben. Die Anhäufung der  $2p^2(^3P_j)4l$  Resonanzen bei  $E_{cm} \approx 10$  eV stimmt nur bedingt mit der Rechnung überein. Unerklärt bleiben bisher noch Beiträge, die als Peaks oder Schultern neben der  $2s2p(^3P_j)nl$  Resonanzreihe zwischen 4 und 8.5 eV auftauchen, sowie der einzelne Peak bei 11.8 eV, die nicht von einer  $l$ -Aufspaltung der DR  $\Delta N = 0$  Resonanzen zu kommen scheinen. Untersuchungen, ob diese Beiträge durch  $\Delta N = 1$  DR oder durch DR-Beiträge metastabiler Niveaus erklärt werden könnten, brachten negative Resultate. Jedoch beträgt die  $l$ -Aufspaltung der TR-Resonanzen für  $n = 3$  bzw.  $n = 4$  schon mehrere eV, so daß sich ungenaue Berechnungen innerhalb einer  $n$ -Mannigfaltigkeit für verschiedene  $l$  relativ stark auf das Aussehen des Spektrums auswirken. Auch die DR-Resonanzen nahe bei Relativenergie Null (Abb. 4.14 oben) werden nur unzureichend von der Theorie erklärt.

In derselben Abbildung unten zeigen sich nur marginale  $2p^2(^3P_{0,1})nl$  Beiträge, so daß die berechneten TR-Resonanzstärken im Bereich um 10 eV im wesentlichen von den Anregungen in die  $2p^2(^3P_2)4l$  und  $2p^2(^1D_2)4l$  Zustände stammen. Offensichtlich ist im theoretischen Spektrum die zu große Resonanz bei 10.4 eV dadurch zu erklären, daß die  $^1D_2$  und  $^3P_2$  Beiträge zu nahe beieinander liegen und sich zu diesem Peak auftürmen. Das experimentelle Spektrum zeigt in diesem Bereich schon bei 10 eV ein lokales Maximum, welches zu den  $2p^2(^3P_2)4l$  Resonanzen gezählt werden kann. Der Peak bei 7.4 eV und die Schulter bei 8.2 eV liegen im Bereich von TR-Resonanzen, welche von der Rechnung unterschätzt sein könnten. Auch könnten die berechneten Resonanzlagen nicht genau stimmen. So sind die ersten zwei Peaks der DR-Dreierresonanzgruppe zwischen 6 und 9 eV von der Rechnung unterschätzt, während aufgrund der darunterliegenden TR-Resonanz beim dritten die Theorie scheinbar stimmt. Jedoch ist in der experimentellen Kurve kein Hinweis auf eine darunterliegende Resonanz zu finden. Scheinbar wird die relative Lage der Niveaus innerhalb einer  $n$ -Mannigfaltigkeit aufgrund der niedrigen Hauptquantenzahlen  $n$  durch die Störungsrechnung erster Ordnung in der Theorie nicht mehr richtig wiedergegeben. Darüber hinaus bewirkt die Energiekorrektur mittels der spektroskopischen Daten nur eine Verschiebung der gesamten Rydbergserie um einen konstanten Wert. Für niedrige Hauptquantenzahlen ist eine solche Korrektur in der Regel nicht mehr vollständig zufriedenstellend.

Allgemein zeigt die Energieabhängigkeit des TR-Wirkungsquerschnitts den gewohnten Verlauf. Wobei für die Singulett TR-Resonanzen unterhalb der Triplett  $2s2p(^3P_j) \propto l$  Schwelle keine konkreten Aussagen gemacht werden können, da aufgrund der großen  $l$ -Aufspaltung für die  $n = 3$  Mannigfaltigkeit der  $^1S_0$  Resonanzen nur Beiträge für  $l = 2$

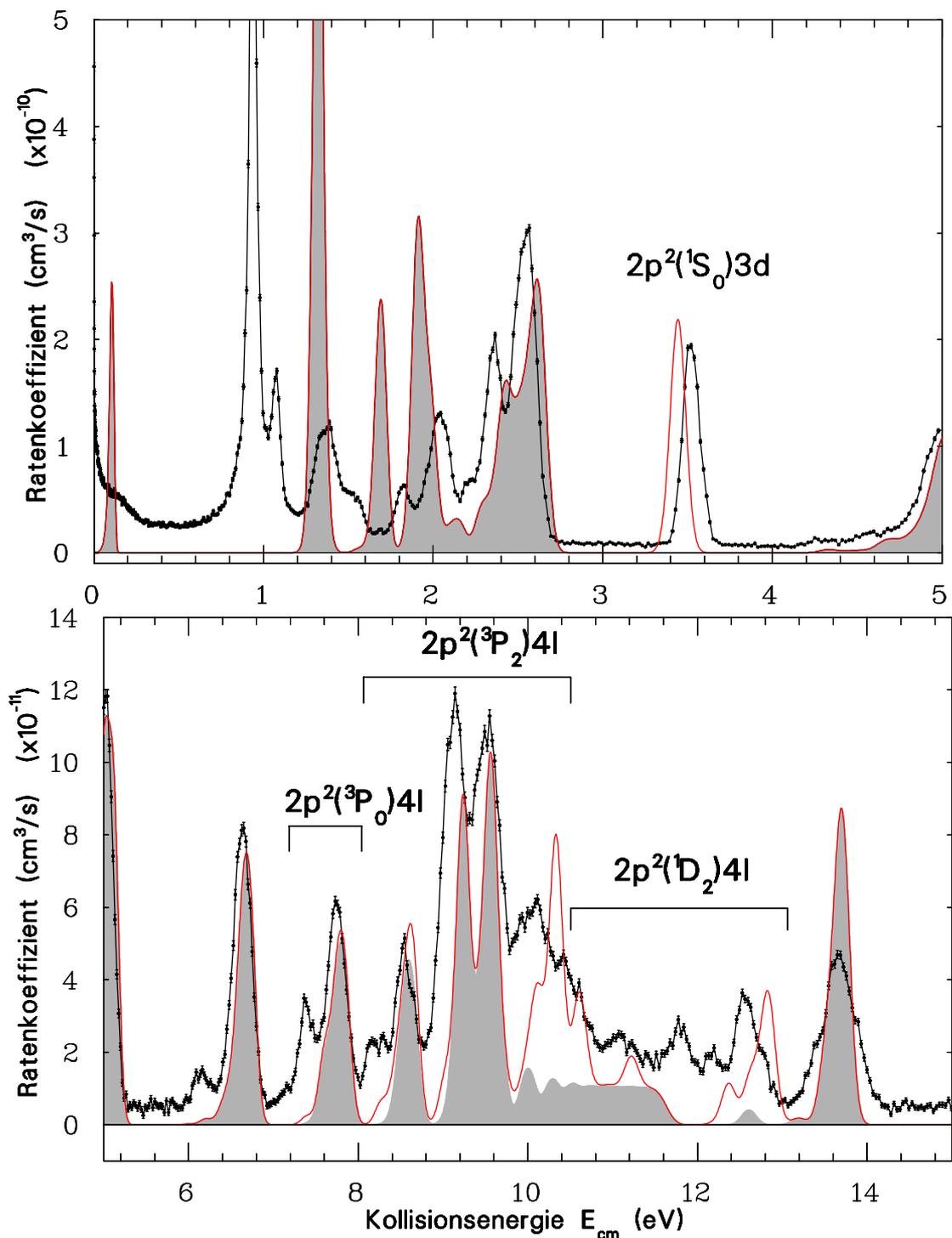
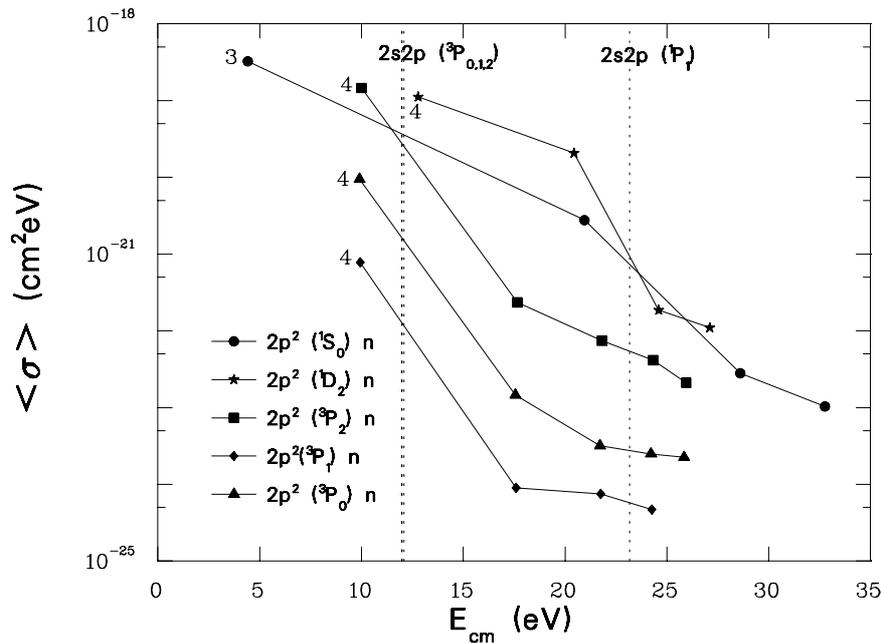


Abb. 4.14: Vergleich zwischen Experiment und Theorie im Energiebereich von 0 bis 15 eV. Die gemäß der Rechnung größten TR-Beiträge stammen von  $2p^2(^1S_0)3d$ ,  $2p^2(^1D_2)4l$  und  $2p^2(^3P_2)4l$ .

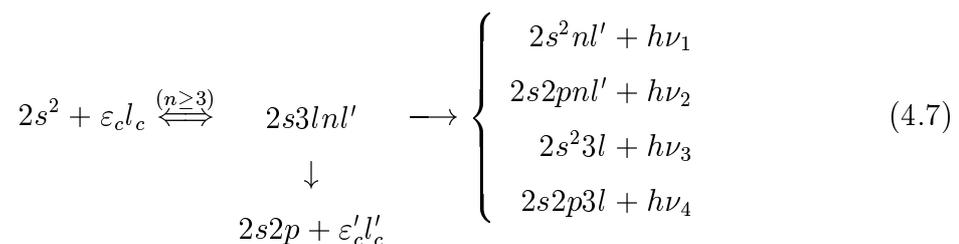


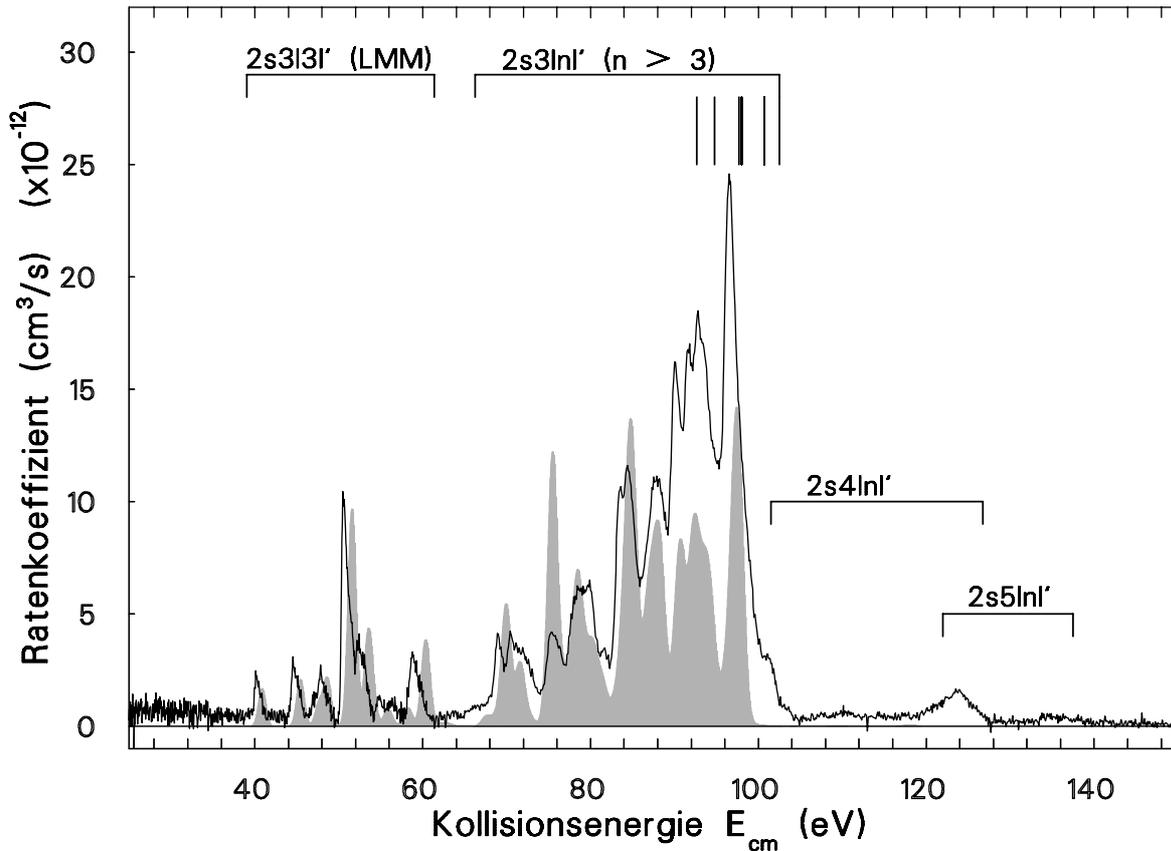
**Abb. 4.15:** Verlauf des über die jeweilige gesamte  $n$ -Mannigfaltigkeit integrierten theoretischen Wirkungsquerschnitts der einzelnen TR-Serien in Abhängigkeit der Energie.

oberhalb der ersten Ionisationsschwelle liegen bzw. die  $2p^2(^1D_2) 3l$  Resonanzen komplett unterhalb der Ionisationsschwelle liegen. Anders als bei  $Cl^{13+}$  scheint bei  $F^{5+}$  die  $^1S_0$  Serie keinen nennenswerten Beitrag mehr oberhalb der  $2s2p(^3P_j) \infty l$  Seriengrenzen zu liefern.

### 4.3.2 $\Delta N \geq 1$ Anregungen

In Hochtemperaturplasmen kann die Rekombination unter einer höheren Targetelektronenanregung als  $\Delta N = 0$  je nach Lage des Schwerpunktes der Geschwindigkeitsverteilung wesentlich stärker zum temperaturgefalteten Gesamtwirkungsquerschnitt beitragen. Ab einer Temperatur von einigen  $10^6$  K liefert die Rekombination über eine  $\Delta N = 1$  Anregung der Rumpfelektronen den Hauptanteil zum Gesamtwirkungsquerschnitt. Für Ionen der Berylliumisoelektronensequenz läuft die  $\Delta N = 1$  DR Reaktion wie folgt ab:





**Abb. 4.16:**  $\Delta N \geq 1$  DR-Spektrum von  $F^{5+}$ . Die durchgezogene Linie zeigt das gemessene Spektrum, die graue Fläche die Theorie. Zwischen ca. 40 und 60 eV liegt die LMM Resonanzgruppe. Ab  $n \geq 4$  überlappen sich die Mannigfaltigkeiten verschiedener  $n$ . Die senkrechten Striche zeigen die Seriengrenzen zu den jeweiligen  $\Delta N = 1$  Anregungen an.

Dabei erfolgt die radiative Stabilisierung (nach der geschweiften Klammer) entweder über das Rumpfelektron  $3l$  oder, falls der Rumpfelektronenzerfall LS-verboden ist, über das Rydbergelektron  $nl'$ . Signifikante TR-Beiträge für  $\Delta N \geq 1$  Rumpfelektronenanregung werden nicht erwartet, da diese aufgrund der hohen Energien der dreifach angeregten Zwischenzustände stets über erlaubte normale Autoionisationen entvölkert werden.

Wegen der kleinen Kernladungszahl und damit relativ niedrigen Anregungsenergien im Fluor war es möglich, Schwerpunktsenergien von über 170 eV mit Zwischenkühlung zu erreichen. Dieser Energiebereich umfaßt alle möglichen  $\Delta N \geq 1$  Rumpfelektronenübergänge in  $F^{5+}$ .

In Abb. 4.16 ist das experimentelle Spektrum im Energieintervall von 25 bis 150 eV zu sehen. Die  $\Delta N = 1$  Serien erstrecken sich von 40 bis 102 eV. Die vom Rest etwas abgesetzte Struktur bei niedrigen Energien entspricht den sogenannten LMM Resonanzen

und bedeutet den Einfang des Kontinuumelektrons in die M-Schale unter Anregung des in der L-Schale gebundenen Elektrons in die M-Schale. Da die  $2s3l$  Konfigurationen für  $l = 0, 1, 2$  zehn verschiedene Zustandsterme bilden, deren Energieaufspaltung gerade mal 10 eV beträgt und von denen jeweils DR-Rydbergserien ausgehen, erhält man ein überaus komplexes Spektrum. Darüber hinaus kann wegen der begrenzten Energieauflösung eine Entfaltung des Spektrums und damit auch eine Zuordnung von einzelnen Resonanzen an die DR-Rydbergserien nicht erfolgen. Der Vergleich mit der Theorie offenbart einige Diskrepanzen. Zwar werden die LMM Resonanzen recht gut von AUTOSTRUCTURE modelliert, jedoch resultiert die etwas verschobene Energielage daraus, daß die Energiekorrektur mittels spektroskopischer Daten nur bei  $n \geq 4$  funktioniert, da die Resonanzlagen der  $2s3l3l'$  Konfiguration unabhängig von den jeweiligen Rydbergserien berechnet werden und deshalb nicht mit verschoben werden. Bis  $n = 5$  werden manche Resonanzen des Spektrums von der Theorie überschätzt, während zur Seriengrenze hin die Theorie systematisch zu niedrig liegt. Eine genauere Untersuchung des theoretischen Spektrums ergab, daß bis  $n = 5$  die Rydbergserien, die zu den Targetanregungen  $2s \rightarrow 3d$  gehören, den weitaus größten Beitrag im Spektrum liefern. Jedoch ab  $n = 6$  fallen genau diese Rydbergserien jäh im Modellspektrum ab und tragen somit zum theoretischen Gesamtwirkungsquerschnitt nichts mehr bei. Auch die schulterartige Struktur an der höherenergetischen Flanke der  $\Delta N = 1$  Seriengrenzen bei  $\approx 100$  eV liegt in dem Bereich, in welchem genau die  $2s3d({}^S D_J)nl$  Serien zu ihren jeweiligen Seriengrenzen konvergieren. Des weiteren ist unklar, ob die Methode, bei höheren  $n$  die Übergangsraten mittels Skalierungsgesetzen zu berechnen, nicht zu ungenau wird. Dies ist leider unvermeidlich, da wegen der mit  $n^2$  wachsenden Anzahl an Orbitalen, in welche das Projektilektron eingefangen werden kann und die jeweils mit den Rumpfelektronen zu mehreren verschiedenen Niveaus koppeln, die Rechenleistung an ihre Grenzen stößt.

An der Seriengrenze der  $\Delta N = 1$  DR schließen sich die Beiträge der Anregung der Rumpfelektronen in die N-Schale an. Die  $\Delta N = 2$   $2s4lnl'$  Resonanzen bleiben unauflöst und türmen sich zur Seriengrenze hin zu einem Maximum bei 124 eV auf. Die LNN Resonanzen, d.h. Elektroneneinfang in die  $2s4l4l'$  Konfiguration, reichen zum Teil bis in die zuvor erwähnte schulterartige Struktur hinein. Jedoch erwartet man dort eher einen unwesentlichen Beitrag von den LNN Resonanzen, setzt man ähnliche Größenverhältnisse voraus wie bei der LMM Struktur zu den restlichen  $\Delta N = 1$  Beiträgen. Mögliche Doppelanregungen der Sorte  $2s^2 \rightarrow 2p3l$  können auch in dem Energiebereich um  $E_{cm} \approx 100$  eV auftauchen, jedoch sind dafür bisher noch keine schlüssigen Indizien gefunden worden.

Bei  $E_{cm} \approx 134$  eV deutet sich noch eine leichte Erhöhung im Spektrum an, welche den  $\Delta N = 3$  Anregungen zugeordnet werden kann.

### 4.4 Fe<sup>22+</sup>

Eine Sonderrolle in der Astrophysik spielt Eisen, da es das schwerste Element darstellt, welches in der stellaren thermischen Nukleosynthese erzeugt werden kann, da bei Eisenkernen das Maximum der Kernbindungsenergie erreicht ist. Spektroskopische Untersuchungen stellarer Koronen beweisen das Vorkommen von Eisen in hochionisiertem Zustand. Zur theoretischen Bestimmung der jeweiligen Anteile des Ionisierungsgrads in Abhängigkeit der Temperatur ist neben der Kenntnis des Ionisierungswirkungsquerschnitts auch der konkurrierende Prozeß der Elektron–Ion Rekombination von Bedeutung. Dabei liefern die DR–Experimente am TSR wertvolle Informationen [47].

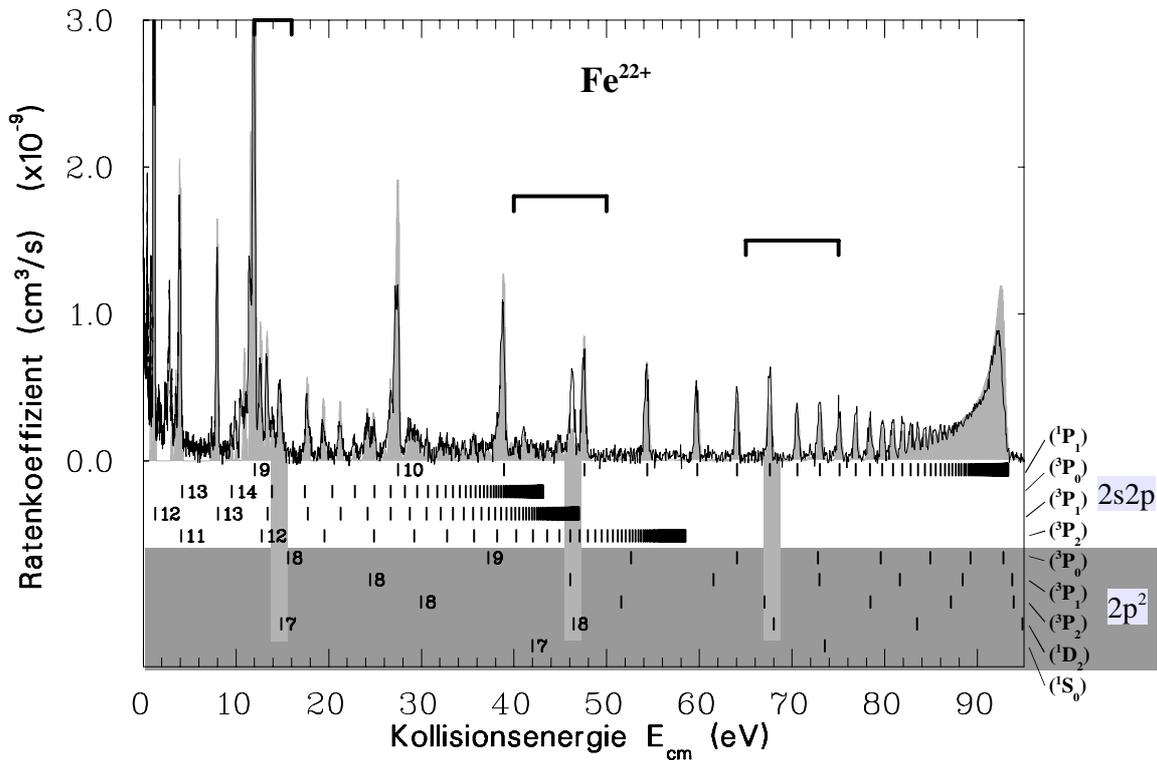
#### 4.4.1 $\Delta N = 0$ Anregungen

In Abb. 4.17 sieht man das  $\Delta N = 0$  DR– und TR–Spektrum von berylliumähnlichem Fe<sup>22+</sup>. Die Ionenenergie betrug 248 MeV. Der Elektronenstrom war auf 80 mA bei Kühlung eingestellt. Die Energiebestimmung erfolgte über die Kathodenspannungsmessung. Für die Raumladungskorrektur wurde zusätzlich die Elektronenstrommessung herangezogen. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Genauigkeit der Energiebestimmung im Schwerpunktsystem um eine Größenordnung verbessert. Da noch eine geringe Restabweichung der gemessenen Energie gegenüber den spektroskopischen Daten von etwa 0.25 % bestehen blieb, wurden die experimentellen Spektren nachträglich um einen Faktor von 1.0025 gestreckt.

Aufgrund der Nachbarschaft im Periodensystem zu Kupfer weisen die Fe<sup>22+</sup> Spektren eine starke Ähnlichkeit zu den Cu<sup>25+</sup> Spektren auf. Die stärkste DR–Rydbergserie zu der assoziierten Anregung der Targetelektronen in den  $2s2p(^1P_1)$  Zustand ist bis zu einer Hauptquantenzahl von  $n = 31$  aufgelöst. Aufgrund von Feldionisation brechen die Rydbergserien bei  $n_{cut} \approx 118$  ab. Deutliche TR–Beiträge sind bei  $E_{cm} \approx 15, 46$  und  $68$  eV auszumachen, welche der  $2p^2(^1D_2)nl$  Serie zuzuordnen sind. Auch hier zeigt sich eine deutliche Unterschätzung der TR–Beiträge dieser Serie in der Theorie.

Bei genauerer Betrachtung (Abb. 4.18) fällt auf, daß unterhalb der DR ( $^3P_j$ )  $\infty l$  Seriengrenzen der Wirkungsquerschnitt der  $2p^2(^1D_2)7l$  Gruppe im Gegensatz zu den Beobachtungen im Cu<sup>25+</sup> Spektrum überraschend gut von der Theorie wiedergegeben wird. Erst bei Überschreiten der Triplet DR–Seriengrenzen wird auch hier die Resonanzstärke der  $2p^2(^1D_2)nl$  Serie in den Rechnungen unterschätzt. Wie schon bei den anderen Spektren zeigt sich eine größere Abweichung der Theorie bei höheren Drehimpulsen der Rydbergelektronenorbitale, so bei  $E_{cm} \approx 46$  eV und  $67.5$  eV. Die gemessene Größe der  $2p^2(^1S_0)nl$  Resonanzen bei  $E_{cm} \approx 41$  eV und  $73$  eV nahe der jeweiligen  $2p^2(^1D_2)nl$  Resonanzen stimmt um einiges besser mit der Theorie überein.

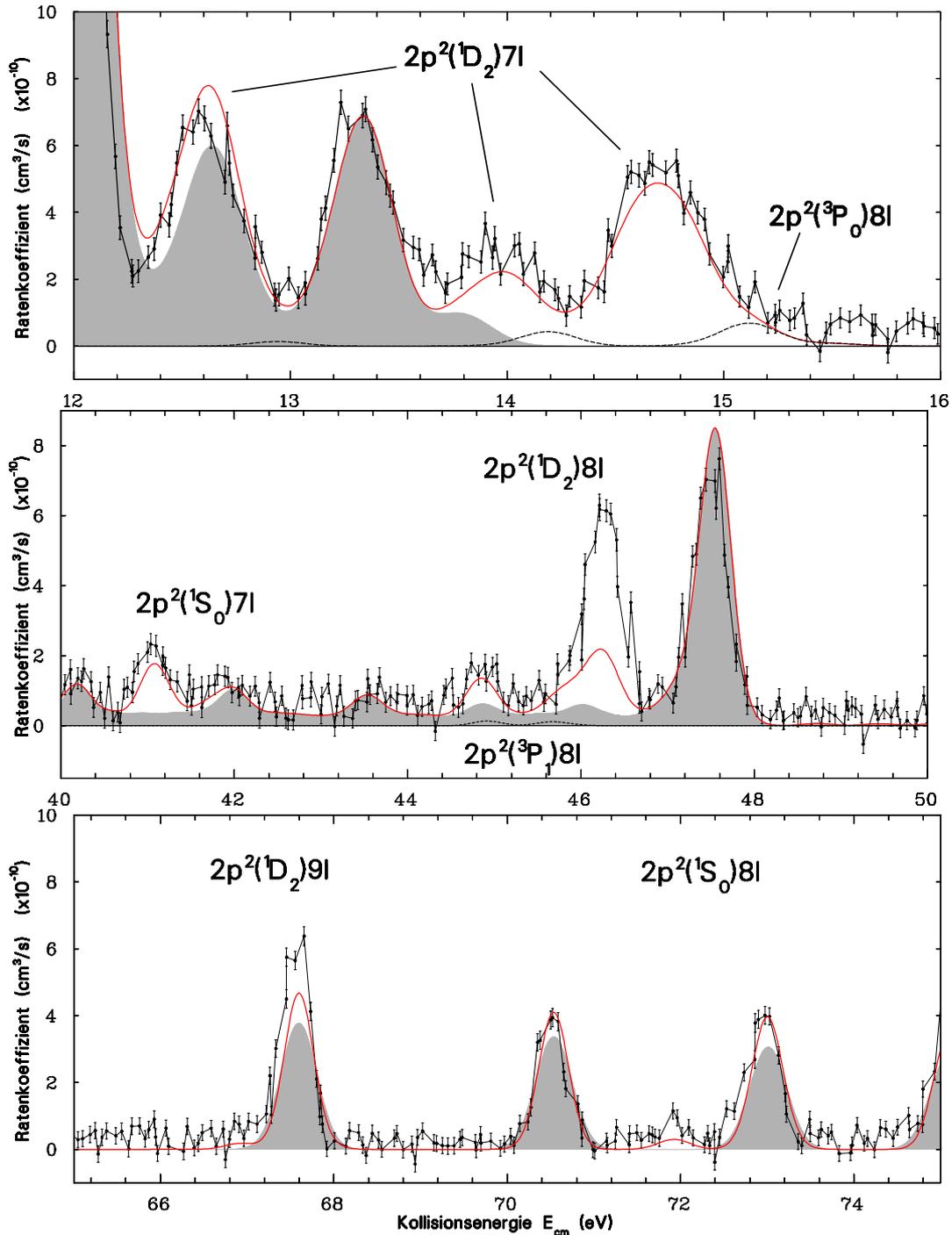
Abb. 4.19 zeigt wiederum den Verlauf der einzelnen TR–Serien in Abhängigkeit der



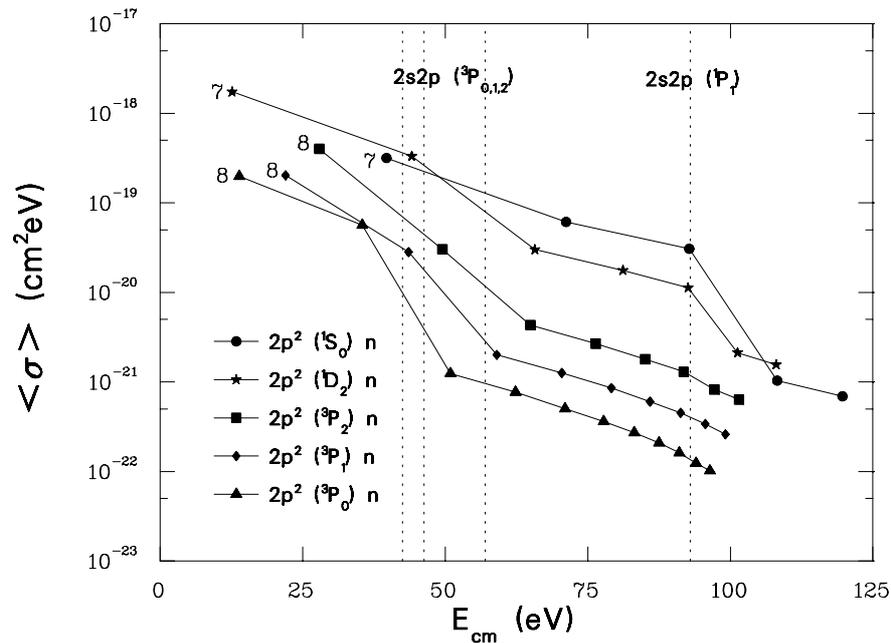
**Abb. 4.17:** DR- und TR-Ratenkoeffizienten von berylliumähnlichem  $\text{Fe}^{22+}$  aufgetragen über die Schwerpunktsenergie. Die durchgezogene Linie zeigt das gemessene Spektrum, die grau schattierte Fläche die Theorie. Unterhalb der Spektren sind die DR- und TR-Rydbergserien zu den jeweiligen  $\Delta N = 0$  Anregungen der berylliumähnlichen Targetelektronenkonfiguration dargestellt.

Energie. Analog zum  $\text{Cu}^{25+}$  zeigt sich eine deutliche Aufspaltung der  $2s2p(^3P_j)$  Terme aufgrund der intermediären Kopplung. Da einige  $2p^2(^3P_j)nl$  Resonanzen zwischen den DR Triplet P Seriengrenzen vorkommen, läßt sich zusammen mit den Kupferdaten eine tendenzielle Unterdrückung der Rumpfelektronenübergänge von den  $2p^2(^3P_j)$  Zuständen in die  $2s2p(^3P_j)$  Terme unter  $\Delta J = \pm 2$  und für  $\Delta J = 0$  bei  $J = 0$  feststellen. Die Singulett  $2p^2(^1D_2)nl$  Zustände zeigen im Gegensatz zu den Singulett  $2p^2(^1S_0)nl$  Niveaus schon eine deutliche Entvölkerung oberhalb der DR Triplet P Seriengrenzen. Auch wenn die Theorie gerade die  $2p^2(^1D_2)nl$  Resonanzen deutlich unterschätzt, so kann man auch im gemessenen Spektrum eine deutliche Abnahme des Wirkungsquerschnitts von  $(^1D_2)8l$  nach  $(^1D_2)9l$  ausmachen, s. Abb. 4.18. Da durch die intermediäre Kopplung in  $\text{Fe}^{22+}$  der  $2p^2(^1D_2)$  Zustand kein reiner LS-Term mehr ist, sondern zu 24% mit dem  $2p^2(^3P_2)$  Niveau mischt (NIST data base), verhält sich der  $(^1D_2)nl$  Wirkungsquerschnitt teilweise wie die Triplet TR-Resonanzen. Dies äußert sich in einem relativ starken Einbruch oberhalb der Triplet P DR Seriengrenzen und einem im Ver-

## Kapitel 4. Rekombinationspektren Be-ähnlicher Ionen



**Abb. 4.18:** Ausschnitte des  $\Delta N = 0$  Ratenkoeffizientenspektrums von  $Fe^{22+}$ . Die roten Kurven zeigen den gesamten theoretischen Ratenkoeffizienten für DR und TR, die grauen Flächen nur die DR-Beiträge. Die gestrichelten Linien zeigen die Hauptbeiträge der Triplet TR-Resonanzen, in den jeweiligen Energieintervallen.



**Abb. 4.19:** Der für die jeweiligen Hauptquantenzahlen  $n$  summierte Wirkungsquerschnitt der einzelnen TR-Serien in Abhängigkeit der Energie.

gleich zu der  $^1S_0$  Serie relativ schwachen Abfall über der Singulett P DR-Seriengrenze. Analog dazu ist bei der  $2p^2(^3P_2)nl$  Serie eine leichte Stufe bei der Singulett P Seriengrenze auszumachen. Demgegenüber steht eine nur 6 %ige Triplet P Beimischung des  $^1S_0$  Niveaus, so daß ein deutlich geringerer Einbruch des Wirkungsquerschnitts beim Überschreiten der DR Triplet P Seriengrenzen zu beobachten ist, jedoch ein weitaus größerer an der Singulett P DR-Seriengrenze.

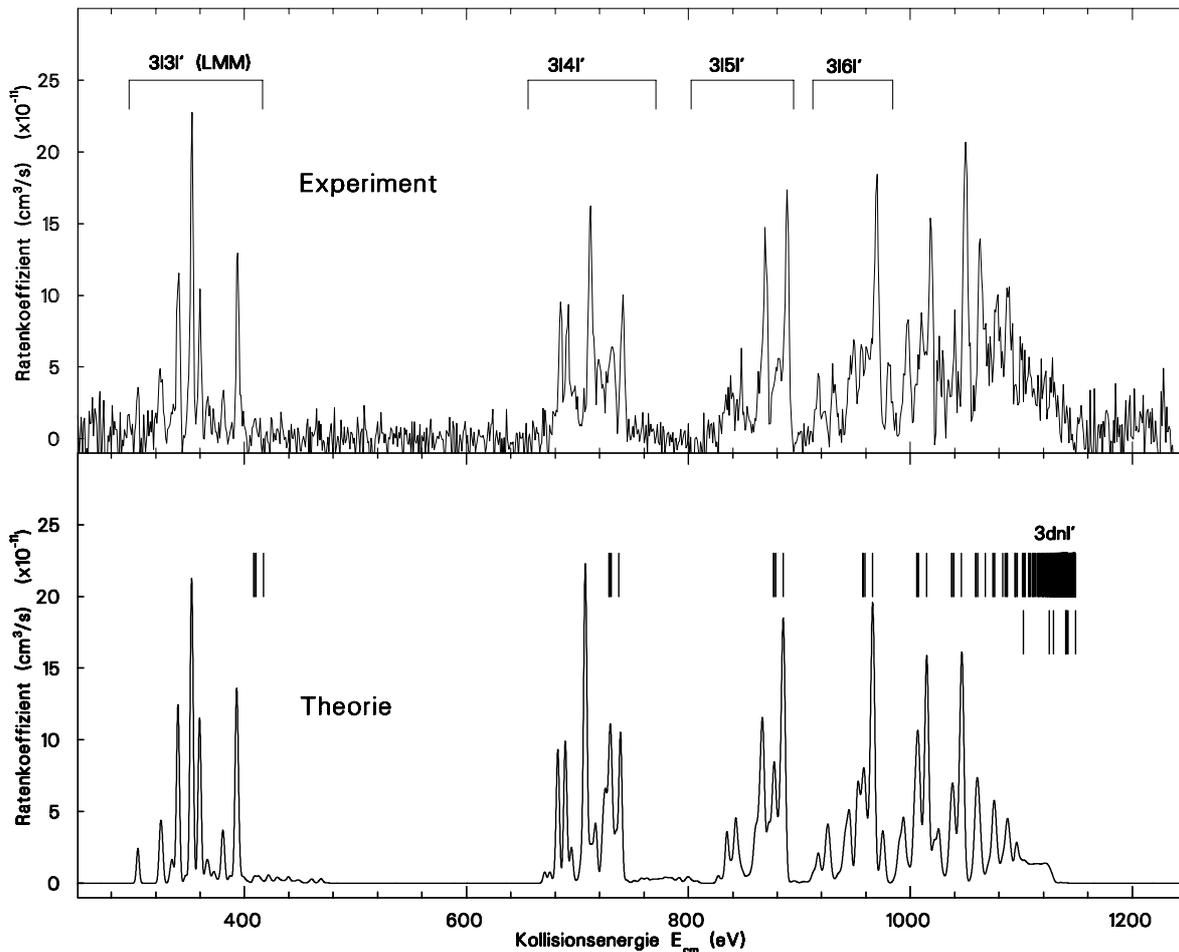
#### 4.4.2 $\Delta N = 1$ Anregungen

In hochionisierten Ionen wie berylliumähnlichem Fe<sup>22+</sup> ist für  $\Delta N \geq 1$  Anregungen die Autoionisationsrate von doppelt angeregten Zwischenzuständen wesentlich kleiner als die radiative Rate. Daher fällt in erster Näherung der energieabhängige Wirkungsquerschnitt wie die Autoionisation mit  $n^{-3}$  ab, mit  $n$  als Hauptquantenzahl des Rydbergelektrons. Zum Gesamtwirkungsquerschnitt der DR tragen deshalb hauptsächlich Einfänge in die niedrigsten doppelt angeregten Niveaus der  $2s3lnl'$  Konfigurationen bei. Da sich die  $\Delta N = 1$  Resonanzen über einen weiten Bereich von 280 bis 1200 eV erstrecken, war man nicht in der Lage, mit dem HV-Verstärker das gewünschte Energieintervall abzudecken. Nach jeder neuen Injektion und nach ausreichender Kühlzeit wurde deshalb innerhalb von 2 s mit dem Hauptnetzgerät eine geeignete Offsetspannung auf das Kühlpotential eingestellt, um in den gewünschten Relativenergiebereich

zu gelangen. Innerhalb eines Scans konnte dann mit dem HV-Verstärker, abhängig von der Endspannung am Hauptnetzgerät, ein bestimmter Teilbereich der  $\Delta N = 1$  DR abgetastet werden. Nach der Auswertung der Einzelspektren werden diese passend aneinandergelagert. Da zwangsläufig eine Zwischenkühlung nicht machbar war, ist ein gewisser Anteil der Resonanzverbreiterung dem Aufheizen des Ionenstrahls zuzuordnen und entspricht nicht der tatsächlichen Elektronentemperatur.

Im Gegensatz zu den  $\Delta N = 0$  Messungen mit typischen Signal-zu-Untergrund Verhältnissen von 2 : 1 erreichte man wegen der geringen Rekombinationsrate bei den  $\Delta N = 1$  Messungen in der Regel nur ein recht ungünstiges Verhältnis von 4 : 100. Dadurch wirken sich etwaige Schwankungen der Untergrundrate stark auf die Bestimmung des DR-Ratenkoeffizienten aus. Die Untergrundrate wächst mit steigendem Elektronenstrom, da einem stärkeren Ausgasen am Kollektor zufolge der Restgasdruck ansteigt. Deshalb wird zu jeder Meßenergie die Referenzrate bei einer festen Relativenergie aufgenommen, um der globalen Restgasdruckänderung im Scanverlauf Rechnung zu tragen. Eine zusätzliche Modulation auf die Untergrundrate wird dadurch verursacht, daß die Druckausbreitung im Kühler im Zeitbereich von Millisekunden abläuft [48] und somit in der Größenordnung der Wobbelfrequenz liegt. Das hat zur Folge, daß sich Druckänderungen aufgrund des schnellen Wechsels zwischen Meßenergie und Referenzenergie jeweils verzögert auswirken. Wenn zum Beispiel die Messung zunächst bei niedriger Energie erfolgt und danach der Referenzwert zu höheren Werten angesteuert wird, so mißt man zum Teil eine Untergrundrate, die dem Restgasdruck der vorhergehenden Messung entspricht. Kehrt man anschließend zu einem niedrigeren Meßwert zurück, sitzt das Signal auf einem Untergrund, der eher der erhöhten Rate bei der Referenz entspricht. Beim Untergrundabzug zieht man so im Mittel für niedrige Meßenergien einen etwas zu kleinen Untergrund ab und für Meßenergien, die über der Referenz liegen, einen zu großen. In erster Näherung wurde dieser Umstand durch eine geeignete Offsetverschiebung des gemessenen Untergrunds, abhängig von der relativen Lage der Schwerpunktsenergie zum Referenzpunkt, bereinigt.

Abb. 4.20 oben zeigt ein gemessenes Spektrum im Energiebereich der über die  $\Delta N = 1$  Rumpfelektronenanregung assoziierten DR-Resonanzen von 250 bis 1250 eV Schwerpunktsenergie. Die entsprechenden Seriengrenzen erstrecken sich von  $E_{cm} \approx 1100$  bis 1150 eV. Die Resonanzgruppen der  $2s3lnl'$  Rydbergserie sind ausgehend von der LMM Struktur bis einschließlich  $n = 6$  voneinander separiert. Im weiteren Verlauf überlagern sich die Resonanzen verschiedener Rydbergquantenzahlen  $n$ , so daß die einzelnen Seriengrenzen nicht mehr aufgelöst im Spektrum erscheinen. Die untere Hälfte von Abb. 4.20 zeigt das mit AUTOSTRUCTURE erzeugte Modellspektrum. Global zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment. Offensichtlich stimmt die Berechnung der relativen Energielagen, denn aufgrund der Vielzahl an beteiligten Rekombinationsniveaus äußern sich schon kleine Energieverschiebungen



**Abb. 4.20:**  $\Delta N = 1$  DR-Spektrum in  $\text{Fe}^{22+}$ . Das obere Bild zeigt den experimentellen Ratenkoeffizienten, das untere den theoretischen. Die Energien aus der Rydbergformel für die  $2s3dnl'$  Serien sind im unteren Bild als senkrechte Striche dargestellt, sowie darunter alle DR-Seriengrenzen für  $\Delta N = 1$ .

relativ zueinander in einer drastischen Veränderung des Spektrumverlaufs. Im Detail weichen manche gerechneten Resonanzstärken stärker von Experiment ab, was möglicherweise in der nicht vollständigen Berücksichtigung aller beteiligten Zerfallskanäle der Niveaus, die jenen Resonanzen zugeordnet sind, begründet liegt. Die Rydbergserie der  $2s3dnl'$  Konfiguration liefert den größten Beitrag zum Spektrum. Dabei kann man die höchsten Resonanzen der Rumpfelektronenanregung in den  $2s3d(^1D_2)$  Zustand mittels der Rydbergformel zuordnen. Für kleine  $n = 3, 4$  liefert die Rydbergformel aufgrund des Quantendefekts keine verlässliche Aussage mehr.

Bei genauerem Vergleich der beiden Spektren in Abb. 4.20 fällt auf, daß zu den Seriengrenzen hin im experimentellen Spektrum der Anteil hoher Rydbergquantenzahlen  $n$

## Kapitel 4. Rekombinationsspektren Be-ähnlicher Ionen

---

größer ausfällt als in der Rechnung. Im Gegensatz dazu ist besonders die LMM Gruppe in ihrer Stärke von der Theorie sehr gut wiedergegeben. Dies hat zwei Ursachen: Aufgrund des enormen Anstiegs der Rechenzeit kann nur eine beschränkte Auswahl geeigneter Konfigurationen berücksichtigt werden, so daß nur die  $2s3l3l'$  Konfigurationen der LMM Resonanzen in ihrer vollständigen Mischung berücksichtigt werden. Darüber hinaus übersteigt bei größeren Rydbergquantenzahlen  $n$  die Anzahl der beteiligten Niveaus die Rechenleistung, so daß zur Berechnung der Raten auf Skalierungsgesetze zurückgegriffen werden muß, was zwangsläufig zu ungenaueren Ergebnissen der Rechnung führt.

## Kapitel 5

# Zusammenfassung und Diskussion

Erstmalig ist die trielektronische Rekombination im Experiment nachgewiesen worden. Insgesamt wurden vier Ionen der isoelektronischen Berylliumsequenz untersucht. Um einen vernünftigen  $Z$ -Bereich abzudecken, wurde als Vertreter der leichten Elemente  $F^{5+}$ , das mittelschwere  $Cl^{13+}$ , sowie die beiden schweren Elemente  $Fe^{22+}$  und  $Cu^{25+}$  gewählt. Aufgrund der sehr guten Energieauflösung konnte man in allen Fällen bei niedrigen Kollisionsenergien detaillierte Ratenkoeffizientenspektren erhalten, die mit der Intraschalenanregung  $\Delta N = 0$  der Targetionen assoziiert sind. Nach der üblichen Zuordnung der DR-Resonanzen mittels der Rydbergformel bleiben einzelne Resonanzen oder irreguläre Erhöhungen von DR-Resonanzen zunächst unerklärt. Offenbar sind dies gerade Beiträge von TR, da die meisten dieser Peaks einerseits in das Energieschema von dreifach angeregten Zuständen passen und andererseits die Erklärung einer  $l$ -Aufspaltung herkömmlicher DR-Resonanzgruppen einer schlüssigen Argumentation nicht standhalten.

Allgemein ist es zur Zeit im Rahmen der Meßgenauigkeit nur möglich, TR-Resonanzen in dem Energieintervall zu beobachten, welches auch von der normalen DR eingenommen wird. Als weitere Einschränkung gilt dies auch nur für  $\Delta N = 0$  Rumpfelektronenanregungen. In vorliegender Arbeit wurde gezeigt, daß dies daran liegt, daß die TR-Resonanzstärke sehr stark von der Abwesenheit erlaubter Kontinuumskanäle abhängt, in welche die dreifach angeregten Zwischenzustände autoionisieren könnten. Als Folge dieser charakteristischen Eigenschaft der dreifach angeregten Zwischenzustände weicht im Gegensatz zu den DR-Serien der TR-Wirkungsquerschnitt stark von einer stetigen Energieabhängigkeit innerhalb einer Rydbergserie ab. Die experimentelle Empfindlichkeit reicht dabei nicht aus, den gesamten TR-Verlauf einzelner Serien zu beschreiben, denn sobald sich im Verlauf einer Serie erlaubte Kontinua öffnen, werden die TR-Zwischenzustände praktisch sofort wieder entvölkert und die Resonanzstärke nimmt um einige Größenordnungen ab. In unseren experimentellen Betrachtungen läßt sich deutlich ein Interkombinationsverbot für die Autoionisation aus dreifach angeregten Zuständen erkennen. So können oberhalb der  $2s2p(^3P_j)$  Seriegrenzen zwar TR-Resonanzen beobachtet werden, die über die Rumpfelektronenanregung in die Sin-

gulett-niveaus  $2p^2(^1D_2)$  und  $2p^2(^1S_0)$  erfolgen, jedoch keine TR-Beiträge über Rumpfelektronenanregung in die  $2p^2(^3P_j)$  Zustände. Oberhalb der  $2p^2(^1P_1)$  DR-Seriengrenze sind überhaupt keine Hinweise mehr auf TR-Beiträge auszumachen. Besonders starke TR-Wirkungsquerschnitte, die sogar in der Größenordnung von DR liegen, erhält man bei niedrigen Anregungsenergien, wenn sowohl als einziger Verlustkanal nur die Dreielektronen-Autoionisation in das Eingangskontinuum in Frage kommt als auch alle strahlenden Dipolübergänge in doppelt angeregte Niveaus unterhalb der ersten Ionisationsschwelle führen und somit sofort zur Stabilisierung beitragen. Gerade die starke Präsenz von TR im niederenergetischen Teil des Spektrums erfordert deren Einbeziehung in die theoretische Abschätzung des temperaturgefalteten Maxwell'schen Rekombinationswirkungsquerschnitts für kalte Plasmen.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde die theoretische Modellierung des Ratenkoeffizientenspektrums mit dem Programmpaket AUTOSTRUCTURE durchgeführt. Dadurch war es unter anderem möglich, die Einzelbeiträge der jeweiligen TR-Serien zu verfolgen, was mit den experimentellen Spektren allein nicht realisierbar ist, da sich TR- und DR-Serien zum Teil überlagern und somit keine komplette TR-Serie isoliert von den anderen Resonanzen gemessen werden konnte. Der Vergleich mit dem Experiment zeigt, daß die DR-Beiträge für mittelschwere bis schwere Ionen, d.h. bei  $Cl^{13+}$ ,  $Fe^{22+}$  und  $Cu^{25+}$ , sehr gut von der Rechnung reproduziert werden und in der Regel innerhalb der systematischen experimentellen Fehlergrenzen liegen.

Unter Einbeziehung der Mischung von Elektronenkonfigurationen, insbesondere zwischen den  $2s^2$  und  $2p^2$  Konfigurationen, läßt sich mit AUTOSTRUCTURE ein endlicher TR-Beitrag zum Rekombinationsspektrum berechnen. Im Prinzip werden die TR-Resonanzen von der Theorie realistisch dargestellt. Jedoch zeigt sich allgemein eine deutlich schlechtere Einschätzung der Stärke einzelner TR-Beiträge, wobei eine allgemeine Tendenz nicht auszumachen ist. In der Regel stimmen die theoretischen Singulett TR-Resonanzen unterhalb der Triplett DR-Seriengrenzen recht gut mit dem Experiment überein, während sie darüber ab einem Bahndrehimpuls der Resonanz von  $l \geq 2$  prinzipiell unterschätzt werden. Diese  $l$ -Abhängigkeit scheint dabei stärker für die  $2p^2(^1D_2)$  TR zu gelten, da der Schwerpunkt des Wirkungsquerschnitts von  $2p^2(^1S_0)$  bereits bei  $l = 1$  und  $l = 2$  liegt und somit eine Unterschätzung höherer  $l$ -Beiträge nicht so stark ins Gewicht fällt. Im Vergleich dazu liegt der Hauptanteil der  $2p^2(^1D_2)nl$  Resonanzen innerhalb einer  $n$ -Mannigfaltigkeit bei  $l = 3$ , s. a. Abb. 4.5 und 4.6. Eine ähnliche Unterschätzung kann auch für die  $2p^2(^3P_j)nl$  Resonanzen bei den schweren Ionen beobachtet werden.

Vergleicht man den berechneten, über die  $n$ -Mannigfaltigkeit integrierten Wirkungsquerschnitt der einzelnen TR-Serien sowohl untereinander als auch zwischen den verschiedenen Ionen, so können die experimentell beobachteten Auswahlregeln für Autoionisation noch ergänzt werden. So wird analog zu den erlaubten Dipolübergängen

---

der strahlungslose Rumpfelektronenübergang zwischen gleichen Multipletts  $^S L_J$  für  $\Delta J = 2$  und  $\Delta J = 0$  für  $J = 0$  unterdrückt, vgl Abb. 4.12 und 4.19. Innerhalb der isoelektronischen Berylliumsequenz zeigt sich mit zunehmendem  $Z$  ein immer größerer Einfluß der intermediären Kopplung, welcher das strikte Interkombinationsverbot zwischen verschiedenen Multipletts der Rumpfelektronenzustände teilweise aufhebt.

Etwas aus der Rolle schlägt  $F^{5+}$ . Die theoretischen Berechnungen stimmen bei weitem nicht so gut mit den Messungen überein wie bei den anderen drei Ionen. Da bei leichten Ionen die Autoionisationsraten in erster Näherung nicht zur Größe des Wirkungsquerschnitt beitragen, beeinflusst deren ungenaue Bestimmung durch die Theorie kaum das Ergebnis. Die radiativen Raten, welche demnach hauptsächlich für die Stärke des Wirkungsquerschnitts verantwortlich sind, reproduzieren im großen und ganzen die Größenverhältnisse der Resonanzstärken richtig. Der Hauptunterschied liegt in den verschobenen Resonanzenergien. Zwar liegen die modellierten TR-Resonanzen in der Nähe der von der normalen DR abweichenden Strukturen, jedoch sind die jeweiligen Resonanzlagen nicht gut wiedergegeben, sowohl innerhalb einer  $n$ -Mannigfaltigkeit einer TR-Serie als auch in den relativen Positionen der einzelnen Serien zueinander. Erschwerend kommt hinzu, daß die Hauptquantenzahlen  $n$  bei  $F^{5+}$  TR klein sind und damit deren  $l$ -Aufspaltung relativ große Ausdehnungen im Spektrum aufweisen. Die recht ungenaue Energieberechnung mit dem verfügbaren Programmpaket AUTOSTRUCTURE erschwert besonders bei leichten Ionen die exakte Wiedergabe der Rekombinationsspektren.

Allgemeine Ursachen für die sichtbaren Abweichungen bei den Stärken der TR-Resonanzen können darin begründet sein, daß die Übergangsraten der beteiligten Niveaus aufgrund der endlichen Anzahl von berücksichtigten Elektronenkonfigurationen nicht mehr akkurat in der Konfigurationsmischung beschrieben werden. Da in AUTOSTRUCTURE Störungsrechnungen zweiter Ordnung nicht durchgeführt werden, finden die bereits erwähnten Shake-Effekte keine Berücksichtigung in den Modellspektren. Ebenfalls nicht mit einbezogen wird der etwas exotische Zweistufenprozeß, bei welchem, falls doppelt angeregte Zwischenzustände innerhalb der natürlichen Resonanzbreite dreifach angeregter Zustände liegen, ein Zweistufeneinfang über eben ein solches DR-Zwischenniveau durchaus denkbar ist. Vor allem bei den hohen Niveaudichten an den  $2s2p$  DR-Seriengrenzen sollte ein solches Szenario stattfinden, vorausgesetzt ein dreifach angeregter Zustand ist energetisch erreichbar. Bisher sind für  $\Delta N = 0$  jedoch keine MBPT Rechnungen in zweiter Ordnung Störungstheorie durchgeführt worden. Auch eine analytische Behandlung der  $\Delta N = 0$  TR ist noch nicht erfolgt.

Die richtige Modellierung der TR-Beiträge in den experimentellen Spektren setzt das Verständnis für den genauen Ablauf der Dreielektronenwechselwirkung voraus und stellt eine Herausforderung für die Theorie dar. Die adäquate Einbeziehung von Viel-elektronenkorrelationsprozessen wie Relaxation und Konfigurationswechselwirkung in

## Kapitel 5. Zusammenfassung und Diskussion

---

der theoretischen Beschreibung kann dabei nur im Zusammenwirken mit dem Experiment erfolgen. Während dies für  $\Delta N = 1$  TR schon zum Teil durchgeführt wurde, ist bisher für  $\Delta N = 0$  TR und im speziellen für TR in berylliumähnlichen Ionen keine umfassende theoretische Behandlung erfolgt. Modellrechnungen, die mit dem Atomstrukturprogramm AUTOSTRUCTURE durchgeführt wurden, liefern einen Vergleich zu den experimentellen Spektren und erlauben, wie hier demonstriert, einen tieferen Zugang zur TR. Abweichungen zwischen Theorie und Experiment zeigen aber auch auf, daß noch weiterer Handlungsbedarf seitens der Theorie besteht. Die gemessenen Spektren dienen dabei als wertvoller Prüfstein für zukünftige Rechnungen.

Von experimenteller Seite aus gesehen wäre eine intensive Untersuchung begrenzter Energieintervalle oberhalb der DR-Seriengrenzen, in denen man energetisch mögliche TR-Beiträge erwartet, von hohem Interesse, da diese nicht von den viel stärkeren DR-Resonanzen überdeckt wären. Vor allem bei leichten Ionen erwartet man einen weniger starken Abfall der TR-Serien aufgrund des größeren Verhältnisses von Dreielektronen-Autoionisation zu normaler Autoionisation. Je günstiger (größer) dieses Verhältnis ausfällt, desto eher wird man in der Lage sein, in hochauflösenden Messungen diese TR-Resonanzen auch wirklich zu beobachten. Für die sinnvolle Auswahl geeigneter Ionen können theoretische Abschätzungen sehr von Vorteil sein. Im Hinblick auf das neue Elektronentarget, welches in Kürze fertig gestellt sein wird, erhofft man sich deutlich energieschärfere Rekombinationsspektren, so daß es auch in Bereichen dicht liegender Resonanzen möglich sein müßte, experimentell eine bessere Trennung der TR-Serien von den DR-Beiträgen zu erreichen.

## Anhang A

# Numerische Berechnung des Ratenkoeffizienten

Die im Rahmen dieser Arbeit gezeigten Modellspektren wurden numerisch mit dem Programmpaket AUTOSTRUCTURE erstellt. Die Ermittlung des temperaturgefalteten DR-Ratenkoeffizienten verläuft sequentiell über zwei voneinander getrennte Teilprogramme. Zunächst einmal werden für ein spezielles Ion die Wellenfunktionen sämtlicher Zustände und deren Energien sowie die entsprechenden radiativen und Autoionisationsraten zu diesen Zuständen berechnet und in eine ASCII-Datei abgelegt. Der Benutzer muß eine Eingabedatei in einem fest definierten Format erstellen, über welche die vorgeschriebenen und optionalen Parameter an AUTOSTRUCTURE übergeben werden. Da die Instruktionen des AUTOSTRUCTURE-Manuals „writeup“ teilweise recht knapp gehalten sind, sei an dieser Stelle die Eingabenotation nochmals erläutert. Abb. A.1 zeigt eine typische Parametereingabedatei für  $\text{Cl}^{13+}$ . Die Kopfzeile muß mit der Zeichenfolge „S.S.“ beginnen. Alle weiteren Eingaben in der Kopfzeile dienen als Kommentar. Ab der zweiten Zeile werden die Inputkonfigurationen übergeben, die in der noch von SUPERSTRUCTURE herrührenden Eissner-Notation definiert sind. Dabei dürfen bis auf die erste Konfigurationenzeile alle weiteren Zeilen erst ab einschließlich der elften Stelle beginnen. Die Ziffernfolge 1 bis 9 zu Beginn dieses Abschnitts dient nur der formatierten Übergabe und enthält sonst keinerlei Information. Die einzelnen Konfigurationen sind durch ein Leerzeichen voneinander getrennt. Eine Elektronenkonfiguration wird in der Schreibweise „ $\alpha_1 n_1 5 \alpha_2 n_2 \dots$ “ übergeben. Dabei stehen die Zahlen  $\alpha_i$  für die Besetzungszahlen der Einzelorbitale. Die Zahl  $n_i$  bezeichnet das  $n_i$ te Orbital der Auflistung, welche in der neunten Zeile im Anschluß an den Konfigurationenblock zu finden ist. Als Trennsymbol zwischen den verschiedenen Orbitalen innerhalb einer Konfiguration dient die Ziffer 5. Die Aufschlüsselung der Orbitale in Zeile neun erfolgt über die standardmäßige  $nl$  Notation mit der Hauptquantenzahl  $n$  und der Drehimpulsquantenzahl  $l$ . Diese Orbitale sind wiederum durch ein Leerzeichen voneinander zu trennen. Folglich sind in Abb. A.1 die Orbitale  $1s$ ,  $2s$ ,  $2p$ ,  $3s$ ,  $3p$  und  $3d$  aufgelistet. Als nächste Zeicheneinheit folgt „802“, welches für die Rydbergorbitale steht, gefolgt

## Anhang A. Numerische Berechnung des Ratenkoeffizienten

---

```

S.S. DR + TR
123456789 22513 12523 33
          22517 12513517 23517
          22518 12513518 23518
          22519 12513519 23519
          2251A 1251351A 2351A
          2251B 1251351B 2351B
          2251C 1251351C 2351C
                10 20 21 30 31 32802900901902903904
&SALGEB RUN='DR' RAD='YES' CUP='IC' TITLE='2-2,n' KCOR1=1 KCOR2=1 &END
&DRR  NMIN=05 NMAX=030 JND=10 LMIN=0 LMAX=029 LCON=5 &END
31 40 70 100 150 200 400 600 800 950
&SMINIM NZION=-17 PRINT='FORM' &END
&SRADCON MENG=-20 &END
0.00 6.00

```

**Abb. A.1:** Eingabedatei für den ersten Teil der *AUTOSTRUCTURE*-Berechnungen.

---

von den Kontinuumsorbitalen, die jeweils mit der Ziffer „9“ angeführt sind. Rydberg- und Kontinuumsorbitale stehen so zueinander in Verbindung, daß diejenigen Orbitale, welche in ihrer letzten Ziffer übereinstimmen, den gleichen Drehimpuls besitzen. Die übrigen Kontinuumsorbitale besitzen Drehimpulse, die jeweils in der Differenz ihrer letzten Ziffer von dem Rydbergdrehimpuls abweichen. In dem Beispiel gehören zu jedem Rydbergorbital  $nl$  fünf Kontinuumsorbitale  $\varepsilon(l-2)$ ,  $\varepsilon(l-1)$ ,  $\varepsilon l$ ,  $\varepsilon(l+1)$  und  $\varepsilon(l+2)$  und tragen somit den  $l$ -Auswahlregeln der Autoionisation Rechnung. Da es mehr als neun verschiedene Einzelorbitale gibt, erfolgt deren Nummerierung ab Nummer zehn alphabetisch zunächst in Großbuchstaben, danach in Kleinbuchstaben. In der Regel reicht dies aus, alle wichtigen Inputkonfigurationen zu beschreiben. Das Beispiel enthält also drei L-Schalen Konfigurationen:

$$2s^2 2p \quad 2s 2p^2 \quad 2p^3,$$

drei Rydbergkonfigurationen:

$$2s^2 nl \quad 2s 2pnl \quad 2p^2 nl$$

und fünfzehn Kontinuumskonfigurationen

$$\begin{array}{lll}
 2s^2 \varepsilon(l-2) & 2s 2p \varepsilon(l-2) & 2p^2 \varepsilon(l-2) \\
 2s^2 \varepsilon(l-1) & 2s 2p \varepsilon(l-1) & 2p^2 \varepsilon(l-1) \\
 2s^2 \varepsilon l & 2s 2p \varepsilon l & 2p^2 \varepsilon l \\
 2s^2 \varepsilon(l+1) & 2s 2p \varepsilon(l+1) & 2p^2 \varepsilon(l+1) \\
 2s^2 \varepsilon(l+2) & 2s 2p \varepsilon(l+2) & 2p^2 \varepsilon(l+2).
 \end{array}$$

Der nächste Block in der Eingabedatei stellt die Parameter für die Berechnung der Autoionisationsraten, der radiativen Raten sowie der Rydbergwellenfunktionen. Die

---

erste Zeile, mit „&SALGEB“ angeführt und mit „&END“ beendet, enthält folgende Einstellungen:

RUN='DR': bestimmt, daß alle notwendigen Energien und Raten für dielektronische Rekombination berechnet werden.

RAD='YES': berechnet Dipolübergänge.

CUP='IC': verwendet intermediäre Kopplung der Drehimpulse.

KCOR1, KCOR2=1, 1: nennt die niedrigste, höchste abgeschlossene  $nl$ -Schale, die nicht in den Inputkonfigurationen auftreten — hier im Beispiel die  $1s$ -Schale.

Falls, wie im Beispiel „RUN='DR'“ gesetzt wurde, wird die nächste Zeile eingelesen, die die Berechnungen zu den Rydbergkonfigurationen abhandelt. Mit „NMIN“ und „NMAX“ wird der Bereich der Hauptquantenzahlen  $n$  des Valenzelektrons festgelegt. Zu jedem  $n$  werden in einer Schleife über den Drehimpuls  $l$  des Rydberg-elektrons alle Wellenfunktionen und Energien der Niveaus der entsprechenden Rydberg-inputkonfigurationen berechnet. Zwischen den Niveaus innerhalb der jeweiligen  $n$ -Mannigfaltigkeiten werden alle radiativen Übergänge ermittelt sowie die Autoionisationsraten und radiativen Raten zu den übrigen Inputkonfigurationen. Daher sind radiative Rydbergübergänge nur zu den Inputkonfigurationen vorgesehen. Dabei müssen die Elternkonfigurationen zwischen den Rydberg- und L-Schalenkonfigurationen übereinstimmen. Weitere Parameter dieser Zeile sind:

JND=10: Anzahl weiterer Rydberghauptquantenzahlen  $n$ , die in der nächsten Zeile aufgelistet sind. Zusätzlich wird vom Programm jeweils ein Zwischenwert zur Verfügung gestellt. Die entsprechenden Niveaus und Raten werden analog nach dem zuvor beschriebenen Verfahren berechnet.

LMIN, LMAX=0, 029: Festlegung des kleinsten, größten Drehimpulses  $l$  innerhalb jeder  $n$ -Mannigfaltigkeit.

LCON=5: Anzahl der Kontinuumskonfigurationen zu jedem  $l$  der Valenzelektronen.

Die letzten beiden Parameterzeilen, welche mit „&SMINIM“ bzw. „&RADCON“ beginnen, enthalten:

NZION=-17: Kernladungszahl  $Z$  des Ions. Das Minuszeichen bewirkt, daß die Radialfunktionen in einem Hartree-Modellpotential, welches mit *Slater-Type* Orbitalen ermittelt wird, berechnet werden. Bei fehlendem Minuszeichen wird das Elektronenpotential mittels der Thomas-Fermi-Dirac Methode berechnet.

PRINT='FORM': Die Ergebnisse werden in einer formatierten ASCII-Datei abgelegt.

## Anhang A. Numerische Berechnung des Ratenkoeffizienten

---

```
&ONE NTAR1=1 NTAR2=1 UNITS=1.000 NPUB=3 IPRINT=-1 NCUT=72 LCUT=-71
  NC=-1 RUN='DR' NX=00 &END
&TWO NBIN=5001 EMIN=0.0 EMAX=5.0 EWIDTH=0.000 NR1= 3 NR2=-5 NECOR=10
  TPAR=1.10e-5 TPER=7.35e-4 &END
  1 0
0.000 1.9357 1.9859 2.0951 3.9075 5.1013 5.1646 5.2609 5.8407 7.1464
0.000 1.9452 2.0035 2.1202 3.8337 5.1403 5.2087 5.3037 5.8217 7.0950
&THREE EMESH=0.5 SMAX1=0.000 SMIN2=0.0 SMESH2=20.0 SMAX2=120.0
CONVRT=1.0E-11 &END
1.0
```

**Abb. A.2:** Eingabedatei für den zweiten Teil von *AUTOSTRUCTURE*, den Postprozessor

---

MENG=-20: Bestimmt die Anzahl der Interpolationsenergien für die Kontinuumsorbitale. Das Minuszeichen bewirkt, daß diese Anzahl intern im Programm bestimmt wird.

Die letzte Zeile setzt den Energiebereich in Rydberg fest, welcher die Berechnung der Orbitale auf dieses Intervall beschränkt. Um *AUTOSTRUCTURE* zu starten ist der Befehl „asrun <Name der Eingabedatei>“ über die Standardeingabe auszuführen. Die formatierte Ausgabedatei, die sämtliche Energien und Raten beinhaltet, erhält die Bezeichnung „oic“.

In einem zweiten Schritt werden nun mit einem weiteren Programmteil von *AUTOSTRUCTURE*, dem sogenannten Postprozessor, die DR-Wirkungsquerschnitte und Ratenkoeffizienten berechnet. Darüberhinaus werden die Beiträge der im ersten Teil nicht berechneten Rydbergzustände durch eine numerisch über  $n$  integrierte Interpolation berücksichtigt. Der Postprozessor erwartet die Datei, welche die Ausgangsdaten des ersten Programmschritts enthält unter dem Namen „o1“, so daß der Benutzer die „oic“ Datei zunächst einmal in „o1“ umbenennen muß. Abb. A.2 zeigt die entsprechende vom Benutzer zu erstellende Eingabedatei des Postprozessors für  $\text{Cl}^{13+}$ , welche zwingend unter der Bezeichnung „dr csin“ anzulegen ist. Folgende Parameter werden dabei in drei Abschnitten, welche jeweils mit „&ONE“, „&TWO“ und „&THREE“ angeführt werden, an den Postprozessor übergeben:

NATR1, NATR2=1, 1: Anzahl der Anfangs- bzw. Endzustände des Targetions. Ersteres ist wichtig für die Einbeziehung von metastabilen Zuständen. Letzteres wird für DR nicht verwendet. Die Multiplizität  $(2S+1)$  und der gesamte orbitale Drehimpuls  $L$  des Anfangszustandes werden nach der Parameterliste „&TWO“ geliefert — hier:  $^1S_0$ .

UNITS=1.00: legt die Energieeinheiten in Rydberg fest.

NPUB, IPRINT: bezieht sich auf die graphische Darstellung.

NCUT, LCUT=72, 71: setzt die Abbruchbedingung für Feldionisation.

---

NC=-1: energiegebinnte Wirkungsquerschnitte werden in eine zusätzliche Datei („ocs“) geschrieben.

RUN='DR': Berechnung für dielektronische Rekombination.

NX=00: keine Eingabe experimenteller Datensets.

NBIN=5001: Anzahl der Energiebins.

EMIN, EMAX=0.0, 5.0: Energieintervall in Rydberg, in dem die Zustände liegen sollen, für die DR gerechnet werden soll.

EWIDTH=0.000: der energiegebinnte Wirkungsquerschnitt wird zusätzlich über eine charakteristische Temperaturverteilung der Elektronen des Elektronenkühlers integriert.

NR1, NR2=3, -5: niedrigstes bzw. höchstes  $n$ -Orbital, in welchem der radiative Zerfall des Valenzelektrons endet. Der Postprozessor berechnet dabei, ausgehend von den von AUTOSTRUCTURE gelieferten Rydbergzuständen, mittels der analytischen Formeln für Zwischenschalenübergänge der wasserstoffähnlichen Ionen die Rydbergstabilisierung. Das Minuszeichen bei NR2 bedeutet, daß alle unterhalb des Ausgangszustandes liegenden Rydbergzustände miteinbezogen werden. Die niedrigsten Endzustände der Rydbergstabilisierung dürfen dabei nicht in den Inputkonfigurationen auftreten, da die Rydbergstabilisierung in diese schon im ersten Teil berechnet worden ist.

NECOR=10: bestimmt die Anzahl der Targetanregungsenergien, die durch experimentelle (spektroskopische) Daten ersetzt werden sollen. „NECOR“ bezieht sich dabei auf Zeile 6 der Eingabedatei, in der die relativ zum Grundzustand des Targets mit AUTOSTRUCTURE im ersten Programmschritt berechneten Anregungsenergien in Rydberg aufgelistet sind. Diese werden manuell den jeweiligen Kontinuumszuständen, welche aufgrund der Energieerhaltung den Anregungsenergien im Target entsprechen, aus der „o1“-Datei entnommen. In der nächsten Zeile sind die entsprechenden experimentellen Werte aufgelistet.

TPAR, TPER=1.1e-5, 7.35e-4: parallele bzw. transversale Elektronentemperatur in Rydberg.

EMESH bis SMAX2: Formatangaben für die Abszisse und Ordinate der graphischen Darstellung.

CONVERT=1.0E-11: Skalierungsfaktor des Ratenkoeffizienten in  $cm^3/s$ .

## **Anhang A. Numerische Berechnung des Ratenkoeffizienten**

---

Der Befehl „mdrcs“, eingegeben über die Standardeingabe, startet den Postprozessor. Während der Rechnung werden die energiegebinnten Wirkungsquerschnitte, die temperaturgefalteteten Ratenkoeffizienten sowie die zugehörigen Energien formatiert in einer Datei mit der Bezeichnung „doutgnu“ abgelegt, deren Inhalt unter anderem zur graphischen Darstellung herangezogen werden kann.

# Literaturverzeichnis

- [1] H.S.W. Massey und D.R. Bates, Rep. Prog. Phys. **9**, 62 (1943).
- [2] A. Burgess, Astrophys. J. **139**, 776 (1964).
- [3] J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley Publ. Comp., Inc. (1985).
- [4] H. Feshbach, Ann. of Phys. **19**, 287 (1962).
- [5] Y. Hahn, Phys. Rev. A **12**, 895 (1975).
- [6] G. Kilgus, D. Habs, D. Schwalm, A. Wolf, N.R. Badnell und A. Müller, Phys. Rev. A **46**, 5730 (1992).
- [7] M. Rødbro, R. Bruch und P. Bisgaard, J. Phys. B **12**, 2413 (1979).
- [8] A. Müller, G. Hofmann, B. Weissbecker, M. Stenke, K. Tinschert, M. Wagner und E. Salzborn, Phys. Rev. Lett. **63**, 758 (1989).
- [9] M.Ya. Amusia, I.S. Lee and V.A. Kilin, Phys. Rev. A **45**, 4576 (1992).
- [10] L.N. Ivanov, U.I. Safronova, V.S. Senashenko und D.S. Viktorov, J. Phys. B **11**, L175 (1978).
- [11] R.L. Simons, H.P. Kelly und R. Bruch, Phys. Rev. A **19**, 682 (1979).
- [12] J.P. Marques, F. Parente, P. Indelicato and J.P. Desclaux, J. Phys. B **31**, 2897 (1998).
- [13] V. Shevelko und H. Tawara, *Atomic Multielectron Processes*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York (1998).
- [14] W. Fritsch und C.D. Lin, Phys. Rev. A **41**, 4776 (1990).
- [15] R.D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, University of California, Berkley (1981).

- [16] G. Kilgus, Dissertation, Universität Heidelberg, Max-Planck-Institut für Kernphysik, Heidelberg (1990).
- [17] V.V. Afrosimov, Yu.S. Gordeev, A.N. Zinoviev, D.H. Rasulov und A.P. Shergin, Proc. IXth ICPEAC, Seattle, p. 1068 (1975).
- [18] L. Folkerts, J. Das, S.W. Bergsma und R. Morgenstern, Phys. Lett. A **163**, 73 (1992).
- [19] K.E. Zaharakis, R.R. Haar, O. Voitke, M. Zhu und J.A. Tanis, Phys. Rev. A **52**, 2910 (1995).
- [20] M. Chevallier, C. Cohen, N. Cue, D. Dauvergne, J. Dural, P. Gangnan, R. Kirsch, A. L'Hoir, D. Lelièvre, J.-F. Libin, P.H. Mokler, J.-C. Poizat, H.-T. Prinz, J.-M. Ramillion, J. Remillieux, P. Roussel-Chomaz, J.-P. Rozet, F. Sanuy, D. Schmaus, C. Stephan, M. Toulemonde, D. Vernhet und A. Warczak, Phys. Rev. A **61**, 022724 (2000).
- [21] Y. Hahn and K.J. LaGattuta, Phys. Rep. **166**, 195 (1988).
- [22] N.R. Badnell, J. Phys. B **19**, 3827 (1986).
- [23] W. Eissner, M. Jones und H. Nussbaumer, Computer Physics Communication **8**, 270 (1974).
- [24] P. Baumann, M. Blum, A. Friedrich, C. Geyer, M. Grieser, B. Holzer, E. Jaeschke, D. Krämer, C. Martin, K. Matl, R. Mayer, W. Ott, B. Povh, R. Repnov, M. Steck und E. Steffens, Nucl. Instr. and Meth. A **268**, 531 (1988).
- [25] M. Grieser, D. Habs, R.v. Hahn, C.M. Kleffner, R. Repnow, M. Stampfer, E. Jaeschke, M. Steck, IEEE Part. Acc. Conf. , p. 2817, (New York, 1991).
- [26] G. Saathoff, Dissertation, Universität Heidelberg, Max-Planck-Institut für Kernphysik, Heidelberg (2002).
- [27] K. Unser, IEEE Trans. Nucl. Sci. NS-28, 2344 (1981).
- [28] S. Pastuszka, U.W. Schramm, M. Grieser, C. Broude, R. Grimm, D. Habs, J. Kenntner, H-J. Miesner, T. Schübler, D. Schwalm, A. Wolf, Nucl. Instr. and Meth. A **369**, 11 (1996).
- [29] H. Poth, Phys. Rep. **195**, 135 (1990).
- [30] J. Linkemann, Dissertation, Universität Stuttgart, Stuttgart (1995).

- [31] M. Lange, Dissertation, Universität Heidelberg, Max-Planck-Institut für Kernphysik, Heidelberg (2001).
- [32] T. Bartsch, Dissertation, Justus-Liebig-Universität Gießen, Institut für Kernphysik, Gießen (1999).
- [33] J. Großer, *Einführung in die Teilchenoptik*, Teubner Studienbücher (1983).
- [34] A.J. Schwab, *Hochspannungsmesstechnik*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York (1981).
- [35] U. Tietze, CH. Schenk, *Halbleiterschaltungstechnik*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York (1978).
- [36] H. Lutz, W. Wendt, *Taschenbuch der Regelungstechnik*, Verlag Harri Deutsch, Frankfurt a. M. (2000).
- [37] T. Hessburg, H. Peng, M. Tomizuka, W.-B. Zhang und E. Kamei, American Autom. Control Council **3**, 3084, Evanston, IL, USA (1991).
- [38] A. Müller, *Physics of Impact Phenomena*, Springer Series in Chemical Physics **54**, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 13 (1991).
- [39] A. Müller und A. Wolf, Hyperfine Interactions **109**, 233 (1997).
- [40] A. Wolf, Habilitationsschrift, Universität Heidelberg, Max-Planck-Institut für Kernphysik, Heidelberg (1992).
- [41] A. Lampert, A. Wolf, D. Habs, G. Kilgus, D. Schwalm, M.S. Pindzola und N.R. Badnell, Phys. Rev. A **39**, 3350 (1996).
- [42] A. Müller, D.S. Belic, B.D. DePaola, N. Djurcic, G.H. Dunn, D.W. Mueller und C. Timmer, Phys. Rev. A **36**, 599 (1987).
- [43] K.J. LaGattuta, Phys. Rev. A **30**, 3072 (1984).
- [44] J.P. Marques, F. Parente und P. Indelicato, Phys. Rev. A **47**, 929 (1993).
- [45] T. Bartsch, S. Schippers, A. Müller, C. Brandau, G. Gwinner, A.A. Saghir, M. Beutelspacher, M. Grieser, D. Schwalm, A. Wolf, H. Danared und G.H. Dunn, Phys. Rev. Lett. **82**, 3779 (1999).
- [46] N.R. Badnell, M.S. Pindzola, L.H. Andersen, J. Bolko und H.T. Schmidt, J. Phys. B **24**, 4441 (1991).

## Literaturverzeichnis

---

- [47] D.W. Savin, T. Bartsch, M.H. Chen, S.M. Kahn, D.A. Liedahl, J. Linkemann, A. Müller, S. Schippers, M. Schmitt und D. Schwalm, *Astrophys. J.* **489**, L115 (1997).
- [48] J. Kenntner, Dissertation, Universität Heidelberg, Max-Planck-Institut für Kernphysik, Heidelberg (1995).

## DANKSAGUNG:

an alle Mitglieder der Arbeitsgruppen Atom- und Molekülphysik für hervorragende Zusammenarbeit und angenehmes Betriebsklima.

Der technischen Crew der Beschleunigeranlage und des Testspeicherrings des Max-Planck-Instituts für Kernphysik, vor allem Dr. Manfred Grieser und Kurt Horn.

Mein besonderer Dank gilt:

- Dr. Gerald Gwinner für dessen hilfreiche Begleitung meiner Doktorarbeit.
- Dr. Shan-Gui Zhou für die sehr gute Einarbeitung in die schwierige Handhabung des Programm-Systems AUTOSTRUCTURE und die ständige Bereitschaft im Zusammenhang damit auftretende Probleme zu beheben.
- Prof. Dr. Andreas Wolf für die Betreuung meiner Arbeit.
- Prof. Dr. Dirk Schwalm für die Ermöglichung der Durchführung dieser Arbeit.

Des weiteren möchte ich der Gruppe Müller des Kernphysikalischen Instituts der Universität Gießen danken, mit der uns eine erfolgreiche Partnerschaft verbindet:

- Prof. Dr. Alfred Müller, Priv.-Doz. Dr. Stefan Schippers, Stefan Kieslich, Sebastian Böhm, Dr. Carsten Brandau und Dr. Wei-Shi.

sowie meinen Eltern und meiner Freundin für die Unterstützung während der gesamten Promotion.

