

# Fakultät für Physik und Astronomie

Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg

Diplomarbeit

im Studiengang Physik

eingereicht von

**Christian Beilmann**

aus Ludwigshafen am Rhein

**2008**



# Beobachtung resonanter Elektroneneinfangprozesse höherer Ordnung in hochgeladenem Krypton

Diese Diplomarbeit wurde angefertigt von Christian Beilmann am  
Max-Planck-Institut für Kernphysik Heidelberg  
unter der Betreuung von  
PD Dr. José Ramón Crespo López-Urrutia



# Abstract

## **Beobachtung resonanter Elektroneneinfangprozesse höherer Ordnung**

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der spektroskopischen Untersuchung resonanter Elektroneneinfang-Prozesse in hochgeladenes Krypton. Mit Hilfe einer Elektronenstrahl-Ionenfalle (EBIT) wurden Rekombinationsresonanzen zwischen K- und L-Schalen-Elektronen in helium- bis sauerstoffähnlichem Krypton mit bisher nicht erreichter Elektronenenergie-Auflösung gemessen. Diese Auflösung wurde durch Untersuchungen systematischer Effekte der experimentellen Einrichtungen und durch Minimierung der thermischen Energie der Ionen mittels evaporativen Kühlens erreicht. So war die erste Beobachtung resonanter Rekombinationen höherer Ordnung unter Beteiligung von K-Schalen Elektronen möglich. Neben vielen aufgelösten und identifizierten dielektronischen Resonanzen wurden erstmals eindeutige Resonanzen der KL-LLL trielektronischen Rekombination gefunden. Daneben waren auch erste Anzeichen des nächsthöheren Prozesses der quadruelektronischen Rekombination zu beobachten.

## **Observation of resonant electron capture processes of higher order**

The presented work deals with the spectroscopic analysis of resonant electron capture processes in highly charged krypton ions. Using an electron beam ion trap (EBIT) recombination resonances between K- and L-shell electrons could be measured with a energy resolution not reached so far. This resolution was reached by the study of systematic effects of the experimental equipment. So recombinations of higher order including K-shell electrons could be observed for the first time. Beside many resolved dielectronic resonances definite resonances of KL-LLL trielectronic recombination were found. Also first signatures of quadruelektronische recombination, the process of next higher order were observable.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einführung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Hochgeladene Ionen und ihre Reaktionen mit Elektronen</b>	<b>7</b>
2.1	Wechselwirkungsprozesse eines hochgeladenen Ions mit Elektronen . . .	8
2.2	Berechnung der energetischen Struktur hochgeladener Ionen . . . . .	14
2.3	Wirkungsquerschnitte und Linienstärken für resonante Rekombinationsprozesse . . . . .	20
<b>3</b>	<b>Das Experiment</b>	<b>23</b>
3.1	Die EBIT . . . . .	24
3.1.1	Prinzip der EBIT . . . . .	24
3.2	Aufbau der Heidelberg-EBIT . . . . .	25
3.3	Methode der Resonanzmessung . . . . .	30
3.4	Bestimmung der Elektronenstrahlenergie . . . . .	32
3.4.1	Beschleunigende Potentiale in der EBIT . . . . .	33
3.4.2	Messung der Potentiale in der EBIT . . . . .	33
3.5	Einflüsse des Elektronenstrahls auf die gemessenen Resonanzenergien	40
3.5.1	Raumladung des Elektronenstrahls . . . . .	40
3.5.2	Diskussion der Einflüsse der Raumladung auf die gemessenen Resonanzenergien . . . . .	43
3.6	Bestimmung der Photonenenergie . . . . .	46
3.7	Datenaufnahmesystem und Steuerung des Experiments . . . . .	47
3.8	Auswertung der Messdaten . . . . .	48
3.8.1	Kalibration der Photonenenergie und der Elektronenstrahlenergie . . . . .	48
3.8.2	Bestimmung der Resonanzenergien . . . . .	52
3.8.3	Fehlerabschätzung . . . . .	52
<b>4</b>	<b>Vorbereitende Untersuchungen systematischer Effekte</b>	<b>55</b>
4.1	Verbesserung der Auflösung . . . . .	57
4.1.1	Kühlung durch verringerte Aufheizung . . . . .	58
4.1.2	Evaporatives Kühlen . . . . .	60
4.2	Systematische Effekte bei der Resonanzmessung . . . . .	68

4.2.1	Abhängigkeiten von der Rampenrichtung und -geschwindigkeit . . . . .	69
4.2.2	Abhängigkeiten von Zielgasunreinheiten und von deren Besei- tigung . . . . .	72
4.2.3	Erkenntnisse aus den vorbereitenden Untersuchungen für die folgenden Experimente . . . . .	78
<b>5</b>	<b>Messungen der dielektronischen K-LL und erster Nachweis der KL- LLL trielektronischen Rekombination</b>	<b>81</b>
5.1	Dielektronische Rekombination . . . . .	81
5.2	Trielektronische Rekombination . . . . .	90
5.3	Quadruielektronische Rekombination . . . . .	97
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>99</b>



# Kapitel 1

## Einführung

Die dielektronische Rekombination (DR) ist ein fundamentaler atomphysikalischer Prozess, der erstmals von H.S.W. Massey und D.R. Bates 1942 [1] beschrieben wurde, die ihn in einer theoretischen Abhandlung über neutralen und ionisierten atomaren Sauerstoff und seinen Einfluss auf die obere Atmosphäre beschrieben. Die Beobachtung der DR hat sich zu einem vielseitigen Werkzeug bei der Erforschung der Materie wie Plasmen und hochgeladenen Ionen mit großem Potential entwickelt. Die DR ist ein resonanter Elektronen-Einfangprozess, bei dem ein Kontinuumelektron mit einem hochgeladenen Ion rekombiniert, indem es seine überschüssige Energie auf ein gebundenes Elektron überträgt und dieses damit auf ein höheres Niveau anregt; die zur Verfügung stehende Energie des freien Elektrons wird also nicht direkt an ein Photon oder dritte Stoßpartner abgegeben. Das gebildete, normalerweise doppelt angeregte Niveau relaxiert durch Photonenemission meist in den Grundzustand und kann dann nicht mehr durch Autoionisation zerfallen; damit ist der Rekombinationsprozess abgeschlossen. Der dielektronische Elektroneneinfang als erster Schritt der DR stellt die Zeitumkehr des Augerprozesses dar, bei welchem durch die direkte Übertragung der Relaxationsenergie eines angeregten Elektrons auf ein weiteres Elektron des Ions dieses ins Kontinuum ionisiert wird.

Eine der Auger-Bezeichnung entsprechende Nomenklatur, bei der angegeben wird, welche Schale die in den DR-Prozess involvierten gebundenen Elektronen vor dem Einfang besetzen und welche danach, erlaubt eine genauere Spezifikation der Rekombinationskanäle. So wird bei einer KLL DR ein K-Schalen-Elektron auf ein L-Schalen-Niveau angeregt, wobei das eingefangene Elektron ebenfalls in die L-Schale rekombiniert [2].

Durch den resonanten Charakter der DR und die damit verbundene, oft mehrere Größenordnungen betragende Erhöhung des Wirkungsquerschnitts des angeregten Zwischenzustands bei der entsprechenden Elektronenenergie und der Abregung dieses doppelt angeregten Zwischenzustands durch Photonenemission lässt sich die dielektronische Rekombination experimentell leicht nachweisen und von der nicht resonanten radiativen Rekombination (RR), bei welcher Elektronen direkt unter Aussendung von Photonen in Ionen rekombinieren (und somit den zeitumgekehrten

Prozess der Photoionisation darstellt), klar trennen. Damit wird ein Instrument geschaffen, mit dessen Hilfe Energieniveaus innerer Schalen in schweren Atomen durch Variation der Ion-Elektron-Kollisionsenergie vermessen werden können, welches damit eine wesentliche Erweiterung der Untersuchungsmöglichkeiten in einem durch andere Verfahren kaum zugänglichen Energiebereich bietet.

Resonanter Elektroneneinfang bedeutet auch, dass in einem Plasma bei bestimmten Energien besonders viele Elektronen durch Rekombinationen verloren gehen. Dies führt zu einer wesentlichen Beeinflussung der Temperatur, weshalb erkannt wurde, dass der Prozess der dielektronischen Rekombination z.B. bei der Sonnenkorona zu berücksichtigen ist [3]. Bereits bei den ersten theoretischen Überlegungen wurden quantitative Abschätzungen dieses Prozesses in Plasmen diskutiert [4].

Weiter ist die Intensität auftretender dielektronischer Rekombinations-Resonanzen in einer Ionen-Elektronen-Verteilung ein klares Indiz für die Energie der Stöße, und deren Untersuchung kann so zur Temperaturbestimmung im Inneren von Plasmen verwendet werden.

Somit sind mit der Vermessung der Energieniveaus tief gebundener Elektronen, mit ihrem Beitrag zur Kühlung und der Temperaturbestimmung in Plasmen drei wichtige Motivationen für die genaue Erforschung der dielektronischen Rekombination gegeben, welche für die fundamentale Atomphysik sowie die Plasmaphysik und deren Anwendungen von weitreichendem Interesse sind. Daneben spielt die dielektronische Rekombination auch in der Astronomie eine wichtige Rolle [5]. Diese fächerübergreifende Bedeutung führte zu einer Reihe von unterschiedlichsten Experimenten, mit welchen durch Beobachtung dielektronischer Resonanzen diverse atomphysikalische oder anwendungsrelevante Schlüsse gezogen wurden.

Vor allem sind für die vorliegende Arbeit Messungen dielektronischer Resonanzen Ionen in sehr hohen Ladungszuständen interessant. Durch die  $\propto Z^2$ -Energie-Abhängigkeit der Bindungsenergie der Elektronen im Vergleich zur  $\propto Z^4$ -Skalierung der relativistischen bzw. quantenelektrodynamischen Beiträge (siehe auch Kapitel 2) lassen sich ansonsten sehr geringfügige Aufspaltungen wie die Feinstruktur, QED-Verschiebungen oder möglicherweise sogar die Hyperfeinstruktur der untersten Schalen gut beobachten und somit entsprechende Vorhersagen sehr genau überprüfen. Im Bereich der Plasmaphysik erschließt sich die Relevanz der Untersuchung hochgeladener Ionen schwerer Elemente dadurch, dass normalerweise bei den Temperaturen in Plasmen leichte Elemente vollständig ionisiert sind und nur hochgeladene Ionen schwerer Elemente noch gebundene Elektronen haben, welche damit auch zur dielektronischen Rekombination beitragen können. Nur so bleiben diskrete spektrale Merkmale für die Diagnostik erhalten.

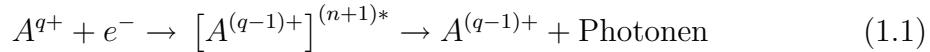
Auf dem Gebiet der fundamentalen Atomphysik wurden neben der generellen Messung der dielektronischen Rekombination hochgeladener wie etwa heliumartiger Ionen [6, 7] auch sehr spezielle Untersuchungen mit Hilfe der DR durchgeführt. So wurden etwa bei DR-Messungen an hochgeladenen Quecksilber-Ionen Fano-Faktoren als Indikator für Linienasymmetrien bestimmt, mit denen zustandsselektive Quanteninterferenz charakterisiert werden kann [8]. Solche Experimente wurden zuerst bei

geringer Auflösung mit hochgeladenen Uran-Ionen am Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL) durchgeführt [2]. Des Weiteren wurden verschiedene Abregungskanäle der DR untersucht und dabei die Zwei-Elektronen-Ein-Photonen-Stabilisierung angeregter Ionen gemessen [9]. Ebenso können mit Beobachtung der dielektronischen Rekombination Kerneffekte wie die nuklearen Ladungs-Radien gemessen werden, indem die Isotopen-Verschiebung der  $2s_{1/2} - 2p_{1/2}$  und  $2s_{1/2} - 2p_{3/2}$  Übergänge in lithiumähnlichem Neodym  $^{142,150}\text{Nd}$  untersucht wird [10]. Auch Zwei-Schleifen-QED-Korrekturen wurden durch Extrapolation der  $2s - 2p$ -Aufspaltung in lithiumähnlichem Uran  $\text{U}^{89+}$  überprüft, die mit Hilfe von DR-Experimenten an der GSI beobachtet wurden [11]. Schon dieser sehr kurze Überblick über DR-Experimente im Bereich der Atomphysik zeigt das vielfältige Potential und damit die Bedeutung dieser Art von Untersuchungen für die Weiterentwicklung der Atomstrukturmodelle.

In der Plasmaphysik wurden ebenfalls viele Experimente zur dielektronischen Rekombination durchgeführt. Hier stehen wie oben angesprochen neben der Grundlagenforschung zur Atomstruktur die praktischen Anwendungen der dielektronischen Rekombination als Kühl- und Analysewerkzeug für thermonukleare Plasmen im Vordergrund. Gerade für die Konstruktion, Weiterentwicklung und den Betrieb des Internationalen Thermonuklearen Experiment-Reaktors ITER [12], einem Kernfusions-Versuchsreaktor, der als erster Reaktor eine positive Energiebilanz erreichen und somit mehr Energie als für den Betrieb notwendig durch Kernfusion freisetzen soll, sind Forschungen in diesem Bereich notwendig. Nach Inkrafttreten des Kooperationsvertrags im Oktober 2007 soll der Bau der Anlage vorraussichtlich Mitte 2009 im französischen Cadarache beginnen. Große Hoffnungen auf eine effektive, saubere und sichere Energieversorgung werden in dieses Projekt gelegt. Herzstück dieser Anlage ist ein thermonukleares Plasma, in dem die Kernfusion ablaufen soll. Dieses Plasma muss analysiert und kontrolliert werden, wofür die Beobachtung dielektronischer Rekombination eine entscheidene Rolle spielen kann [13]. Anhand von Berechnungen der Strahlungsleistung von Gasbeimischungen ins ITER-Plasma [14] wurde festgestellt, dass durch die Injektion schwerer Gase die erwähnte Aufgabe erfüllt werden kann. So wurde Krypton als ein ideales Gas für diese Prozesse identifiziert, da es die für diese Temperaturen ausreichende Bindungsenergie besitzt und in verschiedenen Ladungszuständen im Plasma durch Rekombinationsprozesse das Plasma sowohl kühlen, als auch idealerweise zur Temperatur-Diagnostik eingesetzt werden kann. Spektren von hoch ionisiertem Krypton rückten ins Zentrum des Interesses [15]. Deshalb wurde als ein Hauptprozess die dielektronische Rekombination in hochgeladenem Krypton intensiv untersucht [16, 17] und die radiativen Kühlraten der Ionen mit Hilfe von DR-Experimenten gemessen [18].

Ein bisher kaum erforschtes Gebiet stellen neben der dielektronischen Rekombination analoge resonante Elektroneneinfangprozesse höherer Ordnung dar. Hierbei wird bei dem Einfang eines Kontinuumelektrons die überschüssige Energie nicht auf *ein* gebundenes Elektron, sondern auf *mehrere* Elektronen des hochgeladenen Ions übertragen und diese gleichzeitig auf ein höheres Energieniveau gehoben. So entste-

hen mehrfach angeregte Ionen, welche wiederum durch Aussendung von Photonen in den Grundzustand relaxieren können, wie in Gleichung 1.1 dargestellt ist.



Hierbei steht  $n$  für die Anzahl der gemeinsam angeregten Elektronen des Ions und somit für die Ordnung des resonanten Prozesses. Resonante Rekombinationsprozesse dieser Art können unter Zuzählung des rekombinierenden Elektrons bei einer gleichzeitigen Anregung von zwei Elektronen als *trielektronische Rekombination (TR)*, bei der Anregung dreier Elektronen zu einem vierfach angerechten Zustand als *quadrulektronische Rekombination (QR)* bezeichnet werden.

Eine „Anregung“ mehrerer Elektronen im weitesten Sinne findet auch aber der DR statt. Qualitativ anders sind TR und QR durch die Änderung der Quantenzustände mehrerer Elektronen, in einem Bild separierbarer Wellenfunktionen. Bei einem hochverschränkten System äquivalenter Elektronen im Bild einer Gesamtwellenfunktion besteht zuvor kein Unterschied, aber die in dieser Arbeit untersuchten Phänomene wurden bisher nicht beobachtet. Die adequate theoretische Beschreibung wird zweifellos von den hier gewonnenen Daten profitieren.

Mit Blick auf die zuvor diskutierten Anwendungen und Erkenntnisse mit Hilfe der dielektronischen Rekombination erlaubt die Beobachtung solcher Prozesse höherer Ordnung eine Vertiefung unseres Verständnisses der elektronischen Struktur und deren dynamischen, korrelierten Wechselwirkungen in Zusammenhang mit dem Photonenfeld. Die konkrete Bedeutung der in dieser Arbeit zum ersten Mal bei hohen Energien nachgewiesenen Effekte für die Plasmaphysik lassen sich momentan nur erahnen.

Insbesondere die Atomphysik könnte von solchen Beobachtungen profitieren, bietet sie doch die Möglichkeit, Berechnungen korrelierter Prozesse sehr genau und direkt zu überprüfen. Die Modellierung multipler Anregungen stellt höchste Anforderungen an die Theorie, und so ist es von besonderem Interesse, diese Modelle anhand von Experimenten zu überprüfen. Hierbei spielen sowohl die tatsächlichen Resonanzenergien eine große Rolle, um die Genauigkeit der Energieniveauberechnung zu testen als auch die der Wirkungsquerschnitte, mit der Streutheorien überprüft werden können.

Auch für die Plasmaphysik wird die Messung solcher höheren Resonanzen von großem Interesse sein. Die genaue Kenntnis der Prozesse beim Elektroneneinfang ist gerade für die Plasmadiagnostik wichtig, und so sind auch Daten hierzu notwendig. Je nach Wirkungsquerschnitten werden TR und QR auch relevant für Kühlvorgänge in Plasmen sein.

Gerade Krypton als ein ideales Gas für die Plasmadiagnostik ist ein wichtiges Ziel der Forschung. Um trielektronische Resonanzen in Krypton beobachtbar zu machen, wurde mit Hilfe einer Kristall-Channeling-Methode eine obere Grenze für Wirkungsquerschnitte der TR abgeschätzt [19]. Hierbei wurde der Prozess betrachtet, bei dem beide K-Schalen-Elektronen angeregt werden und beide wieder relaxieren

und so koinzident zwei K-Röntgen-Photonen emittieren, wobei sich der Ladungszustand durch das eingefangene Elektron um 1 ändert. Ohne die Beobachtung des Prozesses selbst wurde ein oberes Limit des Wirkungsquerschnitts von  $1,9 \times 10^{-27} \text{ cm}^2$  für die sogenannte KK-LLL Trielektronische Rekombination ermittelt.

Der zeitumgekehrte Prozess der trielektronischen Rekombination, der Drei-Elektronen Auger-Effekt, wurde kürzlich in einem Strahl-Folien-Kollisions-Experiment mit Kohlenstoff-Ionen beobachtet [20].

Die erste direkte Beobachtung der trielektronischen Rekombination wurde am Test-Speicher-Ring TSR des Max-Planck-Instituts für Kernphysik (MPI-K) in Heidelberg von M. Schnell und anderen publiziert [21]. Es wurden trielektronische Resonanzen von berylliumartigen Chlor-Ionen  $\text{Cl}^{13+}$  gemessen und mit AUTOSTRUCTURE-Rechnungen verglichen. Hierbei handelt es sich um niederenergetische Prozesse, bei denen die gebundenen Elektronen innerhalb der L-Schale angeregt werden. Die bisher einzige weitere publizierte Beobachtung dieses Prozesses fand ebenfalls am TSR in einem nahezu gleichem Experiment mit berylliumähnlichem Titan statt, wobei ebenfalls Doppelanregungen der L-Schale nachgewiesen wurden [22].

In Fusionsplasmen herrschen jedoch Temperaturen, bei denen schwere Gase wie Krypton notwendig sind, um nicht vollkommen ionisiert vorzuliegen. Dieses liegt meist in hohen Ladungszuständen vor, so dass für die Diagnostik höhere Resonanzen von Bedeutung sind, bei denen ein Elektron der K-Schale in den Prozess involviert ist.

Messungen solcher Prozesse setzen eine exzellente Auflösung von wenigen eV für Elektronenergien von etlichen keV voraus, da die interessanten Resonanzen vergleichsweise schwach und nahe an starken dielektronischen Resonanzen erwartet werden. Die bisher genauesten Messungen des KLL-Spektrums der dielektronischen Rekombination in Krypton erreicht jedoch eine Auflösung von nur etwa 36 eV [16], womit sich Prozesse höherer Ordnung nicht messen ließen.

Voraussetzung für die vorliegende Arbeit war es zunächst, die experimentelle Auflösung so weit zu verbessern, dass auch diese Prozesse messbar werden. Die Messungen wurden an einer EBIT (*Electron Beam Ion Trap - Elektronenstrahl-Ionenfalle*) des Max-Planck-Instituts für Kernphysik in Heidelberg durchgeführt. Mit einer Weiterentwicklung des evaporativen Kühlens in der EBIT konnte die Energieauflösung der Elektroneneinfang-Resonanzen auf bis zu etwa 13,5 eV verbessert werden, wodurch klar separierte trielektronische Resonanzen sichtbar wurden. Die TR-Resonanzen wurden vor allem in B- bis N-artigem Krypton nachgewiesen. Zudem wurden erstmals Anzeichen quadreelektronischer Resonanzen in Be- und C-artigem Krypton gefunden.

Die kohlenstoffartigen TR-Resonanzen lassen sich mit kohlenstoffartigen DR-Resonanzen quantitativ vergleichen, so dass Resonanzstärken bestimmt werden konnten. Diese Beobachtungen wurden entscheidend unterstützt von detaillierten Berechnungen der Resonanzenergien und -stärken der Theoriegruppe des MPI-K, welche durch ihre gute Übereinstimmung von den im folgenden vorgestellten Experimenten bestätigt werden konnten.

Die Messung erlaubt außerdem die bisher genaueste experimentelle Bestimmung des gesamten K-LL-Spektrums der dielektronischen Rekombination in Krypton.

Die in dieser Arbeit durchgeführten Experimente beinhalten neben der Beobachtung und Vermessung der resonanten Elektroneneinfang-Prozesse erster und höherer Ordnung noch systematische Betrachtungen zur Stabilität und Genauigkeit der Energiebestimmung des Elektronenstrahls der Heidelberg-EBIT sowie Diskussionen physikalischer Effekte, welche bei der Durchführung der Messungen eine Rolle spielen.

# Kapitel 2

## Hochgeladene Ionen und ihre Reaktionen mit Elektronen

Hochgeladene Ionen (*HCI* - *highly charged ions*) bieten der Experimentalphysik weitreichende Möglichkeiten, ihr Verständnis von der Atomstruktur zu überprüfen. Viele physikalische Prozesse, welche für die Theorie von großer Relevanz sind, lassen sich am einfachsten für Systeme mit wenigen Elektronen berechnen. Zudem sind etwa Aufspaltungen der Energieniveaus gerade der innersten Elektronenschalen von großem Interesse. Diese Effekte sind jedoch stark abhängig von der Kernladungszahl  $Z$ , so dass sich Messungen an neutralen Atomen mit wenigen Elektronen und damit niedrigem  $Z$  meist auf Grund der begrenzten experimentellen Auflösung als schwierig herausstellen. Betrachtet man die  $Z$ -Abhängigkeit vieler relevanter Größen der theoretischen Atomstrukturberechnung näher, so wird deutlich, dass Messungen an Elementen höherer Kernladungszahlen zu deutlich besseren Resultaten führen. Während der Schalenradius reziprok zur Kernladungszahl skaliert, wachsen das Ionisationspotential und die Energie der Hauptschalen näherungsweise mit dem Quadrat der Kernladung. Die Feinstruktur, welche relativistische Effekte berücksichtigt, skaliert sogar mit  $Z^4$ , ebenso die Lamb-Verschiebung, die QED-Effekte beinhaltet. Die Hyperfeinstrukturaufspaltung, welche den Kernspin berücksichtigt, folgt ihrerseits einer  $Z^3$ -Abhängigkeit, wodurch solche in leichten Atomen sehr kleine Effekte in hochgeladenen Ionen sichtbar werden.

Bei Experimenten mit hochgeladenen Ionen sind diverse Wechselwirkungseffekte mit Kontinuumelektronen zu berücksichtigen, wobei die Untersuchung eines dieser Effekte, des resonanten Elektroneneinfangs, den Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit bildet.

Um die physikalischen Effekte zu verstehen und die Messergebnisse mit theoretischen Vorhersagen vergleichen zu können, werden in den folgenden Abschnitten zunächst allgemein die Wechselwirkungsprozesse hochgeladener Ionen mit Kontinuumelektronen diskutiert, wonach sich die Betrachtungen auf den hier interessanten Prozess der resonanten Rekombination konzentrieren. Zur Berechnung der Resonanzenergien ist eine genaue Kenntnis der Energieniveaus in einem solchen

Ion notwendig, weshalb das Verfahren zur Berechnung der entsprechenden Energien näher betrachtet wird. Es folgt eine Beschreibung der Methode zur Bestimmung der Wirkungsquerschnitte der resonanten Prozesse, was zu dem Ergebnis einer differenzierten Berechnung des erwarteten Resonanzspektrums in hochgeladenem Krypton führt.

## 2.1 Wechselwirkungsprozesse eines hochgeladenen Ions mit Elektronen

In den folgenden Ausführungen werden die verschiedenen Wechselwirkungsprozesse erläutert, die ein Elektron mit einem hochgeladenen Ion eingehen kann. Zunächst wird der Prozess betrachtet, bei dem ein hochenergetisches Elektron ein Ion weiter ionisiert, wonach sich die Darstellung des Falls anschließt, in dem ein solches Elektron bestimmte Energien auf ein gebundenes Ionenelektron überträgt und dieses anregt. Elektronen können auch von dem starken Coulombfeld des Ions eingefangen werden, weshalb der allgemeine Fall der radiativen Rekombination diskutiert wird. Schließlich führt dies zu einer genaueren Betrachtung des speziellen Falls der resonanten Rekombination, welcher bei diskreten Elektronenergien abläuft und Gegenstand der durchgeführten Experimente ist.

### Elektronenstoßionisation

Treffen hochenergetische Elektronen auf Ionen, so können diese einen Teil ihrer Energie an die im Ion gebundenen Elektronen abgeben und diese aus ihrem gebundenen Zustand auslösen, sofern die übertragene Energie die Bindungsenergie des Ionenelektrons übersteigt. Dies ist das Grundprinzip, nach dem hochgeladene Ionen in der EBIT erzeugt werden, was in Kapitel 3.1.1 näher erläutert wird. Die Energie der beiden in den Prozess involvierten Elektronen nach der Reaktion ergibt sich aus dem Energieverlust des stoßenden Elektrons und der Bindungsenergie des ionisierten Elektrons durch einfache Summation, wobei  $e_s^-$  das freie stoßende Elektron und  $e_b^-$  das gebundene Elektron bezeichnet, welches von  $e_s^-$  ionisiert wird:

$$\begin{aligned} A^{q+} + e_s^- &\rightarrow A^{(q+1)+} + e_s^- + e_b^- \\ E_k(e_s^-) &= E'_k(e_s^-) + E'_k(e_b^-) + E_b(e_b^-) \end{aligned} \quad (2.1)$$

Hier bezeichnet  $E_k(e_s^-)$  die kinetische Energie des stoßenden Elektrons vor dem Stoß, welche der Summe aus der kinetischen Energie  $E'_k(e_s^-)$  des stoßenden Elektrons nach dem Stoß, der kinetischen Energie des vormals gebundenen Elektrons nach dem Stoß  $E'_k(e_b^-)$  und der Bindungsenergie des Ionenelektrons  $E_b(e_b^-)$  entspricht.

Der Wirkungsquerschnitt für einen solchen Prozess ist abhängig von der Energie  $E_k(e_s^-)$  der stoßenden Elektronen, der Anzahl  $n_j$  der Ionenelektronen in der  $j$ ten Unterschale und von ihrer Bindungsenergie  $E_b$ . Der Wirkungsquerschnitt  $\sigma$  kann



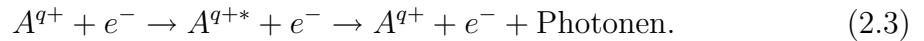
mittels der semiempirischen Lotz-Formel [23] mit den empirischen konstanten Koeffizienten  $a_{ij}$ ,  $b_{ij}$  und  $c_{ij}$  berechnet werden.

$$\sigma^{ESI} = \sum_j \frac{a_{ij} n_j}{E_k(e_s^-) E_b} \ln \frac{E_k(e_s^-)}{E_b} \left\{ 1 - b_{ij} \exp \left( -c_{ij} \left[ \frac{E_k(e_s^-)}{E_b} - 1 \right] \right) \right\}. \quad (2.2)$$

Neben der hier dargestellten Einfachionisation durch ein stoßendes Elektron sind auch Mehrfachionisationen, bei der mehrere Elektronen durch den Stoß eines Elektrons ionisiert werden, möglich, jedoch sind diese im Wirkungsquerschnitt stark unterdrückt. Eine Untersuchung dieser Mehrfachionisationen für das in dieser Arbeit spektroskopierte Element Krypton findet sich z.B. in [24].

### Elektronenstoßanregung

Wird bei einem wie oben beschriebenen Stoßprozess zwischen einem Ion und einem Elektron nicht genügend Energie auf ein gebundenes Elektron übertragen, um dies zu ionisieren, ist es möglich, dass das gebundene Elektron auf ein höheres Niveau innerhalb des Ions angeregt wird. Hierbei wird die Energiedifferenz zwischen Ausgangs- und Endniveau des gebundenen und später angeregten Elektrons auf dieses durch das stoßende Elektron übertragen, welches nach dem Stoß eine um den entsprechenden Betrag verminderte kinetischer Energie besitzt. Da sich der so angeregte Zustand meist unter Aussendung von Photonen wieder stabilisiert, ist dieser Prozess leicht durch Detektion der Abregungsphotonen nachweisbar (z.B. [25]), welche gerade die Energie der Relaxationsübergänge tragen:



Im Rahmen des **Auger-Effekts** [26, 27] ist alternativ möglich, dass ein Elektron während eines Relaxationsprozesses die freiwerdende Energie durch Elektron-Elektron-Wechselwirkung auf ein weiteres schwächer gebundenes Elektron des Ions überträgt und dieses dabei ionisiert. Hierbei geschieht die Relaxation ohne die Aussendung von Photonen, weshalb als Nachweis des Prozesses die ausgelösten Elektronen spektroskopiert werden.

### Radiative Rekombination

Verliert ein freies Elektron über ein drittes Teilchen genügend Energie, um dem Potential des Ions nicht entkommen zu können, kann es in das Ion rekombiniert und somit in einer Schale des Ions gebunden werden. Hierbei sind verschiedene Varianten des Energieverlustes möglich, so etwa der Stoß mit einem dritten Teilchen wie einem weiteren Elektron. Dieser Dreikörperrekombination genannte Prozess benötigt hohe Elektronendichten. Bei niedrigen Dichten dominiert die radiative Rekombination (RR), d.h. die überschüssige Energie des freien Elektrons wird durch ein Photon abtransportiert. Bei der RR entspricht dann die Energie des abgestrahlten Photons

genau der Summe der kinetischen Energie des freien Elektrons und der Bindungsenergie des Energieniveaus, auf welches das Elektron eingefangen wurde:

$$\begin{aligned} A^{q+} + e^- &\rightarrow A^{(q-1)+} + \gamma \\ E_\gamma &= E_k(e_s^-) + E_b(nlj), \end{aligned} \quad (2.4)$$

wobei  $e_s$  wiederum das freie Elektron, welches rekombiniert wird, bezeichnet und  $E_b(nlj)$  für die Bindungsenergie der Schale mit den Quantenzahlen  $nlj$  steht, auf welche das Elektron eingefangen wird. Schon zu Beginn der Quantenphysik waren Elektroneneinfang-Prozesse Gegenstand theoretischer Überlegungen (z.B. Oppenheimer [28]), so dass über semiklassische Modelle (Kramers [29]) und einer einfachen quantenmechanischen Abschätzung nach Bethe und Salpeter [30] als Wirkungsquerschnitt für die radiative Rekombination nach Kim und Pratt [31]

$$\sigma_n^{RR} = \frac{8\pi}{3\sqrt{3}} \frac{\alpha^3}{n^3} \frac{Z_{eff}^4}{E_k E_\gamma} \quad (2.5)$$

angegeben werden kann mit der effektiven Ladung  $Z_{eff}$  des Ions, der kinetischen Energie  $E_k$  des Elektrons, der Energie  $E_\gamma$  des emittierten Photons sowie der Hauptquantenzahl  $n$  des Niveaus, auf welches das Elektron eingefangen wird und der Feinstrukturkonstante  $\alpha$ .

Der Prozess der radiativen Rekombination kann als Umkehrprozess der Photoionisation (Abb. 2.1) verstanden werden, bei welcher Elektronen durch hochenergetische Photonen aus einem Atom bzw. Ion ausgelöst werden können. Dieser Prozess ist auch Gegenstand aktueller Experimente am Institut [32].

Neben dem spontanen Elektroneneinfang kann die Rekombination von Elektronen in hochgeladene Ionen auch mit Hilfe von Lasern induziert werden [33].

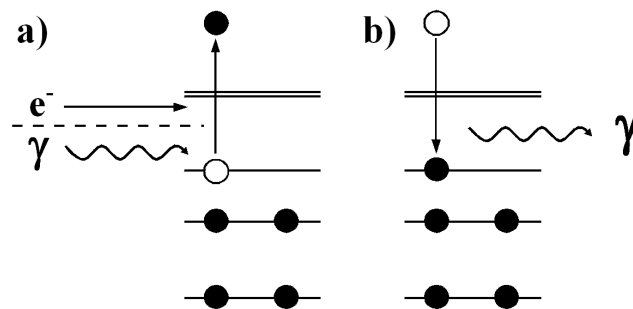
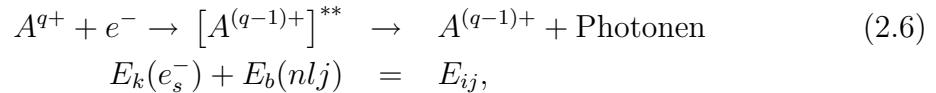


Abbildung 2.1: Ionisation und Rekombination. a) Ionisation mittels Energieübertragung durch ein stoßendes Elektron bzw. ein Photon auf das gebundene Elektron. b) Radiative Rekombination durch Abgabe der überschüssigen Energie über Aussendung eines Photons.

### Dielektronische Rekombination

Bei speziellen kinetischen Energien der freien Elektronen reicht die Summe dieser Energie mit der freiwerdenden potentiellen Energie bei der Rekombination auf einen gebundenen Zustand gerade aus, um ein weiteres gebundenes Elektron des Ions auf ein höheres Niveau anzuregen. Dies geschieht, indem die Energie, welche bei dem Rekombinationsvorgang nach Gleichung (2.4) abtransportiert wird, über Elektron-Elektron-Wechselwirkung direkt auf das gebundene Elektron übertragen wird. Auf Grund der Quantisierung der Energie [34] und damit auch der Energieniveaus in Atomen [35] tritt dieser Prozess als resonanter Prozess bestimmter Elektronenenergien auf. Da hier zwei Elektronen gleichzeitig in die Rekombination involviert sind, wird er als **dielektronische Rekombination (DR)** bezeichnet.

Gleichung (2.6) verdeutlicht den resonanten Prozess der DR und die Energien der Elektronen und Photonen



wobei  $E_{ij}$  die Übergangsenergie der Anregung des in den Rekombinationsprozess involvierten gebundenen Elektrons,  $E_k(e_s^-)$  wieder die kinetische Energie des freien Elektrons vor dem Einfang und  $E_b(nlj)$  die Bindungsenergie des Niveaus  $nlj$  bezeichnet, auf welches das Kontinuumelektron eingefangen wird.

Der komplette Prozess der dielektronischen Rekombination lässt sich generell in zwei Teilprozesse unterteilen: Im ersten Teil wird das freie Elektron in das Ion eingefangen und regt dadurch ein gebundenes Elektron auf ein höheres Niveau an. Nach diesem sogenannten dielektronischen Elektroneneinfang befindet sich das Ion also in einem meist doppelt angeregten Zustand. Die Rekombination wird komplettiert durch den zweiten Teilprozess, in dem dieser angeregte Zustand in den Grundzustand relaxiert.

Während die radiative Rekombination als Umkehrprozess der Photoionisation verstanden werden kann, beschreibt der dielektronische Elektroneneinfang die Zeitumkehr des Auger-Prozesses. Abbildung 2.2 verdeutlicht schematisch den gesamten Prozess der dielektronischen Rekombination und vergleicht ihn mit dem Auger-Prozess.

Eine Berechnung der Wirkungsquerschnitte dieses Prozesses und der zugehörigen Resonanzstärken wird im Abschnitt 2.3 näher besprochen.

Um die Prozesse nach Reaktionskanälen einzuordnen, wurde eine Nomenklatur eingeführt, die in Analogie zur in der Augerelektronenspektroskopie verwendeten steht. Diese beschreibt, in welchen Niveaus sich die gebundenen Elektronen vor der Reaktion und in welchen sie und das eingefangene Elektron sich nach der Reaktion befinden. So beschreibt eine K-LL DR den Prozess, bei dem ein gebundenes Elektron aus der K-Schale in die L-Schale angeregt wird, während ein freies Elektron ebenfalls in die L-Schale rekombiniert. Mit entsprechenden Indizes für Drehimpulse

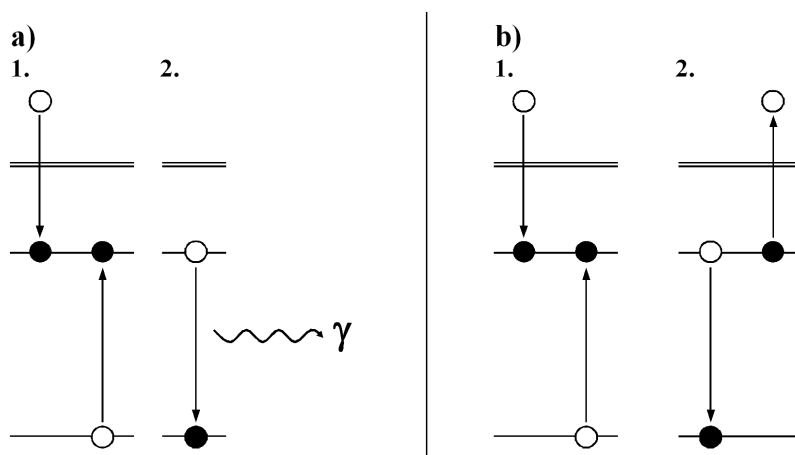


Abbildung 2.2: Dielektronische Rekombination und Auger-Effekt. a) Die Prozesse der dielektronischen Rekombination: dielektronischer Elektroneneinfang (1), Relaxation durch Photonenemission (2). b) dielektronischer Elektroneneinfang (1) als Zeitumkehrprozess des Auger-Effekts (2).

der beteiligten Elektronen lässt sich diese Nomenklatur weiter verfeinern. Um die einzelnen Resonanzen sehr genau zu bezeichnen, wurde in dieser Arbeit mit der hier vorgestellten Schreibweise eine Resonanzgruppe bezeichnet, während die einzelnen Resonanzen selbst mit der Elektronenkonfiguration des während des DR-Prozesses entstehenden angeregten Zwischenzustands angegeben werden.

### Resonante Rekombinationsprozesse höherer Ordnung

Nach dem Prinzip der dielektronischen Rekombination kann die Energie eines eingefangenen Elektrons gleichzeitig auf mehrere gebundene Elektronen übertragen werden und diese gemeinsam anregen. Dieser Prozess, bei dem mit den beiden angeregten und dem eingefangenen Elektron drei Elektronen involviert sind, wird als **trielektronische Rekombination (TR)** bezeichnet. Die für die DR beschriebene Nomenklatur lässt sich hierbei fortsetzen, so dass etwa eine KL-LLL TR eine Anregung eines K- und eines L-Elektrons in die L-Schale bei gleichzeitiger Rekombination eines freien Elektrons in die L-Schale beschreibt.

Die größere Anzahl der in den Prozess involvierten Elektronen lässt auch eine Vielzahl von Variationen der trielektronischen Rekombinationsvorgänge in einem bestimmten Ladungszustand zu. Energieentartungen mit DR-Prozessen und die Problematik der Unterscheidung zu diesen werden im Kapitel 5.2 diskutiert, in dem die Ergebnisse der Messungen dargestellt werden.

Die Ordnung des Prozesses kann anhand der angeregten gebundenen Elektronen bestimmt werden, und so sind neben dem Prozess erster Ordnung (DR) und zweiter Ordnung (TR) auch weitere Prozesse denkbar, so lange genügend gebundene

Elektronen und freie Plätze in den entsprechenden Schalen für die angeregten Elektronen vorhanden sind. Der nächsthöhere Prozess wäre ein Prozess dritter Ordnung mit insgesamt vier involvierten Elektronen und so liegt die Bezeichnung **quadru-elektronische Rekombination (QR)** nahe.

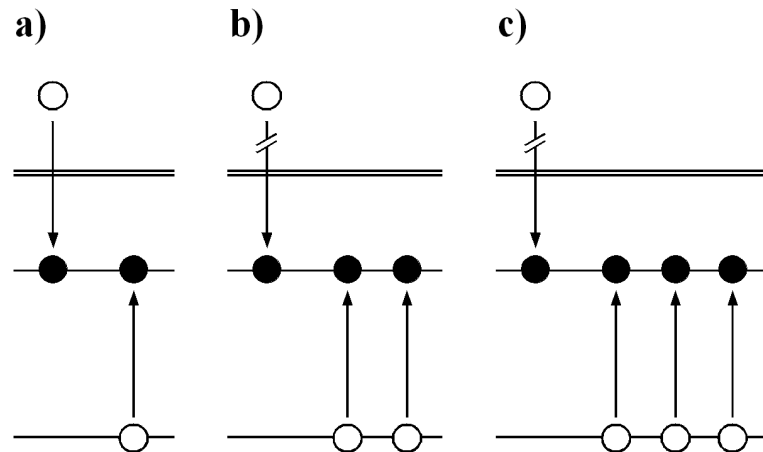


Abbildung 2.3: Resonante Elektroneneinfang-Prozesse erster und höherer Ordnung dargestellt in einem einfachen Zwei-Niveau-System: a) dielektronische Rekombination, b) trielektronische Rekombination und c) quadru-elektronische Rekombination. Auf die Darstellung der Relaxationsvorgänge wurde verzichtet.

Die Skizze in Abbildung 2.3 soll schematisch die drei vorgestellten resonanten Rekombinationsprozesse verdeutlichen. Hierbei wird in einer einfachen Annahme von einem Zwei-Niveau-System unter Beachtung des Pauliprinzips ausgegangen, was die Prinzipien der diskutierten Prozesse gut wiedergibt. In der Darstellung der Messergebnisse in Kapitel 5 werden die einzelnen Prozesse näher beleuchtet und energetisch genauer eingeordnet sowie ihre entsprechenden Resonanzgruppen wie etwa K-LL DR oder KL-LLL TR zugesprochen.

Wie auch die DR können die Prozesse höherer Ordnung in die beiden Teilprozesse resonanter Einfang und Relaxation unterteilt werden. Ein entsprechender Umkehrprozess zum trielektronischen Elektroneneinfang kann in dem Drei-Elektronen Auger-Effekt gesehen werden, welcher kürzlich in Kohlenstoff-Ionen nachgewiesen wurde [20].

Die Berechnung dieser Rekombinationen höherer Ordnung stellt besondere Anforderungen an die Theorie, weil hier gleichzeitige Anregungen und somit korrelierte Prozesse modelliert werden müssen.

## 2.2 Berechnung der energetischen Struktur hochgeladener Ionen

Zur Berechnung der Resonanzenergien ist eine genaue Kenntnis der elektronischen Struktur eines Ions notwendig.

### Entwicklung der Vorstellung der inneren Struktur von Atomen

Erste Beschreibungsversuche der inneren Struktur von Atomen wurden 1903 von Joseph John Thomson unternommen, indem er Atome als eine gleichmäßige Verteilung positiver und negativer Ladungsträger beschrieb. Streuversuche mit  $\alpha$ - und  $\beta$ -Teilchen auf Gold-Folien führten Ernest Rutherford 1911 zu dem Modell, dass innerhalb der Atome die positiven Ladungen in einem Kern konzentriert sind, welcher von negativen Ladungen gleichförmig umgeben ist, so dass das Atom nach außen hin weiter neutral erscheint [36]. Beobachtungen der Schwarzkörperstrahlung führten Max Planck 1900 zu der These der Quantisierung der elektromagnetischen Strahlung und der Energie [34], wonach Niels Bohr 1913 das Rutherfordsche Atommodell mit der Quantentheorie verband und folgerte, dass die Elektronen nicht gleichverteilt den positiven Kern umgeben, sondern sich auf Kreisbahnen mit quantisiertem Drehimpuls bewegen und somit diskrete Energien besitzen [35]. Hier können erstmals die Energien der Elektronen durch eine Quantenzahl  $n$  charakterisiert werden. Diese Theorie wurde wenige Jahre später von Arnold Sommerfeld erweitert, so dass auch elliptische Bahnen möglich wurden [37]. Neben der Hauptquantenzahl  $n$  trägt hier nach eine Drehimpulsquantenzahl  $l$  zur näheren Beschreibung der Energiezustände der Elektronen bei.

### Quantenmechanische Beschreibung der Energien in gebundenen Systemen

Die Wellengleichung von Erwin Schrödinger  $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ , eine lineare Differentialgleichung zweiter Ordnung, definiert die energetischen Zustände eines Teilchens in einem vorgegebenen Potential [38, 39, 40, 41, 42]. Dabei geben die Absolutquadrate der Eigenzustände  $\psi$  der zeitunabhängigen Schrödingergleichung, welche an Stelle der Newtonschen Bewegungsgleichung tritt, eine Wahrscheinlichkeitsdichte für den Ort des Teilchens an und die Eigenwerte  $E$  die entsprechenden Energien. Diese ergeben sich durch den *Hamilton-Operator*  $H$ , welcher einen d'Alembert-Operator als zweifachen Ableitungsoperator enthält und somit seine Eigenzustände als Lösungen der Wellengleichungen auszeichnet.

Mit dem Zentralpotential  $V(r) = -\frac{Z\alpha}{r}$  eines positiv geladenen punktförmigen Kernes mit der Kernladung  $Z$ , ergibt sich der Hamilton-Operator für ein Elektron in mit dem Abstand  $r$  zum Zentrum und der Feinstrukturkonstanten  $\alpha$  in atomaren Einheiten ( $\hbar = e = 1$ ) zu  $H = -\frac{\Delta}{2\mu} - \frac{Z\alpha}{r}$ , was die Eigenwertgleichung

$$\left(-\frac{\Delta}{2\mu} - \frac{Z\alpha}{r}\right)\psi_{nlm}(\vec{r}) = E_n\psi_{nlm}(\vec{r}) \quad (2.7)$$

für die Eigenfunktionen  $\psi_{nlm}(\vec{r})$  ergibt, welche als Parameter die Hauptquantenzahl  $n$ , die Drehimpulsquantenzahl  $l$  sowie die magnetische Quantenzahl  $m$  tragen und von dem Abstand  $r$  zum als punktförmig angenommenen Kern abhängig sind. Mit der Reduzierten Masse  $\mu = \frac{m_e M}{m_e + M}$  wird die endliche Kernmasse  $M$  und ihr Verhältnis zur Elektronenmasse  $m_e$  berücksichtigt.

Lösen lässt sich die Schrödinger-Gleichung für ein geladenes Teilchen im zentralsymmetrischen Coulomb-Feld, indem man einen Separationsansatz nach den drei Kugelkoordinaten  $\vartheta$ ,  $\phi$  und  $r$  wählt. Somit kann man für die radiale Komponente eine Funktion  $R_{nl}$  angeben, während für die Winkelkoordinaten die Kugelflächenfunktionen  $Y_{lm}$  eine passende Lösung liefern. Die allgemeine Lösung der Schrödinger-Gleichung ergibt sich somit als Produkt der beiden Teillösungen:

$$\psi_{nlm} = R(\vec{r})Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (2.8)$$

Die zugehörigen Eigenwerte, d.h. die Bindungsenergien der Zustände des besprochenen Ein-Teilchen-Systems (H-ähnliche Systeme) ergeben sich in Abhängigkeit der Hauptquantenzahl  $n$  zu

$$E_n = -\frac{\mu(Z\alpha)^2}{2n^2}. \quad (2.9)$$

In der Quantenmechanik nach Schrödinger sind wie in Gleichung (2.9) abzulesen die Energien nur abhängig von der positiven und ganzzahligen Hauptquantenzahl  $n$ , wobei sie für die Drehimpulsquantenzahl, welche die Werte  $l = 0, 1, \dots, n-1$  annehmen kann sowie für die magnetische Quantenzahl mit den möglichen Werten  $m = 0 \pm 1, \dots, \pm l$  entartet sind.

**Dirac-Theorie.** Um Effekte wie solche durch den nach den Ergebnissen des Stern-Gerlach-Versuchs postulierten Spin als quantenmechanische Eigenschaft der Teilchen oder die spezielle Relativitätstheorie, welche von Albert Einstein 1905 aufgestellt wurde [43], zu berücksichtigen, erarbeitete Paul Dirac 1928 eine Weiterentwicklung der Schrödinger-Theorie, welche auf dem von Wolfgang Pauli aufgestellten Prinzip, wonach kein Quantenzustand von zwei Teilchen halbzahligen Spins wie Elektronen gleichzeitig eingenommen werden kann, aufbaut [44].

Mit Hilfe der relativistischen Energie  $E = \sqrt{p^2 c^2 + m_e^2 c^4}$  lässt sich als Hamilton-Operator für ein freies Elektron der Masse  $m_e$

$$H_D = \vec{\alpha} \cdot \vec{p}c + \beta m_e c^2 \quad (2.10)$$

formulieren mit den Dirac-Matrizen  $\alpha$  und  $\beta$ , welche die Antikommutatoren  $[\alpha_i, \alpha_k]_+ = 2\delta_{i,k}$  und  $[\alpha_i, \beta]_+ = 0$  sowie die Beziehung  $\beta^2 = 1$  erfüllen, wobei  $\alpha$  über die Pauli-Matrizen  $\sigma_{x,y,z}$  und  $\beta$  über die zweidimensionale Einheitsmatrix  $I$  ausgedrückt wird:

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$$

Wieder angewandt auf ein radiales Coulombpotential  $V(r) = -\frac{Z\alpha}{r}$  ergibt sich die zeitabhängige *Dirac-Gleichung* zu

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left( \vec{\alpha} \cdot \vec{p}c + \beta m_e c^2 - \frac{Z\alpha}{r} \right) \psi \quad (2.11)$$

mit dem Impulsoperator  $\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$ .

Wie bereits bei der Schrödinger-Theorie lassen sich auch in der Dirac-Theorie für das Ein-Teilchen-System, bei dem sich ein Elektron in einem zentralen Coulombpotential befindet und was somit die Situation des Wasserstoff-Atoms bzw. Wasserstoff-ähnlicher Ionen beschreibt, Lösungen für das entsprechende Eigenwertproblem analytisch finden. So können die Eigenwerte

$$E_{nj} = m_e c^2 \left\{ \left[ 1 + \left( \frac{Z\alpha}{n - (j + \frac{1}{2}) + \sqrt{(j + \frac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2}} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}} - 1 \right\} \quad (2.12)$$

nach  $(Z\alpha)$  entwickelt werden, womit sich die Energie der gebundenen Zustände darstellen lässt als:

$$E_{nj} = m_e c^2 \left[ 1 - \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} - \frac{(Z\alpha)^4}{2n^3} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{2}{4n} \right) + \dots \right] \quad (2.13)$$

Die Gesamtdrehimpulsquantenzahl  $j$  setzt sich zusammen aus dem Bahndrehimpuls  $l$  und dem Spin  $s$  und kann die Werte  $j = |l - s|, \dots, l + s$  annehmen.

An den Gliedern der Reihenentwicklung sind die einzelnen Beiträge der Energie des gebundenen Zustands abzulesen. So drückt der erste Term in Gleichung (2.13) die Ruhemasse des Elektrons aus, während der zweite Term die schon in der Schrödinger-Theorie gefundene nichtrelativistische Bindungsenergie wiedergibt. Der Unterschied zur Schrödingertheorie liegt in der Angabe relativistischer Korrekturen, welche für niedrige Ordnung im dritten Term angegeben sind. Diese Feinstruktur beinhaltet neben den relativistischen Massenänderungen durch die Bewegung des Elektrons hauptsächlich Effekte, die auf Grund des Spins des Elektrons bei der Betrachtung der Bewegung des Elektrons um den Kern zu verstehen sind. Dazu spielt ein sog. Darwin-Term bei der Feinstruktur ebenfalls eine Rolle. Er trägt dem Phänomen der Heisenbergschen Unschärferelation Rechnung, indem er eine Art Zitterbewegung des Elektrons auf seiner Bahn annimmt, da es nicht exakt lokalisiert werden kann und daher bei schwankendem Abstand zum Feldmittelpunkt auch schwankende Energien besitzt.



**Quantenelektrodynamik.** Im Rahmen der Quantenelektrodynamik (QED, siehe z.B. [45]) wird das elektromagnetische Feld selbst ebenfalls quantisiert. Die Wechselwirkung des Feldes mit geladenen Teilchen über den Austausch von Transportteilchen, in diesem Fall virtuelle bzw. reelle Photonen, beschrieben. Die QED gibt Abweichungen der nach der Dirac-Theorie berechneten Spektren zu gemessenen Werten sehr genau wieder, wie sie erstmals 1947 von Willis E. Lamb und seinem Studenten Robert C. Retherford in der  $2s_{1/2} - 2p_{1/2}$  Aufspaltung des Wasserstoffatoms beobachtet wurden. Diese Zustände wären nach der Dirac-Theorie auf Grund des gleichen Gesamtdrehimpulses  $j$  entartet.

Wechselwirkungsmechanismen wie in der QED beschrieben haben einen Einfluss auf die Energie der Elektronen. Bei ein-Elektronen-Systemen hat die **Selbstenergie** des Elektrons den dominaten Einfluss. Hierbei liegt die Modelvorstellung zu Grunde, dass ein Elektron ständig virtuelle Photonen emittiert und absorbiert, was im Rahmen der Heisenberg'schen Energieunschärfe [46, 47] möglich ist. Die dadurch bedingte Vakuumfluktuation des elektromagnetischen Felds lässt die in anderen Theorien als punktförmig angenommenen Elektronen mit einer unscharfen Ausdehnung erscheinen, welche das Coulombfeld modifiziert. Nach [48] kann der Beitrag des Selbstenergie-Beitrag zur Lamb-Verschiebung des  $2s$ -Niveaus des Wasserstoffatoms, wobei hier nur die Veränderung der Ladungsverteilung berücksichtigt wurde:

$$\Delta_{H-2s}^{SE} \approx \frac{4m_e c^2 (Z\alpha)^4}{n^3} \frac{\alpha}{3\pi} \ln [(Z\alpha)^{-2}] \quad (2.14)$$

$$n = 2 : \Delta_{H-2s}^{SE} \approx 5,5 \cdot \mu eV.$$

Ein weiterer wichtiger Effekt ist die **Vakuumpolarisation**. Hier wird angenommen, dass ein virtuelles Photon in ein Elektron-Positron-Paar zerfällt, welches wieder zerstrahlt. Die dadurch bedingte Polarisation des Vakuums lässt das Elektron eine höhere effektive Kernladung spüren, so dass dieses stärker an den Kern gebunden ist.

Die Selbstenergie liefert jedoch in dem einfachen System eines Elektrons im Coulombfeld den stärkeren Beitrag, wodurch die Summe der QED-Korrekturen die Bindungsenergie insgesamt absenkt.

### Erweiterung auf Systeme mit mehreren Elektronen

Die Beschreibungen der energetischen Struktur gebundener Systeme mit der Dirac-Gleichung (2.11) ist nur für den Fall *eines* Elektrons im Coulombfeld exakt analytisch lösbar. Um die Energieniveaus hochgeladener Ionen, in welchen mehrere Elektronen gebunden sind, zu berechnen, müssen Näherungsverfahren angewandt werden.

**Mehr-Elektronen Hamilton-Operator.** Zur Beschreibung des Problems muss der Hamilton-Operator der Dirac-Gleichung (2.11) mit einem Operator erweitert werden, welcher die Wechselwirkungen der Elektronen untereinander berücksichtigt.

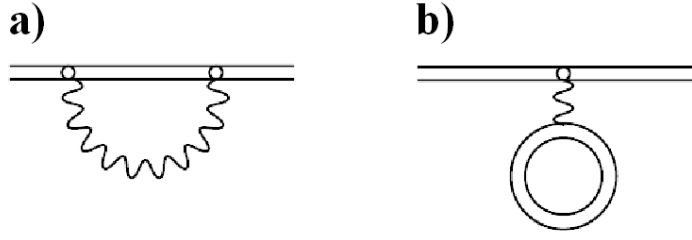


Abbildung 2.4: Selbstenergie (a) und Vakuumpolarisation (b) dargestellt als Feynman-Graphen.

$$H_{D_{Mel}} = \sum_i H_D^i + \sum_{i<j} v_c^{ij}, \quad (2.15)$$

wobei  $H_D$  den ein-Elektronen Hamilton-Operator (2.10) der Dirac-Gleichung bezeichnet und das Wechselwirkungspotential der Elektronen mit  $v_c^{ij} = \frac{1}{|r_i - r_j|}$  angegeben wird. Hierzu sind noch relativistische Korrekturen niedrigster Ordnung zu berücksichtigen, welche die magnetische Wechselwirkung und die Retardierung beinhalten, die mit dem **Breit-Operator** beschrieben werden können:

$$v_B^{ij} = -\frac{1}{2r_{ij}} \left( \alpha_i \cdot \alpha_j + \frac{(\alpha_i \cdot r_{ij})(\alpha_j \cdot r_{ij})}{r_{ij}^2} \right), \quad (2.16)$$

mit welchem sich mit (2.15) der sogenannte **Dirac-Coulomb-Breit Hamilton-Operator** ergibt:

$$H_{DCB} = \sum_i H_D^i + \sum_{i<j} v^{ij} + \sum_{i<j} v_B. \quad (2.17)$$

Wiederum in Komponenten bis zur Ordnung  $(v/c^2)$  aufgespalten sind in diesem Operator die einzelnen Wechselwirkungsprozesse der Elektronen untereinander abzulesen:

$$H_{DCB} = H_{NR} + H_{MRel} + H_{SO} + H_{Darwin} + H_{OO} + H_{SS} + H_{SOO}. \quad (2.18)$$

Ausgehend von dem nichtrelativistischen Hamilton-Operator  $H_{NR}$  beschreibt dieser Hamilton-Operator das System, indem mit  $H_{MRel}$  die relativistische Massenzunahme des Elektrons, mit  $H_{SO}$  die Spin-Bahn-Wechselwirkung und mit  $H_{Darwin}$  der Darwin-Term berücksichtigt wird. Die mehr-Elektronen-Wechselwirkungen werden durch die übrigen Terme ausgedrückt, indem  $H_{OO}$  die Orbit-Orbit-Wechselwirkung beschreibt, welche die Wechselwirkung der Elektronen über die Dipolmomente beinhaltet und  $H_{SS}$  die Spin-Spin-Wechselwirkung der Elektronen berücksichtigt.  $H_{SOO}$  steht für die Wechselwirkungen des Spins mit anderen Orbitalen.

**Multi-Configuration-Dirac-Fock-Methode.** Um sich der Energie eines Zustandes im Mehr-Elektronens-System möglichst genau zu nähern, sind Variationsverfahren hilfreiche Ansätze. Die Grundidee besteht darin, eine Gesamtwellenfunktion als antisymmetrisches Produkt der Ein-Teilchen-Wellenfunktion zu bilden, was durch eine Slater-Determinante ausgedrückt werden kann.

Die optimale Wellenfunktion wird über iterative Variation der Einzelwellenfunktionen erreicht, bis die Energie des Systems, welche durch den Erwartungswert des Hamilton-Operators repräsentiert wird, minimal ist. Dabei wird bei der Iteration immer die zuvor gefundene Wellenfunktion als Ausgangswert betrachtet.

Ein einfaches Verfahren zur Berechnung der Gesamtwellenfunktion eines Mehr-Elektronen-Systems liefert das *Hartree-Fock-Verfahren* [49]. Hier wird die Elektron-Elektron-Korrelation noch nicht berücksichtigt, d.h. die Elektronen werden als unabhängig angenommen. Statt dessen wird bei der Berechnung der Energie eines Elektrons das Modell angenommen, dass die restlichen Elektronen das Coulomb-Feld des Kerns abschirmen und somit ein radiales Abschirmungspotential entsteht, mit der die Energien errechnet werden.

Um Korrelationen zwischen den Elektronen zu berücksichtigen, wurde hieraus das *Multi-Configuration-Hartree-Fock (MCHF)*-Verfahren entwickelt [50]. Durch eine Erweiterung dieses Verfahrens mit Hilfe der ein-Teilchen-Dirac-Wellenfunktion werden zudem neben relativistischen Effekten auch magnetische Wechselwirkungen berücksichtigt. Mit diesem so genannten *Multi-Configuration-Dirac-Fock (MCDF)*-Verfahren [51] wird die Präzession der Rechnung deutlich erhöht. Im Mittelpunkt der Methode stehen *Konfigurations-Zustandsfunktionen (CSF)*  $|\nu\Pi, J, M\rangle$ , die von der Parität  $\Pi$ , dem Gesamtdrehimpuls  $J$  und der magnetischen Quanzenzahl  $M$  abhängen. Sie sind Eigenfunktionen der Parität  $\Pi$ , des Gesamtdrehimpulsquadrats  $\mathbf{J}^2$  sowie der Projektion des Gesamtdrehimpulses  $J_z$ .

Die CSF, welche als antisymmetrisches Produkt von ein-Teilchen-Wellenfunktionen aufgebaut sind, lassen sich als Linearkombination von Slater-Determinanten mit Dirac-Bispinoren schreiben:

$$|\nu\Pi, J, M\rangle = \sum_i^{N_\nu} d_i \begin{vmatrix} \psi_1^i(x_1) & \dots & \psi_m^i(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1^i(x_m) & \dots & \psi_m^i(x_m) \end{vmatrix}$$

Die Gesamtwellenfunktion  $|\Psi_{\Pi, J, M}\rangle$  ist als Linearkombination der CSF definiert

$$|\Psi_{\Pi, J, M}\rangle = \sum_{\nu=1}^N n c_\nu |\nu\Pi, J, M\rangle. \quad (2.19)$$

Um nun die Energien der gebundenen Zustände zu errechnen, müssen die Mischkoeffizienten  $c_\nu$  und die Orbitale  $\psi^i$  durch Anwendung des Variationsprinzips auf die Energieeigenwerte des Hamilton-Operators hinsichtlich der Gesamtwellenfunktion  $\Psi_{\Pi, J, M}$  bestimmt werden. Dadurch entsteht ein System von linearen algebraischen

Gleichungen für die Koeffizienten  $c_\nu$  und ein System von Integro-Differentialgleichungen für die Orbitale  $\psi^i$ , die iterativ gelöst werden.

## 2.3 Wirkungsquerschnitte und Linienstärken für resonante Rekombinationsprozesse

Mit den nach der in Abschnitt 2.2 vorgestellten Methode errechneten Resonanzenergien lassen sich bei der Kenntnis der Wirkungsquerschnitte für die Rekombinationsprozesse und für die Abregung durch Photonenemission entsprechende Resonanzspektren modellieren. Mit Hilfe relativistischer Streutheorien können damit die Resonanzstärken der einzelnen Resonanzen angegeben werden, was nach Faltung mit Gauß-Verteilungen gewünschter Halbwertsbreiten (FWHM - *full width at half maximum*) ein Spektrum ergibt, wie es bei entsprechender experimenteller Auflösung erwartet werden kann.

Den Herleitungen in [52] folgend lassen sich die Resonanzstärken der dielektronischen Rekombination wie folgt berechnen: Nach z.B. [53, 54, 55] kann der Wirkungsquerschnitt für einen dielektronischen Rekombinations-Kanal in atomaren Einheiten angegeben werden mit

$$\sigma_{i \rightarrow d \rightarrow f}^{\text{DR}}(E) = \frac{2\pi^2}{p^2} \frac{A_r^{d \rightarrow f}}{\Gamma_d} L_d(E) V_a^{i \rightarrow d}. \quad (2.20)$$

Der Index  $i$  bezeichnet den Ausgangszustand des Prozesses, welcher aus dem Grundzustands-Ion und einem Kontinuumelektron mit dem asymptotischen Impuls  $\vec{p}$ , der Energie  $E$  und der Spinprojektion  $m_s$  besteht.  $d$  bezeichnet den angeregten Zwischenzustand, der nach dem dielektronischen Elektroneneinfang entsteht, welcher radiativ zum Endzustand  $f$  relaxiert.

Die totale radiative Rate des autoionisierenden Zwischenzustandes  $|d\rangle$  wird über  $A_r^d = \sum_f A_r^{d \rightarrow f}$  ausgedrückt, während die Elektroneneinfang-Rate  $V^{i \rightarrow d}$  gegeben ist durch

$$\begin{aligned} V^{i \rightarrow d} &= \frac{2\pi}{2(2J_i + 1)} \sum_{M_d} \sum_{M_i m_s} \int d\Omega_p \\ &|\langle \Psi_d; J_d M_d | v_C + v_B | \Psi_i E; J_i M_i, \vec{p} m_s \rangle|^2 \\ &= 2\pi \sum_{\kappa} |\langle \Psi_d; J_d | v_C + v_B | \Psi_i E; J_i j; J_d \rangle|^2. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Die Summation läuft über die Partialwellen des Kontinuumelektrons. Die Raten des dielektronischen Elektroneneinfangs verhalten sich gemäß eines detaillierten Gleichgewichts zu den Raten seines Zeitumkehr-Prozesses, dem Auger-Prozess (siehe Abschnitt 2.1) wie

$$V^{i \rightarrow d} = \frac{2J_d + 1}{2(2J_i + 1)} A_a^{d \rightarrow i}. \quad (2.22)$$

$J_d$  und  $J_i$  bezeichnen die Gesamtdrehimpulse der Zwischenzustände  $d$  bzw. des Ausgangszustands  $i$  des Ions, und  $M_d$  und  $M_i$  sind die entsprechenden energetischen Quantenzahlen.

Die Energieabhängigkeit des Wirkungsquerschnitts kann angegeben werden mit Hilfe einer Lorentz-Profil-Funktion

$$L_d(E) = \frac{\Gamma_d/(2\pi)}{(E_i + E - E_d)^2 + \frac{\Gamma_d^2}{4}}, \quad (2.23)$$

welche um die errechnete Resonanzenergie ( $E_{res} = E_d - E_i$ ) zentriert ist. Mit der natürlichen Linienbreite  $\Gamma_d = A_r^d + A_a^d$ , welche sich aus der Summe der radiativen und autoionisierenden Breiten zusammensetzt und unter Vernachlässigung der Energieabhängigkeit der Elektronen-Impulse in der Nähe der Resonanzen kann die Resonanzstärke, welche definiert ist als die Fläche unter den entsprechenden Kurven, angegeben werden mit

$$S_{i \rightarrow d \rightarrow f}^{DR} = \frac{2\pi^2}{p^2} \frac{2J_d + 1}{2(2J_i + 1)} \frac{A_r^{d \rightarrow f} A_a^{i \rightarrow d}}{A_r^d + A_a^d}. \quad (2.24)$$

Wie später beschrieben werden in unserem Experiment die Relaxationsphotonen unter einem Winkel von  $90^\circ$  detektiert. Um eine genauere Vorstellung der zu erwartenden Resonanzstärken zu erhalten, müssen also die differentiellen Wirkungsquerschnitte der Dipol-Röntgen-Strahlung in Winkelabhängigkeit bestimmt werden. Diese lassen sich nach [56] folgendermaßen formulieren:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{i \rightarrow d \rightarrow f}^{DR}}{d\Omega_k} &= \sigma_{i \rightarrow d \rightarrow f}^{DR} W(\theta), \\ W(\theta) &= \frac{1}{4\pi} (1 + \beta_{i \rightarrow d \rightarrow f} P_2(\cos \theta)) \end{aligned} \quad (2.25)$$

Somit muss die Gleichung für die Resonanzstärke (2.24) mit dieser Winkelverteilungsfunktion multipliziert werden. In ihr drückt  $\beta_{i \rightarrow d \rightarrow f}$  den Dipol-Anisotropie-Parameter aus, welcher vom Matrixelement des dielektronischen Elektroneneinfangs und den Drehimpuls-Quantenzahlen des Ausgangs- und Zwischenzustands abhängt, während  $P_2(x)$  das zweite Legendre-Polynom ist. Dieser Anisotropie-Parameter ist nach [56, 57] gegeben durch

$$\beta_{i \rightarrow d \rightarrow f} = (-1)^{1+J_d+J_f} \sqrt{\frac{3(2J_d+1)}{2}} \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ J_d & J_d & J_f \end{Bmatrix} \frac{P_{J_i J_d}^{(2)}}{P_{J_i J_d}^{(0)}}, \quad (2.26)$$

mit

$$\begin{aligned}
P_{J_i J_d}^{(L)} &= \sum_{\kappa \kappa'} (-1)^{J_i + J_d + L - 1/2} i^{l-l'} \cos(\Delta_\kappa - \Delta_{\kappa'}) \quad (2.27) \\
&\times [j, j', l, l', L]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} l & l' & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} j' & j & L \\ l & l' & \frac{1}{2} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} J_d & J_d & L \\ j & j' & J_i \end{matrix} \right\} \\
&\times \langle \Psi_d; J_d \| V_C + V_B \| \Psi_i E; J_i j; J_d \rangle \\
&\times \langle \Psi_d; J_d \| V_C + V_B \| \Psi_i E; J_i j'; J_d \rangle^*
\end{aligned}$$

unter Verwendung der Kurznotation für die Gesamtdrehimpulse  $[j_1, j_2, \dots, j_n] = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \dots (2j_n + 1)$ . Die runden Klammern bezeichnen die sog.  $3j$ -Symbole und die geschweiften Klammern stehen für die  $6j$ -Symbole [58]. Die  $\Delta_\kappa$  sind die Phasen der Partialwellen des Kontinuumelektrons.

Aufbauend auf der so gefundenen Resonanzstärke der dielektronischen Rekombination kann ebenso die Resonanzstärke der resonanten Prozesse höherer Ordnung errechnet werden, indem mit  $A_a$  die Autoionisationsrate des Übergangs  $n$  gebundener Elektronen berücksichtigt wird und  $A_r$  wieder die Rate der entsprechenden radiativen Relaxation bezeichnet [59]:

$$S_{i \rightarrow d \rightarrow f}^{DR} = \frac{\pi}{2p^2} (1 + \beta_{d \rightarrow f} P_2(\cos \theta)) \frac{2J_d + 1}{2(2J_i + 1)} \frac{A_r^{d \rightarrow f} A_a^{i \rightarrow d}}{A_r^d + A_a^d}. \quad (2.28)$$

Im Kapitel 5 werden diese mit experimentellen Resonanzstärken verglichen.

# Kapitel 3

## Das Experiment

Messungen dielektronischer Resonanzen in hochgeladenen Ionen werden seit ihrer Entdeckung in großer Vielfalt durchgeführt, was viele der in der Einleitung beschriebene Experimente zeigen. Der größte experimentelle Aufwand liegt hierbei in der Produktion der hochgeladenen Ionen, die zudem noch für die Reaktion kontrollierbar gehalten werden müssen. Bei manchen solcher Messungen werden die Ionen in Teilchenbeschleunigern erzeugt und in Speicherringen für die Reaktionen gespeichert. In diesen Anlagen können Ionen bis zu höchsten Ladungszuständen produziert werden, die dann für genaue Messungen der Resonanzen genutzt werden.

Speicherringe sind durchaus geeignete Instrumente zur Messung dielektronischer Rekombinationen. Ihre Dimensionen, der Aufwand ihrer Errichtung und der betriebliche Aufwand sind jedoch sehr hoch. Eine besonders attraktive Alternative stellt *Electron Beam Ion Trap* (EBIT) dar, eine Elektronenstrahl-Ionenfalle. Diese kann Ionen bis zu jedem beliebigen Ladungszustand erzeugen und gleichzeitig auf kleinstem Raum speichern, ist zudem ein sehr kompaktes Instrument und universell bei der Forschung mit hochgeladenen Ionen einsetzbar. Verglichen mit den Dimensionen der Speicherringe nehmen sie nur einen Bruchteil des Raumes ein. Der betriebliche Aufwand ist daher um einiges geringer und deren Effizienz und Flexibilität qualifiziert sie als hervorragendes Instrument.

In den nachstehenden Abschnitten soll ihr Prinzip und der spezifische Aufbau der für diese Experimente verwendeten Heidelberg-EBIT erklärt werden. Es wird weiter die Methode der Messung resonanter Elektroneneinfangprozesse vorgestellt sowie die Instrumentation dazu. Eine Beschreibung der Datenaufnahmesysteme, der Steuerungselektronik, der Methoden zur Datenauswertung, der Kalibration der Elektronenstrahlenergie und die Fehlerabschätzung folgen darauf.

## 3.1 Die EBIT

### 3.1.1 Prinzip der EBIT

**Ionisation neutraler Atome.** In einer EBIT (*Electron Beam Ion Trap - Elektronenstrahl-Ionenfalle*) werden hochgeladene Ionen dadurch erzeugt, dass aus neutralen Atomen ein stark fokussierter, hochenergetischer Elektronenstrahl durch Stoßionisation Elektronen auslöst. Dabei muss die Energie des Elektronenstrahls ausreichen, um die gewünschten Elektronen aus dem Atom zu ionisieren. Je höher der gewünschte Ladungszustand der Ionen sein soll, desto mehr Energie ist nötig. Dadurch lässt sich im Prinzip der Ladungszustand steuern. In der Realität liegt durch Rekombination, Ladungsaustauschreaktionen und Ionisierungswahrscheinlichkeiten in Abhängigkeit der Energie der stoßenden Elektronen immer ein Gemisch aus Ladungszuständen vor, welches sich modellieren lässt [60].

Auch wenn kein reiner Ladungszustand dadurch erreichbar ist, lässt sich der maximale Ladungszustand, der im Gemisch vorliegt, damit direkt steuern, indem die Elektronenstrahlenergie unter dem Wert gehalten wird, welche zur Ionisation des nächsten Elektrons notwendig ist. Dies ist zum Beispiel wichtig für Messungen von Photoionisation, in der ein hochenergetischer Photonenstrahl das nächste Elektron ionisieren soll und zuvor sichergestellt sein muss, dass dieser Ladungszustand nicht schon in der EBIT erreicht wurde [32]. Ionen, deren äußere Schalen abgeschlossen sind, eignen sich besonders zur Präparation nahezu reiner Ionenensembles.

**Speicherung hochgeladener Ionen.** Nachdem die Atome zu hohen Ladungszuständen ionisiert wurden, müssen sie für die Experimente in einem kleinen Raumbereich gespeichert werden. In einer EBIT werden Ionen im Elektronenstrahl selbst gefangen. Hierzu wird der Elektronenstrahl in Achsenrichtung von einer Anordnung von drei Driftröhren umgeben (siehe Abbildung 3.1). Werden die beiden äußeren Driftröhren auf ein im Vergleich zur mittleren Driftröhre positives Potential gelegt, so sehen die positiv geladenen Ionen, die sich in der mittleren Driftröhre befinden, einen axialen Potentialkasten, in dem sie gefangen bleiben. So kann durch Steuerung der Spannung eine longitudinale Falle realisiert werden.

In radialer Richtung werden die Elektronen durch das Raumladungspotential des Elektronenstrahls gefangen. Hierzu wird der Elektronenstrahl durch das Magnetfeld der supraleitenden Helmholtz-Spulen stark komprimiert, was eine sehr hohe Elektrodichte im Bereich der Fallenregion bewirkt. Durch diese Dichte wird zum einen effektiver ionisiert, vor allem aber wird ein stark negatives Raumladungspotential erzeugt, welches die positiven Ionen anzieht. In Abbildung 3.1 ist das Prinzip der EBIT schematisch dargestellt.



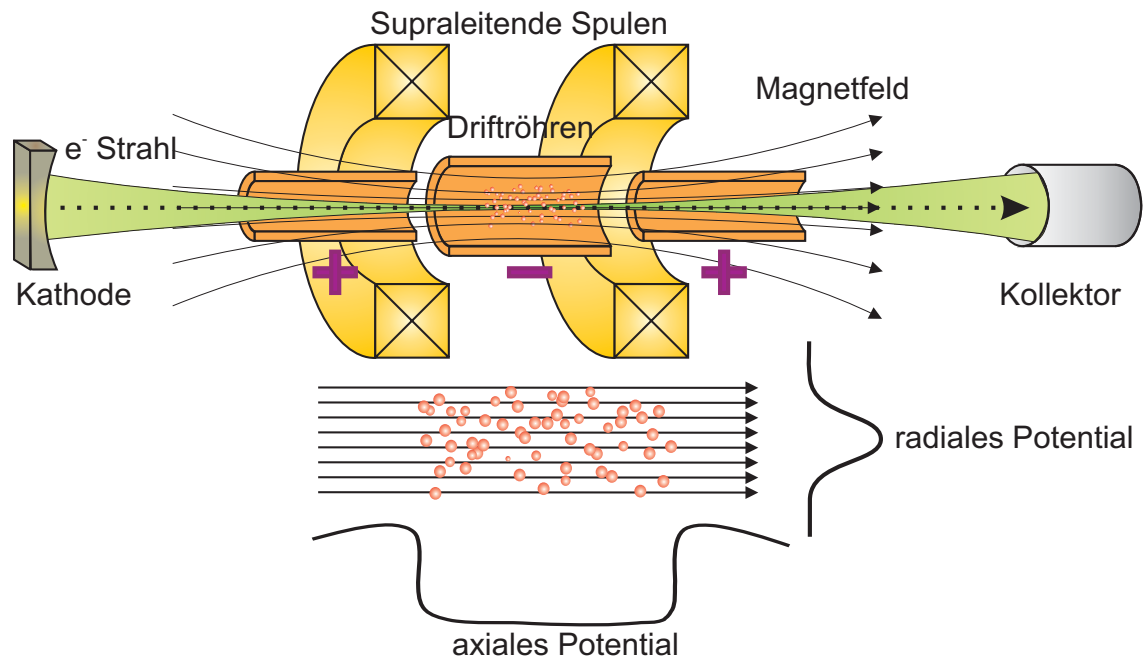


Abbildung 3.1: Prinzip einer EBIT: ein durch ein starkes Magnetfeld, welches mit Hilfe supraleitender Helmholtz-Spulen erzeugt wird, komprimierter Elektronenstrahl ionisiert durch Stöße sequentiell die neutralen Atome, die dann als positive Ionen in einem longitudinalen Potentialkasten bewirkt durch Driftröhren und dem radialen Raumladungspotential des Elektronenstrahls gefangen sind.

## 3.2 Aufbau der Heidelberg-EBIT

Für die vorgestellten Experimente wurde die Heidelberg-EBIT [61] eingesetzt, deren Bauweise und Hauptkomponenten in Bezug auf die für diese Experimente wichtigen Parameter begrenzen. Für detailliertere Beschreibung wird auf die Dissertation von Antonio González Martínez [62] verwiesen.

### Bauweise

Da das zentrale Element einer EBIT der Elektronenstrahl ist, sind die drei wesentlichen Komponenten die **Elektronenkanone**, in der der Elektronenstrahl erzeugt wird, die **Driftröhren**, die zum einen als Endpunkt der Beschleunigungsspannung des Elektronenstrahls dienen, zum anderen das axiale Fallenpotential zum Einschluss der Ionen bewirken und der **Kollektor**, in dem der Elektronenstrahl wieder endet.

Eine Besonderheit der Heidelberg-EBIT besteht darin, dass diese drei Komponenten horizontal angeordnet sind im Gegensatz zur ersten und auch zu den meisten EBITs.

Diese horizontale Bauweise bietet einige Vorteile im operativen Umgang mit der EBIT. Ein Beispiel hierfür ist ein sparsamer Verbrauch an flüssigem Helium als

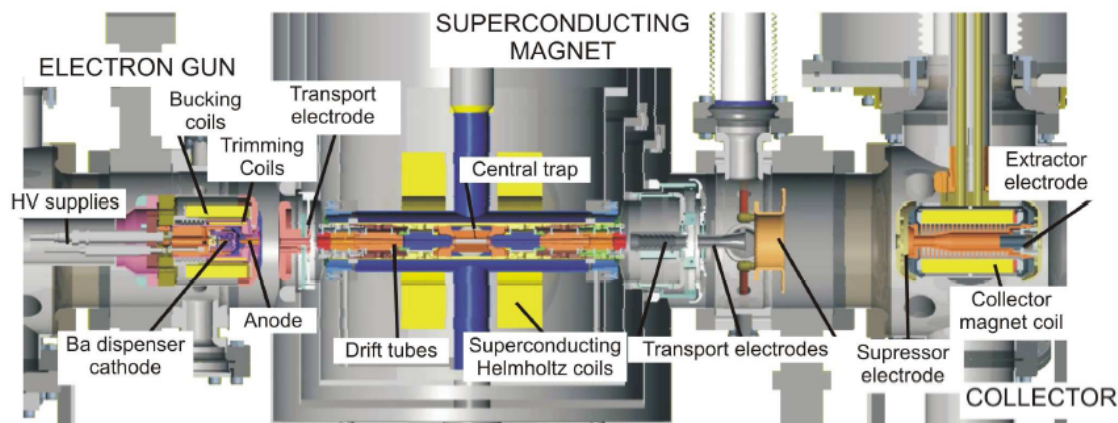


Abbildung 3.2: Aufbau der Heidelberg-EBIT.

Kühlmittel für den supraleitenden Magneten, der zur Fokussierung des Elektronenstrahls notwendig ist. Dieser ist in einen Kryostaten eingebaut, welcher sich bei der Heidelberg-EBIT auf die Umgebung des Magneten und die Driftröhren konzentriert und nicht wie bei anderen Anlagen weitere Komponenten mit einschließt, welche den Verlust des Kühlmittels durch Verdampfen beschleunigen. Durch die horizontal verlaufende Strahlachse ergibt sich gerade auch für die Weiterentwicklungen der Heidelberg-EBIT, welche an externen Strahlquellen aufgebaut werden können, da hier die Strahlachsen der EBIT und der Strahlquelle in Überlapp gebracht und damit wesentlich einfacher Experimente durchgeführt werden können. Dies bietet einige Vorteile bei der für einige Experimente notwendigen Extraktion hochgeladener Ionen. Zudem ist es geplant, in naher Zukunft die aktuelle Heidelberg-EBIT als Ionenquelle für den im Aufbau befindlichen *Cryogenic Storage Ring CSR* [63] am Max-Planck-Institut für Kernphysik einzusetzen, wofür sich die die Extraktion erleichternde Bauweise anbietet.

Ein Nachteil der horizontalen Bauart der Heidelberg-EBIT ist die eingeschränkte Möglichkeit, Sichtzugänge zur Fallenregion zu bekommen. Hier können nicht wie bei einer vertikalen EBIT rund um die zentrale Driftröhre Fenster und ähnliches angebracht werden, denn da die Ober- und Unterseite der Anlage für das Kryo- und Injektionssystem benötigt werden, sind nur von den beiden verbleibenden Seiten Zugänge zur Fallenregion möglich.

### Die Elektronenkanone

Die Elektronenkanone der Heidelberg-EBIT enthält als zentrales Element eine Kathode in Pierce-Geometrie, was einer sphärisch-konkaven Form entspricht und aus einer porösen Wolframmatrix besteht, die mit Barium-Atomen dotiert ist. Das Barium diffundiert an die Oberfläche der Kathode. Chemische Reaktionen mit anderen

Komponenten der Matrix verwandeln das Barium in BaO, wodurch die effektive Austrittsarbeit auf  $V_a = 1,2 \text{ eV}$  verringert wird. Um die Elektronen zu emittieren, wird die Kathode mittels eines Wolframfilaments auf etwa  $T_c = 1400 \text{ K}$  geheizt. Der Durchmesser der Kathode beträgt 3 mm.

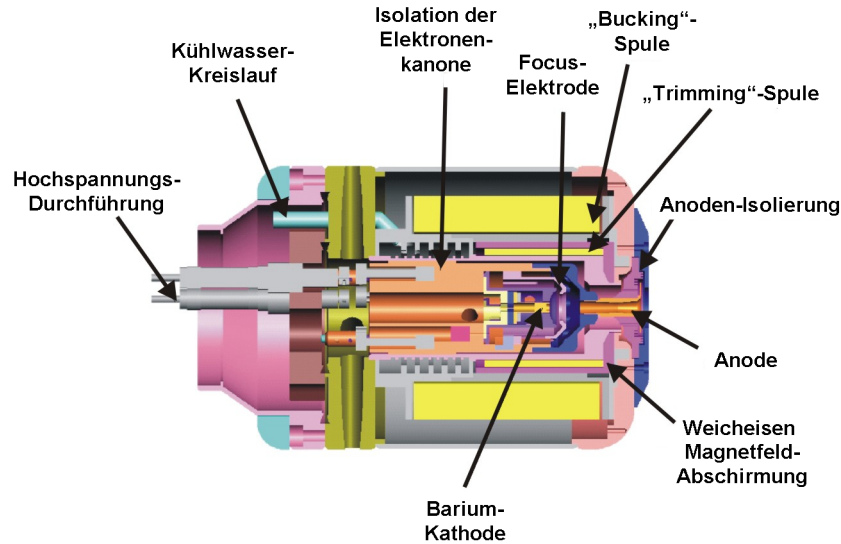


Abbildung 3.3: Schematischer Aufbau der Elektronenkanone.

Die Intensität des Elektronenstrahls wird mit dem Fokus und der Anode gesteuert. Ein Weicheisen-Schild um die Elektronenkanone dient zur Abschirmung des Rest-Magnetfeldes der supraleitenden Helmholtz-Spulen. Um das Restfeld vollends zu kompensieren, wird eine Anordnung von Spulen an der Elektronenkanone eingesetzt, so dass das Magnetfeld an der Oberfläche der Kathode als  $B_c = 0$  angenommen werden kann.

Zur Berechnung des Durchmessers des Elektronenstrahls nach Gleichung (3.4), welcher zur Abschätzung der Raumladung notwendig ist, sind die genannten Parameter wichtig, die in Tabelle 3.1 zusammengestellt sind.

Durch den Betrieb der Kathode gelangt ein ständiger schwacher Fluss an Barium- und Wolframatomten in die Fallenregion. Die daraus entstehenden Ionen können vermöge ihrer hohen Ionisationszustände Ionen leichterer Elemente nach einigen Sekunden verdrängen. Daher muss bei Messungen vor allem leichter Targetgase die Falle regelmäßig durch sog. „dumps“ geleert werden, indem an die zentrale Driftröhre kurzzeitig eine vergleichsweise hohe positive Spannung angelegt wird, die alle Ionen aus der Falle löst. Die Falle füllt sich wieder schnell mit dem durch den Gasinjektor einfließenden Targetgas. Physikalische Auswirkungen dieser „dumps“ sind in Abschnitt 4.2.2 eingehend besprochen.

Die Elektronenkanone ist auf einer Hochspannungsplattform aufgebaut und kann auf Hochspannungen bis etwa 100 kV gelegt werden, wodurch sich der Elektronen-

Tabelle 3.1: Parameter der Elektronenkanone, welche zur Berechnung des Elektronenstrahlradius und der Raumladung relevant sind.

Parameter	Wert
Radius der Kathode $r_c$	1,5 mm
Temperatur der Kathode $T_c$	$\approx 1400$ K
Magnetfeld an der Oberfläche der Kathode (ideal) $B_c$	0 T
Austrittsarbeit der Elektronen aus der Kathode $V_a$	$\approx 1,2$ eV

strahl stark beschleunigen lässt. Die Potentiale der EBIT sind in Abschnitt 3.4.1 im Detail besprochen.

### Die Driftröhren

Der Elektronenstrahl verläuft nach Austritt aus der Elektronenkanone in einer Anordnung von neun Driftröhren. So sind sowohl lange als auch kurze Fallen einstellbar, zudem erleichtert diese Flexibilität in der Falleneinstellung auch die Extraktion hochgeladener Ionen.

Das Fallenzentrum bildet die mittlere Driftröhre, die als „Driftröhre 9“ bezeichnet wird. Sie hat einen Innendurchmesser von  $r_{DT9} = 5$  mm, während die sie umgebenden Driftröhren mit den Bezeichnungen 4 und 5 (siehe Abbildung 3.4) einen Durchmesser von  $r_4 = r_5 = 1,5$  mm haben, wobei  $DT$  für die englische Bezeichnung *drift tube* steht. Alle Driftröhren sind einzeln steuerbar. Zudem sind die dafür verwendeten Netzgeräte auf eine Hochspannungs-Plattform aufgebaut, welche auf Spannungen bis 15 kV gelegt werden kann. Dieses *Plattform-Potential*  $V_{DT}$ , zu welchem die einzelnen Driftröhren-Potentiale addiert werden, dient zur Beschleunigung der Elektronen.

### Der Kollektor

Der Elektronenstrahl wird nach dem Durchgang durch die Driftröhren abgebremst und gestoppt. Zuerst wird der Strahl auf 1500 V abgebremst. Das Rest-Magnetfeld wird durch eine Spule kompensiert. Der dann divergierende Elektronenstrahl trifft auf die Innenwand des Kollektors. Eine röhrenförmige Elektrode am hinteren Ende des Kollektors, welche ein negatives Feld erzeugt, verhindert das Entweichen der Elektronen aus dem Kollektor. Hochgeladene Ionen können auch durch diese Elektrode in die Extraktions-Strahlführung geleitet werden.

### Injektion der Targetatome

Die Atome, mit denen Experimente in der EBIT durchgeführt werden sollen, werden über ein mehrstufiges Differentialpumpsystem in die Fallenregion gebracht. An der

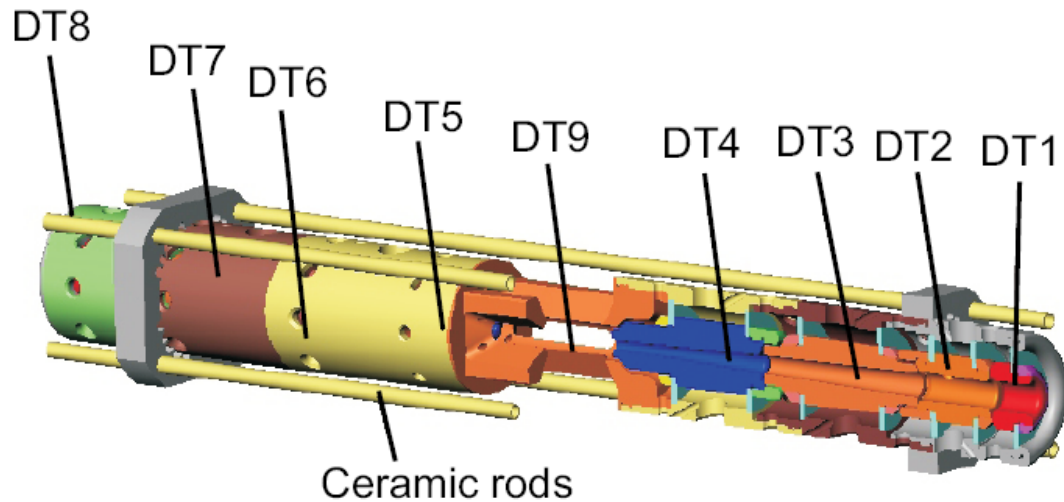


Abbildung 3.4: Anordnung der Driftröhren der Heidelberg-EBIT mit der zentralen Fallendriftröhre 9.

Unterseite der EBIT befindet sich ein Zugang zur Fallenregion, der mittels eines pneumatischen Ventils abgeschlossen werden kann. Hinter dem Ventil befindet sich eine zweifache differentielle Pumpstufe, an deren gegenübergelegener Seite ein pneumatisches Ventil und dahinter ein Nadelventil befestigt ist. Das Nadelventil ist mit einem Druckbehälter verbunden, in dem sich das Zielgas (wie etwa das hier untersuchte Krypton) befindet. Mit dem Nadelventil ist der gewünschte Injektionsdruck regulierbar, mit dem das Gas in die differentielle Pumpstufe strömt. Eine Anordnung von Aperturen zwischen den einzelnen Pumpstufen formt den Atomstrahl, der auf die mittlere Fallenregion zielt.

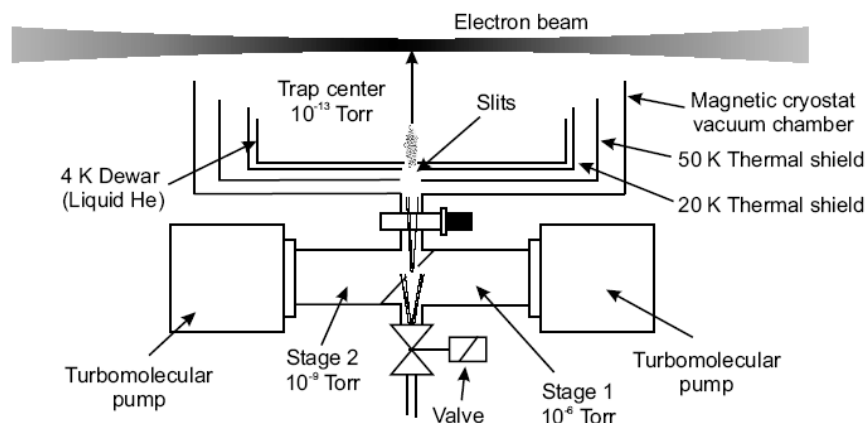


Abbildung 3.5: Das Injektionssystem der Heidelberg-EBIT.

An stelle des Nadelventils kann auch ein Verdampfungssofen angebracht werden, welcher im Rahmen der Diplomarbeit von Monika Binder [64] in Zusammenarbeit mit Lodewjik Arntzen konstruiert wurde. Mit diesem Ofen ist es möglich, niederschmelzende Metalle zu verdampfen und in die EBIT einzuleiten. So wurde etwa Bismuth in die EBIT injiziert, an welchem im Rahmen dieser Arbeit zum Nachweis der Funktionsfähigkeit des Ofens erstmals LMM und auch K-LL Resonanzen der dielektronischen Rekombination gemessen wurden.

Der Ofen wurde weiterentwickelt und mit einem eigenen Gasinjektionssystem versehen, so dass es in Zukunft möglich sein wird, simultan Gase und Metalle zu injizieren.

Viele Elemente liegen nicht in Gasform vor, und für einige von ihnen erreicht zudem ein Verdampfungssofen nicht die benötigte Effektivität. Für diese Elemente existiert an der Heidelberg-EBIT eine **Laser-Ionen-Quelle** [65, 66], welche hinter dem Kollektor in der Extraktions-Beamline angebracht ist. Ein fokussierter und gepulster YAG:Nd<sup>3+</sup>-Laser mit etwa 30 mJ Energie und einer Pulslänge von 8 ns, welcher eine Leistung von  $10^8 - 10^9$  W/cm<sup>2</sup> erreicht, generiert auf der Oberfläche eines Festkörpers ein lokales Plasma. Meist einfach geladene Ionen werden über eine kurze Hochspannung zwischen zwei Pulsen abgezogen und in die Fallenregion geleitet. So wurden erfolgreich viele Elemente wie Kupfer, Molybdän, Blei, Aluminium und Germanium in die EBIT injiziert.

### Extraktion hochgeladener Ionen

Zur Extraktion hochgeladener Ionen existiert hinter dem Kollektor ein Extraktions-Strahlrohr, welches die Ionen durch ein Linsensystem (darunter auch eine von G. Sikler entwickelte kompakte Anordnung von Einzel-Linsen) zu einem 90° Ablenkmagneten leitet, und von dort durch einen Schaltmagnet an verschiedene Experimente führt.

An einem Ausgang einer dieser Strahlröhren ist ein Reaktionsmikroskop zur Untersuchung von Ion-Atom-Wechselwirkungen angebracht, welche auf dem COLTRIMS-Prinzip (Cold Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy) [67] beruht. Ein Experiment zur Untersuchung der Mechanismen der Oberflächenwechselwirkungen hochgeladener Ionen (z.B. [68]) nutzt einen weiteren Ausgang des Ionen-Extraktionssystems der Heidelberg-EBIT. In diesem Zusammenhang sei erwähnt, dass der in dieser Arbeit untersuchte Prozess der dielektronischen Rekombination bei der Optimierung der Ladungsverteilung der aus der EBIT extrahierten Ionen [69] hilfreich sein kann.

## 3.3 Methode der Resonanzmessung

Um resonante Rekombinationsprozesse beobachten zu können, müssen Elektronen definierter Energie zur Wechselwirkung mit hochgeladenen Ionen gebracht werden. Hierzu wird die Energie des Elektronenstrahls über den zu untersuchenden Bereich

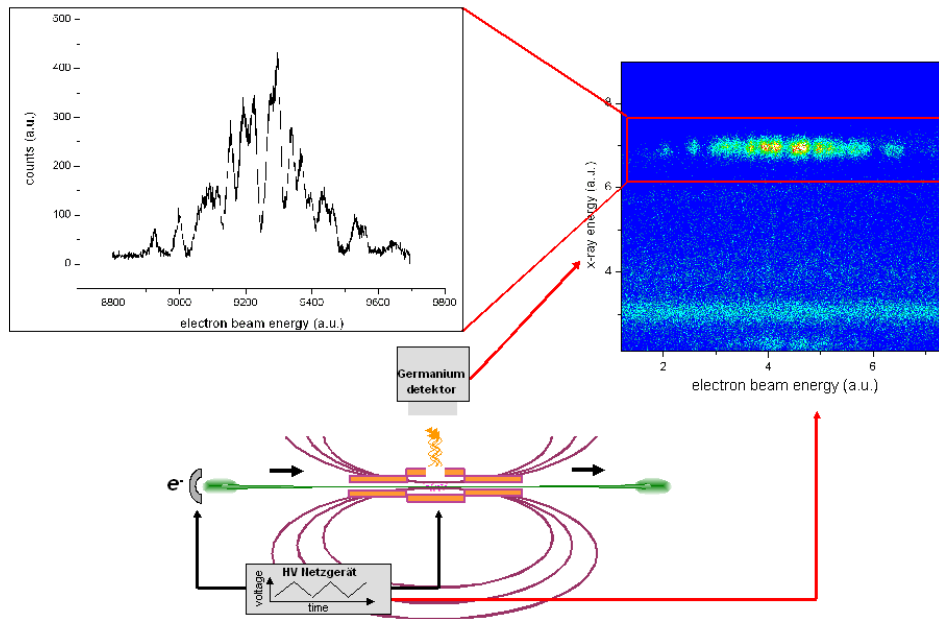


Abbildung 3.6: Schematische Darstellung des Messprinzips: Die Elektronenstrahlenergie wird variiert und dabei Photonen detektiert und energetisch eingeordnet. In einer 2D-Matrix wird die Anzahl der Ereignisse nach Elektronen- und Photonenenergie aufgetragen und der Bereich der interessanten Photonenenergie auf die Elektronenstrahlenergie projiziert, was die Spektren ergibt.

gescant. Dies geschieht durch Veränderung der den Strahl beschleunigenden Potentiale. Da die Elektronenenergie bei der hier untersuchten K-LL DR in Krypton zu jeder Zeit deutlich über der Ionisierungsenergie der L-Schale liegt, werden dabei ständig neue Ionen bis zum heliumartigen Ladungszustand erzeugt.

Bei der angestrebten linearen Energievariation des Elektronenstrahls rekombinieren die Elektronen ständig radiativ in die hochgeladenen Ionen. Haben die Elektronen gerade die richtige Energie, findet zusätzlich zu der radiativen Rekombination auch dielektronischer Einfang statt. Da dieser Vorgang strahlungsfrei abläuft, ist er im Prinzip nicht direkt zu beobachten. Er erzeugt jedoch einen angeregten Zwischenzustand mit einem Loch in der K-Schale, der in kürzester Zeit in den meisten Fällen durch Aussendung eines Photons wieder abregt. Diese Abregung des Zwischenzustands schließt den Prozess der DR ab. Somit kann man durch Detektion der Photonen in auf den resonanten Elektroneneinfang schließen.

Die notwendigen Messgrößen sind also zum einen die Elektronenstrahlenergie, zum anderen die Photonenenergie. In einer zweidimensionalen Matrix, bei der eine Achse die Elektronenstrahlenergie, die andere die Photonenenergie und die Matrixelemente die Anzahl der Ereignisse wiedergeben, erscheinen an den Stellen, bei denen Resonanzen auftreten, im relevanten Photonenenergiebereich Anhäufungen,

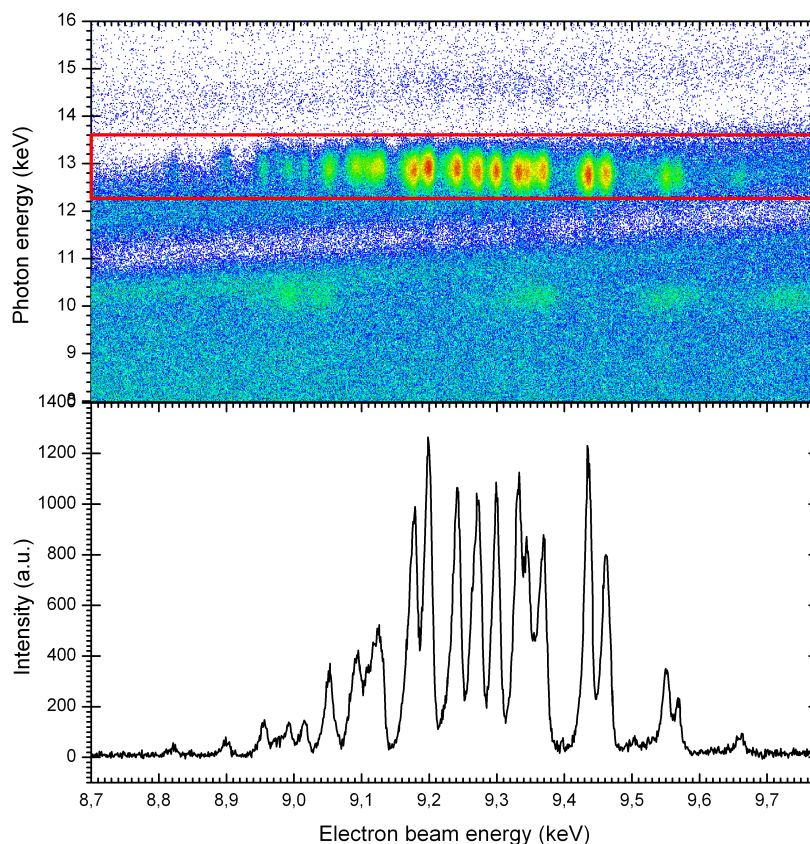


Abbildung 3.7: (a) Zweidimensionaler Intensitätsgraph, in dem die Photo-nenhäufigkeit bestimmter Elektronenstrahl- und Photonenenergien abzulesen sind. (b) Projektion des Bereiches der Ereignishäufungen auf die Elektronenstrahlenergie ergibt ein Resonanzlinienspektrum, aus dem sich die Resonanzenergien bestimmen lassen.

wie in Abbildung 3.7 (oben) zu erkennen ist.

Bei geeigneter Wahl des interessanten Photonenergiebereiches können die Ereignisse auf die Elektronenenergie-Achse projiziert werden. Die Resonanzen erscheinen dort als Peaks (siehe Abbildung 3.7 unten). Durch Anpassen geeigneter Kurven an die Messdaten lassen sich so die Resonanzenergien sehr genau bestimmen.

### 3.4 Bestimmung der Elektronenstrahlenergie

Der genauen Bestimmung der Elektronenstrahlenergie kommt bei DR-Messungen eine zentrale Bedeutung zu. Der Elektronenstrahl wird nach der Produktion in der Elektronenkanone durch verschiedene Potentiale der EBIT bis zur mittleren Driftröhre, die die Falle bildet, beschleunigt. Die Raumladung des Elektronenstrahls



beeinflusst zudem die Energie des Strahls, worauf im folgenden Abschnitt näher eingegangen wird.

### 3.4.1 Beschleunigende Potentiale in der EBIT

#### Potentiale der Elektronenkanone

Das Gesamtpotential der Elektronenkanone, welches den Anfangspunkt der beschleunigenden Potentialdifferenz bildet, setzt sich zusammen aus der zur Produktion der Elektronen notwendigen Kathodenspannung  $V_C$ , zu der die Austrittsarbeit der Elektronen aus dem Kanonen-Filament addiert werden muss, und der Spannung der Elektronenkanonenplattform.  $V_C$  ist auf  $-1501,2\text{ V}$  eingestellt.

Wenn vergleichsweise hohe Beschleunigungsspannungen notwendig sind, besteht die Möglichkeit, die gesamte Plattform, auf die die Elektronenkanone montiert ist, auf ein negatives Potential  $V_{E-Gun}$  zu legen. Damit beziehen sich alle Spannungen innerhalb der Elektronenkanone auf dieses Potential.

#### Driftröhren-Plattform

Die Spannung an der Driftröhren-Plattform  $V_{DT-Pl.}$  wird bei diesen Messungen generiert durch ein Heinzinger 30 kV HV Netzgerät, da dieses die besten Stabilitätsvoraussetzungen für die durchgeführten Messungen mit sich bringt. Dieses Gerät ist durch eine externe Spannung steuerbar. Hierzu muss die Spannung an Driftröhre 9 addiert werden, in deren Bereich die Reaktion der Elektronen mit den Ionen stattfindet. Die 5 kV-Netzgeräte der einzelnen Driftröhren sind ebenfalls durch externe Steuerspannungen kontrollierbar.

#### Gesamtpotentiale in der EBIT

Abbildung 3.8 zeigt einen Überblick über die oben besprochenen Potentiale. Somit lässt sich die Beschleunigungsspannung ohne die Einflüsse des Strahls selbst beschreiben als

$$\begin{aligned} V_{EBeam} &= |V_{EGun}| + |V_{DT}| + V_A \\ &= |V_{Cath} + V_{EGun-Pl.}| + |V_{DT-Pl.} + V_{DT9}| + V_A. \end{aligned} \quad (3.1)$$

### 3.4.2 Messung der Potentiale in der EBIT

Um die Energie des Elektronenstrahls zu bestimmen, müssen die oben besprochenen Potentiale möglichst genau gemessen werden. In den folgenden Abschnitten werden die Messmethoden und -instrumente beschrieben sowie Überlegungen und Maßnahmen zu Fehlerabschätzungen und -minimierungen dargestellt.

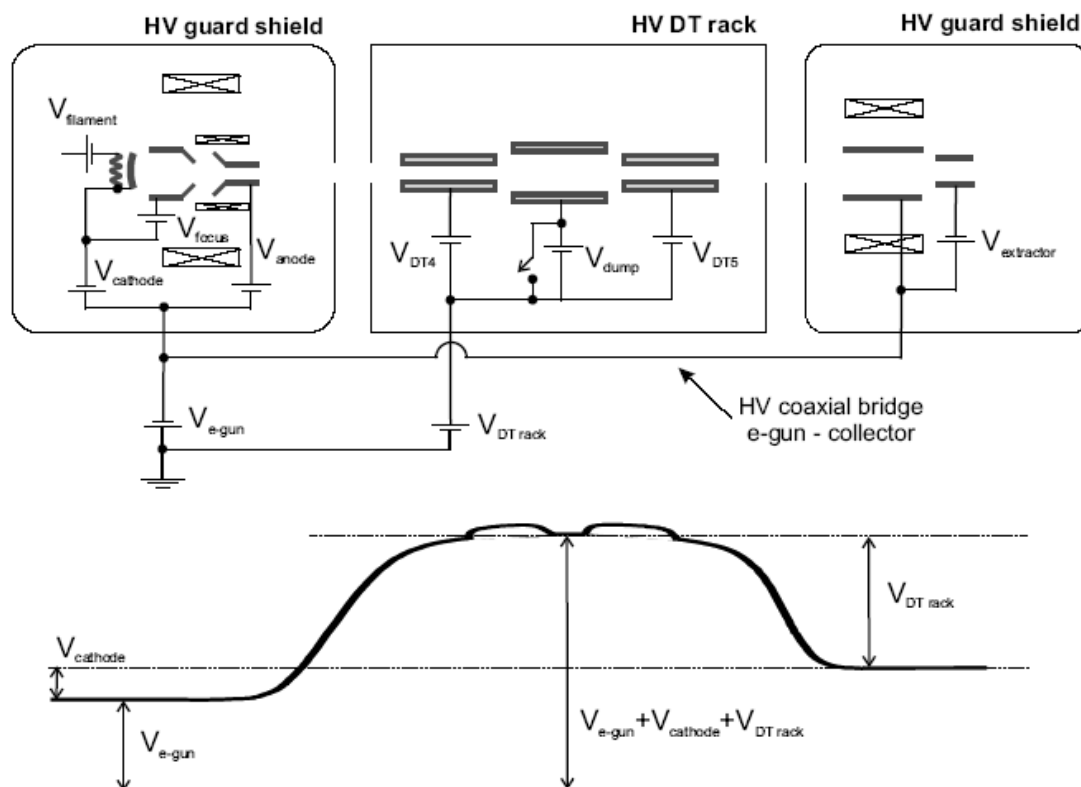


Abbildung 3.8: Übersicht über die Potentiale in der Heidelberg-EBIT. Bild aus [62]

### Messung von Hochspannungen

Die Elektronenstrahlenergie beträgt in den hier durchgeführten Experimenten etwa 10 kV. Spannungsmessgeräte haben meist eine maximale Eingangsspannung von einem kV, so dass höhere Spannungen mit Spannungsteilern in den messbaren Bereich transformiert werden müssen.

So wurden die Hochspannungen an der Elektronenkanone sowie an den Driftröhren in messbare Spannungen verwandelt und diese jeweils mit hochempfindlichen Keithley 2002 Multimetern genau vermessen.

### Messung der Potentiale an der Elektronenkanone

Um die an der Elektronenkanonen-Plattform liegenden Spannungen genau messen zu können, wurde im Rahmen der Dissertation von Antonio Javier González Martínez [62] ein Spannungsteiler angefertigt, der auch im oberen Hochspannungsbereich sehr stabil und genau die benötigten Hochspannungen messen kann. Weitere Details können hierzu aus [62]. Der Aufbau gestattet es, eine relative Messunsicherheit von nur 5 ppm zu erreichen.

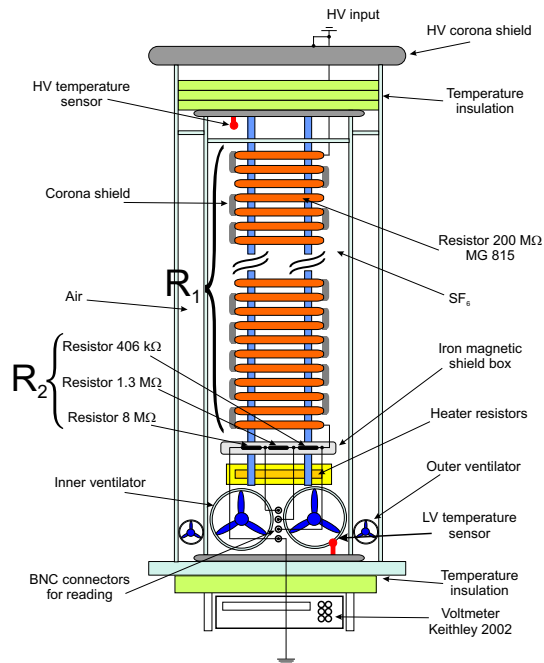


Abbildung 3.9: Schematische Zeichnung des Aufbaus des Spannungsteilers für die Elektronenkanonen-Plattform [62]

Während den Experimenten wird mit dem HV-E-Gun-Spannungsteiler kontinuierlich gemessen, um bei der Auswertung diese Spannung zu den ebenfalls kontinuierlich gemessenen Spannungen an den Driftröhren addieren zu können. Bei den meisten im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Experimenten war die Elektronenkanonen-Plattform geerdet, so dass keine Offset-Spannung an der Elektronenkanone anlag.

**Kathodenspannung.** Die Kathodenspannung wurde hier auf einen konstanten Wert gesetzt. In einer separaten Messung mit Hilfe des Spannungsteilers für die Elektronenkanonen-Plattform wurde die Ausgangsspannung des Kathoden-Netzgerätes unabhängig von den Experimenten gemessen. Nach einer kurzen Einlaufzeit des Netzgerätes lieferte dieses als konstante Ausgangsspannung nach Einbeziehung der gemessenen Null-Linie einen Wert von 1492,28(17) V (siehe Abbildung 3.10). Ein linearer Fit mit einer Steigung von 0,00216 V/min zeigt das gute konstante Verhalten der gemessenen Spannung.

### Messung der Potentiale an den Driftröhren

Die Spannung an den Driftröhren bildet in den meisten Experimenten, die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt wurden, die variable Größe. Daher ist deren Messung und Linearität von großer Bedeutung. Die Stabilität der Spannungen an den Driftröhren spielt für die Energieauflösung der Messungen und für die Fehler-

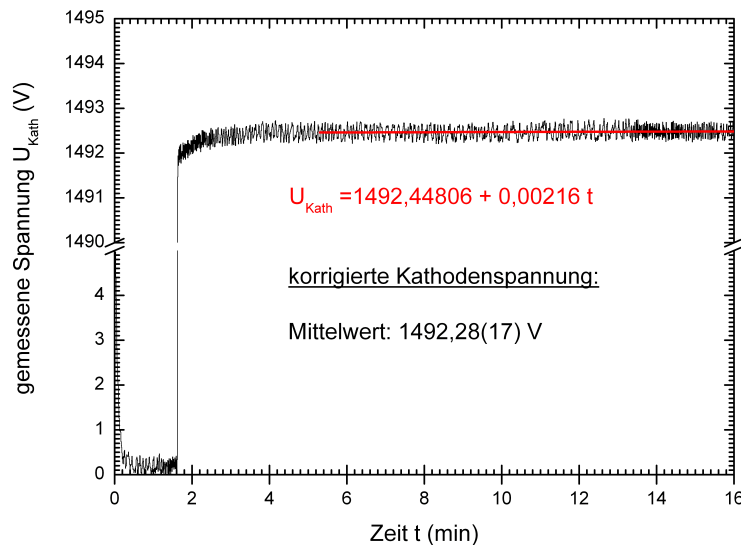


Abbildung 3.10: Ausgangsspannung des Kathoden-Netzgerätes. Es ist eine Nulllinie, das Einlaufverhalten und die konstante ausgegebene Spannung zu sehen.

abschätzung eine entscheidende Rolle, weshalb diese eingehend untersucht. Maßnahmen zur Erhöhung der Stabilität werden diskutiert.

Zur Messung dieser Spannung ist ebenfalls ein HV-Spannungsteiler notwendig. Der Spannungsteiler für die Driftröhren [62] ist in einem Plexiglas-Gehäuse aufgebaut. Es ist mit einem Schild aus weichmagnetischem Material umgeben, um äußere Magnetfelder bestmöglich abzuschirmen. Somit ist der Teiler recht gut gegen äußere Einflüsse, mechanische Einwirkungen und Temperaturschwankungen isoliert. Ein Teilverhältnis von 3986,336(27) wurde ermittelt, welches im weiteren für Spannungsmessungen des erwähnten Messbereiches verwendet wurde.

Je nach Experiment kann der Spannungsteiler an verschiedenen Punkten innerhalb des Driftröhrenaufbaus die Spannung abgreifen. Meist ist dies entweder an der Driftröhrenplattform (dabei wird  $V_{DT}$  gemessen) oder nahezu direkt an den Driftröhren (DT9).

### Linearität der Spannung an den Driftröhren

Der Scan der Elektronenstrahlenergie wird durch eine lineare Spannungsrampe gesteuert. Kapazitative Einflüsse und reale natürliche Widerstände des gesamten Driftröhren-Aufbaus können dazu führen, dass die gewünschte eingestellte Spannung nicht genau der tatsächlichen Spannung entspricht. Eingehende Untersuchungen dieser Dynamik finden sich in [70], welche ergaben, dass bei einer Spannungsrampe von 10 V/s und weniger die Verzögerung zwischen Steuerspannung und an den

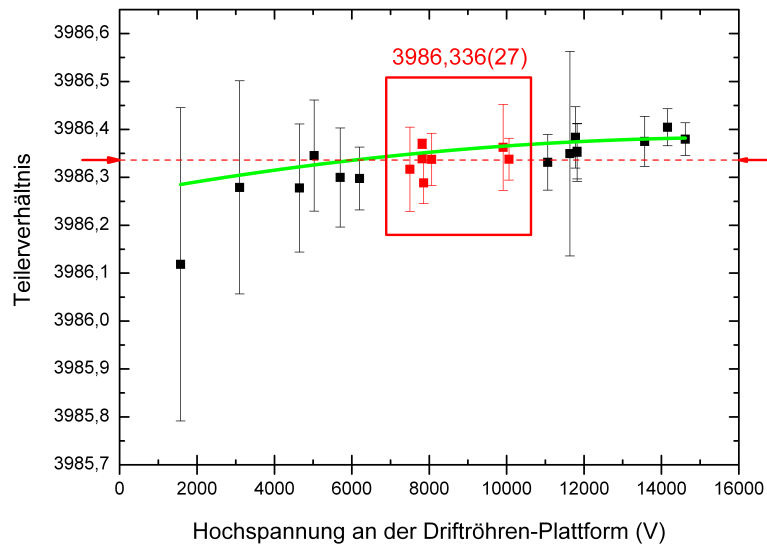


Abbildung 3.11: Kalibrierung des DC-Spannungsteilers für die Driftröhren. Die markierten Punkte sind die Werte im für die Experimente interessanten Bereich, die gestrichelte Linie zeigt das aus diesen Punkten gemittelte Teilerverhältnis.

Driftröhren messbarer Spannung minimal ist (siehe auch Abbildung 4.10). Eine Überprüfung der Linearität der Spannung wichtig, da für die Auswertung der Elektronenstrahlenergie eine linear anwachsende Spannung angenommen wird.

Um diese Messungen der Linearität unter möglichst experimentnahen Bedingungen durchzuführen, wurde bei einem konstanten Elektronenstrahlstrom von 200 mA und geöffnetem Gasinjektor gemessen. Somit wurden auch Einflüsse des Elektronenstrahls etwa durch Spannungsüberschläge, Entladungen etc. in der Linearitätsmessung berücksichtigt.

In Abständen von 200 V wurde eine Spannung im Bereich von 7 kV bis 9 kV an die Driftröhren-Plattform programmiert und an der Driftröhren-Plattform gemessen. Eine ausreichende Statistik wurde gewährleistet, indem jeder Punkt mindestens eine Minute gemessen wurde, was mindestens 120 Messwerten je eingestellter Spannung entspricht. Abbildung 3.12 zeigt die an der Driftröhren-Plattform gemessene Spannung in Abhängigkeit der eingestellten Spannung. Es ist eine sehr gute Linearität mit der Funktion  $U_{DT} = -0,21605 + 1,00078 \cdot U_{set}$  für den untersuchten Bereich zu erkennen.

Von Bedeutung ist jedoch wie bereits dargelegt die Spannung direkt an den Driftröhren. Da zwischen der Driftröhren-Plattform und den Driftröhren selbst noch Netzgeräte und Widerstände geschaltet sind, ist es möglich, dass diese ebenfalls einen Effekt auf die Spannung haben. So wurde direkt an den wichtigen Driftröhren, al-

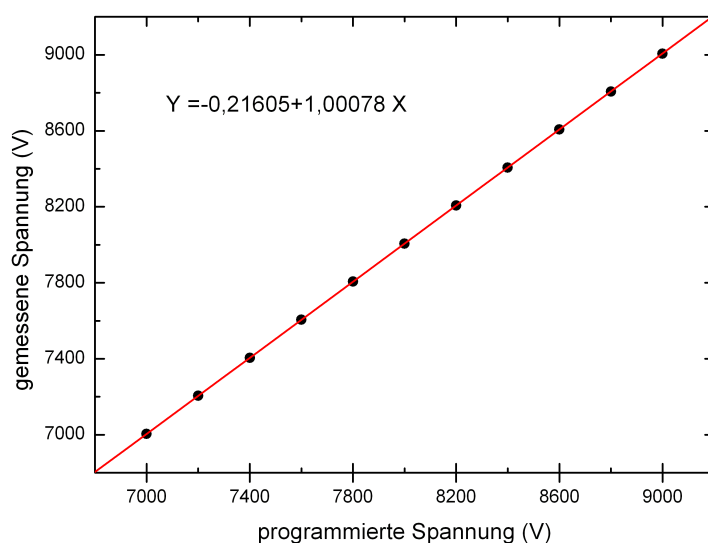


Abbildung 3.12: An der Driftröhren-Plattform tatsächlich gemessene Spannung als Funktion der programmierten Spannung. Die Gleichung ist das Ergebnis eines linearen Fits.

so der zentralen Driftröhre 9 und den direkt benachbarten Driftröhren 4 und 5, die die Falle in den durchgeführten Experimenten bestimmen, ebenfalls die Linearität zwischen eingestellter und tatsächlicher Spannung analog zur Messung an der Driftröhren-Plattform durchgeführt. Hierbei wurden die einzelnen Netzgeräte zwar eingeschaltet, jedoch keine Steuerspannung an sie angelegt, so dass sie keine zusätzliche Spannung auf die Driftröhren geben.

Die Ergebnisse dieser Messungen sind in der Abbildung 3.13 zusammengestellt. Man erkennt in dem untersuchten Bereich ebenfalls eine gute Linearität, jedoch weichen die absoluten Werte der einzelnen Driftröhren voneinander ab.

Wie die vorherigen Messungen zeigen, ist die Linearität in ausreichendem Maße für den untersuchten und für die Messungen relevanten Bereich gegeben, zumal in den einzelnen Experimenten nicht über die vollen 2 kV, sondern meist über ca. 450 V oder bei Übersichtsmessungen über 1,2 kV gescant wurde.

### Stabilität der Elektronenstrahlenergie

Für genaue Messungen der Energie des Elektronenstrahls ist eine sehr konstante und reproduzierbare Elektronenstrahlenergie notwendig. So wurden mögliche Spannungsveränderungen über längere Zeiten untersucht und nach Möglichkeiten gesucht, diese weitestgehend zu unterdrücken.

Um die Stabilität zu testen, wurde über eine konstante Steuerspannung mit dem

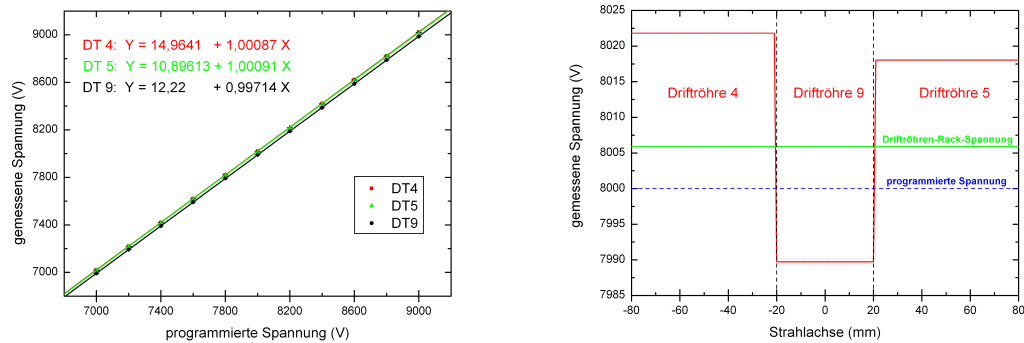


Abbildung 3.13: Messung der ankommenden Spannung an den relevanten Driftröhren. Links: Linearität der Spannung an den Driftröhren 4, 5 und 9. Rechts: Unterschiedliche Spannungen an den drei zentralen Driftröhren ohne zusätzliche Spannung durch die Driftröhren-Netzgeräte.

Netzgerät, welches das Driftröhren-Potential bestimmt, die Driftröhren-Plattform auf eingestellte 7 kV Spannung gesetzt und die Spannung an Driftröhre 9 über einen Zeitraum von 90 Minuten gemessen. Für diese Messung wurde keine zusätzliche Spannung mit dem individuellen Netzteil für diese Driftröhre generiert, so dass die Spannung alleine durch das Driftröhrenpotential bestimmt sein soll. Hierbei wurden zwei unterschiedliche Messungen durchgeführt. Bei der ersten Messung wurde der Steuerspannungseingang des individuellen Netzzeils nicht verbunden, so dass keine externe Steuerspannung anlag. Bei der zweiten Messung wurde dieser Eingang mit einem Funktionsgenerator verbunden, welcher so programmiert war, dass er eine Rechteckfunktion (0 V - 500 V) ausgab. Diese Pulse hatten eine Pulsbreite von jeweils 1 s und eine Periode von 174 s und sollten Dumps simulieren, welche bei den Experimenten aus in Abschnitt 3.2 erläuterten Gründen notwendig waren. Abbildung 3.14 (linkes Bild) zeigt die Messkurven der beiden Stabilitäts-Messungen. Bei beiden Messungen ist zu beobachten, wie neben kurzen Entladungen, welche Spannungsüberschläge bewirken, die Spannung über einen längeren Zeitraum kontinuierlich und nichtlinear abfällt. Die Ursache dieser Instabilität wird in dem Netzgerät für diese Driftröhre vermutet, welches in unbelastetem Zustand keine definierte Spannung generiert. Die in der zweiten Messung sichtbaren Spannungsspitzen zu höheren Spannungen sind die bereits erwähnten Dumps.

Nach diesen Erkenntnissen wurde eine weitere Stabilitätsmessung bei gleicher Spannung an der Driftröhren-Plattform durchgeführt, jedoch mit einer eingestellten zusätzlichen Spannung von ca. 140 V an DT9. Bei dieser Messung wurden ebenfalls Dumps simuliert, so dass in gleicher Weise wie bei der vorherigen Messung gemessen wurde, nur dass die Grundlinie der Pulsfunktion nicht auf 0 V, sondern auf 130 mV gesetzt wurde, was der Steuerspannung entspricht, mit der an Driftröhre 9 eine

Spannung von ca. 140 V angelegt wird. Wie in Abbildung 3.14 (rechte Seite) zu erkennen ist, bleibt dann die Spannung sehr stabil.

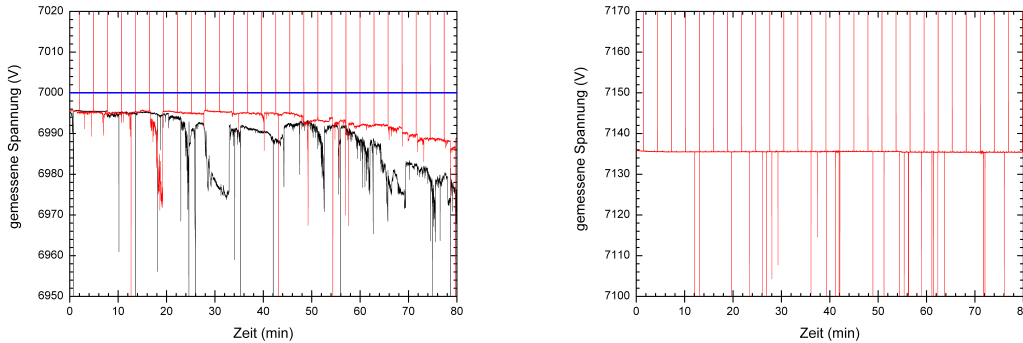


Abbildung 3.14: Messung der Stabilität der Spannung an der zentralen Driftröhre 9. Links: Messung ohne zusätzliche Spannung an dieser Driftröhre. Die schwarze Kurve zeigt die Spannung mit unbelastetem Netzgerät für Driftröhre 9, die rote Kurve zeigt die Spannung, bei welcher am Netzgerät für Driftröhre 9 Dumps simuliert sind. Rechts: Messung mit einer zusätzlichen Spannung von 140 V.

### 3.5 Einflüsse des Elektronenstrahls auf die gemessenen Resonanzenergien

Die starke Fokussierung des Elektronenstrahls durch das Magnetfeld bewirkt eine hohe Elektronendichte im Fallenzentrum, in dem sich die Ionen befinden. Diese hohe Dichte an negativen Ladungen erzeugt ein starkes negatives Raumladungspotential in diesem Raumbereich, welches den radialen Einschluss der Ionen bewirkt (siehe auch Abschnitt 3.1.1). Dieses Raumladungspotential addiert sich zu dem extern an die Anlage angelegten Potential, so dass auf den Elektronenstrahl dieses Gesamtpotential wirkt. Die Resonanzenergien werden jedoch dadurch bestimmt, indem die den Strahl beschleunigenden Potentiale gemessen werden. Somit ergibt sich als Ergebnis der Resonanzmessungen ein um die Raumladungsbeiträge verfälschtes Ergebnis.

In diesem Abschnitt wird die Raumladung des Elektronenstrahls modelliert und deren Beträge zur Resonanzenergie abgeschätzt.

#### 3.5.1 Raumladung des Elektronenstrahls

Bewirkt wird das Raumladungspotential von der Elektronendichte  $\rho$  im Fallenzentrum. Diese kann in Abhängigkeit des Strahlstroms  $I_e$  mit dem Strahlquerschnitt  $A$  und der Elektronengeschwindigkeit  $v_e$  geschrieben werden als



$$\rho = \frac{I_e}{v_e} \frac{1}{A} = \frac{I_e}{\pi r_e^2 v_e}, \quad (3.2)$$

wobei im Allgemeinen für die Geschwindigkeit der Elektronen ein relativistischer Ansatz notwendig ist:

$$v_e = c \sqrt{1 - \left( \frac{E_e}{m_e c^2} + 1 \right)^{-2}}. \quad (3.3)$$

Der Elektronenstrahlradius  $r_e$  kann in einer Näherung von Gabriel Herrmann [71] mit

$$r_H = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \sqrt{1 + 4 \left( \frac{8m_e k_B T_c r_c^2}{e^2 B^2 r_B^2} + \frac{B_c^2 r_c^4}{B^2 r_B^4} \right)}} \quad (3.4)$$

angenähert werden, wobei dieser sogenannte *Herrmann-Radius*  $r_H$  den Radius beschreibt, der 80% des gesamten Strahlstroms einfasst. Er berücksichtigt neben dem fokussierenden Magnetfeld  $B$  noch die speziellen Parameter der Kathode der Elektronenkanone wie den Kathodenradius  $r_c$  und dessen Temperatur  $T_c$ , sowie das Magnetfeld  $B_c$  auf der Kathodenoberfläche. Die für die Heidelberg-EBIT typischen Werte dieser Parameter sind  $r_c = 1,5$  mm,  $T_c = 1400$  K und  $B_c < 1$  mT.

Diese Näherung ist eine Erweiterung des einfachen Modells eines zylindrischen Elektronenstrahls von L. Brillouin [72], in welchem die thermische Energie der Elektronen vernachlässigt und ein laminarer Fluss der Elektronen angenommen wurde. Der sogenannte Brillouin-Radius  $r_B$  ergibt sich daraus als:

$$r_B = \sqrt{\frac{2m_e I_e}{\pi \epsilon_0 v_e e B^2}}. \quad (3.5)$$

Der Herrmann-Radius  $r_H$  hingegen berücksichtigt die thermischen Effekte. Die daraus sich ergebende Elektronendichte  $\rho$  (Gleichung 3.2) kann aus der Poisson'schen Differenzialgleichung

$$\nabla^2 V_{sp} = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (3.6)$$

abgeleitet werden. Somit kann das Raumladungspotential  $V_{sp}(r)$  innerhalb und außerhalb des Elektronenstrahls berechnet werden. Hierzu muss diese radiale Gleichung in Zylinderkoordinaten mit  $\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r}$  gelöst werden. Für das elektrische Feld  $E_{sp}(r)$ , welches durch das Raumladungspotential generiert wird, erhält man nach einigen Schritten:

$$E_{sp}(r \leq r_e) = -\frac{I_e}{2\pi \epsilon_0 v_e} \frac{r}{r_e^2}, \quad (3.7)$$

$$E_{sp}(r \geq r_e) = -\frac{I_e}{2\pi \epsilon_0 v_e} \frac{1}{r}. \quad (3.8)$$

Hierbei wurde die Stetigkeit der Ableitung  $\frac{\partial V_{sp}}{\partial r}$  am Rand des Elektronenstrahls bei  $r = r_e$  vorausgesetzt. Somit ergibt sich für das Raumladungspotential innerhalb und außerhalb des Strahls

$$V_{sp} = \frac{I_e}{4\pi\epsilon_0 v_e} \begin{cases} \left(\frac{r}{r_e}\right)^2 + 2 \cdot \ln\left(\frac{r_e}{r_{dt}}\right)^2 - 1 & \text{für } r \leq r_e, \\ 2 \cdot \ln\left(\frac{r_e}{r_{dt}}\right) & \text{für } r \geq r_e, \end{cases} \quad (3.9)$$

welches in Abbildung 3.15 in Abhängigkeit der Position  $r$  im Elektronenstrahl dargestellt ist.

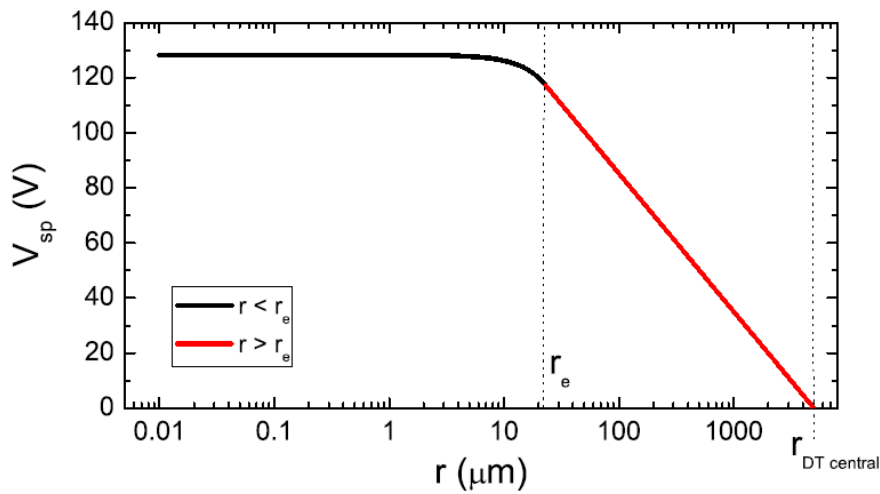


Abbildung 3.15: Radiale Raumladung in Abhängigkeit der Position  $r$  im Elektronenstrahl

**Raumladungskompensation durch Ionen.** Das negative Raumladungspotential des Elektronenstrahls wird durch die in der Falle angesammelten positiv geladenen Ionen wieder teilweise kompensiert. Daher muss zur genauen Berechnung der totalen Raumladung das in Gleichung (3.9) errechnete Potential in Berücksichtigung der Kompensation angepasst werden.

Grundsätzlich kann man nach [73] das Raumladungspotential mit einem Kompensations-Faktor  $f$  skalieren, welcher das Verhältnis der im betrachteten Raum-bereich vorhandenen positiven zu den negativen Ladungen angibt. Hierzu wird die Anzahl  $n_q$  der Ionen der Ladungszahl  $q$  multipliziert mit dieser mit der Anzahl der Elektronen  $n_e$  verglichen:

$$f = \frac{\sum_q n_q q}{n_e}. \quad (3.10)$$

In einem detaillierten Ansatz [74], der die thermische Energie der geladenen Teilchen berücksichtigt, kann die gesamte Raumladung unter Einbeziehung der Kompensation in Analogie zu Gleichung 3.6 berechnet werden nach

$$\nabla^2 V_{spges} = -\frac{\rho_e + \rho_i}{\epsilon_0}, \quad (3.11)$$

wobei  $\rho_e$  die Ladungsdichte des Elektronenstrahls und  $\rho_i$  die der kompensierenden Ionen ausdrückt, die dargestellt werden können als

$$\rho_e = \frac{I_e}{\pi r_e^2 \sqrt{\frac{2e}{m_e} V}}, \quad (3.12)$$

$$\rho_i = -f_i \rho_e \cdot \exp\left(-\frac{e(V - V_0)}{kT_i}\right). \quad (3.13)$$

$f_i$  bezeichnet einen freien Parameter für die zentrale Kompensation und  $T_i$  die Temperatur der Ionen.

### 3.5.2 Diskussion der Einflüsse der Raumladung auf die gemessenen Resonanzenergien

Auf Grund des oben erläuterten Raumladungspotentials hat der Elektronenstrahl, der auf die Ionen trifft, eine andere Energie als die Summe der externen angelegten Potentiale. Es ergibt sich somit eine Zusammensetzung der Resonanzenergie in Erweiterung von Gleichung 3.1:

$$\begin{aligned} E_{res} &= V_{EBeam} - V_{sc} \\ &= |V_{EGun}| + |V_{DT}| - V_A + V_{sc}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Da jedoch nur das externe Potential direkt gemessen werden kann, müssen die die Strahlenergie beeinflussenden Effekte näher diskutiert werden.

**Absolute Bestimmung der Resonanzenergie.** Die Raumladung verhält sich für konstante Strahlenergie nach Gleichung (3.9) linear zum Strom des Elektronenstrahls. Bei größerem Strahlstrom wächst die Raumladung, welche die Energie des Stroms vermindert, und so sind höhere externe Potentiale notwendig, um den Elektronenstrahl auf die entsprechenden Resonanzenergien einzustellen. Die Messgröße der Energie, die externen Potentiale, liefert also um die Einflüsse der Raumladung höhere Werte und somit werden scheinbar höhere Resonanzenergien gemessen als bei niedrigen Strömen. Damit die Raumladung von den gemessenen Energien so subtrahiert werden kann, um damit die Resonanzenergie absolut anzugeben, ist eine genaue Kenntnis sowohl der Raumladung des Strahls als auch deren Kompensation durch die Ionen notwendig. Durch Gleichung (3.9) kann die Raumladung des

Strahls selbst in guter Näherung angegeben werden, da die Parameter des Strahls hinreichend gut bekannt sind. Schwieriger gestaltet es sich für die Kompensation der Raumladung durch die Ionen. Diese lässt sich zwar mittels Gleichung (3.10) exakt berechnen, jedoch ist die Anzahl der Ionen in bestimmten Ladungszuständen, wie sie in diese Gleichung eingeht, stark von einer Reihe an Parametern der EBIT wie etwa den Strom, dem Injektionsdruck, dem Überlapp des Elektronenstrahls mit der Ionenwolke, der Ionisierungseffizienz für die einzelnen Ladungszustände, Stößen mit Restgas und damit verbundenem Ladungsaustausch, Entvölkerung bestimmter Ladungszustände durch resonante Rekombination und vielem mehr, abhängig.

Auch eine Modellierung der Kompensation nach Gleichung (3.13) ist mit vielen Annahmen behaftet wie der Temperatur der Ionen oder dem freien Parameter  $f_i$ . Aus diesen Gründen ist es nicht möglich, exakte Korrekturwerte für die Raumladung anzugeben und somit die Resonanzenergien aus einer Messung absolut zu bestimmen.

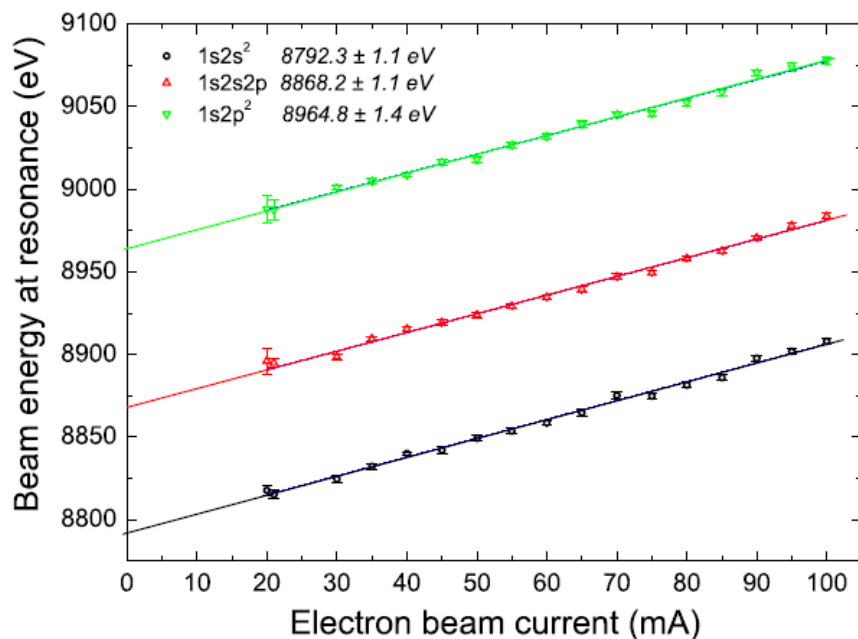


Abbildung 3.16: Bestimmung der absoluten Resonanzenergien durch Extrapolation der gemessenen Energien bei variablem Strahlstrom [62]

Ein Verfahren zur indirekten absoluten Bestimmung der Resonanzenergien ist die Messung der Resonanzen bei verschiedenen Strahlströmen wie etwa in [62, 70]. Durch die Annahme einer im Bezug zum Strahlstrom linearen Raumladung kann daraufhin durch lineare Extrapolation zu einem Strahlstrom von 0 A auf die absolute Resonanzenergie geschlossen werden, da in diesem Fall ohne Strahlstrom auch keine Raumladung des Strahls vorliegt und die Elektronenstrahlenergie den externen

Potentialen entspricht.

Bei dieser Methode liegt die Unsicherheit ebenfalls in der Raumladungskompensation. Wird diese für alle Messungen gleich angenommen, ist eine lineare Extrapolation möglich. In [62] wurde bei Messungen an Krypton eine nahezu konstante Kompensation von 34 – 42% durch Vergleich der gemessenen Werte mit den nur für die Raumladung des Elektronenstrahls selbst korrigierten Werten bestimmt (siehe Abbildung 3.17).

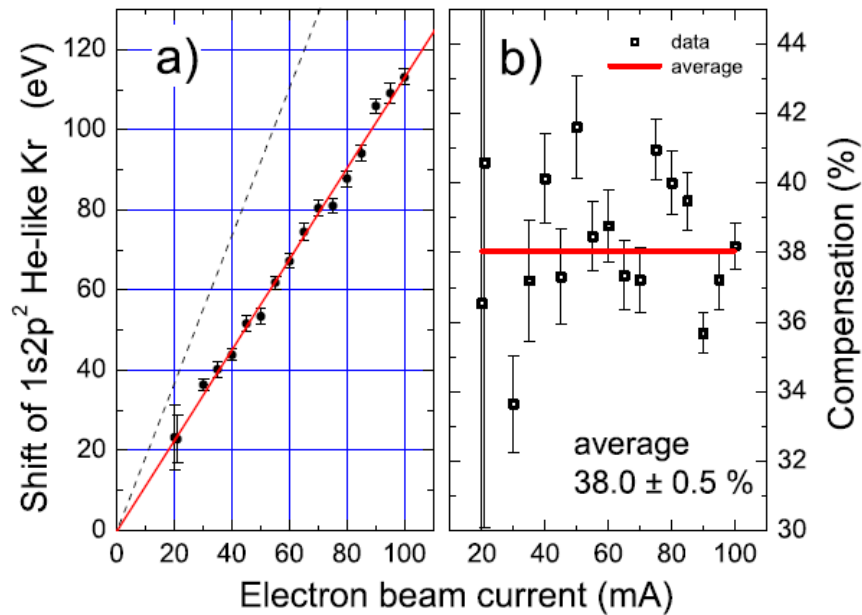


Abbildung 3.17: Raumladungskompensation durch Krypton-Ionen [62]. Die Kompensation wurde berechnet aus der Differenz der gemessenen zur errechneten Raumladung.

Bei näherer Betrachtung der Resonanzenergien [75] fallen jedoch Nichtlinearitäten der Resonanzen in Abhängigkeit des Stroms im niedrigen Strombereich auf, welche durch unterschiedliche Ionen-Verluste aus der Falle (in radialer und axialer Richtung) und der damit verbundenen veränderten Raumladungskompensation zu erklären sind. Somit dürfen in die Extrapolationen nur Werte einbezogen werden, bei denen eine konstante Raumladungskompensation angenommen werden kann.

**Relative Resonanzspektren.** Um Resonanzspektren relativ zu bestimmen, kann eine gut separierte Resonanzlinie auf den entsprechenden theoretischen Wert normiert und alle anderen Resonanzenergien relativ zu dieser Linie angegeben werden. Eine Messung wird hierbei bei festem Strahlstrom durchgeführt, so dass der Parameter des Stroms nur einen konstanten Einfluss auf die Raumladung hat und so für jeden Datenpunkt gleich ist. Die Korrektur dieser dadurch resultierenden konstanten

Verschiebung auf Grund der durch die Raumladung notwendigen größeren externen Potentiale wird somit durch die Normierung einer Resonanz auf theoretische Werte vorgenommen. Die Spektren werden nach den Ausführungen in Abschnitt 3.3 durch eine Energierampe des Elektronenstrahlstroms aufgenommen. Hierbei verändert sich die Strahlenergie, welche ebenfalls in die Raumladung nach Gleichung (3.9) eingeht. Mit den allgemein typischen EBIT-Parametern  $B = 8 \text{ T}$ ,  $r_e = 23 \mu\text{m}$  und  $I_e = 150 \text{ mA}$  lässt sich Gleichung 3.9 für die Position in der Mitte des Elektronenstrahls ( $r = 0$ ) umformulieren in die Abschätzung

$$V_{sc}(0) [V] \approx \frac{30I_e [A]}{\sqrt{1 - \left(\frac{E_e[\text{keV}]}{511} + 1\right)^{-2}}} \left( \ln \left( \frac{r_e}{r_{dt}} \right)^2 - 1 \right), \quad (3.15)$$

wobei die Abhängigkeit von der Strahlenergie  $E_e$  deutlich wird. Zudem ist ebenfalls der Radius des Elektronenstrahls nach Gleichung (3.4) von dieser Energie abhängig, welcher wiederum in die Raumladung eingeht.

Diese Energieabhängigkeit macht bei einer relativen Resonanzenergiebestimmung eine Korrektur für die Raumladung zusätzlich zur Verschiebung auf Grund des Strahlstroms notwendig. Hierbei muss jeder Datenpunkt individuell für seine Energie korrigiert werden.

Wie bereits bei den anderen Korrekturen ist auch hier die Raumladungskompensation zu beachten. Sie fällt jedoch deutlich weniger ins Gewicht, da sie die Raumladungskorrektur um einen Bruchteil vermindert, welche bereits die Datenpunkte nur um wenige eV verschiebt. Da die Raumladung selbst nur einen geringen Einfluss von wenigen eV auf die relativen Spektren hat, ist der Einfluss der Korrektur nochmals geringer. In Abschnitt 4.1.2 wird zudem diskutiert, wie die angewandte Messmethode des evaporativen Kühlens diese nur sehr schwierig zu modellierende zusätzliche Korrektur so vermindert, dass sie vernachlässigt werden kann und allein die Korrektur für die unkompenzierte Raumladung des Strahls berücksichtigt werden muss.

## 3.6 Bestimmung der Photonenenergie

Die Photonen, welche durch Relaxationsprozesse der angeregten Ionen nach den diversen Rekombinationsprozessen ausgesandt werden, werden zum Nachweis der resonanten Rekombinationsprozesse energetisch aufgelöst detektiert. Dafür wird ein Germanium-Röntgendetektor verwendet (Modell *GLP 36360* des Herstellers Ortec).

Der Ortec-Germanium-Detektor ist koaxial aufgebaut, was ein größeres Detektionsvolumen im Vergleich zu anderen Geometrien bietet und hat eine Detektionsfläche von  $1018 \text{ mm}^2$ . Der Kristall ist  $13 \text{ mm}$  dick und in einer Entfernung von ca.  $35 \text{ cm}$  zur Fallenmitte aufgebaut. Somit wird ein Raumwinkel von ca.  $\Omega = 0,1\%$  abgedeckt. Die Auflösung beträgt ca.  $150 \text{ eV}$  bei den betrachteten Photonenenergien.

Um die im Fallenzentrum der EBIT emittierten Photonen beobachten zu können, ist an der Seite der Maschine ein Vakuumfenster aus Beryllium der Dicke  $254\ \mu\text{m}$  angebracht. Wie in Abbildung 3.18 zu sehen ist, ist Beryllium für die Photonen im energiebereich um  $13\ \text{keV}$ , welche als Relaxationsphotonen der Rekombinationsprozesse erwartet werden, nahezu durchsichtig, so dass eine hohe Effizienz gewährleistet ist. In dieser Abbildung ist zudem die gute Effizienz der Detektion der Photonen bei der hier vorzufindenden Stärke des Germanium-Kristalls abzulesen.

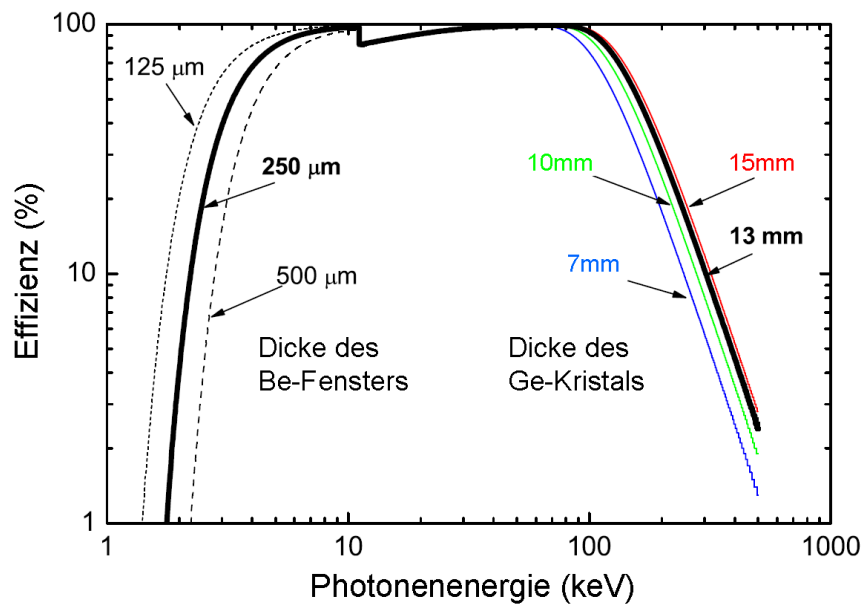


Abbildung 3.18: Effizienz des Germanium-Detektors und Durchlässigkeit des Beryllium-Fensters in Abhängigkeit der Photonenenergie.

### 3.7 Datenaufnahmesystem und Steuerung des Experiments

Um die Spannung der Driftröhren entsprechend den Überlegungen in Abschnitt 3.3 zu variieren, wurde eine durch Software einstellbare Steuerspannung in Form einer entsprechenden Dreiecksfunktion zur Steuerung des HV-Netzgerätes, welches  $V_{DT}$  erzeugt, ausgegeben.

Zur Messung der Resonanzen wurden im wesentlichen die Eingangsgrößen Elektronenstrahlenergie und Photonenenergie in Koinzidenz gemessen. Dies geschah mit Hilfe eines FAST-MPA Datenaufnahmesystems, welches über Analog-Digital-Wandler (analog to digital converter, ADC) die gemessenen Signale digitalisiert und als

Ereignisse speichert. Jede Messgröße wird dabei in bis zu 8000 Kanäle einsortiert, die bei der Auswertung kalibriert werden können (siehe Abschnitt 3.8.1).

Dabei können Koinzidenzbedingungen für die Datenaufnahme festgelegt werden. So wurde zu jedem ankommenden Photonensignal das entsprechende Signal der Elektronenstrahlenergie gespeichert.

Auf Grund des geringen Ausgangssignals des Spannungsteilers für die Driftröhren, womit der Messbereich und damit die volle Auflösung des ADC nicht genutzt werden kann, und dem Eingangswiderstand des ADC, welcher parallel zum Messwiderstand des geeichten Systems liegen würde, war es nicht möglich, das gemessene Signal der Driftröhrenspannung direkt mit dem MPA zu speichern. Daher wurde statt dieses Signals die Steuerspannung für das Driftröhren-Netzgerät mit dem MPA-System gemessen, welches nach den Untersuchungen in Abschnitt 3.4.2 eine sehr gute Linearität zu der gemessenen Spannung aufweist.

Davon unabhängig wird die von den Spannungsteilern transformierte und mit den Keithley-Multimetern gemessene Spannung digital aufgezeichnet, um so die Daten der realen Spannungsrampe an den Driftröhren zu erhalten. Mit Hilfe dieser Messung kann die vom MPA-System aufgezeichnete Steuerspannung nach den Beschreibungen in Abschnitt 3.8.1 kalibriert werden, wodurch sich die reale Spannung zu jedem gemessenen Photonenergebnis ergibt.

## 3.8 Auswertung der Messdaten

### 3.8.1 Kalibration der Photonenenergie und der Elektronenstrahlenergie

Die Photonen- bzw. die Elektronenstrahlenergie wurden von den Messgeräten erfasst und entsprechend ihrer Werte in Kanäle des jeweiligen ADCs eingeordnet. Somit erhält man ein Messergebnis, welches nach Kanälen skaliert ist. Daher sind genaue Kalibrationen der beiden Energien notwendig.

#### Kalibration der Photoenergie

Die Photonenenergie wurde kalibriert, indem das Röntgen-Spektrum eines radioaktiven Elementes mit bekannten Emissionsenergien mit dem gleichen Aufbau für die Photonenenergie gemessen wurde, wonach sich die Kanäle des ADC entsprechenden Energien zuordnen lassen. Hierfür wurde eine Strahlungsquelle bestehend aus Americium  $^{241}\text{Am}$  an den Eingang des Photonen-Detektors befestigt und die von der Quelle ausgesandten Photonen gemessen.  $^{241}\text{Am}$  hat ein gut bekanntes Photonen-Spektrum, in dem sich die in Abbildung 3.19 gekennzeichneten Linien klar identifizieren und energetisch zuordnen lassen. Aus diesen fünf bekannten Punkten wurde eine Gerade der Photonenenergie in Abhängigkeit der Kanalnummer bestimmt, welche zur Kalibration der Kanäle des Photonen-ADCs verwendet wurde. Bei den Messungen, bei denen die Photonenenergie besonders relevant war, wurde jeweils vor und nach der



Messung eine solche Kalibration durchgeführt, um einen eventuellen Fehler durch zeitliche Veränderung der Energieeinordnung etc. abschätzen zu können.

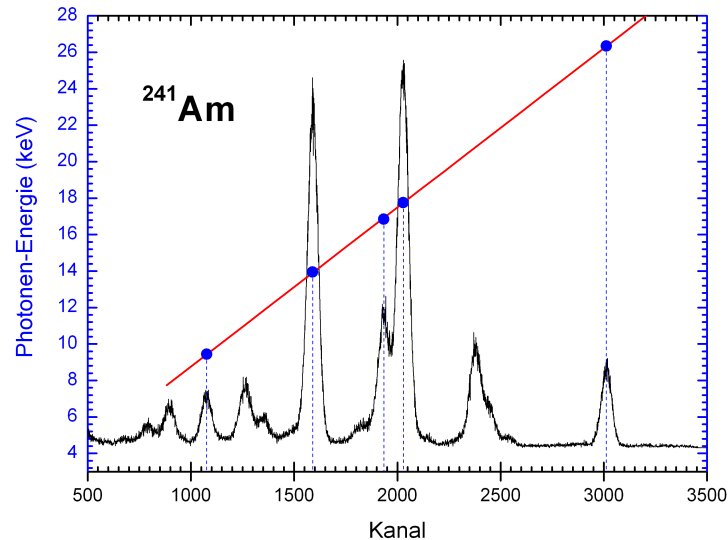


Abbildung 3.19: Beispiel einer Kalibration der Photonenenergie. Die bekannten Energien der von  $^{241}\text{Am}$  emittierten Photonen werden den entsprechenden Kanälen zugeordnet und so eine Kalibrationsfunktion ermittelt.

### Kalibration der Elektronenstrahlenergie

Um auf die wahre Elektronenstrahlenergie schließen zu können, muss die aufgenommene und in Kanäle einsortierte Spannung mit den Werten kalibriert werden, die für die Spannung von den Keithley-Multimetern gemessen und im Steuerrechner gespeichert wurden. Das MPA-System misst somit eine Referenzrampe, die der Spannungsrampe der Driftröhren entspricht. Ist diese kalibriert, müssen noch die Spannungen für Elektronenkanonen-Plattform und die Kathodenspannung addiert werden. Die Spannungsrampe der Driftröhren selbst wird in einer separaten Datei mit einer Frequenz von ca. 2Hz gespeichert, so dass in Anbetracht der langsamen Rampen-Geschwindigkeiten (meist ca. 2 V/s) eine sehr genaue Messung der Driftröhren-Spannungsrampen erfolgt. In vorherigen Messungen wurden unterschiedliche Wege der Energiekalibration gegangen. So wurde in [62] eine Kalibration der beiden Rampen miteinander durchgeführt, wogegen in [70] jedes Photonenergebnis einer bestimmten Energie der Datenaufnahme direkt zugeordnet wurde. Hierbei wurde die Messung der realen Spannung auf die Photonenergebnisse getriggert und bei der Auswertung jedem Photonenergebnis die entsprechende Energie zugeordnet.

Hierbei ist zu beachten, dass das Multimeter zur Messung dieser Spannungen einen Wert aus zeitlicher Integration über einen Zeitraum von 20 ms liefert, wodurch der aufgezeichnete Wert einem verzögert gemessenen Wert entspricht. Dazu kommen Verzögerungen zwischen gemessener und tatsächlicher Spannungsrampe. Diese Effekte führen dazu, dass die getriggerten Werte nochmals korrigiert werden müssen. Bei einer Kalibration der beiden individuellen Dreiecksrampen, also der mit dem MPA-System aufgezeichnete Steuerspannung und der gemessenen Spannung, spielen diese Effekte keine Rolle. Es kann angenommen werden, dass die Steuerspannung das zeitliche Verhalten der Spannung gut wiedergibt, weshalb eine Kalibration dieser Spannung einen ausreichend genauen Wert der momentanen Elektronenstrahlenergie ergibt.

Die genannten Überlegungen führten dazu, die Kalibration auf Grundlage der Methode nach González Martínez [62] durchzuführen. Die Idee hinter der Kalibration, wie sie durchgeführt wurde, ist die Umkehrpunkte der beiden Rampen, also der Referenzrampe und der Spannungsrampe zu bestimmen und daraus eine lineare Kalibrationsfunktion zu formulieren. Voraussetzung hierfür ist die Linearität und Stabilität beider Rampen. Auch dürfen sich die Minima und Maxima der beiden Rampen nur in äußerst kleinem Rahmen über die Zeit bewegen. Wenn dies der Fall ist, ist auch gewährleistet, dass sowohl die Spannungsrampe stabil ist als auch dass die Einordnung der gemessenen Spannungen in die Kanäle der ADCs zeitlich konstant verläuft.

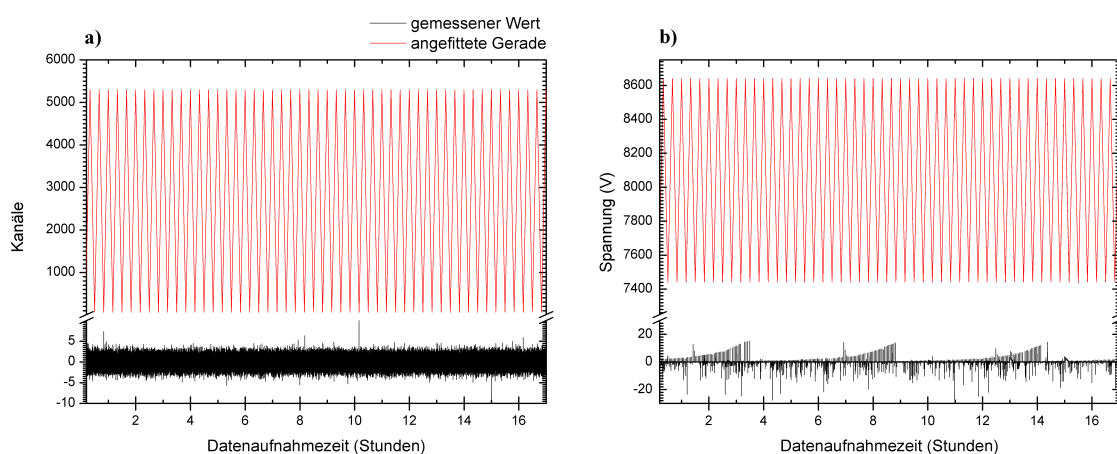


Abbildung 3.20: Linearität der Spannungsrampen und Vergleich mit den zur Auswertung angefitzten Geraden. Es sind jeweils die gemessenen Werte (schwarze Kurve), meist vom Geradenfit überdeckt, und die angefitzten Geraden (rote Kurve) für die aufgenommene Referenzspannung (a) und tatsächlich gemessene Spannung (b) mit ihren jeweiligen Residuen aufgetragen.

Da auf Grund der Größe der unter Spannung stehenden Bauteile und der begrenzten Dynamik der Netzgeräte keine scharfen Umkehrpunkte möglich sind, wird

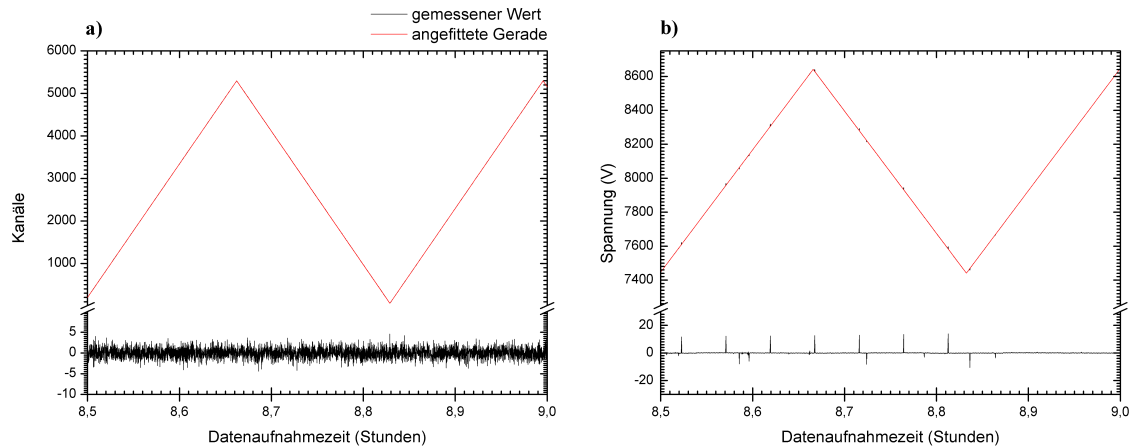


Abbildung 3.21: Detailbetrachtung der Abbildung 3.20 für den Zeitraum einer halben Stunde. Wieder ist (a) die Referenzspannung und (b) die tatsächliche Spannung. Hier wird die Linearität der Spannungsrampen mit geringen Residuen deutlich.

an der Stelle der Umkehrpunkte eine kleine Abflachung erwartet. Zudem ist bei einer Aufnahme Frequenz von 2 Hz auch kein scharfer Umkehrpunkt genau bestimmbar. Ebenso wird die Datenmenge der Referenzrampe auf 2 Hz reduziert. Die Umkehrpunktbestimmung ist dadurch ebenfalls direkt nicht möglich, wobei jedoch die Umkehrpunkte der Steuerspannung prinzipiell schärfer sind als die der Driftröhren selbst. Für die Kalibrationen können somit nicht die direkt gemessenen Umkehrpunkte verwendet werden, sondern es müssen die Umkehrpunkte auf ihren „wahren“ Wert Extrapoliert werden. Hierfür wird von einem Programm, welches die Kalibrationswerte errechnet, an die jeweiligen Rampen Geraden angefittet, für die die Punkte ohne die Betrachtung weniger Punkte direkt vor und nach den Umkehrpunkten einbezogen werden. Die Schnittpunkte dieser Geraden werden dann als Umkehrpunkte angesehen.

Nachdem die Werte der Umkehrpunkte ermittelt wurden, wird hieraus ein Mittelwert mit entsprechender Standardabweichung gebildet, welche in die Fehlerbetrachtung einbezogen wird. Die Differenzen der Umkehrpunkte bilden die Auslenkungen der Rampen, aus welcher ein Umrechnungsfaktor sowie aus dem Mittelwert der unteren Umkehrpunkte ein Ausgangswert ermittelt wird.

Ein weiteres Programm liest diese Kalibrationswerte ein und rechnet die Kanäle der Energieeinordnung der Projektionen der Resonanzen auf die Energieachse in die jeweiligen Energien um.

Da die Resonanzen auf Grund der Raumladung bei verschobenen Energien erscheinen, müssen die Spektren entsprechend korrigiert werden. Hierzu werden, nachdem die Spektren kalibriert und gespeichert wurden, die Energien der Projektionen nach der Gleichung 3.9 nochmals neu berechnet und die so korrigierten Spektren gesondert gespeichert.

### 3.8.2 Bestimmung der Resonanzenergien

Nachdem die Energie- und Photonenergienereignisse aufgenommen, durch Projektion die Spektren erzeugt und entsprechend kalibriert wurden, wurden durch Geradenfits die Resonanzzentren ermittelt. Die radiative Rekombination erzeugt ein Untergrundsignal, welches bei Messungen über einen großen Bereich nicht konstant ist. Um den Untergrund entsprechend von den Spektren abziehen zu können, wurde dieses bei allen Messungen deutlich vor und nach dem interessanten Bereich aus den Spektren ermittelt. In Abbildung 3.22 ist ein Beispiel für eine Untergrundsubtraktion einer Übersichtsmessung dargestellt.

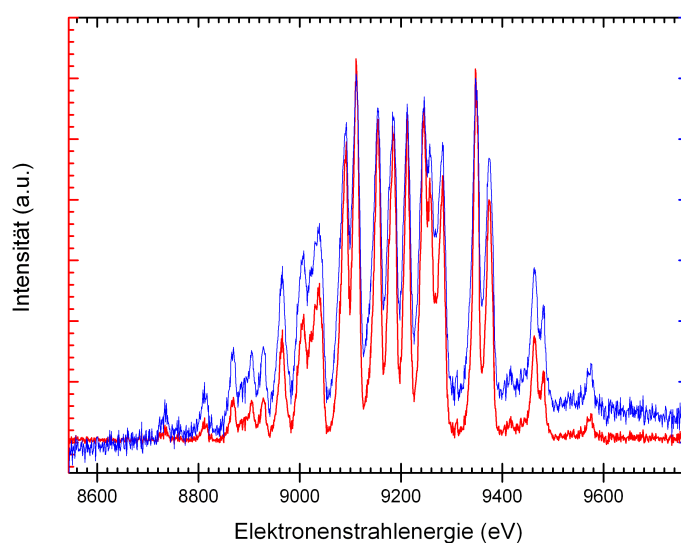


Abbildung 3.22: Übersichtsspektrum vor und nach der Subtraktion des Untergrundes

### 3.8.3 Fehlerabschätzung

Die ermittelten Fehler der Resonanzenergien setzen sich im wesentlichen aus vier Komponenten zusammen:

- Unsicherheit der Kathodenspannung;
- Fehler der Driftröhrenenergiemessung und -kalibration;
- Fehlerabschätzung durch Nichtlinearitäten und zeitlichen Instabilitäten der Spannungsrampen und
- Statistische Unsicherheiten.

Die einzelnen Fehler wurden nach den Grundsätzen des Gaußschen Fehlerfortpflanzungsgesetzes ermittelt:

$$u_y = \sqrt{\left(\frac{dy}{dx_1} \cdot u_{x_1}\right)^2 + \left(\frac{dy}{dx_2} \cdot u_{x_2}\right)^2 + \dots}, \quad (3.16)$$

wobei der Fehler  $u_y$  der Funktion  $y$  berechnet wird und die Einzelfehler  $u_n$  der Variablen  $x_n$  entsprechend Gleichung 3.16 eingehen. Der an den entsprechenden Datenzusammenstellungen angegebene Gesamtfehler wird durch die quadratische Summation der Einzelfehler festgelegt.



# Kapitel 4

## Vorbereitende Untersuchungen systematischer Effekte

Mit den in Kapitel 3 beschriebenen Aufbauten wurden die resonanten Elektroneneinfangprozesse in hochgeladenem Krypton gemessen. Das Ziel war die möglichst genaue relative Bestimmung der Resonanzen, die im KLL-DR-Bereich auftreten, das heißt bei Elektronenstrahlenergien zwischen 8 und 10kV.

In Abbildung 4.1 sind die Berechnungen der Resonanzenergien und relativen Resonanzstärken [59] nach der MCDF Methode (siehe Kapitel 2) dargestellt, welche mit einer Gaußverteilung (Halbwertsbreite 13 eV) gefaltet wurden. Eventuell abweichende Ladungszustandsverteilungen wurden in den Vergleichen mit den jeweils gemessenen Spektren berücksichtigt.

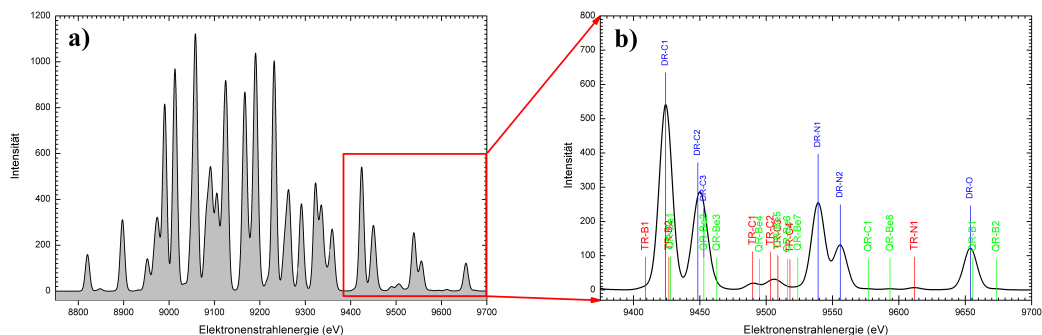


Abbildung 4.1: Theoretische Berechnungen der Elektroneneinfang-Resonanzen in Krypton-Ionen mit einer Auflösung von 13eV (FWHM) nach [59]. a) Spektrum des gesamten KLL-Bereiches von He- bis O-artigen DR-Resonanzen. b) Spektrum des Bereiches der C- bis O-artigen DR-Resonanzen, in dem einzeln isolierte Resonanzen höherer Ordnung erwartet werden. TR bezeichnet trielektronische und QR quadruelektronische Rekombination.

Frühere Messungen dieses Spektrums erreichen eine Auflösung von etwa nur 40 eV FWHM. So zeigt die Messung von R. Radtke et al. [18], welche die beste publizierte Messung des DR-Spektrums von Krypton darstellt, eine Auflösung von 36 eV (Abbildung 4.2 a)), während T. Fuchs et al. [16] in deren Spektren nur eine Auflösung von 50 eV Auflösung erreicht (Abbildung 4.2 b)). In der Dissertation von Antonio González Martínez [62] wurden zur Vorbereitung der DR-Messungen an Quecksilber Testmessungen an Krypton durchgeführt, da es sich hier um ein bekanntes Spektrum handelte und man hierbei das Prinzip der Messungen überprüfen konnte. Diese Messung erreichte eine Auflösung von etwa 40 eV und ist in Abbildung 4.2 c) dargestellt.

Ein wesentliches Ziel dieser Arbeit bestand darin, eindeutige Resonanzen höherer Ordnung wie Trielektronische Rekombination zu finden. Bei der in der obigen Rechnung zugrunde gelegten Auflösung von etwa 13 eV sind separierte trielektronische Resonanzen im Bereich der Kohlenstoff- bis Sauerstoff-artigen DR-Resonanzen zu erwarten (siehe Abbildung 4.1, b). Bei den bisher durchgeführten Messungen ist dieser Bereich nicht genügend gut aufgelöst, so dass die gesuchten Resonanzen nicht beobachtbar waren.

Im Folgenden wird nun dargelegt, welche Methoden zur Verbesserung der Auflösung entwickelt wurden und wie damit sehr genaue Bestimmungen der DR-Resonanzen sowie eindeutige TR-Resonanzen nachgewiesen werden konnten. Ebenfalls wurden so erste Anzeichen von QR-Resonanzen gefunden.

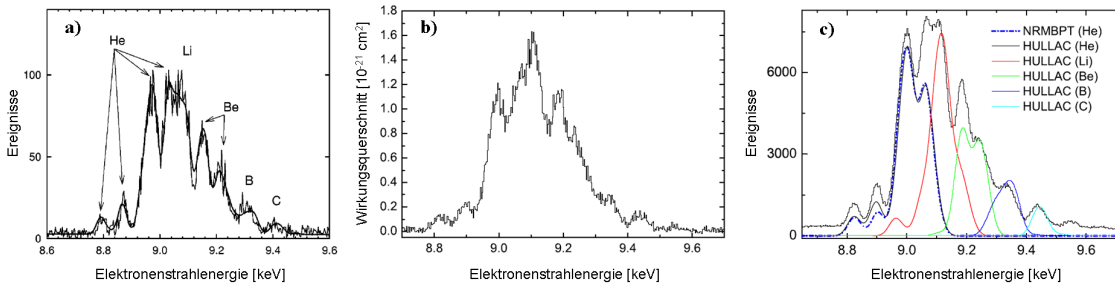


Abbildung 4.2: Resonanzspektren früherer Messungen an hochgeladenem Krypton. a) Messung von Radtke et al. [18] mit einer Auflösung von 36 eV. b) Messung von Fuchs et al. [16] mit einer Auflösung von ca. 50 eV. c) Messung von González Martínez [62], in der eine Auflösung von ca. 40 eV erzielt wurde. In allen drei Messungen ist der Bereich der höheren Resonanzen bei einer Strahlenergie von etwa 9,4 bis 9,7 keV nicht aufgelöst.



## 4.1 Verbesserung der Auflösung

In diesem Abschnitt werden Methoden zur Verbesserung der Auflösung besprochen und dargelegt, auf welchem Weg es möglich war, die Resonanzen höherer Ordnung zu beobachten. Nach Überlegungen zur Minimierung der schwer abschätzbaren Ionenkompensation und einer Diskussion weiterer systematischer Einflüsse auf die Genauigkeit der Messung werden die als optimal angesehenen Parameter der Experimente festgelegt.

Die messbare Auflösung der Resonanzen, wie sie bei diesen Experimenten nach Abschnitt 3.3 gemessen wurden, wird im Wesentlichen von zwei großen Faktoren bestimmt. So gibt es (1) *technische* Einflüsse, die die Auflösung verschlechtern und (2) *physikalische* Vorgänge bei den Reaktionspartnern selbst, die einen großen Einfluss auf die Auflösung der Resonanzen haben.

Da die wichtigste Messgröße in den vorliegenden Experimenten die Elektronenstrahlenergie ist, liegen die technischen Einflüsse der Auflösung vor allem in der Stabilität der Beschleunigungsspannung und ihrer genauen Messbarkeit. Dieser Themenbereich wurde in Abschnitt 3.4 ausführlich behandelt. Somit sind die technischen Einflüsse auf die Auflösung der Resonanzen limitiert, so dass für weitere Entwicklungen der Auflösung vor allem die physikalischen Vorgänge in der Falle selbst betrachtet werden müssen.

Durch den fokussierten, dichten und hochenergetischen Elektronenstrahl werden die Ionen in der Falle stark aufgeheizt, wodurch sich ihre thermische Energie erhöht und die Energieverteilung verbreitert. Weiter ergibt sich bedingt durch die Tiefe des longitudinalen Potentialkastens eine Temperaturerhöhung. Der Fokus der Überlegungen soll daher auf die Temperatur der Ionen in der Falle gelegt werden.

In frühen systematischen Studien des Verhaltens der Ionen innerhalb einer EBIT [60] wurden die Terme, welche für die Temperaturentwicklung der Ionen verantwortlich sind, beschrieben mit

$$\frac{d}{dt}(N_i k T_i) = \left[ \frac{d}{dt}(N_i k T_i) \right]^H + \sum_j \left[ \frac{d}{dt}(N_i k T_i) \right]^A_j - \left[ \frac{d}{dt}(N_i k T_i) \right]^{V_{ax}} - \left[ \frac{d}{dt}(N_i k T_i) \right]^{V_{rad}}. \quad (4.1)$$

wonach sich die Temperaturentwicklung der Ionen  $\frac{d}{dt}(N_i k T_i)$  ergibt aus der Aufheizung der Ionen durch den Elektronenstrahl  $\left[ \frac{d}{dt}(N_i k T_i) \right]^H$  und den Energieaustauschreaktionen der Teilchen untereinander, welche mit  $\sum_j \left[ \frac{d}{dt}(N_i k T_i) \right]^A_j$  beschrieben wird. Dem entgegen wirkt ein Verlust der Ionen in axialer bzw. radialer Richtung, welcher sich ebenfalls auf die Gesamttemperaturentwicklung auswirkt nach  $-\left[ \frac{d}{dt}(N_i k T_i) \right]^{V_{ax}}$  für die axial entweichenden Ionen und  $-\left[ \frac{d}{dt}(N_i k T_i) \right]^{V_{rad}}$  für die Ionen, die das radiale Potential der Falle überwinden. Der Kühleffekt entsteht hierbei durch den Temperatúrausgleich, welcher die verbleibenden Ionen in der Falle bilden und der niedriger ist als vor dem Verlust, da zuerst die hochenergetischen Ionen entweichen. Dieser Vorgang des *evaporativen Kühlens* wird in den folgenden Abchnitten

näher beleuchtet.

Einige Simulationsmodelle gehen von einem weiteren Term in der Temperaturentwicklung der Ionen aus, welcher die Aufheizung durch die Ionisation beschreibt [76]. Er wird dargestellt als

$$\frac{dkT_{i+1}^{IH}}{dt} = \frac{1}{\pi r_e^2} \frac{1}{N_{i+1}} \frac{dN_i^{EI}}{dt} \cdot \int_0^{r_e} 2\pi r V(r) \cdot \exp\left(-\frac{q_i V(r)}{kT_i}\right) dr$$

. Eine Messung der Iontemperatur kann beispielsweise durch Extraktion von Ionen, wie in [77], durchgeführt werden.

Um eine verbesserte Auflösung durch verringerte Iontemperatur zu erreichen, muss auf die verschiedenen Komponenten der Temperaturentwicklung gezielt Einfluss genommen werden.

### 4.1.1 Kühlung durch verringerte Aufheizung

Die übliche Methode zur Kühlung der Ionen ist die Durchführung der Experimente bei minimalem Elektronenstrahlstrom. Die Aufheizung der Ionen wird hervorgerufen durch Coulomb-Stöße der Elektronen mit den Ionen, welche beschrieben werden kann aus einer nach [78] abgeleiteten Coulomb-Frequenz

$$\nu_{ei} = 4\pi \frac{n_e}{v_e^3} \left( \frac{q_i e^2}{4\pi \epsilon_0 m_e} \right)^2 \ln \Lambda_i, \quad (4.2)$$

welche die Stoßrate der Elektronen mit den Ionen quantifiziert. Hier sind die entscheidenden Einflüsse gegeben durch die Elektronendichte  $n_e$  und der Geschwindigkeit der Elektronen  $v_e$  sowie dem sogenannten Coulomb-Logarithmus  $\ln \Lambda_i$ . Dieser Wert gibt das Verhältnis zwischen minimaler und maximaler Elektronen-Ionen-Stoßenergie an. Mit Hilfe dieser Coulombfrequenz kann die Temperaturentwicklung bedingt durch Stöße der Ionen mit dem Elektronenstrahl nach [60] beschrieben werden mit

$$\left[ \frac{dE_i}{dt} \right]^H = \left[ \frac{d}{dt} (N_i k T_i) \right]^H = \frac{4m_e}{3M_i} \nu_{ei} n_i E_e, \quad (4.3)$$

wobei neben der in Gleichung (4.2) eingehenden Parameter noch die Elektronenmasse  $m_e$ , die Ionenmasse  $M_i$  sowie die Elektronenstrahlenergie  $E_e$  linear eingehen.

Auf Grund der Resonanzsuche mit Hilfe der Elektronenstrahlenergie ist an diesem Parameter keine zusätzliche Änderung möglich ebenso wie eine Verringerung der Ionendichte einen starken Einfluss auf die Zählrate hätte. So bleibt nur die Verringerung des Elektronenstrahlstroms, welcher die linear in diese Gleichung eingehende Elektronendichte herabsetzt.

Wie in Gleichung (3.9) beschrieben generiert der Elektronenstrahl ein Raumladungspotential, welches die Ionen in radialer Richtung einschließt. Das Potential ist linear abhängig vom Elektronenstrahlstrom und wird so durch die Verringerung des

Stromes ebenfalls herabgesetzt, wodurch sich der nach Gleichung (4.1) der Temperaturzunahme entgegenwirkende Effekt des Verlustes der Ionen in radialer Richtung  $-\left[\frac{d}{dt}(N_i k T_i)\right]^{V_{rad}}$  verstärkt.

Allgemein lässt sich der Energieverlust nach [79] durch radiales bzw. axiales Entweichen der Ionen als approximative Lösung der Fokker-Planck-Gleichung (siehe z.B. [80]) darstellen:

$$\left[\frac{dE_i}{dt}\right]^V = \left[\frac{d}{dt}(N_i k T_i)\right]^V = \left[\frac{2}{3}n_i \nu_i e^{-\omega_i} - \frac{dn_i}{dt}\right] k T_i. \quad (4.4)$$

Hierbei bezeichnet  $\frac{dn_i}{dt}$  die Ionenverlustrate, welche quantifiziert werden kann nach

$$\frac{dn_i}{dt} = n_i \left[ \frac{3}{\sqrt{2}} \nu_i \left( \frac{e^{-\omega_i}}{\omega_i} - \sqrt{\omega_i} [erf(\omega_i) - 1] \right) \right]. \quad (4.5)$$

Dazu geht wiederum die Stoßrate der Teilchen ein, hier als absolute Coulomb-Stoßrate der Ionen untereinander für die Kollision zweier Teilchen mit den Ladungen  $q_i$  und  $q_j$  [60]

$$\nu_{ij} = \frac{4}{3} \sqrt{2\pi} n_i \left( \frac{q_i q_j e^2}{M_i} \right)^2 \left( \frac{M_i}{k T_i} \right)^{3/2} \ln \Lambda_{ij}. \quad (4.6)$$

Das Potential, für welches die Verlustrate und der damit einhergehende Energieverlust mit oben stehenden Beziehungen modelliert wird, geht in den Parameter  $\omega_i$  ein, der das Verhältnis des Potentialwalls zur durchschnittlichen kinetischen Energie der Ionen angibt.

In der hier betrachteten Kühlmethode ist vor allem der Verlust in radialer Richtung entscheidend, da das radiale Fallenpotential wesentlich durch den Elektronenstrahlstrom beeinflusst wird. Für das radiale Entweichen der Ionen ergibt sich  $\omega_i$  nach

$$\omega_i^{rad} = \frac{q_i e V_{rad} + q_i e B r_{dt} \left( \frac{2k T_i}{3M_i} \right)^{1/2}}{k T_i}. \quad (4.7)$$

Somit wird durch Verringerung des Elektronenstrahlstroms zum einen das Aufheizen der Ionen durch die Elektronen verringert und gleichzeitig ein Kühleffekt durch den Verlust energiereicher Ionen auf Grund des mit der Verringerung des Elektronenstrahlstroms einhergehenden Absenkung des radialen Fallenpotentials.

**Beispiel einer Messung nach der Methode.** Mit dieser Kühlmethode ist es gelungen, dielektronische Resonanzen in hochgeladenem Argon mit einer spektralen Auflösung von ca. 8 eV zu vermessen [9], Abbildung 4.3. Diese Messung fand bei einem Strahlstrom von nur 2,7 mA statt.

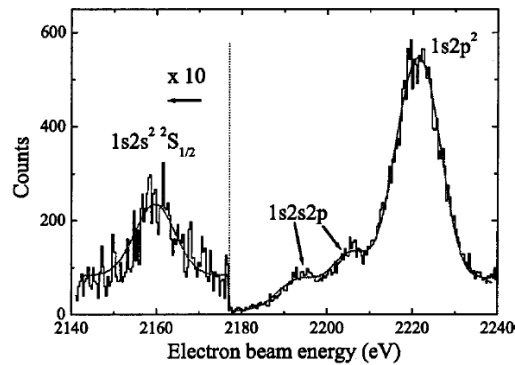


Abbildung 4.3: Messung der DR von Argon als Beispiel einer Messung mit guter Auflösung durch Verringerung des Elektronenstrahlstroms. Es wurde eine spektrale Auflösung von ca. 8 eV erreicht [9].

**Vor- und Nachteile dieser Kühlmethode.** Der große Vorteil der Methode besteht darin, dass die Kühlung direkt über den Elektronenstrahlstrom steuerbar ist, welcher für die diskutierten Experimente ein freier Parameter ist. Zudem ist ein Nebeneffekt der Kühlmethode eine Bestimmung der Resonanzenergien näher an den absoluten Energien, da die Raumladung des Elektronenstrahls eine wesentliche Verschiebung der Resonanzenergien bewirkt und diese nach Gleichung (3.9) linear vom Elektronenstrahlstrom abhängt.

Ein wesentlicher Nachteil der Verringerung des Elektronenstrahlstroms als Kühlmethode besteht in der durch die verringerte Elektronendichte resultierenden deutlich geringeren Ionisations- und Reaktionsrate. Da sowohl deutlich weniger Ionen auf hohe Ladungszustände ionisiert werden als auch deutlich weniger Elektronen zur Verfügung stehen, um in die schon verringerte Ionenzahl zu rekombinieren, sind lange Messzeiten mit geringen Zählraten notwendig. Zudem ist bei steigender Kernladungszahl des zu untersuchenden Elements eine gute Ionisationsrate umso wichtiger, da hier wesentlich mehr Elektronen sequentiell aus dem Atom ausgelöst werden müssen, was bei geringen Elektronendichten stark erschwert ist. So sind Messungen schwererer Elemente bei sehr niedrigen Strömen stark erschwert bis unmöglich, so dass das untere Limit der somit erreichten Auflösung deutlich über der gewünschten Auflösung für Messungen auch kleiner und von starken Resonanzen umgebener Resonanzen höherer Ordnung nicht ausreicht.

### 4.1.2 Evaporatives Kühlen

Neben der Beeinflussung des geringeren Aufheizens durch den Elektronenstrahl und das damit verbundene erleichterte radiale Entweichen heißer Ionen aus der Falle ist es auch denkbar, direkt zu kühlen, indem die Verdampfung heißer Ionen gefördert wird.

Als Kühleffekt tritt in Gleichung (4.1) das Entweichen der Ionen auf, welche in radialer und axialer Richtung die Falle verlassen [81]. Das Prinzip beruht darauf, dass das Fallenpotential so weit verringert wird, dass es Teilchen mit hoher kinetischer Energie (und damit den heißesten) möglich ist, über die Kanten des Potentialtopfes aus der Falle zu entweichen (siehe Abbildung 4.4). Die typischen Potentialtiefen, die von den heißen Ionen überwunden werden müssen, liegen bei mehreren keV. Jedes Ion entnimmt dem Ensemble einen diesen Betrag entsprechende Energie. Die übrigen in der Falle verbliebenen Teilchen stellen wieder das thermisches Gleichgewicht bei einer niedrigeren Temperatur her. Weiteres Absenken des Potentialtopfes wiederholt den Effekt. Diese Vorgehensweise reduziert die Anzahl der Teilchen in der Falle stark.

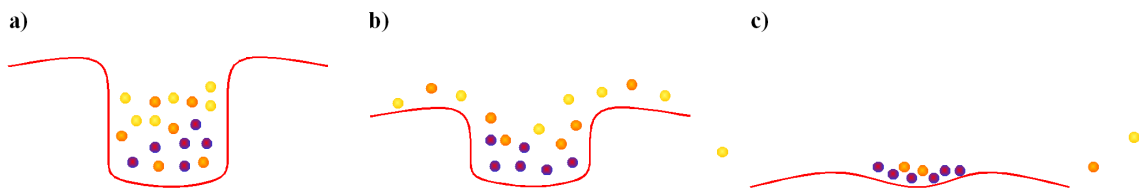


Abbildung 4.4: Prinzip des evaporativen Kühlens. In einer Teilchenfalle herrscht eine große Temperaturverteilung (a). Wird das Fallenpotential verringert (b), können die heißesten Teilchen entweichen, die dabei dem restlichen Ensemble Energie entnehmen. Daraus ergibt sich der Kühleffekt. Am Ende bleiben wesentlich kältere Teilchen in der Falle (c).

Mit dieser Methode, die durch Analogie zum natürlichen Abkühlen heißer Flüssigkeiten auch „Verdampfungskühlen“ genannt wird, wurde beispielsweise erreicht, in einer Magneto-Optischen Falle [82] statt der mit der dort angewendeten Laserkühlung erreichbaren einigen  $100 \mu\text{K}$  Teilchen durch Umschalten auf eine rein magnetische Falle, und damit durch eine Absenkung des Fallenpotentials auf wenige nK abzukühlen und somit erstmals einen Phasenübergang von Rubidium [83] und Natrium [84] zu einem Bose-Einstein-Kondensat nachzuweisen.

In der EBIT wird das evaporative Kühlen vor allem eingesetzt, um höhere Ladungszustände zu erreichen [85]. Es wurde früh festgestellt, dass durch die hohe Temperatur der Ionen Ladungszustände nur bis zu einer bestimmten Grenze erreicht werden konnten, da sich die höchsten Ladungszustände am meisten aufheizen und so keine lange Verweildauer in der Falle haben. Um dies zu ändern werden leichte Atome in die Falle injiziert, die schnell hochionisiert werden und mit den anderen in der Falle gefangenen Ionen thermalisieren. Durch den im Vergleich zu den schweren Ionen niedrigeren Ladungszustand verdampfen diese leichten Ionen wesentlich schneller, während sich die schwereren Ionen abkühlen. So lässt sich die Temperatur durch ein Kühlgas in der EBIT regulieren und damit höhere Ladungszustände erreichen.

**Theoretische Überlegungen.** Der Kühleffekt in der Temperaturentwicklung ergibt sich aus dem Energieverlust durch entweichende Ionen  $\left[\frac{dE_i}{dt}\right]^V$ , der mit Gleichung (4.4) beschrieben werden kann. Dieser Verlust ist eine Summe aus den Verlusten durch radiales und axiales Entweichen der Ionen, welcher jeweils mit dem Parameter  $\omega_i$  charakterisiert wird. Während sich für die radialen Verluste der Parameter  $\omega_i^{rad}$  nach Gleichung (4.7) ergibt, kann das Entweichen der Ionen in axialer Richtung charakterisiert werden durch

$$\omega_i^{ax} = \frac{q_i e V_{DT}}{k T_i}, \quad (4.8)$$

wobei  $V_{DT}$  die Spannung an den Driftröhren angibt, welche das axiale Fallenpotential bewirkt. Vergleicht man die Parameter  $\omega_i^{rad}$  (Gl. (4.7)) und  $\omega_i^{ax}$  (Gl. (4.8)) und deren Einfluss in Gleichung (4.4), der auch über Gleichung (4.5) gegeben ist, erkennt man deutlich verschiedene Einflüsse der jeweiligen Fallenpotentiale  $V_{rad}$  und  $V_{ax}$ . So gehen zwar beide Werte über den Parameter  $\omega_i$  in einer  $e^{-\omega_i}$ -Abhängigkeit in die Kühlung ein, doch sind nicht beide Parameter beliebig zu verkleinern, was für eine möglichst hohe Kühlrate wichtig ist, da sich für den Parameter  $\omega_i^{rad}$  nach Gl. (4.7) durch den Term  $(q_i e B r_{dt} \left(\frac{2kT_i}{3M_i}\right)^{1/2}) / (kT_i)$  eine untere Grenze ergibt. Das Absenken des radialen Fallenpotentials allein, was dazu noch nur indirekt durch die Verringerung des Elektronenstrahlstroms möglich ist, kann somit die Ionen nicht bis zu optimalen Temperaturen abkühlen.

Anders verhält sich das im Falle des axialen Potentials  $V_{ax}$ . Wird das Fallenpotential entlang der Elektronenstrahlachse so niedrig wie möglich gewählt, wird der Parameter  $\omega_i$  minimal, was maximale Kühlung nach Gleichung (4.4) bedeutet.

Zusätzlich hat der große Verlust energiereicher Ionen einen Einfluss auf den Term der Aufheizung der Ionen durch Energieaustausch der Ionen mit den Ladungszuständen  $q_i$  und  $q_j$  untereinander, welcher nach [86, 87] quantifiziert werden kann mit

$$\left[\frac{dE_i}{dt}\right]^A = \left[\frac{d}{dt} (N_i k T_i)\right]^A = \sum_j 2\nu_{ij}^{eff} N_i \frac{M_i}{M_j} \frac{k(T_j - T_i)}{\left(1 + \frac{M_i T_j}{M_j T_i}\right)^{3/2}}, \quad (4.9)$$

mit der effektiven Stoßrate der Ionen  $\nu_{ij}^{eff}$ , welche nach [88] aus der totalen Stoßrate  $\nu_{ij}$  (Gl. 4.6) mit einem Faktor  $f(r_i, r_j)$  für den Überlapp der Ionenwolken der Ladungszustände  $q_i$  und  $q_j$  zu

$$\nu_{ij}^{eff} = \nu_{ij} f(r_i, r_j) \quad (4.10)$$

ergibt. Der Ionenverlust wirkt auf die Temperatur linear durch  $n_i$  in Gleichung (4.9). Ein zweiter Effekt folgt dadurch, dass die energiereichen Ionen die Falle verlassen, was den Term

$$\frac{k(T_j - T_i)}{\left(1 + \frac{M_i T_j}{M_j T_i}\right)^{3/2}}$$

beeinflusst.

In [60] ist in einer numerischen Rechnung die Ionentemperatur von Argon-Ionen in der LLNL-EBIT bei den Betriebsparametern ( $I_{e-Beam} = 100$  mA,  $B = 3$  T und  $E_{e-Beam} = 9$  keV) und einer neutralen Argondichte von  $n_0 = 10^4$  cm<sup>-3</sup> simuliert. Abbildung 4.5 zeigt, wie deutlich sich das Absenken des Fallenpotentials auf die Temperatur der Ionen in der Falle auswirkt.

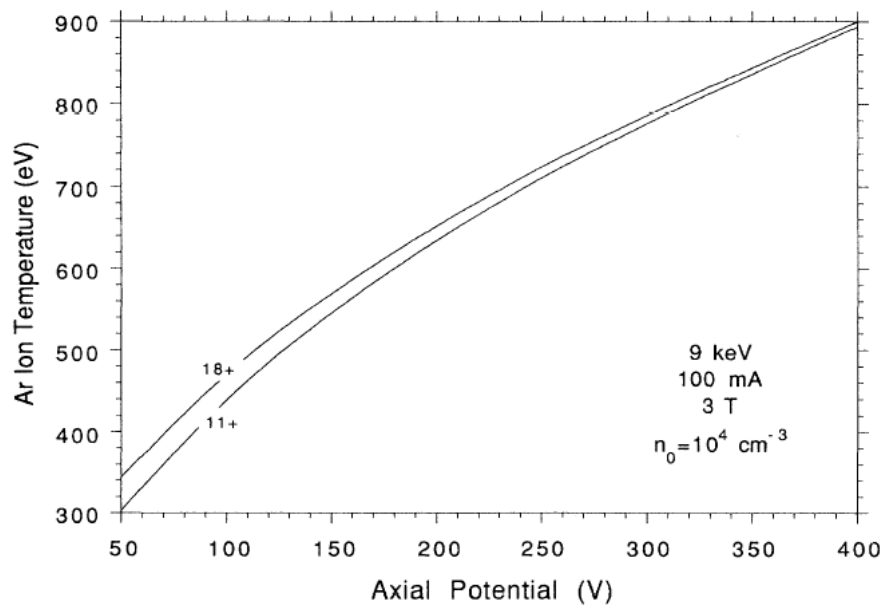


Abbildung 4.5: Simulierte Temperatur von Argon-Ionen in Abhängigkeit der Tiefe des Fallenpotentials [60]

**Experimentelle Umsetzung.** Bereits in früheren Messungen wurde oft eine möglichst flache Falle gewählt, um eben diesen Kühleffekt zu erreichen. Hierzu wurden, sofern die Falle zur Produktion der Ionen ausreichte, das Fallenpotential der äußeren Driftröhren weitestmöglich abgesenkt bis hin zu dem Zustand, bei dem alle Driftröhren auf gleichem Potential liegen.

Betrachtet man die Überlegungen zur Raumladung des Elektronenstrahls, ergibt sich gemäß Gleichung (3.9) bedingt durch die unterschiedlichen Durchmesser der einzelnen Driftröhren in jeder der Driftröhren ein anderes Raumladungspotential. Angewandt auf die zentrale Fallendriftröhre 9, welche einen Radius von 5 mm aufweist und auf die direkt benachbarten Driftröhren 4 und 5 mit Radien von jeweils

1,5 mm, ergibt sich bei einem Strahlstrom von 100 mA und 9 kV Elektronenstrahlenergie eine „natürliche“ Falle von etwa 35 V, welche allein durch die Raumladung und die Dimensionen der Driftröhren erzeugt wird. Hinzu kommen die unterschiedlichen Potentiale an den Driftröhren, welche auch bei einer Einstellung, in der alle Driftröhren das gleiche Potential haben sollten, bei einem Basispotential von 7 kV einen Spannungsunterschied von etwa 25 V aufweisen, wie in Kapitel 3.4.2 diskutiert wurde. Wie dort näher erläutert wurden daher die Driftröhren 4 und 5 direkt mit der Driftröhrenplattform verbunden. Somit lässt sich eine flachere Falle und ein stabiles und vor allem gleiches Potential der äußeren Driftröhren erreichen. Wie jedoch in Abbildung 3.13 zu sehen ist, gibt es auch hier im Vergleich zur Driftröhre 9 ein allein durch die Elektronik und Bauform bedingten Potentialunterschied von etwa 16 V, welcher sich mit dem durch die Raumladung generierten Fallenpotential zu einer Falle von ca. 50 V addiert. Dieses Fallenpotential besteht, obwohl kein externes Potential angelegt wurde.

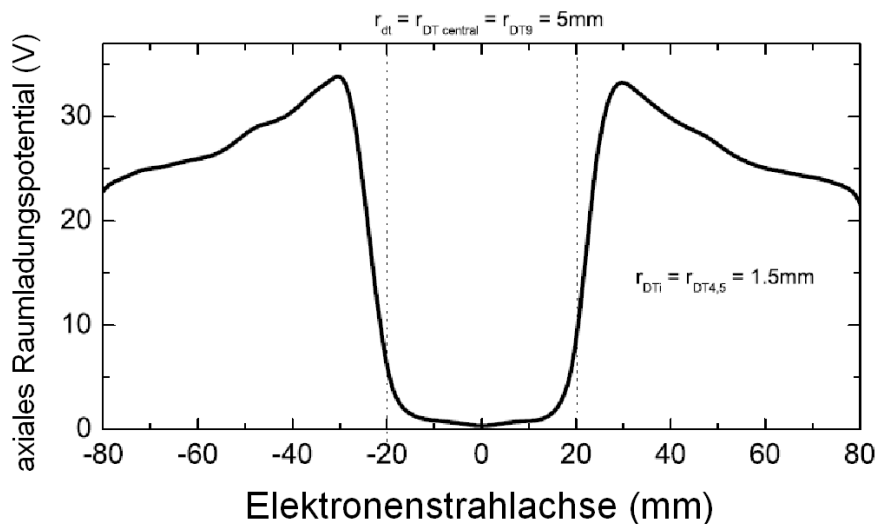


Abbildung 4.6: Natürliches axiales Fallenpotential bedingt durch die unterschiedliche Raumladung in den einzelnen Driftröhren mit verschiedenem Durchmesser bei  $I_e=100$  mA und  $E_e=9$  keV. Simulation aus [62]

Um eine für die Kühlung notwendige äußerst flache Falle zu erreichen, wurde in dieser Arbeit die „natürliche“ Falle kompensiert, indem an die mittlere Driftröhre eine zusätzliche positive Spannung angelegt wird. Somit wird das evaporative Kühlen nicht alleine durch das Absenken der Potentialtopf-Kanten, sondern auch durch das Anheben des Potentialtopf-Bodens weiter forciert.

Die zentrale Fallendriftröhre 9 blieb weiter an einem steuerbaren Netzgerät angeschlossen. Bei einem Strom des Elektronenstrahls von 200 mA wurde in kleinen Schritten die Spannung an der zentralen Driftröhre erhöht, und so die Auf-



lösungsverbesserung durch die besprochenen Effekte des evaporativen Kühlens beobachtet. Untersucht wurden hierbei vor allem der Bereich der Kohlenstoff- bis Sauerstoff-ähnlichen K-LL DR-Resonanzen, welcher für die Beobachtung der Resonanzen höherer Ordnung nach Abbildung 4.1 am erfolgsversprechendsten ist.

Abbildung 4.7 zeigt eine Zusammenstellung der aufgenommenen Spektren. Um auch die Entwicklung der Ionenzahl quantitativ untersuchen zu können, wurde bei allen hier dargestellten Messungen eine gleiche Zeitspanne von 30 Minuten sowie gleiche Parameter wie etwa gleicher Injektionsdruck angewandt. Man erkennt deutlich, dass bei einer Offset-Spannung an Driftröhre 9 von 140 V die Ionenzahl so minimal ist, dass sie gerade noch ausreichend detektiert werden kann, wobei bei einer weiteren Erhöhung der Driftröhrenspannung um 10 V nahezu keine Rekombinationen mehr beobachtet werden, was dafür spricht, dass fast keine Ionen mehr in der Falle gefangen sind.

Wie leicht zu erkennen ist, wird die Auflösung wie erwartet bei flacherer Falle stetig besser und erreicht ein Optimum bei der flachest möglichen Falle. Die kohlenstoffartigen Resonanzen waren noch nie in einer Messung aufgelöst worden. Hingegen sind schon bei einem kleinen Offset deutlich zwei separierte Peaks im Bereich der Kohlenstoff-artigen DR-Resonanzen zu erkennen. Ebenso verhält es sich mit den Stickstoffartigen Resonanzen, die ebenfalls aufgelöst werden konnten.

Zwischen der Messung ohne Offset (0 V) und der ersten Messung mit einem Spannungs-Offset ist eine deutliche Veränderung des Spektrums hin zu besser aufgelösten Resonanzen zu erkennen. Dies liegt vor allem daran, dass durch das Anlegen einer Offset-Spannung an Driftröhre 9 diese zusätzlich in der Spannung stabilisiert wird, wie in in Abbildung (3.14) deutlich wird. So trägt diese Methode der Kühlung neben den physikalischen Kühlungseffekten auch zu einer Verringerung der technischen Einflüsse auf die Auflösung bei.

**Entwicklung der Raumladungskompensation.** Neben den Kühl- und Stabilisierungseffekten bietet die Variante des evaporativen Kühlens eine weitere Verbesserung der Genauigkeit auf Grund der geringeren Raumladungskompensation. Auch für relative Messungen der Resonanzenergien muss eine Korrektur der Kompensation der Raumladung berücksichtigt werden. Nach der Diskussion der Raumladungskompensation in Abschnitt 3.5.1 lässt sich eine höhere Genauigkeit in der Berechnung der effektiven Raumladung am besten erzielen, indem die Raumladungskompensation minimiert wird.

Eine sehr flache Falle mit vergleichsweise wenigen Ionen bietet dazu beste Bedingungen. Abbildung 4.8 zeigt eine Gegenüberstellung der durch die Erhöhung der Spannung an Driftröhre 9 erreichten Auflösung im Maß der vollen Breite auf der Hälfte des Maximums (full width at half maximum - FWHM) mit dem qualitativen Verlauf der Anzahl der Ionen, welche gefolgert wurde aus der Resonanzstärke der beiden für diese Auswertung betrachteten kohlenstoffartigen DR-Resonanzen, und der Verschiebung der Energien der Resonanzen. Hier ist zu erkennen, wie mit abnehmender Ionenzahl sich die scheinbaren Resonanzenergien deutlich erhöhen, was

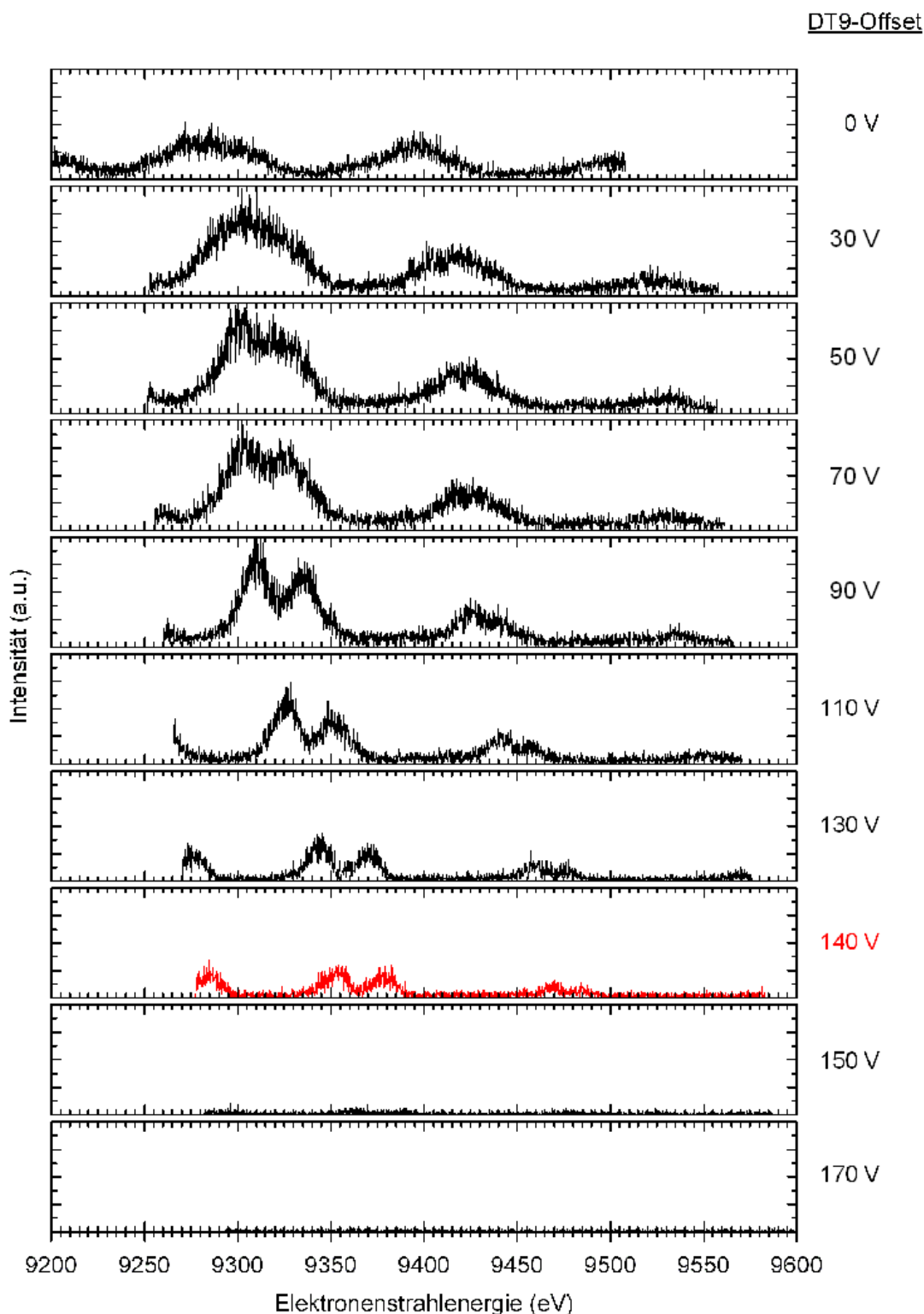


Abbildung 4.7: Entwicklung der Auflösung als Funktion der Offset-Spannung an der zentralen Driftröhre 9 bei einem Elektronenstrahlstrom von 200 mA. Zu erkennen ist eine stetige Auflösungsverbesserung bei gleichzeitiger Abnahme der Anzahl gespeicherter Ionen, was an der Intensität zu erkennen ist. Kurz vor der leeren Falle bei einem Offset von 140 V ist die Auflösung mit 13-17 eV optimal.

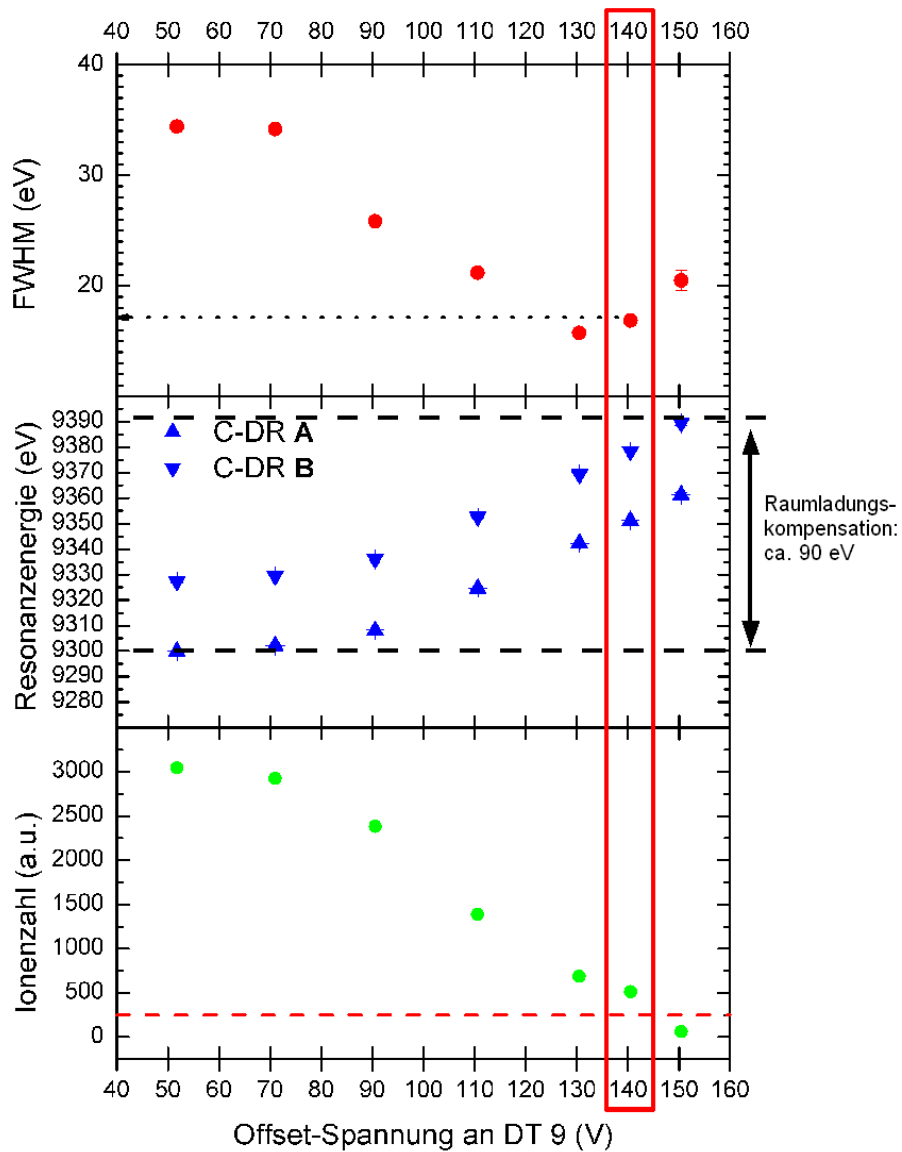


Abbildung 4.8: Effekte des evaporativen Kühlens. (a) Entwicklung der spektralen Auflösung. (b) Verschiebung der Resonanzenergien bei steigender Offset-Spannung an Driftröhre 9, was durch abnehmende Raumladungskompensation zu erklären ist, die aus der Abnahme der Ionenanzahl (c) resultiert. Es ist eine Raumladungskompensation von ca. 90 eV bei einem Elektronenstrahlstrom von 200 mA abzulesen. Die Falle ist bei 140 V Offset-Spannung minimal gefüllt. So wird eine ideale Auflösung erreicht.

auf eine schwächere Raumladungskompensation hindeutet. Die rote gestrichelte Linie im Graphen der Intensitäten zeigt an, ab welcher Schwelle die Falle als nahezu leer angesehen werden kann. Im Bereich der optimalen Auflösung bei 140 V Offset-Spannung ist die Verschiebung sehr nahe an dem Wert, den die wenigen Rest-Ionen in der Falle bei nahezu leerer Falle aufzeigen. Somit kann bei einer Messung mit optimalen Einstellungen zur Kühlung der Ionen auch davon ausgegangen werden, dass die Raumladungskompensation minimal und daher für die Korrektur der relativen Spektren vernachlässigbar klein ist.

**Vor- und Nachteile dieser Kühlmethode.** Die Methode des evaporativen Kühlens durch Anlegen einer Offset-Spannung an die zentrale Fallendrifröhre bietet eine bisher nicht erreichte Auflösung der K-LL DR-Resonanzen in hochgeladenem Krypton und ist daher ein sehr effektives Werkzeug zur Untersuchung energetisch sehr eng benachbarter Prozesse. Durch einen vergleichsweise hohen Strom des Elektronenstrahls, welcher bei dieser Methode eingesetzt werden kann, ist dennoch eine ausreichende Elektronendichte vorhanden, um die Zielionen schnell zu ionisieren und in sie zu rekombinieren, was sich deutlich auf die Zählrate auswirkt. Zwar ist durch die geringe Ionenanzahl in der Falle die Zahl der detektierten Ereignisse stark vermindert, jedoch für eine gute Statistik immer noch ausreichend. Zudem bietet die für relative Resonanzmessungen vernachlässigbare Raumladungskompensation eine bessere Berechenbarkeit der Raumladungskorrekturen.

Die Raumladung selbst wird am besten durch Stromreduzierung vermindert. Die Ionenkompensation bleibt jedoch schlecht kalkulierbar. Dagegen bleibt die Raumladung bei der Methode des evaporativen Kühlens unverändert, da der Elektronenstrahl beliebig eingestellt wird. Die Kompensation nimmt jedoch entscheidend ab, was es gerade für relative Messungen kalkulierbarer macht.

**Einsatzbereich der beiden Kühlmethoden.** Für die absolute Bestimmung der DR-Resonanzenergien ist die Methode der Stromreduzierung zu bevorzugen, da für eine Raumladungsbestimmung der Parameter des Strahlstroms variiert werden muss und damit die Kühlung automatisch über diese Methode erfolgt.

Relative Resonanzmessungen sind dagegen deutlich besser mit einem gezielten evaporativen Kühlen durchzuführen, da die Auflösungsverbesserung effektiver und die Zählrate deutlich höher ist als bei der Stromreduzierungsmethode, dazu ist durch die geringe Raumladungskompensation die Korrektur der relativen Spektren leichter zu berechnen.

## 4.2 Systematische Effekte bei der Resonanzmessung

In früheren Messungen der dielektronischen Rekombination in der Heidelberg-EBIT [62, 70] sind diverse systematische Effekte aufgetreten, welche einen Einfluss auf

die Genauigkeit der Resonanzmessungen haben. So wurde festgestellt, dass sich die Resonanzenergien in Abhängigkeit der Geschwindigkeit und der Richtung der Spannungsrampen, welche an die Driftröhren zur Variation der Elektronenstrahlenergie angelegt wurden, leicht verschieben. Zudem ist es wie bei anderen Experimenten in der EBIT notwendig, die Fallenregion von Barium- und Wolframionen regelmäßig zu entleeren.

### 4.2.1 Abhängigkeiten von der Rampenrichtung und -geschwindigkeit

Für die Genauigkeit besonders wichtig ist eine nähere Betrachtung der Ursache von Asymmetrien der Spektren verschiedener Rampenrichtungen.

Die Abhängigkeit des beobachteten Resonanzspektrums von der Rampenrichtung wurde in früheren Arbeiten zur dielektronischen Rekombination untersucht. So wurde in [62] ein Spektrum selektiv nach der Rampenrichtung ausgewertet. Die Geschwindigkeit der Rampe war mit 90 V/s relativ schnell, so dass die Auswirkungen auch sehr deutlich wurden. In dieser Arbeit von Antonio González Martínez lag bei den Krypton-Messungen der Schwerpunkt vor allem auf den ersten heliumartigen Resonanzen  $1s2s^2$  und  $1s2s2p$ , welche bei aufsteigender Rampe bei Strahlströmen von 20 bis 100 mA konstant um 4,1 V höher als bei absteigender Rampe erschienen, was eingerechnet der Verschiebungseffekte in der Größe von -1,2 V durch kapazitive Aufladung des Spannungsteilers, der Eingangsimpedanz des Voltmeters und der Kapazität des Kabels, welches den Widerstand mit dem Voltmeter verbindet, eine Gesamtverschiebung von 5,3 V hervorruft. Für die  $1s2p^2$ -Resonanz wurde dagegen eine entgegengesetzte Verschiebung von 6,3 V festgestellt, zudem wurden abweichende Photonenausbeuten in den Resonanzen beobachtet, wie in Abbildung 4.9 deutlich wird.

Eine Erklärung der unterschiedlichen Photonenzählraten wurde in der Abnahme von hohen Ladungszuständen durch Rekombination der niedrigeren Zustände bei absteigender Rampe gefunden. Die niedrigeren Ladungszustände werden nämlich als Präkursoren der höheren benötigt, und eine Reduktion ihrer Dichte führt verzögert zur Reduktion der Produktionsrate der höherern Ladungszustände. Diese Ungleichheit der Ladungszustandsverteilung erzeugt nach diesen Überlegungen eine veränderte Raumladungskompensation, was zu Verschiebungen der Resonanzen führt. Es wurde gefolgert, dass bei einer Summation der Ereignisse für auf- und absteigende Spannungsrampe die Effekte jedoch klein seien.

In [70] finden sich nähere Untersuchungen zu den Verzögerungen der ausgegebenen Spannung des Netzgerätes im Vergleich zur Programmierspannung, welche vor allem auf kapazitive Effekte zurückgeführt werden.

Die Untersuchungen zeigten, dass bei Rampengeschwindigkeiten von etwa 10 V/s und weniger (siehe Abbildung 4.10) die Verzögerung der Spannungsausgabe im Vergleich zur Programmierspannung nur noch unwesentlich auftritt und fast nicht mehr zu bestimmen ist. Weiter wurden ebenfalls die Verschiebungen der Resonanzen bei

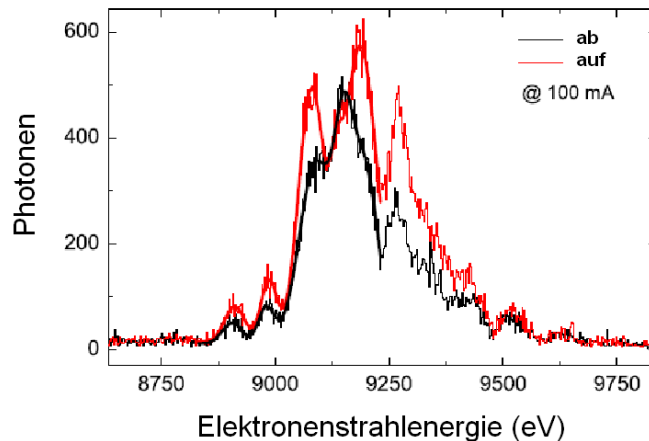


Abbildung 4.9: Vergleich der Resonanzspektren für auf- und absteigende Spannungsrampe bei einem Strahlstrom von 100 mA und einer Rampengeschwindigkeit von 90 V/s aus [62].

verschiedenen Rampenrichtungen untersucht und festgestellt, dass durch Summierung der beiden Rampenrichtungen sich die Fehler durch die Verschiebungen aufheben.

**Weitergehende Untersuchungen.** Die in dieser Arbeit erreichte hohe Auflösung gibt die Möglichkeit, vor allem die oben besprochenen physikalischen Effekte näher zu untersuchen. Auf Grund der Erkenntnisse aus [62] und [70] wurde für die Messungen der Resonanzen eine sehr langsame Spannungsrampe von nur 2 V/s verwendet. Die systematischen Untersuchungen wurden jedoch mit einer Spannungsrampe von 6 V/s durchgeführt. Somit wurden die Effekte klar sichtbar gemacht, ohne die Auflösung wesentlich zu beeinflussen. Das Interesse lag bei diesen Untersuchungen vor allem auf den Resonanzen der höheren Ladungszustände. So wurde bei der flachest möglichen Falle bei einem Strahlstrom von 80 mA, welche bei einem programmierten Spannungsoffset von 60 V an der zentralen Driftröhre gefunden wurde, der Bereich der heliumartigen Resonanzen gesondert untersucht. Zudem wurde bei entgegengesetzten Bedingungen, nämlich einer möglichst tiefen Falle von 1000 V an den Driftröhren 4 und 5 bei gleichem Strahlstrom, der Bereich der helium- bis kohlenstoffartigen Resonanzen betrachtet.

Wie Abbildung 4.11 zeigt, verlaufen die Resonanzspektren der beiden Rampenrichtung nahezu synchron im Bereich eines Ladungszustandes. Bei aufsteigender Rampe (grüne Kurve) sind an einzelnen Stellen jedoch deutlich Abweichungen der Ausbeute im Vergleich zur absteigenden Rampe zu beobachten. Die hohe Auflösung erlaubt eine genauere Studie dieses Bereichs. So kann aus Abbildung 4.12, in welcher die theoretischen Spektren nach Ladungszuständen aufgelöst aufgetragen sind,

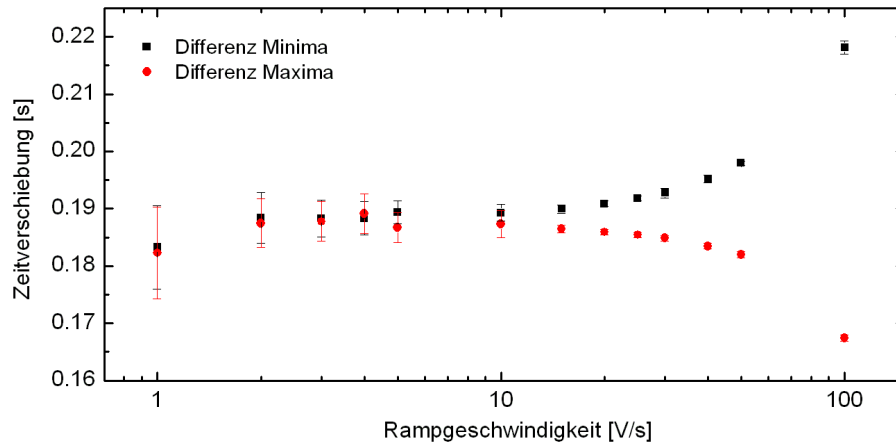


Abbildung 4.10: Relative Verzögerungen der programmierten und gemessenen Spannung an den Driftröhren in Abhängigkeit der Rampengeschwindigkeit [70].

entnommen werden, bei welchen Ladungszuständen die beobachteten Effekte auftreten. Bedingt durch die im Vergleich zu den Untersuchungen in [62] langsame Spannungsrampe ist bei größeren Abständen der verschiedenen Resonanzgruppen kein Unterschied in der Gestalt des Spektrums zu erkennen, wohl aber bei sehr eng benachbarten Resonanzen. Am deutlichsten wird dies im markierten Bereich **A** in Abbildung 4.11: Schon bei der Aufnahme mit schwächerer Auflösung in Teil a) sind Abweichungen zu erkennen, die bei dem hochaufgelösten Spektrum in b) näher identifiziert werden können. Wird aufsteigend von niedrigen Energien zu höheren gescannt, wird nach einigen heliumartigen Resonanzen kurz vor **A** eine starke lithiumartige Resonanz angeregt, worauf direkt weitere heliumartige Resonanzen folgen. Diese heliumartigen Resonanzen sind im Vergleich zur absteigenden Rampe deutlich unterdrückt, was für die These spricht, dass nach einer starken Entvölkerung der heliumartigen Ionen durch die Rekombination der starken lithiumartigen Resonanz nicht schnell genug genügend heliumartige Ionen zur Verfügung stehen, um gleich viele Rekombinationen wie bei absteigender Rampe durchzuführen (vergleiche hierzu auch Abbildung 4.16). In der Übersicht in a) sind zudem bei **B** und **C** die Auswirkungen des Ladungszustandsgemischs von He-, Li- und Be-artigen Resonanzen erkennbar.

In [62] sind die Effekte vor allem bei absteigender Rampe aufgetreten, was damit zusammenhängt, dass hier nicht einzelne „fremde“ Resonanzen in einer Ladungszustands-Resonanz-Gruppe beobachtet wurden, sondern sich durch die schnelle Rampe die Entvölkerungseffekte auf die gesamten Resonanzgruppen auswirkten. Dies spielt bei der hier angelegten langsamen Rampe eine untergeordnete Rolle, da den Ionen genügend Zeit zur Ionisierung bleibt, bis die nächste Gruppe von höheren Energien (d.h. niedrigeren Ladungszuständen) kommend, angeregt wird. Die Beobachtung des Effektes innerhalb einer Ladungszustands-Gruppe, in der einzelne höhere La-

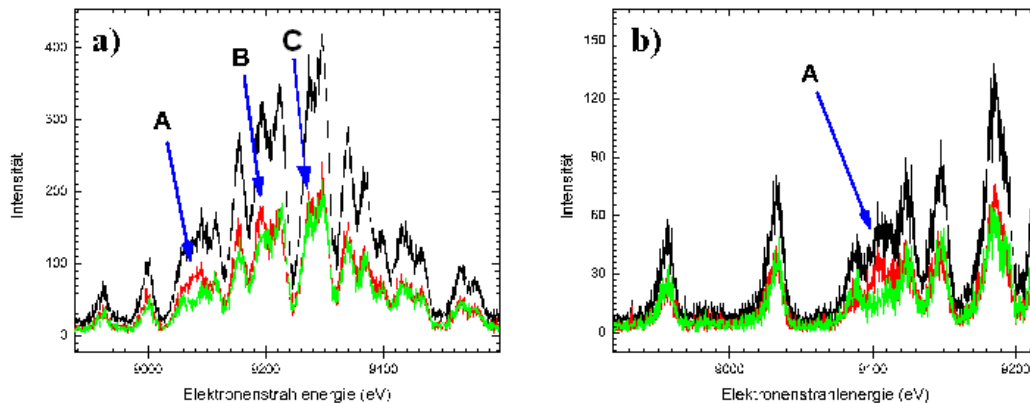


Abbildung 4.11: Auswertung der Richtung der Spannungsrampe. In beiden Teilen der Abbildung stellt die schwarze Kurve die Summe der Daten, die grüne Kurve die Messdaten aufgenommen bei ansteigender Spannung und die rote Kurve bei absteigender Spannung aufgenommene Messdaten dar. a) Messung von He- bis C-artigen Resonanzen bei 80 mA Strahlstrom und einer Falltiefe von 1000 V. b) Detail-Messung der He- und Li-artigen Resonanzen bei 80 mA Strahlstrom und einer Offset-Spannung von ca. 60 V an DT9. Es sind jeweils die im Text erklärten Abweichungen zu erkennen.

dungszustände auftreten, ist nur bei aufsteigender Rampe möglich, da nur in dieser Richtung auf kurzem Wege von niedrigeren Ladungszuständen zu höheren gescannt wird, ohne die Gruppen, welche zu großen Abstand haben, zu verlassen.

Durch die in diesen Untersuchungen gemachten Beobachtungen zu Auswirkungen der Rampenrichtung auf die Photonenzahl werden die Vermutungen in [62] bezüglich der unterschiedlichen Gestalt der Spektren, für welche Entvölkerungen von Ladungszuständen verantwortlich gemacht werden, bestätigt. Zudem wurde deutlich, dass bei einer möglichst langsamen Rampe die Ionen in den meisten Fällen, vor allem zwischen den Ladungszustandsgruppen, schnell genug wieder ionisiert werden, um praktisch identische Spektren zu zeigen.

## 4.2.2 Abhängigkeiten von Zielgasunreinheiten und von deren Beseitigung

Während dem Betrieb der Elektronenkanone entsteht ein ständiger Fluss von Wolfram und Barium in das Fallenvolumen. Diese beiden Elemente sind mit den Kernladungszahlen 56 für Barium und 74 für Wolfram sowie den Massezahlen 137 bzw. 183 vergleichsweise schwere Elemente, weshalb sie leichtere Elemente aus der Potentialfalle verdrängen. Krypton ist mit einer Kernladungszahl von 36 und einer Massezahl von 83 ein deutlich leichteres Element und so wird im Laufe der Zeit die Anzahl der



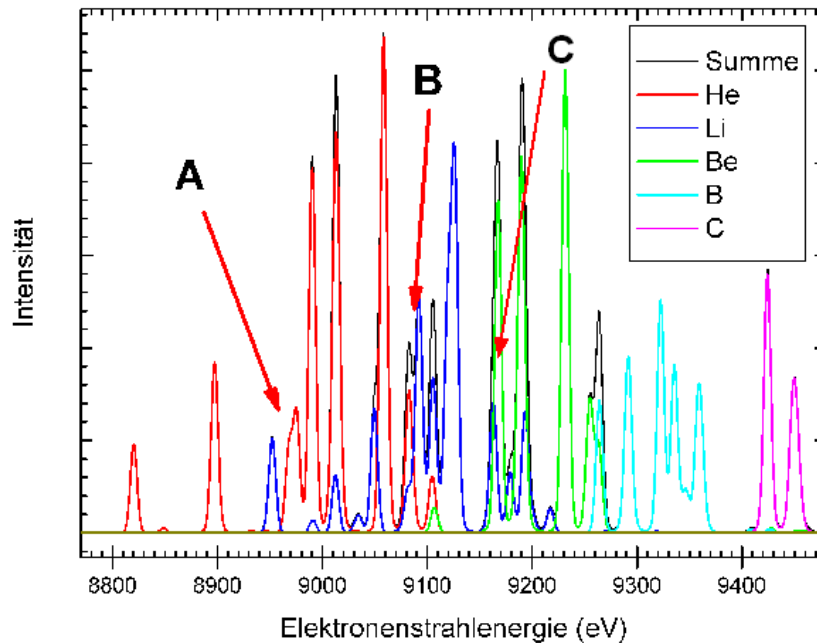


Abbildung 4.12: Theoretisches Spektrum bei einer Auflösung von 9 eV nach [59]. Die Resonanzen sind nach zugehörigem Ladungszustand farblich gekennzeichnet.

Krypton-Ionen in der Falle von dieser systematischen Verunreinigung beeinflusst. Eine stetige Abnahme der rekombinierenden Krypton-Ionen in der Falle hätte die Folge, dass weniger Photonen detektiert und so die gemessenen Resonanzstärken verfälscht würden. Zudem würde sich die Verdrängung der Krypton-Ionen schnell kritisch auf die Beobachtbarkeit der Resonanzen durch eine sehr geringe Zählrate auswirken.

**Durchführung und Optimierung von „Dumps“.** Um diesen negativen Einfluss zu minimieren, wird das Fallenvolumen in kurzen Abständen von den Verunreinigungen befreit. Dies geschieht durch einen sogenannten „Dump“, indem die Spannung an der zentralen Driftröhre 9 kurzzeitig stark erhöht wird (meist zu einer Spannung von 500 bis 1000 V), wodurch alle Ionen die Falle verlassen und von ihrem Zentrum abgestoßen werden. Auf Grund und des relativ zum Fallenvakuum hohen Injektionsdrucks sammelt sich Krypton wesentlich schneller in der EBIT als die verunreinigenden Elemente. Erst nach einer gewissen Zeit nach einem solchen Dump tritt der negative Effekt der Verunreinigung spürbar auf. Bevor dies geschieht, wird wieder ein Dump gesetzt.

Bei einem Dump wird die Spannungsrampe aus praktischen Gründen weiter gefahren. In dieser sehr kurzen Zeit nach dem Dump befinden sich jedoch nur sehr

wenig Krypton in der Falle, welches für Rekombinationen zur Verfügung steht. Zudem ist zum Vergleich des Ladungszustandsgemischs des normalen Betriebs direkt nach dem Dump nur neutrales Krypton vorhanden, welches erst ionisiert werden muss. All dies hat ebenfalls Auswirkungen auf die Zählrate, wodurch die gemessenen Ergebnisse beeinflusst werden.

Um dieses Problem zu beheben, sind zwei Varianten der Verteilung der Dumps denkbar: in der ersten Variante wird der Dump jeweils zu Beginn einer Spannungsrampe gesetzt und die Spannungsrampe einige Volt vor den interessanten Ereignissen begonnen, so dass die verfälschenden Effekte nur in diesem Anfangsabschnitt zu erwarten sind und im Bereich der interessanten Resonanzen wieder genügend ionisiertes Krypton für die Experimente vorliegt. Diese Methode birgt jedoch ebenfalls Probleme, denn nach ihr ist man in der Zeit eines Zyklus der Spannungsrampe stark eingeschränkt, da diese vollständig beendet sein muss, bevor das Barium und Wolfram spürbar werden. Wie im vorherigen Abschnitt erläutert wurde, ist man jedoch an einer sehr langsamen Spannungsrampe interessiert. Zudem ist der Prozess der Verdrängung kein plötzlicher, sondern ein kontinuierlich ansteigender, was bedeutet, dass zu jedem Zeitpunkt der Spannungsrampe mit jeweils etwa gleichen, jedoch im Vergleich zu anderen Zeitpunkten verschiedenen Bedingungen in der Falle gemessen wurde, was sich bei einer langen Messzeit ebenfalls spürbar auf die Messergebnisse auswirken würde.

Alternativ ist es möglich, die Dumps quasi statistisch verteilt über die gesamte Spannungsrampe zu platzieren. Dies ist unter anderem dadurch realisierbar, in dem eine optimale Periode für den Dump ausgewählt wird, und diese Zeitspanne so der Periode eines Rampendurchlaufs angepasst wird, dass über eine längere Messdauer die Dumps nahezu gleichverteilt über dem gesamten Bereich liegen. Um dies zu realisieren, wurden optimale Dumping-Perioden für längere Messdauern berechnet. In den vorgestellten Experimenten wurde nach dieser Methode verfahren und meist eine Dumping-Periode von etwa 273 s eingestellt, für die in Abbildung 4.13 die Verteilung über eine typische Rampenperiode von 450 s und eine Messdauer von 6 h dargestellt ist. Da oft die Gesamtmessdauern 12, 18 oder 24 h betragen, gibt diese Verteilung gut die Verteilung der Dumps auch solcher Messungen wieder.

**Auswirkungen der Dumps auf die Resonanzen.** Neben der geringeren Zählrate direkt nach einem Dump wird auch ein physikalischer Einfluss auf die gemessenen Resonanzen erwartet, denn weniger Ionen in der Falle bedeutet auch eine geringere Raumladungskompensation. Die Kompensation durch die Ionen hat einen geringfügigen Einfluss auf die Lage der Resonanzen. In der Regel herrscht in der Falle ein Gleichgewicht der Ionenzahl, weshalb die Raumladungskompensation für ein Experiment als konstant angenommen wird. Ändert sich diese jedoch, verschieben sich auch die zu diesem Zeitpunkt gemessenen Resonanzen um einen kleinen Betrag. Die Daten bei konstanter Raumladungskompensation werden ebenso wie die Daten direkt nach einem Dump aufaddiert, um so das komplette Messergebnis zu erhalten. Während sich die Auswirkungen auf die Zählraten durch die quasi gleichverteilten

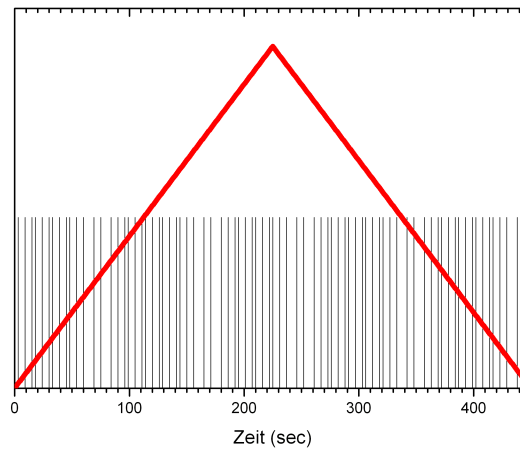


Abbildung 4.13: Beispiel der Verteilung der Dumps über eine Messung. Die Dumps sind über die Messdauer quasi gleichverteilt über den gesamten Messbereich. Parameter hier: Gesamtmessdauer: 6 h, Dumping-Periode: 273 s, Rampenperiode: 450 s

Dumps nahezu egalisieren lassen, sollten sich nach den Überlegungen die bei leicht verschobenen Energien gemessenen Resonanzen auf das Gesamtergebnis der Resonanz so auswirken, dass diese zum einen leicht verbreitert werden, zum anderen sich das Zentrum der Resonanz zu höheren Energien verschiebt. Dies wird erwartet, da eine geringere Raumladungskompensation eine höhere effektive Raumladung bedeutet.

Um die Auswirkungen zu untersuchen, wurde eine zusätzliche Spannung simultan mit den Werten für die Elektronenstrahlenergie und Photonenergien aufgenommen, welche von einer Sägezahnfunktion generiert wurde, die den Beginn ihres Zyklusses mit einem Dump gemeinsam hat. So ist an Hand dieser Spannung die nach einem Dump verstrichene Zeit ablesbar.

Die so aufgenommenen Werte wurden in gesonderten Auswertungen in Abhängigkeit der Zeit nach einem Dump zusammengestellt. Addiert man die gesamten Ereignisse in dem Intervall der Photonenenergie, in welchem radiative und resonante Rekombination von Krypton erscheint, in kleinen Zeitintervallen, ist die Entwicklung der Ionenanzahl nach einem Dump qualitativ ablesbar, wie Abbildung 4.14 zeigt. Hier sind zudem die Ionenpopulationsentwicklungen bei einer sehr tiefen Falle von 1000 V und der flachest möglichen Falle für den hier verwendeten Strahlstrom von 100 mA dargestellt, welche bei einem Spannungs-Offset von 60 V an Driftröhre 9 gefunden wurde. In beiden Fällen ist eine Sättigung der Ionenanzahl nach etwa 30 s zu erkennen. Bei einer sehr flachen Falle ist zudem zu erkennen, dass nach dieser Zeit die Anzahl der Photonenergien leicht, jedoch stetig abnimmt, was auf Grund der Verdrängung des Kryptions durch Barium und Wolfram zu erklären ist.

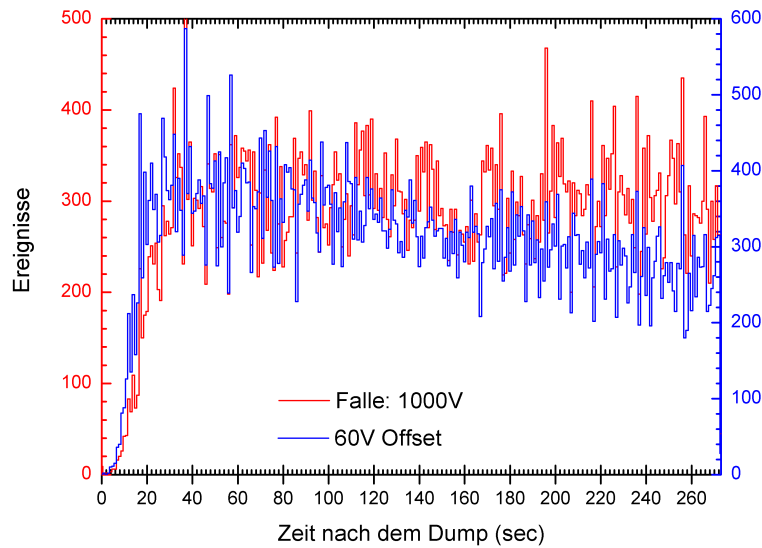


Abbildung 4.14: Entwicklung der Ionenzahl nach einem Dump. Aufgezeigt sind die im Intervall einer Sekunde addierten Photonenergebnisse im Bereich der Krypton RR und DR bei einer tiefen Falle von 1000 V und bei einer flachen Falle mit einem Spannungs-Offset von 60 V an Driftröhre 9, jeweils mit einem Strahlstrom von 80 mA gemessen.

Zur Untersuchung der Auswirkungen auf die Resonanzlagen wurden die ersten beiden heliumartigen Resonanzen in drei verschiedenen Datensätzen ausgewertet. Im ersten Datensatz wurden nur die Daten direkt nach einem Dump berücksichtigt, der zweite enthält nur die mit einem Ionenzahlgleichgewicht in der Falle und der dritte schließlich alle Daten, wie sie in der Auswertung der Resonanzen auch verwendet werden. In Abbildung 4.15 ist zu sehen, welche Resonanzenergien für die jeweiligen Datensätze festgestellt wurden. Wie erwartet liegt die scheinbare Resonanzenergie des ersten Datensatzes der Daten direkt nach dem Dump höher als die der anderen beiden, da hier die Raumladung nur sehr schwach kompensiert ist. Dieser Effekt ist aber auf Grund der schwachen Statistik nicht besonders belegbar.

**Entwicklung der Ladungszustände in der EBIT.** In einigen numerischen Rechnungen wurden die Entwicklungen der Ladungszustände innerhalb der EBIT etwa für Argon [60, 76] und Thorium [88] simuliert und über die Zählrate extrahierter Ionen gemessen [60]. Die Messungen der Entwicklung der Ladungszustände stützt sich meist auf Methoden mit extrahierten Ionen.

Mit der hier vorgestellten Methode der zeitabhängigen Auswertung der Resonanzen lässt sich prinzipiell auch die zeitliche Entwicklung der Rekombinationen in

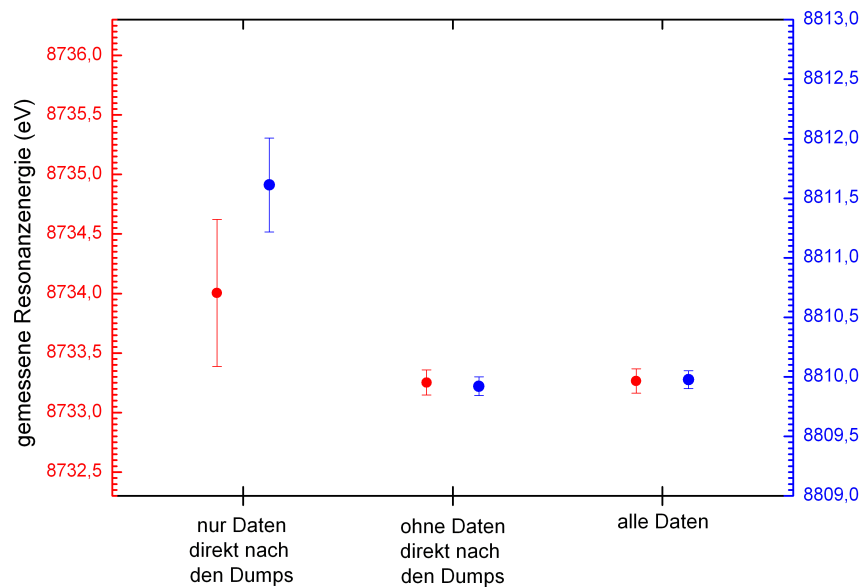


Abbildung 4.15: Resonanzenergien einer heliumartigen DR-Resonanz ermittelt mit unterschiedlichen Datensätzen in Abhängigkeit der Zeit nach einem Dump.

die einzelnen Ladungszustände in der EBIT qualitativ untersuchen. Da nach einem Dump die Falle nahezu vollständig geleert ist, kann man mit der zeitlich pakettierten Summation der Ereignisse, welche in dem interessanten Photonenintervall und in dem Energieintervall der Resonanzen eines bestimmten Ladungszustandes liegen, die zeitliche Entwicklung der Zählrate und damit indirekt die zeitliche Entwicklung der Ladungszustände *in* der EBIT beobachten, ohne Ionen zu extrahieren.

Die Resonanzen lassen sich in Ladungszustandsgruppen einteilen, in denen ein bestimmter Ladungszustand dominant auftritt und „fremde“ Ladungszustände nur vereinzelt spürbar zu beobachten sind, wie Abbildung 4.12 und die Überlegungen aus dem vorherigen Abschnitt zeigen. Die Daten einer längeren Messreihe mit nach beschriebener Methode verteilten Dumps wurden so sekundenweise für die einzelnen Resonanzgruppen der He- bis N-artigen Resonanzen aufaddiert.

Abbildung 4.16 zeigt eine Zusammenstellung der zeitlichen Entwicklung der einzelnen Gruppen der Resonanzen verschiedener Ladungszustände. Für eine bessere Vergleichbarkeit wurden die einzelnen Kurven auf gleiches Sättigungsniveau skaliert. Es ist deutlich zu erkennen, wie die Resonanzen höherer Ladungszustände verzögert auftreten gegenüber den niedrigeren Ladungszuständen. Dies liegt an der größeren Anzahl von Ionisierungsschritten, welche zum einen für die grundsätzliche Ionisierung in so hohe Ladungszustände notwendig sind. Eine so lange Verzögerung lässt sich jedoch nicht aus der reinen Ionisation erklären, viel mehr wird die Ionisation in höchste Ladungszustände dadurch erschwert, dass im betrachteten Energiebereich

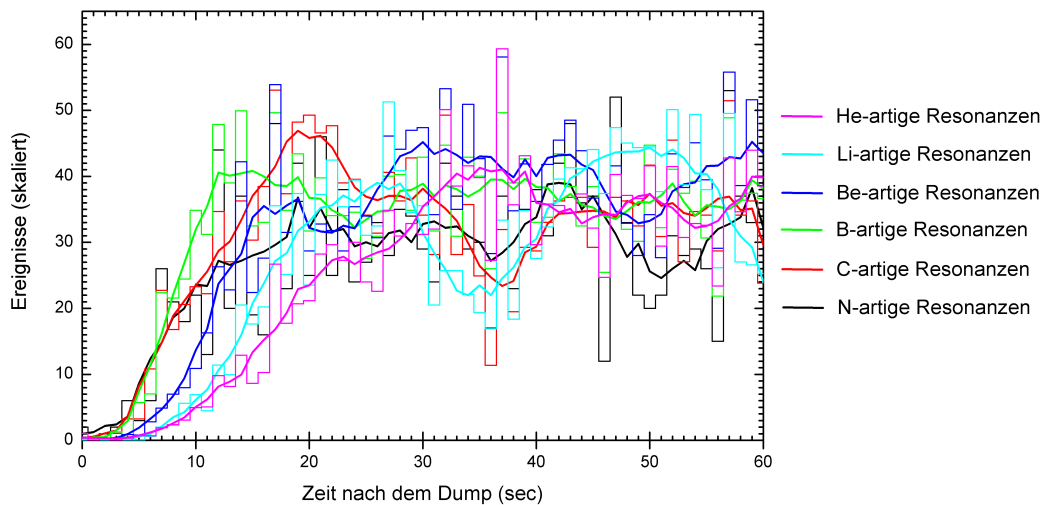


Abbildung 4.16: Entwicklung der Rekombinationen in die verschiedenen Ladungszustände in Abhängigkeit der Zeit nach einem Dump.

viele Rekombinationsresonanzen auftraten und daher die höheren Ladungszustände sehr schnell in tiefere rekombinieren.

### 4.2.3 Erkenntnisse aus den vorbereitenden Untersuchungen für die folgenden Experimente

Die in den vorbereitenden Untersuchungen gewonnenen Erkenntnisse führten zu den optimalen Einstellungen für die weiteren Experimente.

So wurde zur Auflösungsverbesserung die Methode des evaporativen Kühlens angewandt. Um eine ausreichende Zählrate zu erhalten, wurde in den Hauptmessungen ein Elektronenstrahlstrom von 200 mA verwendet, was zu einer möglichst flachen Falle bei einem Spannungs-Offset von 140 V (programmiert: 130 V) führt. Nach der Diskussion der Effekte der verschiedenen Rampenrichtung wurde wie auch in [62] und [70] gefolgert, dass sich bei einer Summation der Daten die auftretenden Asymmetrien aufheben. Um die Abweichungen zwischen den Spektren der beiden Rampenrichtungen zu minimieren, wurde bei einer sehr langsamen Rampe von 2 V/s gemessen. Die Verschiebungseffekte, welche durch die Einbeziehung der Daten direkt nach einem Dump entstehen, sind wie gezeigt für eine sehr flache Falle minimal, da sie sich durch die unterschiedliche Raumladungskompensation bemerkbar machen, welche auf Grund der geringen Anzahl der Ionen in der Falle bei der angewandten Kühlmethode für relative Resonanzmessungen vernachlässigbar ist. Somit wurden diese Daten nicht aus der Auswertung herausgenommen, sondern zur Erhöhung der Zählrate in die Betrachtungen einbezogen. Meist wurde eine Rampenperiode von

450 s oder einem Vielfachen von 300 s angewandt, was zu einer optimalen Dumping-Periode von 273 s führte.

Zur Bestätigung der erzielten Ergebnisse wurden zudem Spektren bei einem Strahlstrom von 100 mA und einer dabei bestmöglichen Falle mit einer Offset-Spannung von programmierten 75 V bzw. 80 V gemessen, ebenso wie viele Testspektren in den dazwischen liegenden Bereichen.





# Kapitel 5

## Messungen der dielektronischen K-LL und erster Nachweis der KL-LLL trielektronischen Rekombination

Die in Kapitel 4 erzielten Erkenntnisse zur Auflösungsverbesserung und anderen systematischen Effekten bei der Messung der dielektronischen Rekombination machten es möglich, die bisher genaueste Messung der Resonanzen im K-LL Spektrum von Krypton durchzuführen. Es wurde der Energiebereich der Elektronen untersucht, in welchem resonante Rekombination eines freien Elektrons in die L-Schale auftritt bei gleichzeitiger Anregung eines K-Schalen-Elektrons in die L-Schale für dielektronische Rekombination und zusätzlich noch eine gleichzeitige Anregungen von L-Schalen-Elektronen auf eine höhere L-Unterschale, was dem Prozess der tri- bzw. quadreelektronischen Rekombination entspricht. Im folgenden werden die Ergebnisse der Resonanzmessungen sortiert nach der Ordnung des Prozesses dargestellt und diskutiert.

### 5.1 Dielektronische Rekombination

Der Prozess der dielektronischen Rekombination (DR) ist der einfachste korrelierte Rekombinationsprozess eines freien Elektrons in ein hochgeladenes Ion. Die bei dem Einfang frei werdene Energie wird durch Elektron-Elektron-Wechselwirkung auf ein gebundenes Elektron übertragen, welches so angeregt wird.

Nach Berechnungen [59] erscheinen die K-LL Resonanzen in einem Elektronenstrahl-Energiebereich zwischen 8,7 und 9,8 keV.

Um einen Überblick über den gesamten Bereich der K-LL Resonanzen zu erhalten, wurden zwei Messreihen mit hoher Statistik bei unterschiedlichen Parametern über den genannten Energiebereich der helium- bis sauerstoffartigen Resonanzen

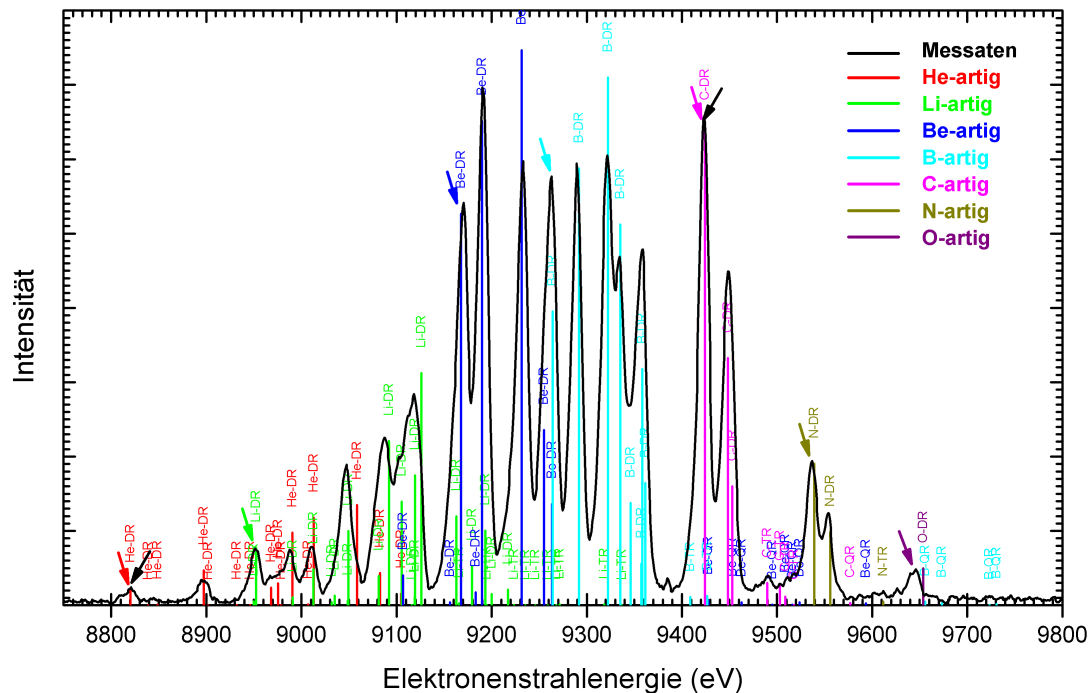


Abbildung 5.1: Spektrum der resonanten Rekombinationen im Bereich der helium- bis sauerstoffartigen K-LL DR Resonanzen im Vergleich zu Berechnungen nach [59]. Farben markieren die Ladungszustände vorhergesagter Resonanzen. Die Pfeile zeigen die Normierungs- und Skalierungspunkte an (siehe Text).

durchgeführt. Die hier dargestellten Ergebnisse beziehen sich auf die Messreihe, welche mit einem Strahlstrom von 200 mA und einer Bias-Spannung an der zentralen Driftröhre von 140 V durchgeführt wurde. Für die Rampe der Elektronenstrahlenergie wurde eine Geschwindigkeit von 2 V/s gewählt, um beeinflussende Effekte durch eine schnelle Energierampe zu minimieren. Die gemessenen Resonanzen konnten mit Gauß-Funktionen einer Halbwertsbreite von 16,7 eV angefitet werden, was einer Auflösungsverbesserung von einem Faktor 2,2 gegenüber der bisher besten Messung von Radtke et al. [18] entspricht. Die zweite Messreihe bestätigt die vorgestellten Ergebnisse voll. Sie wurde bei einem Strahlstrom von 100 mA und einer angelegten Biasspannung an DT9 von 85 V durchgeführt.

**Ergebnisse und Vergleich mit theoretischen Werten.** Abbildung 5.1 zeigt das aufgenommene Rekombinationsspektrum der K-LL Resonanzen in Krypton in einem Vergleich mit den theoretischen Werten der Resonanzenergien und -stärken [59]. Wie in Abschnitt 3.8 beschrieben mussten die Werte nach der Projektion und

Kalibration noch auf Grund der Einflüsse der Raumladung nach Gleichung 3.9 korrigiert werden. Dazu kommen die Korrekturen für die Kompensation der Raumladung durch die Ionen. Den Überlegungen in Abschnitt 4.1.2 zufolge sind diese Einflüsse bei der angewandten Methode des evaporativen Kühlens auf die relativen Spektren bei vergleichsweise kleinen untersuchten Energieintervallen innerhalb der Auflösung vernachlässigbar. Dies gilt jedoch nicht für absolute Energiebestimmungen, weshalb das gemessene Spektrum gegenüber den theoretischen Werten verschoben ist. Um diese Verschiebung zu korrigieren, wurde das Zentrum der ersten heliumartigen Resonanz, der  $1s2s^2$ -Resonanz, auf den theoretischen Wert dieser Resonanz um 87,13 eV verschoben.

Bei dieser Messung wurde mit dem gesamten K-LL Spektrum ein relativ großer Energiebereich von  $\Delta_{E_e} = 1,2$  keV betrachtet, weshalb sich die verzerrenden Effekte so stark bemerkbar machen, dass eine Raumladungskorrektur ohne Beachtung der Ionenkompensation das Spektrum gegenüber der Erwartung als zu weit gestreckt wiedergibt. Um einen Vergleich mit theoretischen Werten anstellen zu können, müssen die Effekte der Ionenkompensation berücksichtigt werden, indem die gemessenen Werte auf das theoretisch erwartete Spektrum reskaliert werden. Hierzu wurde neben der heliumartigen  $1s2s^2$ -Resonanz als zweiter Fixpunkt die erste kohlenstoffartige DR-Resonanz gewählt und das Spektrum auf diese beiden Linien ausgerichtet. Die Wahl fiel auf diese Linie, da sie zum einen sehr gut separiert und deutlich zu messen ist, zum anderen sind die Spektren der Detailbetrachtung für die höheren Resonanzen ebenfalls auf diese Resonanz normiert, was in den folgenden Abschnitten näher erläutert wird. In Abbildung 5.1 sind die beiden Skalierungslinien mit schwarzen Pfeilen gekennzeichnet.

Je nach Einstellung der EBIT werden bestimmte Ladungszustände bevorzugt produziert. So kann etwa durch Veränderung des Injektionsdrucks der Ladungsaustausch zwischen den Ionen und den neutralen Atomen gefördert werden, was die Produktion höchst geladener Ionen unterdrückt und die der leicht weniger geladenen fördert. Während bei den systematischen Untersuchungen in Kapitel 4 der Fokus auf die heliumartigen Resonanzen lag, wurde der Schwerpunkt der hier vorgestellten Messungen auf die niedriger geladenen Krypton-Ionen gelegt, also auf den Bereich der lithium- bis sauerstoffartigen Resonanzen, da dieser Bereich in früheren Messungen am wenigsten gut aufgelöst wurde. Zudem werden hier separate Resonanzen höherer Ordnung erwartet, wie die folgenden Abschnitte zeigen. Auf Grund der individuellen Verteilung der Ladungszustände wurden die theoretischen Werte für die Resonanzstärken pro Ladungszustand jeweils auf eine gut separierte Resonanz skaliert, um einen besseren Vergleich der Theorie mit den Messwerten in Abbildung 5.1 zuzulassen. Auch hier wurden die Referenz-Resonanzen für die Skalierungen mit kleinen Pfeilen, diesmal jeweils in den Farben der theoretischen Resonanzlinien, gekennzeichnet.

**Linienidentifikation.** Die hohe spektrale Auflösung erlaubt die Auflösung einer Vielzahl von Resonanzlinien. Einige Resonanzen ähnlicher Stärke sind jedoch eng

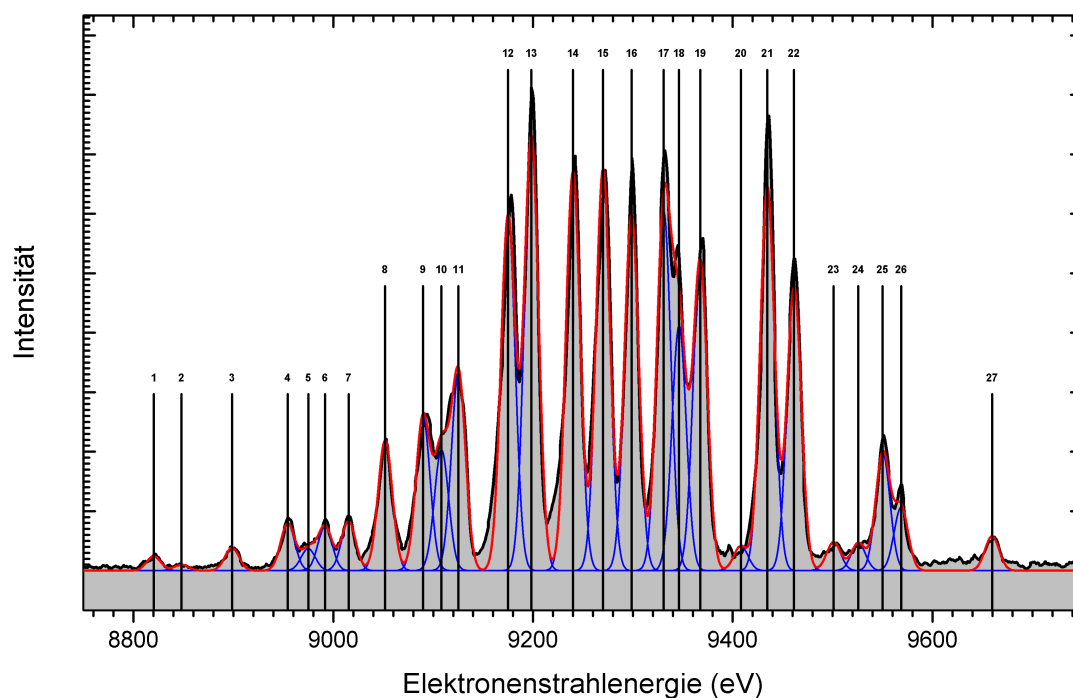


Abbildung 5.2: 27 separierte Linien im K-LL Resonanzspektrum von Krypton. Die Bezeichnungen verweisen auf Werte und Identifikationen in Tabelle 5.1.

benachbart zu anderen, so dass nicht immer eine eindeutige Zuordnung möglich ist. Abbildung 5.2 zeigt 27 aufgelöste Linien, welche im aufgenommenen Spektrum angefitet werden konnten. In Tabelle 5.1 sind die gemessenen Linienzentren zusammengestellt, wie sie nach der Normierung auf die  $1s2s^2$ -Resonanz und anschließender Reskalierung mit Hilfe der ersten kohlenstoffartigen Resonanz gefunden wurden. Durch einen Vergleich mit berechneten Resonanzen entsprechender Stärke wurde eine Identifikation der Linien vorgenommen.

Sowohl in der Abbildung als auch im Vergleich der Resonanzenergien in Tabelle 5.1 ist eine gute Übereinstimmung der gemessenen Resonanzen mit den theoretischen Werten zu erkennen. Mit Ausnahme der Linie Nr. 20 konnten zu allen gefitteten Linien eindeutig Resonanzen zugeordnet werden. Bei den Linien mit den Nummern 8 und 15 war die Identifikation erschwert, da sich in der Umgebung der gemessenen Resonanz nach der Theorie jeweils zwei ähnlich starke Resonanzen befinden, daher sind diese in der Tabelle mit einem Stern gekennzeichnet und beide in Betracht kommenden Rekombinationskanäle aufgezeigt. Ein weiteres Indiz für die gute Identifikation liefert die Messung der Photonenenergie, die im nächsten Abschnitt dargestellt wird.

Tabelle 5.1: Gemessene Elektronenstrahl-Energien der dielektronischen Resonanzen in helium- bis sauerstoffartigem Krypton bei einem Elektronenstrahlstrom von 200mA und einer Spannung von +130V an Driftröhre 9. Die Halbwertsbreite der angefitzten Kurven beträgt 16,7eV.

Nr.	Resonanz	Zwischenzustand	$E_{res,Exp_{kor.}}$ [eV]	$E_{res,theo}$ [eV]	$\Delta_{E_e}$ [eV]
1	He-DR	$[(1s(2s^2)_0]_{1/2}$	8820,25(60)	8820,25	$\stackrel{!}{=} 0$
2	He-DR	$[(1s2s)_1 2p_{1/2}]_{3/2}$	8847,56(1,3)	8848,51	0,95(1,3)
3	He-DR	$[(1s2s)_0 2p_{1/2}]_{1/2}$	8897,33(43)	8897,31	-0,02(43)
4	Li-DR	$[1s(2s^2)_0 2p_{1/2}]_1$	8952,16(35)	8952,34	0,18(35)
5	He-DR	$[(1s2s)_0 2p_{3/2}]_{3/2}$	8972,31(88)	8975,35	3,04(88)
6	He-DR	$[(1s2p_{1/2})_1 2p_{3/2}]_{5/2}$	8988,88(46)	8990,37	1,49(46)
7	He-DR	$[(1s2p_{1/2})_0 2p_{3/2}]_{3/2}$	9012,02(31)	9013,11	1,09(31)
8	Li-DR*	$[((1s2s)_1 2p_{1/2})_{3/2} 2p_{3/2}]_3$	9048,00(22)	9049,46	1,46(22)
	He - DR*	$[1s(2p_{3/2}^2)_2]_{5/2}$		9058,37	10,01(22)
9	Li-DR	$[((1s2s)_1 2p_{1/2})_{3/2} 2p_{3/2}]_2$	9085,21(24)	9091,99	6,78(24)
10	Li-DR	$[((1s2s)_1 2p_{1/2})_{3/2} 2p_{3/2}]_1$	9103,41(35)	9105,45	2,04(35)
11	Li-DR	$[((1s2s)_0 2p_{1/2})_{1/2} 2p_{3/2}]_2$	9120,10(23)	9119,37	-0,73(23)
12	Be-DR	$[(1s(2s^2)_0 2p_{1/2})_1 2p_{3/2}]_{5/2}$	9168,86(20)	9167,60	-1,26(20)
13	Be-DR	$[(1s(2s^2)_0 2p_{1/2})_1 2p_{3/2}]_{3/2}$	9191,83(20)	9189,82	-2,01(20)
14	Be-DR	$[1s(2s^2)_0 (2p_{3/2}^2)_2]_{5/2}$	9232,75(20)	9231,53	-1,22(20)
15	B-DR*	$[1s(2s^2)_0 (2p_{1/2}^2)_0 2p_{3/2}]_2$	9262,34(20)	9264,13	1,79(20)
	Be - DR*	$[1s(2s^2)_0 (2p_{3/2}^2)_2]_{3/2}$		9254,94	-7,4(20)
16	B-DR	$[1s(2s^2)_0 (2p_{1/2})^2 2p_{3/2}]_1$	9290,70(20)	9291,56	0,86(20)
17	B-DR	$[(1s(2s^2)_0 2p_{1/2})_1 (2p_{3/2}^2)_2]_2$	9322,34(22)	9322,45	0,11(22)
18	B-DR	$[(1s(2s^2)_0 2p_{1/2})_1 (2p_{3/2}^2)_2]_3$	9337,41(27)	9335,50	-1,91(27)
19	B-DR	$[(1s(2s^2)_0 2p_{1/2})_0 (2p_{3/2}^2)_2]_2$	9358,18(20)	9358,41	0,23(20)
20	-	-	9398,19(53)	-	-
21	C-DR	$[1s(2s^2)_0 2p_{1/2}^2 (2p_{3/2}^2)_2]_{5/2}$	9424,21(20)	9424,21	$\stackrel{!}{=} 0$
22	C-DR	$[1s(2s^2)_0 2p_{1/2}^2 (2p_{3/2}^2)_2]_{3/2}$	9450,55(20)	9448,51	-2,04(20)
23	C-TR	$[(1s(2s^2)_0 2p_{1/2})_0 2p_{3/2}^3]_{3/2}$	9489,39(48)	9489,83	0,44(48)
24	C-TR*	$[(1s(2s^2)_0 2p_{1/2})_1 2p_{3/2}^3]_{1/2}$	9513,74(52)	9508,84	-4,9(52)
25	N-DR	$[1s(2s^2)_0 (2p_{1/2}^2)_0 2p_{3/2}^3]_2$	9537,77(26)	9539,11	1,34(26)
26	N-DR	$[1s(2s^2)_0 (2p_{1/2}^2)_0 2p_{3/2}^3]_1$	9555,90(34)	9555,85	-0,05(34)
27	O-DR	$[1s(2s^2)_0 (2p_{1/2}^2)_0 (2p_{3/2}^4)_0]_{1/2}$	9645,50(37)	9653,82	8,32(37)

Auch die auf die jeweilige Normierungslinie skalierten Resonanzstärken werden in den meisten Fällen gut wiedergegeben, wobei hier die Einflüsse überlagernder Linien zu beachten sind. Bereits in dieser Übersichtsmessung sind eindeutige trielektronische Resonanzen in kohlenstoffartigem Krypton zu erkennen, auf die im nächsten Abschnitt näher eingegangen wird. Überraschend groß ist jedoch die Abweichung der gemessenen zur theoretischen sauerstoffartigen DR-Resonanz von 8,32 eV. Auch mit der Annahme der Verzerrungen durch die Raumladungskompensation ist eine Abweichung dieser Größe nicht zu erklären, welche in allen untersuchten Spektren auftritt. Eine mögliche Erklärung kann in der komplizierteren Rechnung der Zustände liegen, da bei sauerstoffartigen Resonanzen die meisten Elektronen der hier gerechneten Ionen involviert und somit mehrere Korrelationen beachtet werden müssen.

**Relaxationsphotonen.** Zur Identifikation der Linien können auch die Energien der bei der Relaxation des angeregten Zwischenzustandes ausgesandten Photonen beitragen. Diese Energie kann bestimmt werden, indem im 2D-Graph der Photonenenergie in Abhängigkeit der Strahlenergie (Abb. 3.7) Auswahlbereiche um die identifizierten Resonanzen gebildet und diese auf die Photonenenergie projiziert werden. Auch wenn die Auflösung des Germaniumdetektors die Genauigkeit der Energiebestimmung einschränkt, können durch Kurvenfits die Photonenenergien recht genau bestimmt werden. Um diese Daten mit theoretischen Vorhersagen zu vergleichen, wurde ein gewichtetes Mittel der berechneten Photonenenergien [59] aller Relaxationskanäle des jeweiligen angeregten Zustandes gebildet und so ein theoretischer Wert für die erwartete Energie ermittelt. Wie Abbildung 5.3 zeigt, gibt die Messung die berechneten Werte in sehr guter Übereinstimmung wieder. In Tabelle 5.1 sind die errechneten und gemessenen Photonenenergien und ihre Abweichungen zusammengestellt. Die Abweichungen zwischen den Messergebnissen und der Theorie betragen zwischen 0,04% und 0,7%. Diese gute Übereinstimmung der Photonenenergien ist eine deutliche Bestätigung der Linienidentifikation, wie sie im vorherigen Abschnitt vorgenommen wurde.

Dazu trägt die Messung der Photonenenergie zur Bestimmung der beiden unsicheren Linien 8 und 15 bei. So ist in Abbildung 5.3 ebenso wie in Tabelle 5.1 der zweite mögliche Rekombinationskanal dargestellt und mit dem anderen verglichen. Die Photonenergie des zum vermuteten Kanal alternativen Prozesses (in der Abbildung in grün und in der Tabelle kursiv dargestellt) zeigt für Linie 8 eine deutlich größere Abweichung von dem gemessenen Wert der ursprünglich angenommenen Resonanz. Für Linie 15 tritt diese Abweichung ebenfalls auf, wenn auch schwächer. Bei beiden Linien fällt auf, dass in ihrer Umgebung alle Photonenenergien leicht niedriger wie die Vorhersagen der Theorie gemessen wurden, wobei bei der betrachteten Resonanz selbst die errechnete Energie deutlich niedriger lag. Die Alternativprozesse hätten eine höhere Photonenenergie, die jedoch deutlich stärker von der gemessenen abweichen würde.

Bei Linie 8 liegt der Fall zu Grunde, dass eine lithiumartige Resonanz eng benach-

Tabelle 5.2: Gemessene Photonen-Energien der dielektronischen Resonanzen in helium- bis sauerstoffartigem Krypton bei einem Elektronenstrahlstrom von 200mA und einer Spannung von +130V an Driftröhre 9.

Nr.	Resonanz	Zwischenzustand	$E_{\gamma,exp}$ [keV]	$E_{\gamma,theo}$ [keV]	$\Delta_{E_{\gamma}}$ [eV]
1	He-DR	$[(1s(2s^2)_0]_{1/2}$	12,793(27)	12,84015	47(27)
2	He-DR	$[(1s2s)_1 2p_{1/2}]_{3/2}$	12,839(36)	12,9576	119(36)
3	He-DR	$[(1s2s)_0 2p_{1/2}]_{1/2}$	12,973(14)	13,0064	33(14)
4	Li-DR	$[1s(2s^2)_0 2p_{1/2}]_1$	12,917(10)	12,91161	-510)
5	He-DR	$[(1s2s)_0 2p_{3/2}]_{3/2}$	13,001(13)	13,0844	83(13)
6	He-DR	$[(1s2p_{1/2})_1 2p_{3/2}]_{5/2}$	12,907(9)	12,96311	56(9)
7	He-DR	$[(1s2p_{1/2})_0 2p_{3/2}]_{3/2}$	12,947(13)	13,03774	91(13)
8	Li-DR*	$[((1s2s)_1 2p_{1/2})_{3/2} 2p_{3/2}]_3$	12,917(5)	12,89621	-21(5)
	<i>He - DR*</i>	$[1s(2p_{3/2}^2)_2]_{5/2}$		13,0311	114(5)
9	Li-DR	$[((1s2s)_1 2p_{1/2})_{3/2} 2p_{3/2}]_2$	12,954(3)	12,97896	25(3)
10	Li-DR	$[((1s2s)_1 2p_{1/2})_{3/2} 2p_{3/2}]_1$	12,945(5)	12,9921	47(5)
11	Li-DR	$[((1s2s)_0 2p_{1/2})_{1/2} 2p_{3/2}]_2$	12,934(3)	12,94986	16(3)
12	Be-DR	$[(1s(2s^2)_0 2p_{1/2})_1 2p_{3/2}]_{5/2}$	12,868(3)	12,85902	-9(3)
13	Be-DR	$[(1s(2s^2)_0 2p_{1/2})_1 2p_{3/2}]_{3/2}$	12,917(2)	12,9345	18(2)
14	Be-DR	$[1s(2s^2)_0 (2p_{3/2}^2)_2]_{5/2}$	12,895(3)	12,92031	25(3)
15	B-DR*	$[1s(2s^2)_0 (2p_{1/2}^2)_0 2p_{3/2}]_2$	12,857(3)	12,80199	-55(3)
	<i>Be - DR*</i>	$[1s(2s^2)_0 (2p_{3/2}^2)_2]_{3/2}$		12,95001	93(3)
16	B-DR	$[1s(2s^2)_0 (2p_{1/2}^2)_0 2p_{3/2}]_1$	12,838(3)	12,86164	24(3)
17	B-DR	$[(1s(2s^2)_0 2p_{1/2})_1 (2p_{3/2}^2)_2]_2$	12,829(2)	12,85167	23(2)
18	B-DR	$[(1s(2s^2)_0 2p_{1/2})_1 (2p_{3/2}^2)_2]_3$	12,818(3)	12,83807	20(3)
19	B-DR	$[(1s(2s^2)_0 2p_{1/2})_0 (2p_{3/2}^2)_2]_2$	12,855(3)	12,87988	25(3)
20	-	-	12,906(26)	-	-
21	C-DR	$[1s(2s^2)_0 (2p_{1/2}^2)_0 (2p_{3/2}^2)_2]_{5/2}$	12,761(3)	12,78132	20(3)
22	C-DR	$[1s(2s^2)_0 (2p_{1/2}^2)_0 (2p_{3/2}^2)_2]_{3/2}$	12,781(3)	12,81418	33(3)
23	C-TR	$[(1s(2s^2)_0 2p_{1/2})_0 2p_{3/2}^3]_{3/2}$	12,770(18)	12,81728	47(18)
24	C-TR*	$[(1s(2s^2)_0 2p_{1/2})_1 2p_{3/2}^3]_{1/2}$	12,759(7)	12,82223	63(7)
25	N-DR	$[1s(2s^2)_0 (2p_{1/2}^2)_0 2p_{3/2}^3]_2$	12,715(4)	12,74542	30(4)
26	N-DR	$[1s(2s^2)_0 (2p_{1/2}^2)_0 2p_{3/2}^3]_1$	12,745(6)	12,76183	17(6)
27	O-DR	$[1s(2s^2)_0 (2p_{1/2}^2)_0 (2p_{3/2}^4)_0]_{1/2}$	12,724(15)	12,70409	-20(15)

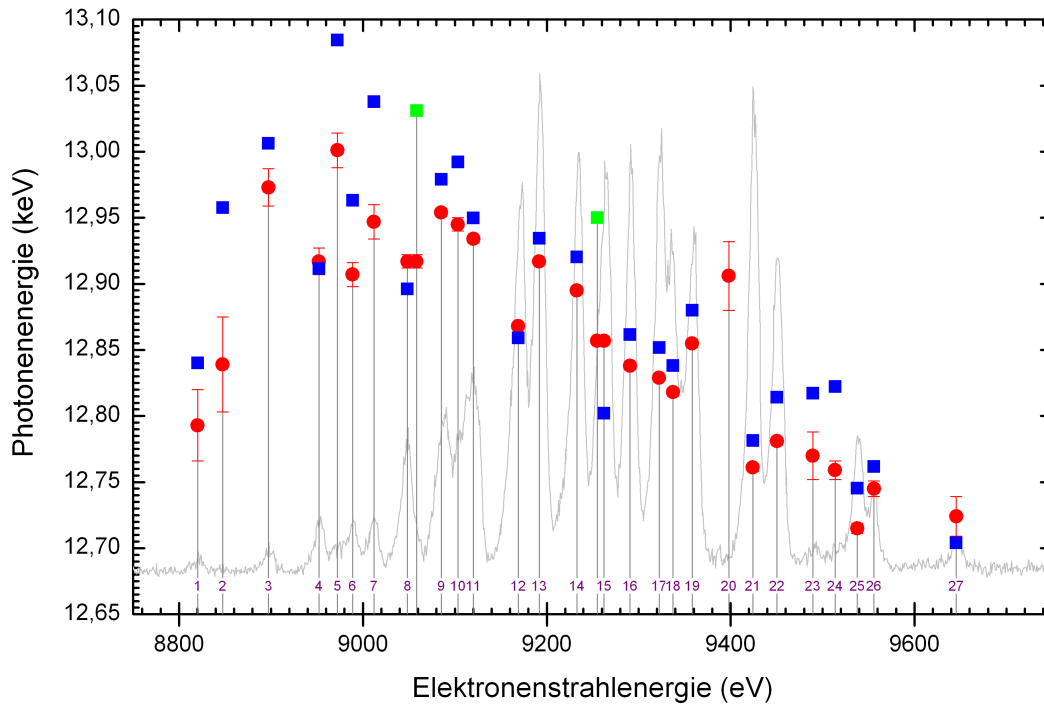


Abbildung 5.3: Vergleich der errechneten (blau) und gemessenen (rot) Photonenenergien für die identifizierten K-LL Resonanzen.

bart und energetisch niedriger zu einer heliumartigen Resonanz liegt, die nach der Theorie stärker sein sollte, wie Abbildung 5.1 verdeutlicht. Die Linienidentifikation nach Elektronenstrahlenergie und Photonenenergie zeigt jedoch, dass die Resonanz eher der theoretisch schwächeren lithiumartigen Linie zuzuschreiben ist. Hier spielen Entvölkerungseffekte des heliumartigen Ladungszustandes eine Rolle, wie sie im Abschnitt 4.2.1 für genau diesen Fall diskutiert wurden. Daher erscheint die heliumartige Resonanz schwächer als erwartet und beeinflusst das Photonenspektrum, so dass die beobachteten Abweichungen zu dem Verhalten der benachbarten Linien im Photonenspektrum und in der Resonanzstärke hieraus resultieren.

Im Fall der Linie 15 liegt ebenfalls die besondere Konstellation vor, dass zwei ähnlich starke Resonanzen unterschiedlicher Ladungszustände eng benachbart liegen. In diesem Fall liegen die hoher geladenen Zustände bei niedrigeren Energien, so dass die Entvölkerungseffekte nicht wie bei Linie 8 und den Untersuchungen in Abschnitt 4.2.1 bei aufsteigender Rampe, sondern bei absteigender Elektronenstrahlenergie auftreten. Der Effekt ist in diesem Fall nicht so stark wie bei Linie 8, so dass die Abweichungen geringer ausfallen.

Die Überlegungen führen zu dem Schluss, dass Linie 8 mit einer lithiumartigen



und Linie 15 mit einer borartigen DR-Resonanz zu identifizieren sind. Die Abweichungen beider Linien sind mit den genannten Effekten zu erklären, so dass bei allen Stellen im Resonanzspektrum mit einer solchen Konstellation eng benachbarter Resonanzen ähnlicher Stärke und unterschiedlicher Ladungszustände Beeinflussungen des Spektrums auf Grund der Entvölkerung zu erwarten sind und entsprechend geprüft werden sollen.

## 5.2 Trielektronische Rekombination

Bei der trielektronischen Rekombination wird die Energie des eingefangenen Elektrons nicht auf *ein* gebundenes Elektron, sondern gleichzeitig auf *zwei* gebundene Elektronen übertragen. Im Energiebereich der K-LL DR treten somit neben den DR-Resonanzen auch TR-Resonanzen auf, bei denen ein Elektron in die L-Schale eingefangen wird, wodurch ein gebundenes Elektron aus der K-Schale in die L-Schale und eines aus einem L-Schalen-Niveau auf ein höheres L-Schalen-Niveau innerhalb der Feinstrukturaufspaltung angeregt wird. Dieser Prozess ist in Abbildung 5.4 schematisch dargestellt, wobei sich die Abbildung auf den resonanten Elektroneneinfang beschränkt, dem noch die Relaxation des angeregten Zwischenzustands über Photonen folgt.

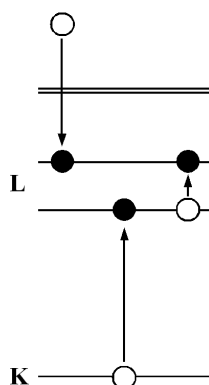


Abbildung 5.4: Energieschema der trielektronischen Rekombination. Ein Elektron wird auf die L-Schale rekombiniert, wobei ein gebundenes Elektron von der K- auf die L-Schale und ein weiteres gleichzeitig innerhalb der L-Schale angeregt wird. Diesem Einfangprozess schließt sich die radiative Relaxation in den Grundzustand an.

**Energieentartung einiger TR-Kanäle.** Bedingt durch die Ununterscheidbarkeit der Elektronen ist es prinzipiell nicht möglich, DR- von TR-Prozessen gleicher Energie zu unterscheiden. Ein solcher Fall kann etwa auftreten, wenn ein Elektron in ein niedriges L-Niveau eingefangen, ein K-Schalen-Elektron ebenfalls auf ein niedriges L-Niveau angeregt und ein weiteres Elektron innerhalb der L-Schale angeregt wird. Dieser TR-Prozess ist energetisch identisch mit dem DR-Prozess, bei dem ein Elektron in ein niedriges L-Niveau eingefangen und dabei eines aus der K-Schale auf ein hohes L-Niveau angeregt wird. Im ersten Fall wird die Energie des eingefangenen Elektrons auf zwei Elektronen verteilt, wobei sich eines vor dem Prozess in der K-Schale und das zweite in der L-Schale befindet, im zweiten Fall wird die gesamte Energie auf ein K-Schalen-Elektron übertragen. Abbildung 5.5 verdeutlicht

im Energieschema, dass diese Prozesse bei gleicher Elektronenstrahlenergie ablaufen. TR kann nur auftreten, wenn neben dem eingefangenen Elektron noch zwei weitere Elektronen in einem anfänglich nicht besetzten Einteilchen-Zustand angeregt werden, wie in Abbildung 5.5 c) klar wird. Daher werden in dieser Arbeit als TR-Resonanzen nur solche Resonanzen bezeichnet, die energetisch singulär sind.

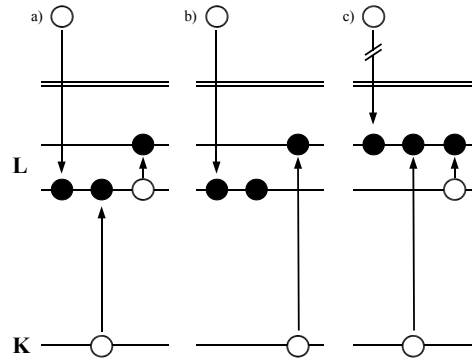


Abbildung 5.5: Eindeutigkeit der Trielektronischen Resonanzen dargestellt im Energieschema: a) zeigt einen TR-Vorgang, der bei gleicher Elektronenenergie des eingefangenen Elektrons abläuft wie der DR-Vorgang in b), wobei der Zwischenzustand in c) nicht durch DR, sondern nur durch TR (oder entsprechende Vorgänge höherer Ordnung) erreicht werden kann.

Die Feinstrukturaufspaltung der L-Schale ist im Vergleich zur Energiedifferenz der K- zur L-Schale sehr gering, wodurch die trielektronischen Resonanzen eng benachbart zu den dielektronischen Resonanzen auftreten. Im Bereich der DR-Resonanzen der hohen Ladungszustände wie helium- bis borartigem Krypton ist die Vielfalt der DR-Resonanzen auf Grund der möglichen Rekombinationsmöglichkeiten bedingt durch die vielen Vakanzen innerhalb der L-Schale so groß, dass die TR-Resonanzen in diesem Bereich meist von den deutlich stärkeren DR-Resonanzen überdeckt werden und so schlecht aufzulösen sind.

**Messung der Resonanzen.** Um die Resonanzen höherer Ordnung mit ausreichender Statistik untersuchen zu können, wurden mehrere umfangreiche Messungen im Energiebereich der kohlenstoff- bis sauerstoffartigen DR-Resonanzen durchgeführt. Die hier in Abbildung 5.6 gezeigte Messreihe wurde bei analogen Bedingungen zu der im vorherigen Abschnitt gezeigten Übersichtsmessung ( $I_{beam} = 200$  mA, Biasspannung an DT9: 140 V, Geschwindigkeit der Rampe für die Elektronenstrahlenergie: 2 V/s) durchgeführt. Es wurde bei dieser Messung eine Halbwertsbreite von 13,7 eV erreicht, wodurch die höheren Resonanzen gut aufgelöst sichtbar wurden. Nach der gerechneten Raumladungskorrektur der Energiewerte wurde das Spektrum auf die erste kohlenstoffartige DR-Resonanz verschoben, wobei auf eine weitere Reskalierung für die Kompensation der Raumladung verzichtet werden konnte, da der

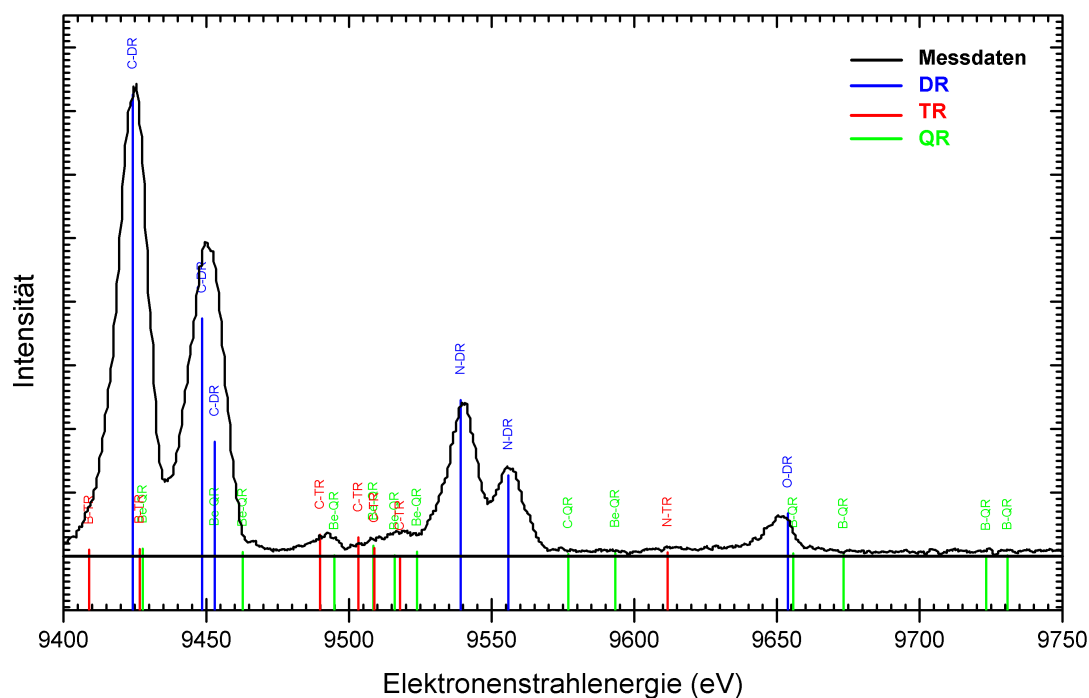


Abbildung 5.6: Spektrum im Energiebereich der C- bis O-artigen DR-Resonanzen. Es sind eindeutige trielektronische Resonanzen zu erkennen.

untersuchte Bereich ein deutlich geringeres Energieintervall abdeckt. Zudem wäre als zweiter Referenzpunkt für die Reskalierung idealerweise die sauerstoffartige DR-Resonanz in Betracht gekommen, für die jedoch gemäß der Diskussion in Abschnitt 5.1 vergleichsweise große Abweichungen von der Theorie gefunden wurden, so dass eine Reskalierung mit dieser Resonanz den Gesamtfehler eher vergrößern würde.

**Vergleich mit theoretischen Werten.** Die in Abbildung 5.6 überlagerten theoretischen Werte für die Resonanzenergie und -stärke wurden analog zu Abbildung 5.1 nach Ladungszustandsgruppen auf die jeweils erste DR-Resonanz der Gruppe skaliert, da diese gut separiert war und die größte Resonanzstärke hatte. In dieser Abbildung stellen die Farben die verschiedenen Ordnungen der Resonanzen dar. So stehen die blauen Linien für dielektronische Resonanzen, die roten für trielektronische und die grünen Linien zeigen die Positionen an, an denen quadreelektronische Rekombination erwartet wird.

Deutlich zu erkennen sind kohlenstoffartige trielektronische Resonanzen bei einer Elektronenstrahlenergie von etwa 9489 eV. Zwischen 9500 und 9525 eV schließt sich eine Resonanzgruppe an, die eine Überlagerung aus verschiedenen kohlenstoffartigen

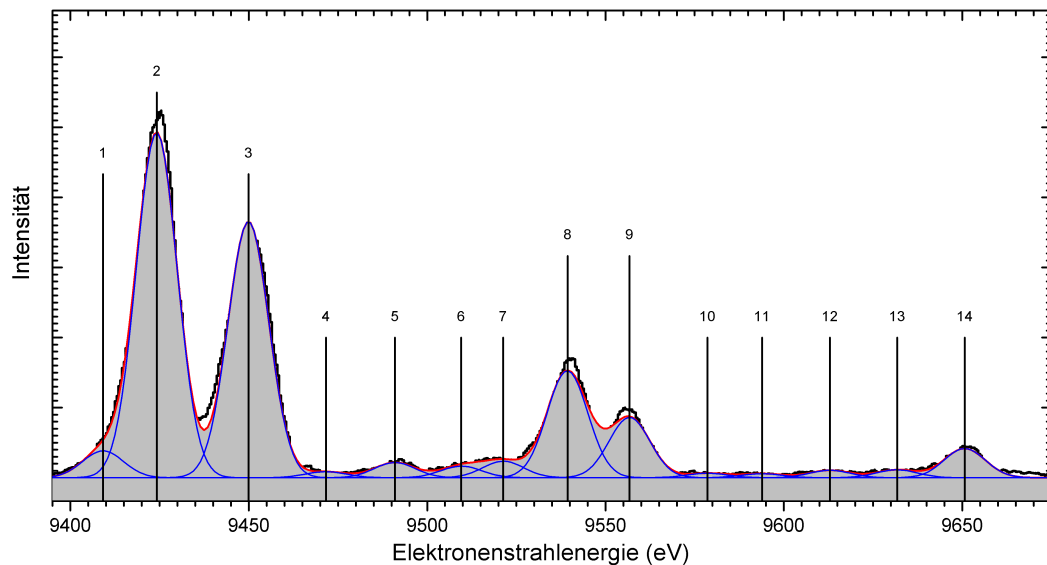


Abbildung 5.7: Spektrum im Energiebereich der C- bis O-artigen DR-Resonanzen mit gefitteten Geraden und Linienbezeichnungen.

TR- und berylliumartigen QR-Resonanzen darstellt. Zwischen den stickstoff- und sauerstoffartigen DR-Resonanzen sind ebenfalls höhere Resonanzen zu identifizieren. So ist eindeutig stickstoffartige trielektronische Rekombination bei etwa 9610 eV zu sehen.

**Linienidentifikation.** Auch für dieses Spektrum wurden Gaußverteilungen angefitet (Abbildung 5.7) und die entsprechenden Linienzentren in Tabelle 5.2 zusammengestellt. Analog zu Tabelle 5.1 wurde ein Vergleich zu den theoretischen Werten nach [59] gezogen. Auch in dieser Auswertung fällt besonders eine vergleichsweise hohe Abweichung der gemessenen sauerstoffartigen DR-Resonanz zu den theoretischen Werten von über 3 eV auf. Daneben wurde im Spektrum ein Anzeichen einer weiteren Resonanzlinie bei etwa 9630 eV angefitet, die von der Theorie nicht wiedergegeben wird.

**Resonanzstärkeverhältnis.** Eine erste Abschätzung der gemessenen Resonanzstärken der trielektronischen Rekombination kann über einen Vergleich zwischen einer separierten TR-Resonanz zu einer DR-Resonanz des gleichen Ladungszustandes vorgenommen werden. Die eindeutigste und stärkste trielektronische Resonanz ist eine kohlenstoffartige TR bei 9490,92(31) eV Strahlenergie. Diese wurde ins Verhältnis gesetzt zu den entsprechenden kohlenstoffartigen DR-Resonanzen wie Abbildung 5.8 verdeutlicht.

Tabelle 5.3: Gemessene Energien der trielektronischen Resonanzen in He- bis O-artigem Krypton bei einem Elektronenstrahlstrom von 200 mA und einer Spannung von +130 V an Driftröhre 9 im Energiebereich der C- bis O-artigen KLL-DR, welche als Referenzwerte mit angegeben sind. Die Halbwertsbreite der angefitzten Kurven beträgt 15,35(1) eV.

Res.	Nr.	angeregter Zustand	$E_{res,Exp}$	$E_{res,Theo}$	$\Delta E_{res}$
			[eV]		
Dielektronische Resonanzen					
DR-C1	2	$[1s2s^22p_{1/2}^2(2p_{3/2}^2)_2]_{5/2}$	9424,21(31)	9424,21	0(0,31)
DR-C2	3	$[1s2s^22p_{1/2}^2(2p_{3/2}^2)_2]_{3/2}$	9449,92(44)	9448,51	1,41(44)
DR-N1	8	$[1s2s^2(2p_{1/2})^22p_{3/2}^3]_2$	9539,33(44)	9539,11	0,22(44)
DR-N2	9	$[1s2s^2(2p_{1/2})^22p_{3/2}^3]_1$	9556,72(45)	9555,85	0,87(45)
DR-O	14	$[1s2s^2(2p_{1/2}^2)_0(2p_{3/2}^4)_0]_{1/2}$	9650,71(46)	9653,82	-3,11(46)
Trielektronische Resonanzen					
TR-B1	1	$[1s2s^22p_{1/2}^2(2p_{3/2}^2)_2]_{5/2}$	9409,17(52)	9408,94	0,23(52)
TR-C1	5	$[1s2s^22p_{1/2}^2(2p_{3/2}^2)_2]_{5/2}$	9490,92(31)	9489,83	1,09(54)
TR-C2	6	$[1s2s^22p_{1/2}^2(2p_{3/2}^2)_2]_{5/2}$	9509,52(31)	9508,84	0,68(81)
TR-N1	12	$[(1s2s^22p_{1/2})_12p_{3/2}^4]_1$	9612,92(31)	9611,73	1,19(69)
Anzeichen Quadreelektronischer Resonanzen					
QR-Be1	4	$[1s2s^22p_{1/2}^2(2p_{3/2}^2)_2]_{5/2}$	9471,65(85)	9462,74	8,91(85)
QR-Be2	7	$[1s2s^22p_{1/2}^2(2p_{3/2}^2)_2]_{5/2}$	9521,28(71)	9523,82	-2,54(71)
QR-Be3	11	$[1s2s^22p_{1/2}^2(2p_{3/2}^2)_2]_{5/2}$	9593,90(1,19)	9593,36	0,54(1,19)
QR-C1	10	$[1s2s^22p_{1/2}^2(2p_{3/2}^2)_2]_{5/2}$	9578,58(1,07)	9576,88	1,70(1,07)

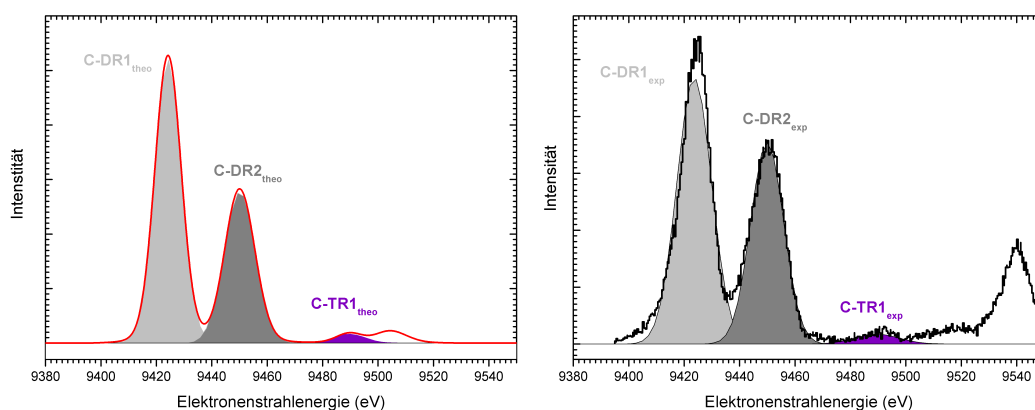


Abbildung 5.8: Resonanzstärkeverhältnis zwischen kohlenstoffartiger DR und TR. Die Werte der Verhältnisse sind in Tabelle 5.4 zu finden.

Tabelle 5.4: Vergleich der theoretischen und experimentellen Resonanzstärkeverhältnisse der C-artigen DR zu einer ausgezeichnete C-artigen TR-Resonanz nach Abbildung 5.8

DR1 / TR1		DR2 / TR1	
theoretisch	27,03(1,59)	theoretisch	16,62(0,98)
experimentell	21,31(0,73)	experimentell	15,27(0,53)
$R1_{theo} / R1_{exp}$	1,27(9)	$R2_{theo} / R2_{exp}$	1,08(8)

Der Bereich der kohlenstoff- bis sauerstoffartigen KLL-Resonanzen wurde in mehreren unabhängigen Messungen bei verschiedenen Bedingungen wiederholt, wobei jedes Mal zumindest die signifikanten TR-Resonanzen zu sehen waren. Abbildung 5.10 zeigt eine Zusammenstellung von vier Spektren dieses Bereiches, bei unterschiedlichen Einstellungen der EBIT. Die eindeutigen TR-Resonanzen sind jeweils gekennzeichnet. Somit ist eine zweifelsfreie Beobachtung der KL-LLL TR in kohlenstoff- und stickstoffartigem Krypton nachgewiesen.

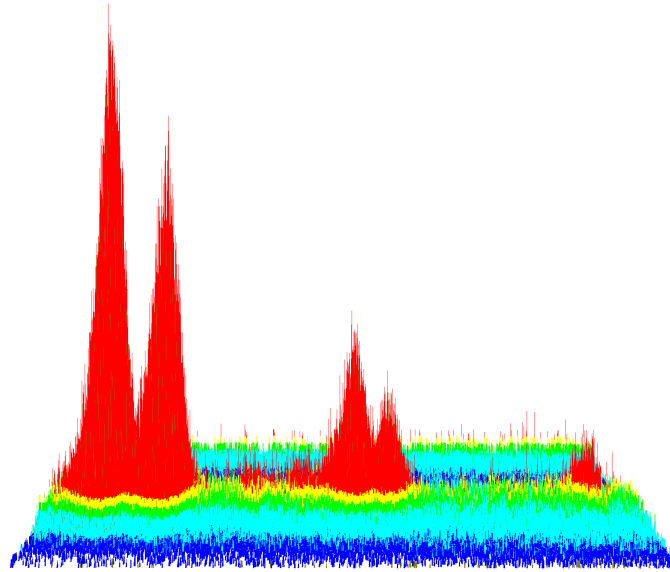


Abbildung 5.9: Dreidimensionale Darstellung der Photonenergebnisse mit der Energie der Relaxationsphotonen der K-L Übergänge entsprechend Abbildung 5.6. Die dielektronischen Rekombinationen sind deutlich zu erkennen, ebenso wie die trielektronischen Resonanzen im Bereich zwischen den kohlenstoff- und stickstoffartigen DR-Resonanzen.

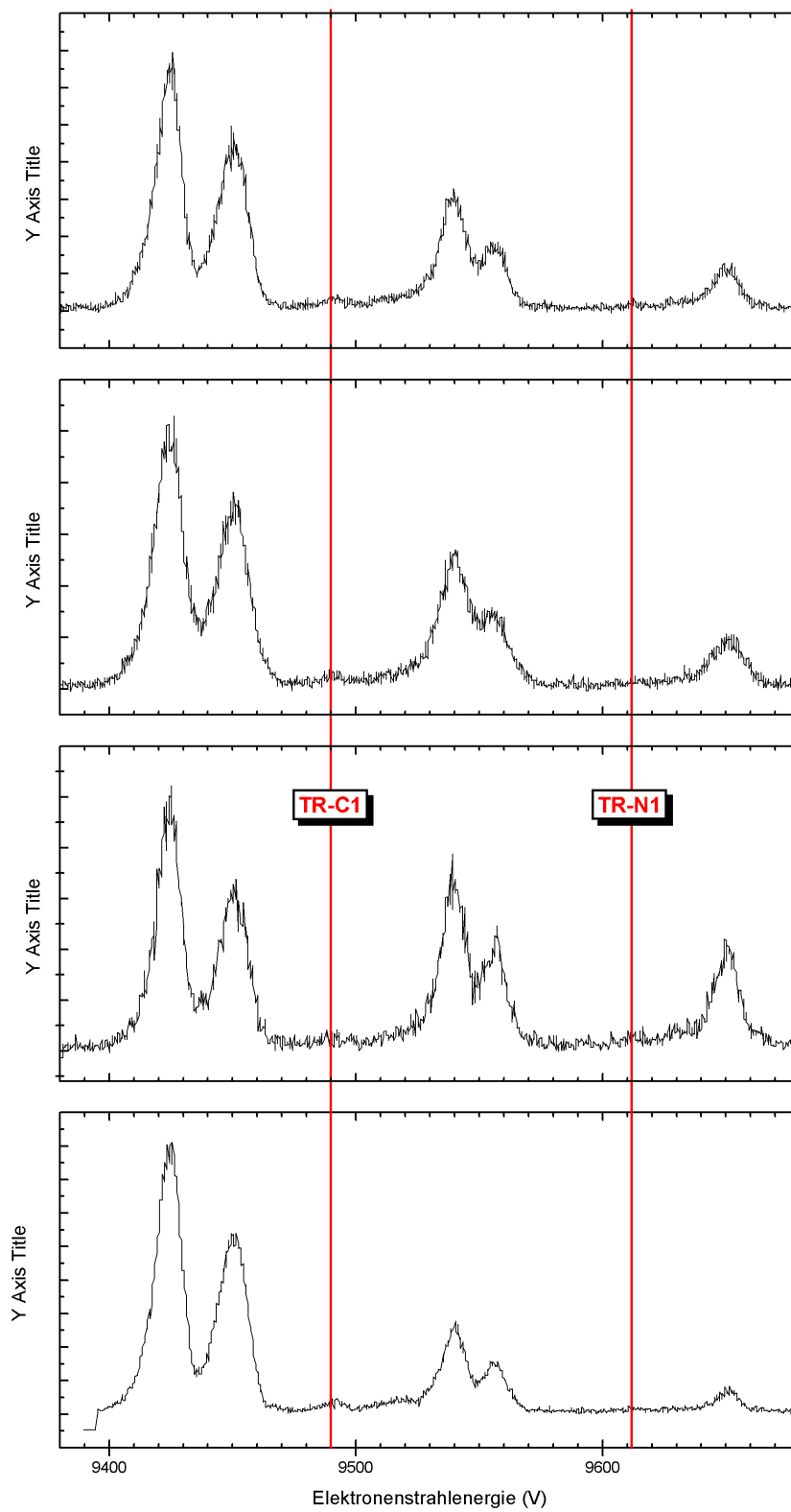


Abbildung 5.10: Reproduzierbarkeit der Beobachtung der isolierten TR-Resonanzen



### 5.3 Quadruелеktronische Rekombination

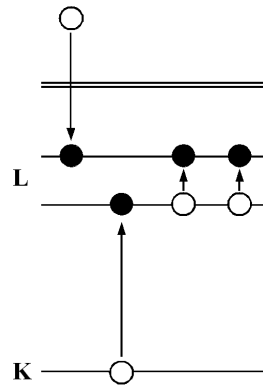


Abbildung 5.11: Energieschema der Quadruелеktronischen Rekombination. Ein Elektron wird auf die L-Schale rekombiniert, wobei ein gebundenes Elektron von der K- auf die L-Schale und gleichzeitig zwei weitere innerhalb der L-Schale angeregt werden.

Bei der quadruелеktronischen Rekombination (QR) werden *drei* gebundene Elektronen gleichzeitig von der überschüssigen Energie eines eingefangenen Elektrons auf höhere Niveaus angeregt (siehe Abbildung 5.11). Bisher wurde dieser Effekt in der Literatur weder theoretisch diskutiert noch experimentell beobachtet. Wie aktuelle Rechnungen und Überlegungen zeigen [59], besteht eine durchaus signifikante Wahrscheinlichkeit für diesen resonanten Elektroneneinfangprozess dritter Ordnung in hochgeladenem Krypton. Auch hier werden die Resonanzen wie schon die TR-Resonanzen vor allem im Bereich der C- bis O-artigen K-LL DR erwartet, da diese hier genügend separiert sind, um als solche erkannt werden zu können.

Bereits im vorherigen Abschnitt wurde bei der Identifikation der TR-Resonanzen auf quadruелеktronische Resonanzen hingewiesen. Abbildung 5.12 zeigt die Ergebnisse der Messung dieses Abschnitts in logarithmischer Skalierung. Hierbei wird deutlich, dass in dem Energiebereich, in dem nach der Theorie quadruелеktronische Resonanzen erwartet werden, eine Resonanzstruktur im Spektrum zu sehen ist. Da es sich um sehr schwache Effekte handelt, ist eine genaue Identifikation durch Kurvenfit nicht zweifelsfrei möglich, jedoch sind deutlich Anzeichen quadruелеktronischer Resonanzen zu erkennen. Die Anpassung von Gaußfunktionen an diese Signale zeigt ebenfalls eine Struktur in dem gemessenen Spektrum in der Umgebung der berechneten Resonanzzentren quadruелеktronischer Rekombination, was ein weiterer Hinweis auf Anzeichen dieses Prozesses darstellt. Die Auswertungen dieser Kurvenanpassungen sind in Tabelle 5.2 zusammengestellt.

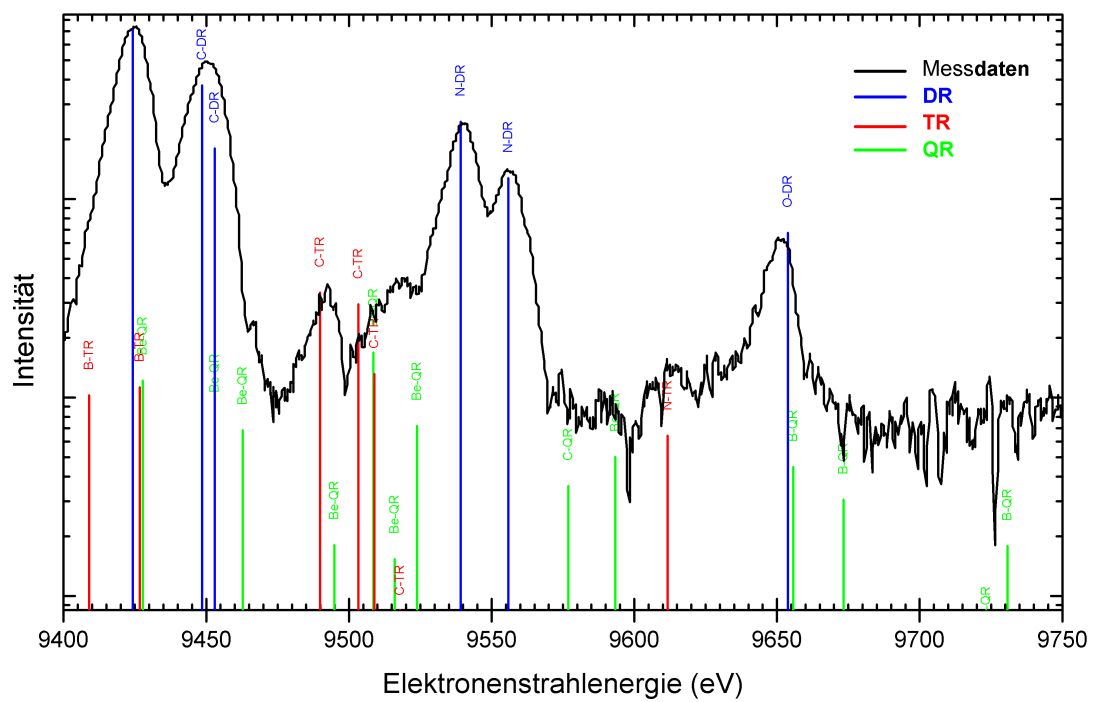


Abbildung 5.12: Spektrum im Energiebereich der C- bis O-artigen DR-Resonanzen. Es sind deutlich B-, C- und N-artige TR sowie Anzeichen von Be-artiger QR zu erkennen.

# Kapitel 6

## Zusammenfassung

Das wesentliche Ergebnis der vorliegenden Arbeit ist der erstmalige Nachweis trielektronischer Rekombinationsresonanzen unter Einbeziehung eines Elektrons der K-Schale, welche in Experimenten mit hochgeladenem Krypton gefunden wurden. Möglich wurde dies durch die Realisierung der bisher bestaufgelösten K-LL-Resonanzspektren von hochgeladenem Krypton in Abhängigkeit der Elektronenstrahlenergie in einer EBIT. So wurde nach der prinzipiellen Messung der TR [21] in den aktuellen Experimenten der für die Plasmaphysik und fundamentale Atomphysik interessante Fall der korrelierten Anregung mehrerer Elektronen in einem Ion bei hohen Energien und höchsten Ladungszuständen in einem mittelschweren Element beobachtet. Das Meßverfahren bestand in der Registrierung der bei der Photorekombination von hochgeladenen  $K^{28+...34+}$ -Ionen emittierten Photonen samt deren Energie als Funktion der Energie eines Elektronenstrahls.

Experimentelle Voraussetzung für den Erfolg dieser Messungen war eine deutliche Verbesserung der Elektronenenergie-Auflösung. Umfangreiche systematische Studien des Verhaltens der für die Experimente eingesetzten Elektronenstrahl-Ionenfalle (EBIT) wurden durchgeführt und die physikalischen Prozesse der Ionen in dieser untersucht, um hieraus Schlüsse für optimale Bedingungen zur hochgenauen Messung zu ziehen.

Eine intensive Beschäftigung mit der genauen Bestimmung der Elektronenstrahlenergie als zentrale Messgröße führte zu Betrachtungen über die Potentialverhältnisse in der EBIT und die Stabilität des Elektronenstrahls, wobei auflösungsverschlechternde Instabilitäten bei bestimmten Betriebsparametern deutlich erkannt wurden. Die Ursachen dazu wurden gefunden, und so konnte ein äußerst stabiler Elektronenstrahl erzeugt werden. Eine präzise Auswertung und Kalibration der Elektronenstrahlenergie nach Datenaufnahme, die durch umfangreiche Softwareentwicklungen realisiert werden konnte, folgte.

Durch gezielte Beeinflussung der Temperaturentwicklung der Ionen durch evaporatives Kühlen konnte die Breite der thermischen Energieverteilung der Teilchen im Fallenpotential so weit verringert werden, dass Photorekombinations-Spektren mit wesentlich schärferen Linien im Vergleich zu bisherigen Experimenten resultierten.

In dieser Arbeit wurde die grundsätzliche Nachweisbarkeit der resonanten Rekombinationsprozesse höherer Ordnung in mittelschweren Elementen gezeigt, und so liegt es nahe, diese Studien systematisch fortzusetzen. Das große Spektrum an möglichen Anwendungen macht deutlich, dass eine genaue Kenntnis dieser Prozesse für viele Gebiete der Physik von großem Interesse ist. Trielektronische Rekombination muss je nach Stärkeverhältnis zu den herkömmlich untersuchten dielektronischen Resonanzen bei zukünftigen Studien berücksichtigt werden. Zudem motivieren Anzeichen quadreelektronischer Resonanzen, wie sie in den Spektren bei Vergleichen mit theoretischen Rechnungen nach [59] ausgemacht wurden, zur Weiterentwicklung der angewandten Methoden mit dem Ziel des eindeutigen Nachweises dieser hoch korrelierten Prozesse mit vier beteiligten Elektronen. Hier zeigt sich ein großes Potential an Testmöglichkeiten komplexer Atomstrukturberechnungen.

In zukünftigen Experimenten werden leichtere Elemente wie Argon und Eisen im Fokus der Untersuchungen stehen. Motivation hierfür ist erstens das Interesse an diesen Elementen für die Plasmadiagnostik und für die Astrophysik. Zweitens versprechen theoretische Rechnungen einen deutlich größeren Anteil der Resonanzen höherer Ordnung an dem Rekombinationsspektrum für Elemente mit einer geringeren Kernladung. Bisher blieb der Nachweis trotz der größeren Resonanzstärke aus, da eine geringere Kernladung auch geringere Energieabstände zur Folge hat und somit eine bessere Auflösung voraussetzt. Mit dieser Arbeit sind die Voraussetzungen dafür geschaffen, eindeutige quadreelektronische Resonanzen zu finden.

# Literaturverzeichnis

- [1] H. S. W. Massey and D. R. Bates. The Properties of Neutral and Ionized Atomic Oxygen and their Influence on the Upper Atmosphere. *Reports on Progress in Physics*, 9:62, 1942.
- [2] D. A. Knapp, P. Beiersdorfer, M. H. Chen, J. H. Scofield, and D. Schneider. Observation of Interference between Dielectronic Reacceleration and Radiative Recombination in Highly-Charged Uranium Ions. *Physical Review Letters*, 74:54, 1995.
- [3] A. Burgess. Dielectronic Recombination and the Temperature of the Solar Corona. *Astrophysical Journal*, 139:776, 1964.
- [4] A. Burgess. A General Formula for the Estimation of Dielectronic Recombination Coefficients in Low-Density Plasmas. *Astrophysical Journal*, 141:1588, 1965.
- [5] J. Dubau and S. Volonté. Dielectronic Recombination and its Applications in Astronomy. *Reports on Progress in Physics*, 43:199, 1980.
- [6] D. A. Knapp, R. E. Marrs, M. A. Levine, C. L. Bennett, M. H. Chen, J. R. Henderson, M. B. Schneider, and J. H. Scofield. Dielectronic Recombination of Heliumlike Nickel. *Physical Review Letters*, 62(18):2104, 1989.
- [7] D. A. Knapp, R. E. Marrs, M. B. Schneider, M. H. Chen, M. A. Levine, and P. Lee. Dielectronic Recombination of Heliumlike Ions. *Physical Review A*, 47(3):2039, 1993.
- [8] A. J. González-Martínez, J. R. Crespo López-Urrutia, J. Braun, G. Brenner, H. Bruhns, A. Lapierre, V. Mironov, R. Soria Orts, H. Tawara, M. Trinczek, J. Ullrich, and J. H. Scofield. State-Selective Quantum Interference Observed in the Recombination of Highly Charged  $\text{Hg}^{75+ \dots 78+}$  Mercury Ions in an Electron Beam Ion Trap. *Physical Review Letters*, 94:203201, 2005.
- [9] Y. Zou, J. R. Crespo López-Urrutia, and J. Ullrich. Observation of Dielectronic Recombination through Two-Electron-One-Photon Correlative Stabilization in an Electron-Beam Ion Trap. *Physical Review A*, 67:042703, 2003.

- [10] C. Brandau, C. Kozhuharov, Z. Harman, A. Müller, S. Schippers, Y. Kozhedub, D. Bernhardt, S. Böhm, J. Jacobi, and E. Schmidt. Isotope Shift in the Dielectronic Recombination of Three-Electron  $^A\text{Nd}57+$ . *Physical Review Letters*, 100:073201, 2008.
- [11] C. Brandau, C. Kozhuharov, A. Müller, W. Shi, S. Schippers, T. Bartsch, S. Böhm, C. Böhme, A. Hoffknecht, H. KNopp, N. Grün, W. Schneid, T. Steih, F. Bosch, B. Franzke, P. H. Mokler, F. Nolden, M. Steck, T. St, and Z. Stachura. Precise Determination of the  $2s_{1/2} - 2p_{1/2}$  Splitting in Very Heavy Lithiumlike Ions Utilizing Dielectronic Recombination. *Physical Review Letters*, 91:073202, 2003.
- [12] K. Tomabechi, J. R. Gilleland, Y. A. Sokolov, and R. Toschi. ITER Conceptual Design. *Nuclear Fusion*, 31(6):1135, 1991.
- [13] S. A. Cohen, K. A. Werley, D. E. Post, B. J. Braams, J. L. Perkins, and D. Pearlstein. Two-Dimensional Fluid Simulations of the ITER SOL Plasma. *Journal of Nuclear Materials*, 176 & 177:909, 1990.
- [14] J. Cummings, S. A. Cohen, R. Hulse, D. E. Post, M. H. Redi, and J. Perkins. Power Radiated from ITER by Impurities. *Journal of Nuclear Materials*, 176 & 177:916, 1990.
- [15] M. Bitter, H. Hsuan, C. Bush, S. Cohen, C. J. Cummings, B. Grek, K. W. Hill, J. Schivell, M. Zarnstorff, P. Beiersdorfer, A. Osterheld, A. Smith, and B. Fraenkel. Spectra of Heliumlike Krypton from Tokamak Fusion Test Reactor Plasmas. *Physical Review Letters*, 71(7):1007, 1993.
- [16] T. Fuchs, C. Biedermann, R. Radtke, E. Behar, and R. Doron. Channel-Specific Dielectronic Recombination of Highly Charged Krypton. *Physical Review A*, 58(6):4518, 1998.
- [17] C. Biedermann, T. Fuchs, P. Liebisch, R. Radtke, E. Behar, and R. Doron. X-Ray Spectroscopic Measurements of Dielectronic Recombination of Highly Charged Krypton Ions. *Physica Scripta*, T80:303, 1999.
- [18] R. Radtke, C. Biedermann, T. Fuchs, G. Fußmann, and P. Beiersdorfer. Measurement of the Radiative Cooling Rates for High-Ionization Species of Krypton using an Electron Beam Ion Trap. *Physical Review E*, 61(2):1966, 2000.
- [19] M. Chevallier, C. Cohen, D. Dauvergne, J. Dural, P. Gangnan, R. Kirsch, D. Lelièvre A. LHOir, J. Libin, P. H. Mokler, J. C. Piozat, H.-T. Prinz, J.-M. Ramillon, J. Remillieux, P. Roussel-Chomaz, J.-P. Rozet, F. Sanuy, D. Schmaus, C. Stephan, M. Toulemonde, D. Vernhet, and A. Warczak. Upper-Limit Determination of Resonant Trielectronic Recombination Cross-Section for Krypton using Crystal Channeling. *Physical Review A*, 61:022724, 2000.

- [20] E. De Filippo, G. Lanzanò, H. Rothard, and C. Volant. Three-Electron Auger Process from Beam-Foil Excited Multiply Charged Ions. *Physical Review Letters*, 100:233202, 2008.
- [21] M. Schnell, G. Gwinner, N. R. Badnell, M. E. Bannister, S. Böhm, J. Colgan, S. Kieslich, S. D. Loch, D. Mitnik, A. Müller, M. S. Pinzola, S. Schippers, D. Schwalm, W. Shi, A. Wolf, and S.-G. Zhou. Observation of Trielectronic Recombination in Be-like Cl Ions. *Physical Review Letters*, 91(4):043001, 2003.
- [22] S. Schippers, E. W. Schmidt, D. Bernhardt, D. Yu, A. Müller, M. Lestinsky, D. A. Orlov, M. Grieser, R. Repnow, and A. Wolf. Photorecombination of Berylliumlike  $\text{Ti}^{18+}$ : Hyperfine Quenching of Dielectronic Resonances. *Journal of Physics: Conference Series - 13th HCI, 2006*, 58:137, 2007.
- [23] W. Lotz. Electron-Impact Ionization Cross-Sections and Ionization Rate Coefficients for Atoms and Ions from Hydrogen zu Calcium. *Zeitschrift für Physik*, 216:241, 1968.
- [24] J. A. Syage. Electron-Impact Cross Sections for Multiple Ionization of Kr and Xe. *Physical Review A*, 46(9):5666, 1992.
- [25] R. E. Marrs, M. A. Levine, D. A. Knapp, and J. R. Henderson. Measurement of Electron-Impact-Excitation Cross Sections for Very Highly Charged Ions. *Physical Review Letters*, 60(17):1715, 1988.
- [26] L. Meitner. Über die  $\beta$ -Strahl-Spektren und ihren Zusammenhang mit der  $\gamma$ -Strahlung. *Zeitschrift für Physik A*, 11(1):35, 1922.
- [27] P. Auger. Comptes Rendus 180, 65. *Journale de Physique et Radium*, 6:205, 1925.
- [28] J. R. Oppenheimer. On the Quantum Theory of the Capture of Electrons. *Physical Review*, 31(3):349, 1928.
- [29] H. A. Kramers. On the Theory of X-Ray Absorption and of the Continuous X-Ray Spectrum. *Philosophical Magazine*, 46:836, 1923.
- [30] H. Bethe and E. Salpeter. *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Systems, Vol 35*. Springer, Berlin, 1957.
- [31] Y. S. Kim and R. H. Pratt. Direct Radiative Recombination of Electrons with Atomic Ions: Cross Sections and Rate Coefficients. *Physical Review A*, 27(6):2913, 1983.
- [32] M. C. Simon. Persönliche Mitteilung. 2008.

- [33] U. Schramm, J. Berger, M. Grieser, D. Habs, E. Jaeschke, G. Kilgus, D. Schwalm, A. Wolf, R. Neumann, and R. Schuch. Observation of Laser-Induced Recombination in Merged Electron and Proton Beams. *Physical Review Letters*, 67(1):22, 1991.
- [34] M. Planck. Zur Theorie des Gesetzes der Energieverteilung im Normalspektrum. *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, 2(17):237, 1900.
- [35] N. Bohr. The Constitution of Atoms and Molecules. I and II. *Philosophical Magazine*, 26:1, 1913.
- [36] E. Rutherford. Scattering of Alpha and Beta Particles of Matter and the Structure of the Atom. *Philosophical Magazine*, 21:669, 1911.
- [37] A. Sommerfeld and A. Unsöld. Über das Spektrum des Wasserstoffes. *Zeitschrift für Physik A*, 26(4):259, 1926.
- [38] E. Schrödinger. Quantisierung als Eigenwertproblem (Erste Mitteilung). *Annalen der Physik*, 79:361, 1926.
- [39] E. Schrödinger. Quantisierung als Eigenwertproblem (Zweite Mitteilung). *Annalen der Physik*, 79:489, 1926.
- [40] E. Schrödinger. Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen. *Annalen der Physik*, 79:734, 1926.
- [41] E. Schrödinger. Quantisierung als Eigenwertproblem (Dritte Mitteilung). *Annalen der Physik*, 80:437, 1926.
- [42] E. Schrödinger. Quantisierung als Eigenwertproblem (Vierte Mitteilung). *Annalen der Physik*, 81:109, 1926.
- [43] A. Einstein. Zur Elektrodynamik bewegter Körper. *Annalen der Physik*, 4(17):891, 1905.
- [44] P. A. M. Dirac. The Quantum Theory of the Electron. *Proceedings of the Royal Society*, 117:610, 1928.
- [45] R. P. Feynman. The Development of the Space-Time View of Quantum Electrodynamics. *Nobel Lectures, Physics*, page 1963, 1972.
- [46] W. Heisenberg. Über quantenmechanische Umdeutung kinematischer und mechanischer Bewegungen. *Zeitschrift für Physik*, 33:879, 1926.
- [47] W. Heisenberg. Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik. *Zeitschrift für Physik*, 43:172, 1927.



- [48] M. I. Eides, H. Grotch, and V. A. Shelyuto. Theory of Light Hydrogenlike Atoms. *Physics Reports*, 342:63, 2001.
- [49] D. R. Hartree. Approximate Wave Functions and Atomic Field for Mercury. *Physical Review*, 46:738, 1934.
- [50] C. F. Fischer and H. P. Saha. Multiconfiguration Hartree-Fock Results with Breit-Pauli Corrections for Forbidden Transitions in the  $2p^4$  Configuration. *Physical Review A*, 28:3169, 1983.
- [51] I. P. Grant, D. Mayers, and N. Pyper. Studies in Multiconfiguration Dirac-Fock Theory I. The Low-Lying Spectrum of Hf III. *Journal of Physics B*, 9:2777, 1976.
- [52] Z. Harman, A. J. González Martínez, H. Tawara, J. R. Crespo López-Urrutia, U. D. Jentschura, C. H. Keitel, and J. Ullrich. Resonance Strength for KLL Dielectronic Recombination into Highly Charged Mercury Ions and Empirical Scaling Law. Publikation in Vorbereitung.
- [53] S. L. Haan and V. L. Jacobs. Projection-Operator Approach to the Unified Treatment of Radiative and Dielectronic Recombination. *Physical Review A*, 40(1):80, 1989.
- [54] P. Zimmerer, N. Grün, and W. Scheid. Auger Rates for Dielectronic Recombination Cross Sections with Highly Charged Relativistic Heavy Ions. *Physics Letters A*, 148:457, 1990.
- [55] M. Zimmermann, N. Grün, and W. Scheid. Photo Recombination on Highly Charged Few-Electron Uranium Ions. *Journal of Physics B*, 30:5259, 1997.
- [56] M. H. Chen and J. H. Scofield. Relativistic Effects on Angular Distribution and Polarization of Dielectronic Satellite Lines of Hydrogenlike Ions. *Physical Review A*, 52(3):2057, 1995.
- [57] M. Gail, N. Grün, and W. Scheid. Angular Distribution of Radiation Emitted after Resonanz Transfer and Excitation. *Journal of Physics B*, 31:4645, 1998.
- [58] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe. *Quantum Mechanics*. Wiley J, 1977.
- [59] Z. Harman. Persönliche Mitteilung. 2008.
- [60] B. M. Penetrante, J. N. Bardsley, D. DeWitt, M. Clark, and D. Schneider. Evolution of Ion-Charge-State Distributions in an Electron-Beam Ion Trap. *Physical Review A*, 43:4861, 1991.
- [61] J. R. Crespo López-Urrutia, A. Dorn, R. Moshhammer, and J. Ullrich. The Freiburg Electron Beam Ion Trap/Source Project FreEBIT. *Phys. Scr.*, T 80:502, 1999.

- [62] A. J. González Martínez. *Quantum Interference in the Dielectronic Recombination of Heavy Highly Charged Ions*. Dissertation, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2005.
- [63] D. Zajfman, A. Wolf, D. Schwalm, D. A. Orlov, M. Grieser, R. von Hahn, C. P. Welsch, J. R. Crespo López-Urrutia, C. D. Schröter, X. Urbain, and J. Ullrich. Physics with Colder Molecular Ions: The Heidelberg Cryogenic Storage Ring CSR. *Journal of Physics: Conference Series: Sixth International Conference on Dissociative Recombination*, 4:296, 2005.
- [64] M. Binder. *Spektroskopie an hoch geladenen Ionen aus der EBIT im Sichtbaren und im nahen Ultraviolett*. Diplomarbeit, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2008.
- [65] V. Mironov, M. Trinczek, A. Werdich, A. J. González Martínez, P. Gou, X. Zhang, J. Braun, J. R. Crespo Lopez-Urrutia, and J. Ullrich. Tests of a Laser Ion Source at the Heidelberg Electron Beam Ion Trap. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 205:183, 2003.
- [66] M. Trinczek, A. Werdich, V. Mironov, P. Guo, A. J. González Martínez, J. Braun, J. R. Crespo López-Urrutia, and J. Ullrich. A Laser Ion Source for an Electron Beam Ion Trap. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 251:289, 2006.
- [67] J. Ullrich, R. Moshhammer, R. Dörner, O. Jagutzki, V. Mergel, H. Schmidt-Böcking, and L. Spielberger. Recoil-Ion Momentum Spectroscopy. *Journal of Physics B*, 30:2917, 1997.
- [68] W. Meissel, D. Winklehner, F. Aumayr, M. C. Simon, R. Ginzl, J. R. Crespo López-Urrutia, and J. Ullrich. Electron Emission from Insulators Irradiated by Slow Highky Charged Ions. *e-Journal of Surface Science and Nanotechnology*, 6:54, 2008.
- [69] J. R. Crespo López-Urrutia, J. Braun, G. Brenner, H. Bruhns, A. Lapierre, A. J. González Martínez, V. Mironov, R. Soria Orts, H. Tawara, M. Trinczek, and J. Ullrich. Optimization of the Charge State Distribution of the Ion Beam Extracted from an EBIT by Dielectronic Recombination. *Review of Scientific Instruments*, 75(5):1560, 2004.
- [70] V. Mäckel. *Spektroskopische Untersuchung dielektronischer Resonanzen von hochgeladenen Ionen*. Diplomarbeit, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2006.
- [71] G. Herrmann. Optical Theory of Thermal Velocity Effects in Cylindrical Electron Beams. *Journal of Applied Physics*, 29:2, 1958.

- [72] L. Brillouin. A Theorem of Lamour and Its Importance for Electron in Magnetic Fields. *Physical Review*, 67:260, 1945.
- [73] K. Widmann. *High-Resolution Spectroscopic Diagnostics of Very High-Temperature Plasmas in the Hard X-ray Regime*. PhD Thesis, U.S. Department of Energy, Lawrence Livermore National Laboratory, 1999.
- [74] R. Becker and M. Kleinod. Space-Charge Compensation of Electron Beams by Thermal Ions and the Production of Highly Charged Ions in EBIS and EBIT. *Review of Scientific Instruments*, 65:1063, 1994.
- [75] V. Maeckel. Persönliche Mitteilung. 2007.
- [76] X. Lu, H. Watanabe, and F. J. Currell. Numerical Simulation of the Charge Balance in an EBIT. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 205:234, 2003.
- [77] F. J. Currell, H. Kuramoto, S. Ohtani, C. Scullion, E. J. Sokell, and H. Watanabe. Measurements of Temperature Dynamics of Ions Trapped Inside an Electron Beam Ion Trap and Evidence for Ionization Heating. *Physica Scripta*, T92:147, 2001.
- [78] I. P. Shkarofsky, T. W. Johnston, and M. P. Bachynski. *The Particle Kinematics of Plasmas*. Addison-Wesley, Reading, MA, 1966.
- [79] E. D. Donets and V. P. Ovsyannikov. Investigation of Ionization of Positive Ions by Electron Impact. *Soviet Physics JETP*, 53(3):466, 1981.
- [80] H. Risken and T. Frank. *The Fokker-Planck-Equation. Methods of solution and Applications*. Springer, Berlin, 2007.
- [81] C. E. Klots. Evaporative Cooling. *J. Chem. Phys.*, 83(11):5854, 1985.
- [82] S. Chu, L. Hollberg, J. E. Bjorkholm, A. Cable, and A. Ashkin. Three-dimensional viscous confinement and cooling of atoms by resonance radiation pressure. *Physical Review Letters*, 55:48, 1985.
- [83] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wienman, and E. A. Cornell. Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor. *Science*, 269:198, 1995.
- [84] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle. Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 75(22):3969, 1995.
- [85] B. M. Penetrante, J. N. Bardsley, M. A. Levine, D. A. Knapp, and R. E. Marrs. Evaporative Cooling of Highly Charged Dysprosium Ions in an Enhanced Electron-Beam Ion Trap. *Phys. Rev. A*, 43:4873, 1991.

- [86] L. Spitzer. *Physics of Fully Ionized Gases*. Interscience, New York, 1956.
- [87] V. Pastukhov. Collisional Losses of Electrons from an Adiabatic Trap in a Plasma with a Positive Potential. *Nucl. Fusion*, 14:3, 1974.
- [88] Y. F. Liu, K. Yao, R. Hutton, and Y. Zou. Numerical Simulations using an improved Computational Scheme for Ion Charge State Distribution and Ion Temperature Evolution in an EBIT. *Journal of Physics B*, 38:3207, 2005.

# Danksagung

An dieser Stelle möchte ich die Gelegenheit ergreifen, mich bei vielen Menschen zu bedanken, durch deren Hilfe und Unterstützung es möglich war, diese Arbeit zum Erfolg zu führen.

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

Ein ganz besonderer Dank geht an meinem Betreuer, den Leiter der EBIT-Gruppe, Herrn Privatdozent José Ramón Crespo López-Urrutia. Viele fruchtbare Diskussionen und hilfreiche Ratschläge haben mir wertvolle Hilfestellungen gegeben. Doch ganz besonders wichtig war für mich, dass er mir die Freiheit gegeben hat, nach meinen Vorstellungen das Thema zu bearbeiten. Ich hatte die Möglichkeit, auch abseits der Vorgaben frei zu experimentieren und damit richtig zu „forschen“. Dies machte es mir möglich, auch neue Felder und unerforschte Bereiche zu betreten und so spannende Ergebnisse zu erzielen. Weiter gab er mir die Chance, meine Forschung auf drei Konferenzen in Darmstadt, Riezlern (Österreich) und Tokio (Japan) vorzustellen und so direkt an der aktuellen wissenschaftlichen Diskussion teilzuhaben. Daneben bin ich ihm auch für seine Unterstützung meiner Tätigkeiten und Aufgaben neben der Wissenschaft sehr dankbar, da es mir durch seine Flexibilität so möglich war, meine Mandate weiterhin ausführen zu können.

Den hervorragenden Berechnungen von Zoltán Harman ist zu verdanken, dass überhaupt eine Forschung in die Richtung der resonanten Rekombinationen höherer Ordnung möglich war. Er hat damit die Grundlage gelegt, auf ein bisher unerforschtes Gebiet vorzudringen. Ohne die vielen fachlichen Diskussionen mit ihm wären die gewonnenen Erkenntnisse nicht zu erzielen gewesen.

Die gesamte EBIT-Gruppe hat mir immer wieder in verschiedenster Weise geholfen. So haben vor allem Lodewijk Arntzen, Rainer Ginzler, Katharina Kubicek, Volkhart Mäkel und Martin Simon durch tatkräftige Unterstützung die Bedienung der komplexen Experimente erleichtert und mir in vielen Diskussionen geholfen, meine Gedanken über das Projekt zu entwickeln. Sie haben mir ein wirklich schönes kollegiales Umfeld geschaffen, in dem es viel Spaß gemacht hat zu arbeiten. Hierzu haben auch meine Büronachbarn Yang Yang in den ersten Monaten und später Sven Bernitt und René Klawitter ganz entscheidend beigetragen, ebenso wie Thomas Baumann, Monika Binder, Günter Brenner, Sascha Epp und Maria Schwarz, zudem noch viele weitere Mitglieder der Forschungsgruppe von Joachim Ullrich.

I would also like to thank Prof Hiro Tawara for his helpful comments. With his great experience he gave some important hints and helped solving a lot of problems.

Zudem möchte ich auch besonders Professor Paul Mokler hervorheben. Er hat mich früh bei meinen ersten Ideen für Experimente unterstützt und motiviert, auch wenn das Ziel sehr unsicher war, und seine Ratschläge waren sehr wertvoll.

Thomas Busch und Lars Sterzenbach haben mit großem Einsatz viele kleine und große technische Probleme gelöst und so war gerade im Bereich der Elektronik ihr Beitrag entscheidend.

Die Zeit am Max-Planck-Institut für Kernphysik war zudem bereichert von interessanten Projekten außerhalb der Forschung, so danke ich Bernold Feuerstein für die Möglichkeit, ein Exponat für eine Ausstellung im Technikmuseum Berlin mit zu entwickeln und Arne Senftleben für die Zusammenarbeit bei der Entwicklung der neuen Homepage der Gruppe.

Die Diplomarbeit als Abschlussarbeit des Studiums gibt weiter die Gelegenheit, mich bei denjenigen Menschen zu bedanken, die die Zeit meines Studiums bereichert und mich dabei in unterschiedlicher Weise unterstützt haben.

An ganz besonderer Stelle ist hier Jennifer Wagner hervorzuheben. Ihr enormes fachliches Wissen auf der einen und ihre tolle Freundschaft auf der anderen Seite haben ganz entscheidend zu vielen Erfolgen während des Studiums und der Diplomarbeit beigetragen.

Ein Studium der Physik wird deutlich erleichtert durch eine ausgezeichnete Vorbereitung der Grundlagen, wie ich sie viele Jahre von meinem Physiklehrer Wolfgang Kniss erfahren durfte. Er hat mich zudem für die Aufnahme des Studiums motiviert und auch später durch sein Interesse an meiner Forschung begleitet.

Auch außerhalb der Physik habe ich große Unterstützung erfahren. Nicht abzuschätzen ist der Beitrag meines Bruders Markus Beilmann, der mir in unzähligen Fällen und oft sehr spontan viele tägliche Aufgaben abgenommen hat. Ohne seine Unterstützung hätte ich meine Aufgaben neben der Physik nicht in dieser Weise weiter erfüllen können und sich auf ihn verlassen zu können hat mir unbezahlbare Sicherheit gegeben.

Meine Eltern Berthold und Roswita Beilmann haben durch ihre moralische und nicht zuletzt durch ihre finanzielle Unterstützung mein Studium in Berlin und Heidelberg erst möglich gemacht und mir so viele Chancen eröffnet.

Viele Freunde, Kollegen und Institutionen könne ich weiter nennen, die wertvolle Beiträge für diese Arbeit und zur Unterstützung während des Studiums geleistet haben. Ihnen allen gebührt mein großer Dank.