

# INAUGURAL - DISSERTATION

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

vorgelegt von  
Dipl.-Phys. Christian Beilmann  
aus Ludwigshafen am Rhein

Tag der mündlichen Prüfung: 31.01.2012



# Über die Stärke mehrelektronischer Resonanzen bei der Photorekombination und -ionisation

Gutachter:

PD Dr. José R. Crespo López-Urrutia

Prof. Dr. Thomas Stöhlker



## Zusammenfassung

Die Beiträge trielektronischer Prozesse zur resonanten Rekombination hochgeladener Ionen sowie der zur Rekombination zeitumgekehrte Prozess der resonanten Photoionisation wurden mit hoher Auflösung experimentell untersucht. Bei den bisher wenig beachteten Anregungskanälen der resonanten Elektron-Ion-Rekombination einer höheren Ordnung als der dielektronischen Rekombination (DR) wurden überraschend hohe Resonanzstärken gefunden, die den Zustand astrophysikalischer und erdgebundener Plasmen deutlich beeinflussen können. Die systematische Untersuchung dieser zwischen zwei Hauptschalen wirkenden Trierlektronischen Rekombination (TR) an  $L$ -Schalen Ionen von Argon und Eisen – zwei astrophysikalisch bedeutende Elemente – ermöglichte die Aufstellung entsprechender Skalierungsregeln in Abhängigkeit von  $Z$ . Diesen folgend nimmt die Bedeutung der TR für niedrige  $Z$  stark zu, so dass die TR den zugehörigen dielektronischen Prozess erster Ordnung (DR) an Stärke übertreffen kann.

Das physikalische Bild dieser Vorgänge wurde weiter vervollständigt durch Untersuchungen des zeitumgekehrten Prozesses, nämlich der Photoionisation von Natriumartigem Eisen. Die erstmals gleichzeitig detektierte radiative Relaxation photoangeregter Zustände durch weiche Röntgenstrahlung führte zu einer Bestimmung absoluter Resonanzenergien einer wichtigen Gruppe von in der astrophysikalischen Spektroskopie bisher unaufgelösten Übergängen.

Der Vergleich mit eigenen *Configuration Interaction*-Rechnungen ermöglichte eine detaillierte Analyse der Einflüsse von Elektronen-Korrelation und Konfigurationsmischungen auf beide dynamischen Prozesse und zeigte unerwartet hohe Einflüsse der Breit-Wechselwirkung bereits bei Ionen mittlerer Kernladung.

## Abstract

Contributions of trielectronic processes to resonant recombination of highly charged ions as well as the time reversed process of recombination, the resonant photoionization, were experimentally investigated with high resolution. For this hitherto mostly ignored excitation channels of a higher order with respect to dielectronic recombination (DR), unexpected high resonance strength values were found that can considerably influence the state of astrophysical or earthbound plasmas. Systematic studies of trielectronic recombination (TR) interacting between two principal shells in argon and iron – two elements of astrophysical relevance – allowed for the development of scaling laws in dependence of  $Z$ . Following them, the importance of TR for low- $Z$  substantial increases, so TR strength can dominate over the respective first-order process (DR).

The physical model of these processes was completed by investigations of the time reversed process, namely the photoionization of sodium-like iron. The first simultaneous detection of the radiative relaxation of these photoexcited states by soft X rays lead to the determination of absolute resonance energies of an important group of transitions that had not been resolved in astrophysical spectroscopy.

The comparison with our own *configuration interaction*-calculations enabled for a detailed analysis of influences by electron correlation and configuration mixing to both dynamical processes and demonstrated the unexpectedly strong influence of the Breit-interaction in ions of medium nuclear charge.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Physikalische Vorgänge bei der resonanten Absorption von Elektronen und Photonen durch hochgeladene Ionen</b>	<b>7</b>
2.1	Hochgeladene Ionen, Elektronen und Photonen . . . . .	8
2.2	Fundamentale Prozesse bei der Kollision von Elektronen und Photonen mit Ionen . . . . .	10
2.3	Resonante Absorption von Elektronen und Photonen durch hochgeladene Ionen . . . . .	13
2.3.1	Bildung angeregter Zustände . . . . .	13
2.3.2	Zerfall angeregter Zustände . . . . .	17
2.3.3	Gesamtprozesse mit resonanter Absorption . . . . .	18
2.4	Ansätze zur Berechnung der Prozess-Parameter . . . . .	22
2.4.1	Wellenfunktionen als Beschreibungen des Zustands . . . . .	22
2.4.2	Bestimmung der Wellenfunktionen für Mehr-Elektronen-Systeme . . . . .	24
2.4.3	Berechnung der Prozessparameter über die Wellenfunktionen . . . . .	26
<b>3</b>	<b>Das Experiment</b>	<b>33</b>
3.1	Die Präparation des Targets . . . . .	34
3.1.1	Erzeugung und Einschluss hochgeladener Ionen . . . . .	34
3.2	Die Projektile: Teilchenstrahlen aus Elektronen und Photonen . . . . .	39
3.2.1	Elektronen als Projektile . . . . .	39
3.2.2	Photonen als Projektile . . . . .	43
3.3	Detektionssysteme . . . . .	50
3.3.1	Detektion von Photonen . . . . .	50
3.3.2	Detektion von Ionen mit Ladungszustandsselektion . . . . .	52
3.3.3	Das Detektionssystem im Überblick . . . . .	56
3.4	Datenaufnahmesystem und Datenanalysesoftware . . . . .	59
3.4.1	Das Datenaufnahmesystem MPA-3 . . . . .	60
3.4.2	Datenanalyse mit speziell entwickelter Software . . . . .	63
3.5	Der FLEXIBLE ATOMIC CODE zur Berechnung der Atomstruktur . . . . .	65

<b>4</b>	<b>Resonante Rekombination und die Bedeutung der Prozesse höherer Ordnung</b>	<b>69</b>
4.1	Experimentelles Vorgehen . . . . .	70
4.1.1	Messprinzip der Rekombinations-Experimente . . . . .	70
4.1.2	Die Auflösung der Rekombinationsmessungen . . . . .	71
4.1.3	Kalibrationen und systematische Effekte . . . . .	76
4.2	Ergebnisse der Experimente zur resonanten Rekombination . . . . .	77
4.2.1	Rekombination in hochgeladenes Argon . . . . .	77
4.2.2	Rekombination in hochgeladenes Eisen . . . . .	79
4.2.3	Zusammenstellung der <i>K-L</i> -Resonanzspektren in Argon, Eisen und Krypton . . . . .	81
4.3	Diskussion der resonanten Rekombination höherer Ordnung . . . . .	83
4.3.1	Stärkenverhältnisse . . . . .	84
4.3.2	<i>Z</i> -Skalierung der trielektronischen Rekombination . . . . .	85
4.3.3	Trielektronische Rekombination in theoretischen Berechnungen . . . . .	88
4.3.4	Elektronenkorrelation und Breit-Wechselwirkung . . . . .	93
<b>5</b>	<b>Resonante Absorption von energiereichen Photonen</b>	<b>97</b>
5.1	Experimentelles Vorgehen . . . . .	98
5.1.1	Messprinzip der Photoabsorptions-Experimente . . . . .	98
5.1.2	Aus der Messung resultierende Resonanzspektren . . . . .	100
5.1.3	Systematische Effekte und deren Korrektur . . . . .	102
5.1.4	Testmessungen der Photoabsorption in $\text{Fe}^{14+}$ . . . . .	109
5.2	Photoabsorption in $\text{Fe}^{15+}$ . . . . .	110
5.2.1	Resonante Photoionisation . . . . .	110
5.2.2	Resonante Photonenstreuung . . . . .	114
5.2.3	Detaillierte Überprüfung der theoretischen Berechnungen . . . . .	116
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>121</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>124</b>
	<b>Abkürzungen, Bezeichnungen und Konventionen</b>	<b>145</b>
	<b>Veröffentlichungen</b>	<b>151</b>



# Kapitel 1

## Einleitung

Die Bedeutung der Korrelation für die Dynamik elektronischer Prozesse in gebundenen Systemen kommt immer mehr zum Vorschein. Während die Theorie der Niveaustuktur schon seit langem den Vergleich zum Experiment nicht zu scheuen braucht, sind Berechnungen der Matrixelemente zur Dynamik schwieriger, und die Möglichkeit, sie zu testen, mit größeren Unsicherheiten behaftet.

Weder die quantenmechanische Beschreibung atomarer Systeme durch die Schrödinger-Theorie [179–182] noch deren relativistische Formulierung durch *Paul Dirac* [63] decken solche Korrelations-Effekte ab.

*Liese Meitner* [139] und *Pierre Auger* [6] beschrieben eine strahlungslose, direkte Wechselwirkung zwischen gebundenen Elektronen in einem atomaren System, nach der die Energie eines angeregten Elektrons bei dessen Abregung *unmittelbar* auf ein anderes gebundenes Elektron übertragen wird und dieses ionisiert. Diese als *Auger-Meitner-Effekt* bekannte Autoionisation und dessen zeitliche Umkehr, der resonante Elektroneneinfang, stellten sich als fundamentale und sehr häufige Prozesse in Plasmen heraus [43].

So wurde durch *G. Breit* wenige Jahre nach der Einführung der Quantenmechanik der Wechselwirkungsoperator, welcher bisher nur die gegenseitigen Coulomb-Potentiale der beteiligten Elektronen berücksichtigte, auf relativistische Effekte wie die Retardierung oder die durch die Bewegung des Elektrons induzierten magnetischen Wechselwirkungen erweitert [37–39].

Neuerdings kann man mit Experimenten besser an solche Prozesse herankommen, und auch die Theorie findet genauere Beschreibungen für diese dynamischen Vorgänge unter Einbeziehung der Korrelationen.

Gerade die *dielektronische Rekombination* (DR) [23, 43, 136], bei welcher als Umkehrung des Auger-Meitner-Effekts ein Elektron strahlungslos in ein Ion eingefangen wird und mit seiner frei werdenden Energie ein gebundenes Hüllenelektron anregt, bevor sich dieser nun doppelt angeregte Zustand radiativ stabilisiert, ist Gegenstand intensiver Studien. Insbesondere seit zwei Jahrzehnten werden diese verstärkt an hochgeladenen Ionen durchgeführt. Solche Targets eignen sich bestens zur Messung quantenelektrodynamischer (QED) und relativistischer

Effekte (siehe z.B. [57, 85, 113, 143] und andere).

Neben vielen für die Plasmaphysik wichtigen Ergebnissen gaben DR-Experimente Einblicke in Phänomene der Quanteninterferenz [88, 89, 119], behandelten Probleme der QED zweiter Ordnung [36] oder gewährten einen Zugang zu kernphysikalischen Größen wie dem Ladungsradius von Atomkernen durch die Messung von Isotopenverschiebungen [35, 183]. Prozesse, deren Dynamik durch resonant angeregte Zwischenzustände erheblich beeinflusst werden, findet man nicht nur in der Atomphysik. Kernreaktionen und chemische Prozesse bieten weitere Beispiele [5, 42, 149, 156].

Überall, wo ein Plasma mit vielen energiereichen Elektronen besteht, ist die dielektronische Rekombination ein dominanter Prozess – sei es im astrophysikalischen Zusammenhang [43, 44, 65] oder in Laborplasmen, wie sie in Tokamak- und Stellarator-Experimenten vorkommen [31, 49, 56].

Der zur Rekombination zeitumgekehrte Prozess, bei dem ein durch energiereiche Photonen angeregter ionischer Zustand autoionisierend über den Auger-Meitner-Effekt zerfällt, stellt eine *resonante Photoionisation* (PI) dar (siehe etwa [201]). Wird ein Plasma von energiereicher Röntgenstrahlung durchflutet, ist die PI der dominante photonische Prozess in dieser Materie. So wird gerade im Bereich der Astrophysik großen Wert auf die Untersuchung der PI gelegt, da nämlich seit jüngster Zeit die Röntgenspektren der aktiven galaktischen Kerne den entscheidenden Einfluss der PI auf die Entwicklung dieser Objekte zeigen [155].

Untersuchungen an resonanten Kollisions-Prozessen von hochgeladenen Ionen mit Elektronen und Photonen, welche in einer guten Übersicht in [147] dargestellt sind, spannen somit ein sehr weites und aktuelles Gebiet der physikalischen Grundlagenforschung auf.

Die vorliegende Arbeit widmet sich der Untersuchung dieser Mechanismen der inneratomaren Elektron-Elektron-Wechselwirkungen. Dabei wurden beide Zeitrichtungen der genannten dynamischen Prozesse – die resonante Rekombination auf der einen Seite und die resonante Photoionisation auf der anderen – experimentell an hochgeladenen Ionen untersucht und mit eigenen sowie verfügbaren Rechnungen (v.a. [99] für die DR, [96] für die PI) analysiert.

In Prozessen des resonanten Elektroneneinfangs höherer Ordnung gewinnt die Elektronen-Korrelation noch stärker an Bedeutung: hier werden mehrere Hüllenelektronen durch den Energieübertrag eines eingefangenen Elektrons simultan angeregt. Erste Anzeichen solcher Prozesse wurden beispielsweise in der Dreifachanregung von  $\text{Li}^+$ -Ionen durch Elektroneneinfang gesehen, wobei sich diese Zustände jedoch nicht stabilisierten und daher eine resonante Elektronenstreuung darstellen [148].

Eine vollständige Rekombination höherer Ordnung wurde gesucht mit Experimenten, in denen ein Ionenstrahl durch einen Kristall geschossen wurde, jedoch ohne Erfolg [48]. Der erste Nachweis der sogenannten *trielektronischen Rekombination* (TR) gelang *Michael Schnell* und Kollegen in einem Speicherring-

Experiment mit Beryllium-artigen Chlor  $\text{Cl}^{13+}$  – Ionen, als durch den Einfang niederenergetischer Elektronen mit kinetischen Energien von wenigen 10 eV beide  $2s^2$ -Elektronen innerhalb der  $L$ -Schale auf  $2p^2$ -Zustände angeregt wurden [178]. Die Berücksichtigung dieses trielektronischen Effekts in der Intra-Schalen-DR – vor allem Beryllium-artiger Ionen – etablierte sich durch weitere Speicherring-Experimente [154, 176]. Intuitiv vermutet man jedoch, dass gemeinsame Anregungen zweier Elektronen verschiedener Schalen sowie Orbitalen eine weitaus geringere Bedeutung spielen, da die Elektronen-Korrelation zu schwach scheint.

In der dieser Arbeit vorausgegangenem Diplomarbeit [18] wurde erstmals eine *resonante Inter-Schalen Rekombination höherer Ordnung* in Kohlenstoff- und Stickstoff-artiges Krypton  $\text{Kr}^{30+,29+}$  ( $Z = 36$ ) nachgewiesen. Dabei handelt es sich um einen  $KL$ - $LLL$ -Prozess, bei welchem ein freies Elektron in die  $L$ -Schale eingefangen wird und dabei gleichzeitig sowohl ein  $K$ -Schalen-Elektron als auch ein weiteres Elektron aus der  $L$ -Schale anregt. Danach stabilisiert sich der dreifach angeregte Zustand wieder radiativ. So wurde festgestellt, dass dieser Prozess bis zu 6% der gesamten Rekombination in Kohlenstoff-artiges Krypton ausmacht [22]. Es war gewissermaßen überraschend, dass solche Prozesse über Schalengrenzen hinweg bei Kollisionsenergien von nahezu 10 keV so deutlich auftreten können.

Die systematische Untersuchung dieses  $KL$ - $LLL$ -TR Prozesses im Rahmen der vorliegenden Dissertation brachte jedoch noch größere Überraschungen hervor: Bei der experimentellen Analyse der Resonanzspektren der Elektron-Ion-Rekombination in Helium- bis Sauerstoff-artiges Argon ( $Z = 18$ ) und Eisen ( $Z = 26$ ) [20] wurde festgestellt, dass die trielektronische Rekombination bei niedrigen Kernladungen nicht nur deutlich an Bedeutung zunimmt, sondern unter Umständen sogar die Rekombination dominiert und die bekannte dielektronische Rekombination an Stärke übertrifft [21]. Diese Messungen wurden durch erhebliche hierbei erreichte Verbesserungen der Auflösung ermöglicht [19]. Die hochaufgelösten Spektren zeigten zudem den ersten Nachweis der *quadruelektronischen Rekombination* (QR) als resonante Rekombination dritter Ordnung mit der simultanen Anregung dreier Hüllenelektronen durch den Einfang eines Kontinuumelektrons.

In der Diskussion der Ergebnisse zur resonanten Elektron-Ion-Rekombination höherer Ordnung wird die Abhängigkeit der Resonanzstärke und deren Verhältnis zur entsprechenden dielektronischen Rekombination näher analysiert und ein Skalierungsgesetz angegeben, welches die erweiterte Elektron-Elektron-Wechselwirkung beim Elektroneneinfang berücksichtigt [21]. Diese Überlegungen werden von *ab initio*–MCDF (*Multiconfiguration Dirac-Fock*)–Rechnungen, die von *Zoltan Harman* zur Verfügung gestellt wurden [99], bestätigt.

Elektronen wechselwirken also stärker über Schalengrenzen hinweg als bisher im Allgemeinen angenommen wurde. Hierbei ist auch entscheidend, welche Kombinationen von Elektronenanregungen auf Grund von Paritätsregeln möglich sind [22]. Demnach ist etwa die Inter-Schalen-TR in Beryllium-artigen Ionen

in erster Näherung verboten, wie die Analyse der TR in den Eisen- und Argon-Spektren dieser Arbeit bestätigen wird.

Die Einflüsse der Elektronen-Korrelation bei der TR rufen nach weitergehende Untersuchungen. Ein verwandter Gegenstand aktueller Forschung bei der dielektronischen Rekombination in hochgeladenen Ionen ist die Breit-Wechselwirkung [25, 80, 150]. Für die TR ist die Elektron-Elektron-Wechselwirkung im Vergleich zur dielektronischen Rekombination erster Ordnung wesentlich wichtiger, und so ergibt sich durch die prominenten TR-Resonanzen in mittelschweren Ionen ein wesentlich sensitiverer Reaktionsmechanismus zur Analyse der Elektronen-Korrelation. Durch den Vergleich der Stärken-Verhältnisse zweier aufgelöster Resonanzen der trielektronischen Rekombination in Kohlenstoff-artiges Eisen mit im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten *Configuration-Interaction*-Rechnungen unter Anwendung des FLEXIBLE ATOMIC CODE (FAC) von *Ming Feng Gu* [92, 94] können die deutlichen Einflüsse der Breit-Wechselwirkung auf die beobachteten Resonanzstärkeverhältnisse gezeigt werden.

Einen weiteren experimentellen Zugang zu den Mechanismen des Auger-Meitner-Effekts liefert die Untersuchung der resonanten Photoionisation in der zweiten Gruppe von Experimenten zu dieser Dissertation. Dieser grundsätzliche Umkehrprozess der resonanten Rekombination – im Falle der PI wird ein energiereiches Photon absorbiert, was zu einem angeregten Zustand des Target-Ions führt, welcher autoionisierend zerfallen kann – wurde bei Kollision hochgeladener Ionen mit Röntgen-Photonen untersucht. Photonenstrahlen können mit Monochromatoren in sehr guter Energieschärfe präpariert werden. In den hier vorgestellten Experimenten wurde eine Auflösung von bis zu  $\Delta E_{\text{FWHM}}/E \approx 1/6000$  bei einer Projektilenergie von 812 eV erreicht, fast eine Größenordnung besser als bei Messungen mit Elektronenstrahlen.

Bei den im Rahmen dieser Arbeit unterstützten Experimenten zur Photoionisation von Magnesium-artigem  $\text{Fe}^{14+}$  [189, 190] und verschiedenen Ionen von Stickstoff und Argon [191, 192] in den Jahren 2008 und 2009 wurden bei der PI bisher nicht erreichbare Ladungszustände studiert. Diese Untersuchungen fortsetzend wurden für die vorliegende Dissertation im Sommer 2010 mit Photonen der Synchrotron-Strahlungsquelle BESSY II in Berlin Photonen-Absorptionsexperimente in Natrium-artigen  $\text{Fe}^{15+}$  – Ionen durchgeführt und die bis dato höchsten photoionisierten Ladungszustände gemessen.

Hierbei konnten erstmals beide Zerfallskanäle der nach der Photoanregung entstandenen autoionisierenden Zustände – sowohl die radiative als auch die autoionisierende Abregung – gemeinsam beobachtet werden. So wurde die Unterdrückung des autoionisierenden Zerfallskanals einer Resonanz bei gleichzeitiger vollständiger Abregung durch Photoemission gezeigt. Vorhersagen diverser Theorien in Bezug auf die Autoionisation wurden dabei überprüft.

Unterstützt wurde die Auswertung wiederum von eigenen Rechnungen unter Verwendung des FAC-Pakets, die mit Berechnungen aus der Literatur verglichen wurden.

Neben den erweiterten Erkenntnissen zur Stärke und Dominanz der Elektron-Elektron-Wechselwirkung sowie der Konfigurationsmischung in theoretischen Berechnungen könnten die Erkenntnisse aus dieser Arbeit zu einem Schritt der Lösung diverser astrophysikalischer Probleme beitragen. Hier spielt Eisen in den beiden untersuchten Ionisationsvarianten eine besondere Rolle:

Große Mengen von  $M$ -Schalen-Ionen von Eisen und anderer leichter Elemente tragen wesentlich zu solaren Opazitäten bei, die nach wie vor Rätsel aufgeben [168]. So gibt es unter anderem eine deutliche Diskrepanz zwischen errechneten Opazitäten und den helioseismologisch ermittelten Häufigkeiten der leichten bis mittelschweren Elemente in der Sonne [11]. Zwei unabhängige, groß angelegte Projekte zur Errechnung dieser Opazitäten, das *OPAL-Project* [108] und das *Opacity Project* [197], weisen untereinander sehr gute Übereinstimmungen auf, jedoch können sie bisher diese teils erheblichen Unterschätzungen der Opazitäten nicht erklären. Die resonante Rekombination und die Photoionisation sind wesentliche Prozesse bei der Bestimmung dieser Größen [10]. Besonders hervorgehoben werden seit wenigen Jahren die inner-Schalen-Beiträge der berechneten Prozesse – vor allem  $1s \rightarrow n$  und  $2p \rightarrow n$  Übergänge [9], die in dieser Arbeit detailliert untersucht wurden. Auch wenn trielektronische Beiträge zur Rekombination prinzipiell bei einer ausreichenden Konfigurationsmischung Berücksichtigung finden, spielen sie in der Diskussion dieser Opazitäten keine Rolle. Die hier demonstrierte Relevanz dieser Prozesse höherer Ordnung gerade bei leichten Elementen, wie sie die Zusammensetzung der Sonne dominieren, kann die Überlegungen in eine neue Richtung lenken.

Vergleiche der Resonanzenergien der Photoabsorption von Eisen- $M$ -Schalen-Ionen, die in dieser Arbeit mit einer bisher nicht erreichten Genauigkeit experimentell *absolut* bestimmt wurden, mit diversen theoretischen Berechnungen sind von der astrophysikalischen Gemeinschaft lange gewünscht, denn eine Reihe von Interpretationsansätzen zur Dynamik galaktischer Plasma-Winde stützt sich einzig und alleine auf das Vertrauen in theoretische Vorhersagen [53]. Dabei ist dieser Resonanz-Bereich in den Röntgenspektren aktiver galaktischer Kerne als *unaufgelöste Übergangsgruppe* (UTA) [17, 171] nach wie vor ein Rätsel, worum sich manche Debatte bezüglich deren Geschwindigkeitsverteilungen dreht [96, 107]. Präzise experimentelle Untersuchungen der Photoionisations-Resonanzen in Eisen aus [190] und der vorliegenden Dissertation können wesentlich zum besseren Verständnis dieser ungeklärten Fragen beitragen.

So wird in der vorgestellten Arbeit nach einer generellen Betrachtung der Wechselwirkungsprozesse von energiereichen Elektronen und Photonen mit hochgeladenen Ionen und einer Zusammenstellung der theoretischen Hintergründe der Beschreibung der Atomstruktur sowie dieser dynamischen Prozesse (Kapitel 2) eine Darstellung der verwendeten Apparate sowie der Rechnungen gegeben (Kapitel 3). Dies sind zum einen die Elektronenstrahl-Ionenfalle (*Electron Beam Ion Trap (EBIT)*) [71, 127] zur Erzeugung und zum kontrollierten Einschluss hochgeladener Ionen als Target-Elemente, zum anderen die Einrichtungen und Me-

thoden zur Erzeugung und energetischen Kontrolle der Projekttilstrahlen, was für Elektronen wieder die EBIT selbst ist, für Photonen die *Synchrotron-Strahlungsquelle BESSY II*. Zudem wird die speziell erstellte Software zur Auswertung der Messdaten und das für die theoretischen Berechnungen verwendete Programm FAC beschrieben. Dem folgen ausführliche Beschreibungen der experimentellen Vorgehensweise und die Darstellung sowie Diskussion der Ergebnisse der Untersuchungen der resonanten Elektron-Ion-Rekombination (Kapitel 4) und der resonanten Photoabsorption (Kapitel 5). In der Zusammenfassung werden die Ergebnisse der beiden Experiment-Gruppen in einen generellen Zusammenhang gestellt, und ein Ausblick auf bereits laufende und mögliche weitere Untersuchungen gegeben.

## Kapitel 2

# Physikalische Vorgänge bei der resonanten Absorption von Elektronen und Photonen durch hochgeladene Ionen

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Untersuchung physikalischer Vorgänge, bei denen ein Ion durch Einfang von Elektronen bzw. Absorption von Photonen angeregt wird und dieser Zwischenzustand wieder über die Emission von Elektronen oder Photonen zerfällt.

In diesem Kapitel sollen allgemein die fundamentalen Wechselwirkungsprozesse von Elektronen und Photonen mit hochgeladenen Ionen dargestellt werden, bevor im Detail auf die untersuchten Prozesse eingegangen wird.

Es schließt sich eine Darstellung der Konzepte zur Berechnung der Atomstruktur an, womit die Prozessparameter errechnet werden können. Dabei wird insbesondere auf die Berechnung von Mehr-Elektronen-Systemen eingegangen sowie die verschiedenen Konzepte aktueller Methoden zur Berechnung der Prozesse dargestellt, welche in dieser Arbeit mit den experimentellen Werten verglichen werden.

Für einen vertieften Einblick in die in diesem Kapitel in aller Kürze dargestellten Konzepte der Beschreibung der Atomstruktur und der physikalischen Vorgänge sei auf die umfangreiche Literatur verwiesen, wovon repräsentativ für die theoretische Physik [28, 124, 140] (in den Darstellungen auch zusammengefasst als [2]) sowie die Lehrbücher der Experimentalphysik [24, 60, 84] (zusammengefasst als [1]) erwähnt seien. Die Beschreibungen der physikalischen Vorgänge dieses Kapitels folgen auch hauptsächlich diesen Darstellungen und sind an einigen Stellen zusätzlich explizit zitiert. Darüber hinaus wird mancherorts auf ausgewählte Spezialliteratur verwiesen.

## 2.1 Hochgeladene Ionen, Elektronen und Photonen

Zu Beginn sollen die Reaktionspartner der vorgestellten Experimente – hochgeladene Ionen als Targets sowie Elektronen und Photonen als Projektile – kurz charakterisiert werden. Dabei werden im Wesentlichen die Eigenschaften betrachtet, die für die Experimente und physikalischen Prozesse von Bedeutung sind, wobei auf die Produktion und Kontrolle dieser Teilchen in den Abschnitten 3.1 und 3.2 eingegangen wird. Daneben werden die in der Arbeit verwendeten Nomenklaturen eingeführt.

### Hochgeladene Ionen

In der Regel betrachtet man ein atomares System als hochgeladen, wenn es im Vergleich zu seiner Kernladung  $Z$  verhältnismäßig viele Elektronen aus der Hülle verloren hat.

Eine gute Übersicht über die Physik dieser Systeme bietet u.a. [57, 85, 113, 143]. Die Nomenklatur solcher Ionen orientiert sich entweder an der absoluten positiven Ladung, was der Anzahl der fehlenden Elektronen entspricht (z.B.  $\text{Ar}^{12+}$ ), oder an der *isoelektronischen Sequenz*, indem das Ion mit dem neutralen Element gleicher Elektronenanzahl verglichen wird, so zum Beispiel *Kohlenstoff-artiges Argon*. In der Spektroskopie ist eine in römischen Zahlen nummerierte Schreibweise üblich, bei der ebenfalls die Ionisationsstufe gezählt, jedoch das neutrale Element mit I bezeichnet wird. So entspricht der Ladungszustand der um 1 verringerten Bezeichnung, und das obige Beispiel würde mit Ar XIII angegeben werden. In dieser Arbeit wird vor allem die erste und zweite Bezeichnung verwendet.

Der Anregungszustand eines Ions lässt sich mit der jeweiligen Elektronenkonfiguration ausdrücken. Hierbei werden die Hüllenelektronen mit der Hauptquantenzahl  $n$ , der Drehimpulsquantenzahl  $l$  und dem Gesamtdrehimpuls  $j = l + s$  als Summe aus  $l$  und dem Elektronenspin  $s$  charakterisiert. Es wird auch häufig der Gesamtdrehimpuls  $J$  der Konfiguration angegeben. Üblicherweise wird  $n$  in arabische Zahlen, das Orbital  $l$  in Buchstaben (mit  $s$  für  $l = 0$ ,  $p$  für  $l = 1$ ,  $d$  für  $l = 2$  etc.) und die Besetzung dieser Orbitale in hochgestellten Zahlen ausgedrückt, wobei  $j$  den Orbitalen als tiefgestellte Zahl angehängt wird. So hat  $\text{Ar}^{12+}$

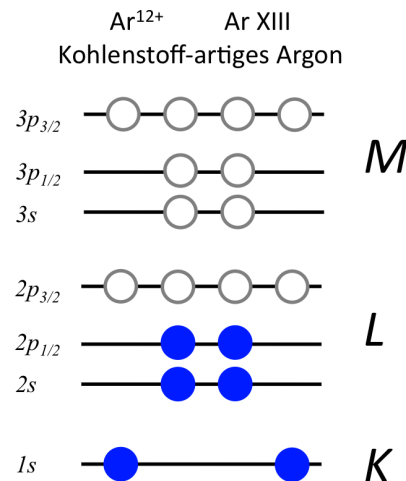


Abbildung 2.1: Nomenklatur für Ionen und Orbitale am Beispiel zwölffach ionisierten Argons. Ausgefüllte Kreise stellen besetzte Orbitale dar.



die Grundzustandskonfiguration  $1s^2 2s^2 2p_{1/2}^2$ . Vor allem bei der Angabe dynamischer Prozesse, bei denen in erster Linie nur die Hauptquantenzahl  $n$  (auch als *Schalen* bezeichnet) wichtig ist, wird diese in großen Buchstaben mit  $K$  für  $n = 1$ ,  $L$  für  $n = 2$  und  $M$  für  $n = 3$  angegeben, wie es etwa in der *Auger-Notation* (siehe Abschnitt 2.3.1) Verwendung findet.

## Elektronen

Die Elementarteilchen *Elektronen* werden als erste Gruppe der Projektile für die vorgestellten Absorptionsexperimente betrachtet. Sie sind Träger der negativen *Elementarladung*  $q = -1,602176565(35) \cdot 10^{-19} \text{ C}$  [141, 151].

Elektronen besitzen als *Leptonen* den *Spin*  $s = 1/2$  und unterliegen daher wie alle Fermionen (Teilchen mit halbzahligen Spin) dem Pauli-Prinzip [157], welches postuliert, dass in einem gebundenen System keine zwei Fermionen den gleichen Quantenzustand haben können. Daher lassen sich die einzelnen gebundenen Elektronen der Elektronenhülle eines Atoms oder Ions eindeutig mit den vier Quantenzahlen  $n, l, m$  (Drehimpulsprojektion auf die Quantisierungsachse – magnetische Quantenzahl) und  $s$  beschreiben.

## Photonen

*Photonen* sind nach dem Verständnis der Quantenphysik „Lichtteilchen“ oder „Energiepakete“ der Energie  $E = h\nu$  (wobei  $h$  das *Plancksche Wirkungsquantum* [163] und  $\nu$  die *Frequenz* darstellt), aus denen elektromagnetische Strahlung besteht [2, 163]. Nach dem Bild des Welle-Teilchen-Dualismus haben sie physikalische Eigenschaften wie herkömmliche mikroskopische Teilchen mit der Besonderheit der Masselosigkeit und der permanent definierten *Lichtgeschwindigkeit* von  $2,99792458 \cdot 10^8 \text{ m/s}$  [151].

Betrachtet man die *Helizität* des Photons als Projektion des Spinvektors auf seinen Impulsvektor  $\vec{S} \cdot \vec{k}$ , folgt für die masselosen Photonen, dass der Spin nur in Ausbreitungsrichtung des Photons gerichtet sein, jedoch eine Orientierung *in* oder *entgegen* der des Impulsvektors besitzen kann. Dabei führt eine Orientierung des Photonen-Spins in Ausbreitungsrichtung zu einer *linkszirkularen Polarisation* ( $\sigma^+$ ) und eine Spin-Orientierung entgegen dieser zu einer *rechtszirkularen Polarisation* ( $\sigma^-$ ) des Photons. *Linear polarisiertes Licht* ( $\pi$ ) entsteht durch die Überlagerung von  $\sigma^-$  und  $\sigma^+$ -Photonen, wobei sich die Drehimpulse gegenseitig aufheben [2, 111].

## 2.2 Fundamentale Prozesse bei der Kollision von Elektronen und Photonen mit Ionen

Die möglichen Wechselwirkungen von hochgeladenen Ionen mit Elektronen und Photonen sind vielfältig: von elastischen Streuprozessen über inelastische Prozesse, welche den inneren Zustand des Targets ändern, bis hin zu der Absorption des Projektils durch das Target. Dieser Abschnitt soll einen kurzen Überblick über diese Prozesse geben und schließlich zu den *resonanten Absorptions-* bzw. *Einfangprozessen* führen, welche die initialen Mechanismen der in dieser Arbeit behandelten Prozesse sind (siehe hierzu auch [57, 146, 147] und andere).

### Elastische Streuung

Im einfachsten Fall streut ein Projektil elastisch mit dem Target – in diesem Fall an den Hüllenelektronen oder an dem Zentralfeld des hochgeladenen Ions, wobei die Gesamtsumme der *kinetischen* Energien von Projektil und Target erhalten bleibt. So können bei der *Compton-Streuung* [50] sehr hochenergetische Photonen mit Elektronen des Ions, welche auf Grund ihrer deutlich kleineren Bindungsenergie gegenüber der Photonenenergie als quasi-freie Elektronen angesehen werden können, stoßen und diese aus dem Ion herauslösen. Die Photonenenergie nach dem Stoß ist demnach um die nun dem Elektron zugeführte kinetische Energie verringert. Im Grenzfall einer Photonenwellenlänge größer als die Ausdehnung des Targets spricht man von einer von der Frequenz  $\nu$  abhängigen ( $\propto \nu^4$ ) *Rayleigh-Streuung* [1], welche etwa die Ursache für die scheinbare Färbung des Himmels ist.

Auch Elektronen können elastisch an den hochgeladenen Ionen streuen: Hier beschreibt die *Rutherford-Streuung* [170] den Prozess der Ablenkung eines geladenen Teilchens durch Streuung an einer Ladungsverteilung, was historisch zur Entwicklung der Vorstellung des Atomaufbaus geführt hat. Wird der Spin des Projektils mit berücksichtigt, wie dies bei der *Mott-Streuung* [145] der Fall ist, können weitergehende Untersuchungen etwa in der Nuklear- und Elementarteilchenphysik unternommen werden.

### Inelastische Streuung

Wird ein Teil der kinetischen Energie beim Stoß mit dem Target vom System absorbiert, so dass nicht die gesamte Ausgangsenergie in kinetische Energie der Stoßpartner umgewandelt wird, liegt eine inelastische Streuung vor. Dies ist für Photonen dann der Fall, wenn das streuende Photon einen Teil seiner Energie abgibt, um ein Hüllenelektron des Ions anzuregen und demnach mit der um die Anregungsenergie verminderten Photonenenergie aus dem Stoß hervorgeht (*Raman-Streuung* [166]).

Gleiches ist für Elektronen als Projektil möglich: auch sie können im Rahmen der *Elektronenstoßanregung* [1, 146] einen Teil ihrer Energie an gebundene Elektronen abgeben, um diese anzuregen. Die Beobachtung dieses Effekts beim *Franck-Hertz-Versuch* [78] trug maßgeblich zur Bestätigung der Vorstellung diskreter Energieniveaus in Atomen bei. Wird beim Stoß mehr Energie von dem Elektronenprojektil auf das gebundene Elektron übertragen, als dessen Bindungsenergie beträgt, wird das gebundene Elektron durch *Elektronenstoßionisation* [1, 146] aus dem Ion herausgelöst, was auch das Grundprinzip einer *Elektronenstrahl-Ionenfalle* [128] ist, wie sie in den dargestellten Experimenten zum Einsatz kam und in Kapitel 3.1.1 besprochen wird.

### Allgemeine Absorptionsprozesse

Bei der Absorption wird das stoßende Projektil in das System des Targets absorbiert, so dass hier nicht mehr von einer Streuung im eigentlichen Sinne gesprochen werden kann (den Spezialfall der Resonanzstreuung behandelt der nächste Absatz). Demnach werden Photonen vollständig von den Hüllenelektronen absorbiert, so dass deren gesamte Energie auf das Elektron übertragen wird und dieses aus dem Ion herausgelöst wird, was den *Photoeffekt* [68] darstellt. Die kinetische Energie des nun freien Elektrons beträgt die ursprüngliche Photonenenergie vermindert um die Bindungsenergie des Elektrons.

Elektronen können ebenfalls von Ionen "absorbiert" werden, indem sie von dem positiven Zentralpotential angezogen und auf ein freies Energieniveau eingefangen werden (siehe hierzu auch die Erläuterungen zu den Konventionen auf Seite 149). Bei dieser *Radiativen Rekombination* (z.B. [28, 115, 122, 146, 153]) muss dann die kinetische Energie des freien Elektrons und die Bindungsenergie des Zustands, auf welches das Elektron eingefangen wurde und die nun zusätzlich frei wird, meist durch Abstrahlung eines Photons mit  $E_\gamma = E_e^{\text{kin}} + E_e^{\text{bind}}$  abgegeben werden. Bei der *Dreikörper-Rekombination* [146] kann diese Energie auch auf ein weiteres freies massives Teilchen übertragen werden.

### Resonante Absorptionsprozesse

Die interessantesten Prozesse unter den Kollisionen sind die resonanten Absorptionsprozesse: Hier werden an die in das System aufgenommenen Projektile die besondere Bedingung resonanter Energien gestellt. Die bei dem Absorptionsprozess freiwerdende Energie wird auf ein gebundenes Elektron übertragen, welches auf ein höheres, jedoch weiterhin gebundenes Energieniveau angeregt wird. Photonen wechselwirken hierbei wieder direkt mit den Elektronen durch *Photoanregung* [1], wodurch Energieniveaus im Rahmen der Absorptionsspektroskopie sehr genau vermessen werden können (siehe beispielsweise [71, 97, 135, 152]).

Der direkte Energieübertrag eines rekombinierten auf ein gebundenes Elektron wird als *resonanter Elektroneneinfang* [136, 146] bezeichnet und erfolgt strah-

lungslos. Durch das Einfangen auf ein freies Energieniveau und die gleichzeitige Anregung entsteht ein in der Regel doppelt, bei höheren Ordnungen mehrfach angeregter Zustand.

**Abregungsprozesse.** Diese durch die resonanten Absorptionsprozesse angeregten Zustände zerfallen nun wieder in einen energetisch günstigeren Zustand – in der Regel in den Ausgangszustand – und komplettieren somit den Absorptionsprozess. Die dem System zugeführte Energie muss bei der Abregung wieder abgeführt werden, was bei der *radiativen Relaxation* über ein Photon geschieht, bei der *Autoionisation* [6, 139] über ein Elektron. Das nächste Kapitel, welches die resonanten Absorptionsprozesse im Speziellen bespricht, wird auch auf diese Abregungsprozesse vertiefter eingehen.

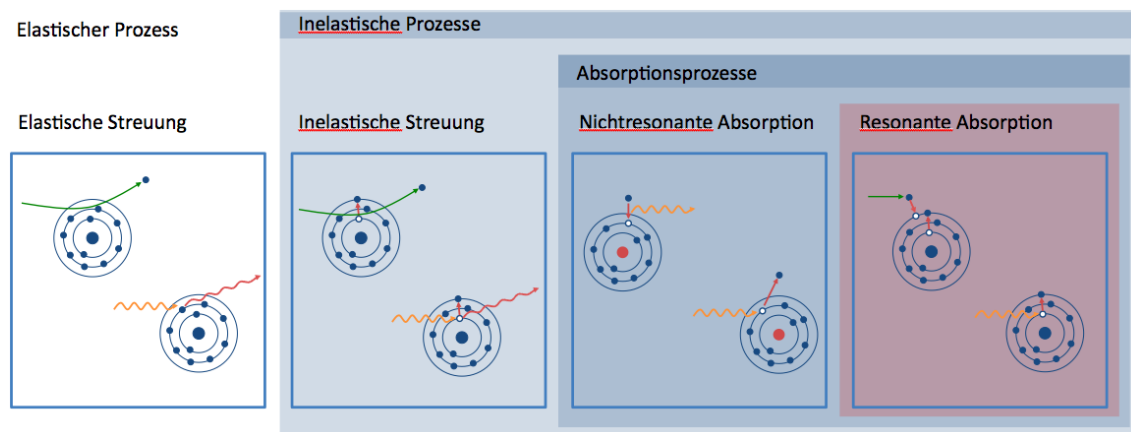


Abbildung 2.2: Fundamentale Wechselwirkungsprozesse zwischen Elektronen und Photonen mit Ionen in einer systematischen Zusammenstellung. Die hier untersuchten *resonante Absorptionsprozesse* als Anregungsmechanismus sind rot hinterlegt.

## 2.3 Resonante Absorption von Elektronen und Photonen durch hochgeladene Ionen

Nach der vorausgegangenen allgemeinen Betrachtungen werden nun die untersuchten Prozesse besprochen, welche eine resonante Absorption des Projektils als initialen Vorgang und eine autoionisierende oder radiative Abregung zur Stabilisierung vollführen.

### 2.3.1 Bildung angeregter Zustände

Resonante Absorptionsprozesse zeichnen sich dadurch aus, dass bei der Absorption der Projektils die freiwerdende Energie strahlungslos ein gebundenes Elektron anregt.

#### Anregung durch Elektroneneinfang

Der resonante Einfang eines freien Elektrons  $e^-$  in ein hochgeladenes Ion führt zur Umladung des aufnehmenden Ions und dessen Anregung nach dem Schema



wobei im einfachen Fall der Anregung *eines* gebundenen Elektrons ein in der Regel insgesamt zweifach angeregter Zustand des Targetions entsteht: Die erste Anregung stellt das eingefangene Elektron dar, da es auf ein höheres, weil freies Ziel-Energieniveau eingefangen wird, und die zweite ist die Anregung des bereits gebundenen Elektrons auf ein höheres Niveau. Die kinetische Energie  $E_{\text{kin}}^e$  des Elektrons muss hierbei die Bedingung  $E_{\text{kin}}^e = E_{\text{anr}}^{\text{ion}} - E_{\text{bind}}^e$  mit der Anregungsenergie des Ions  $E_{\text{anr}}^{\text{ion}}$  und Bindungsenergie  $E_{\text{bind}}^e$  des Zustands, auf welches das freie Elektron eingefangen wird, erfüllen [146].

Folgt man der allgemeinen Notation für Auger-Prozesse (siehe unten), spricht man von einem  $A$ - $BC$ -Einfang, bei dem das freie Elektron in die  $B$ -Schale eingefangen wird, wobei das gebundene Elektron von der  $A$ -Schale auf die  $C$ -Schale angeregt wird [119]. Die Buchstaben  $A$ ,  $B$  und  $C$  sind Platzhalter für die entsprechenden Schalen-Bezeichnungen nach Hauptquantenzahlen ( $K$ ,  $L$ ,  $M$ ,  $\dots$ ). Die Angaben vor dem Trennstrich beschreiben also den Zustand des in den Prozess involvierten gebundenen Elektrons, während die Bezeichnungen danach deren Zustände nach dem Einfang anzeigen.

Eine quantitative Aussage über die Stärke des Prozesses wird über die Absorptionsrate  $A_e^a$  für die resonante Elektronenabsorption getroffen, wobei der obere Index  $a$  die Absorption anzeigt und der untere Index  $e$  die Elektronen als absorbierte Projektils repräsentiert.  $A_e^a$  ist in der nichtrelativistischen Betrachtung unabhängig von der Kernladung  $Z$  [2]:

$$A_e^a \sim Z^0, \quad (2.2)$$

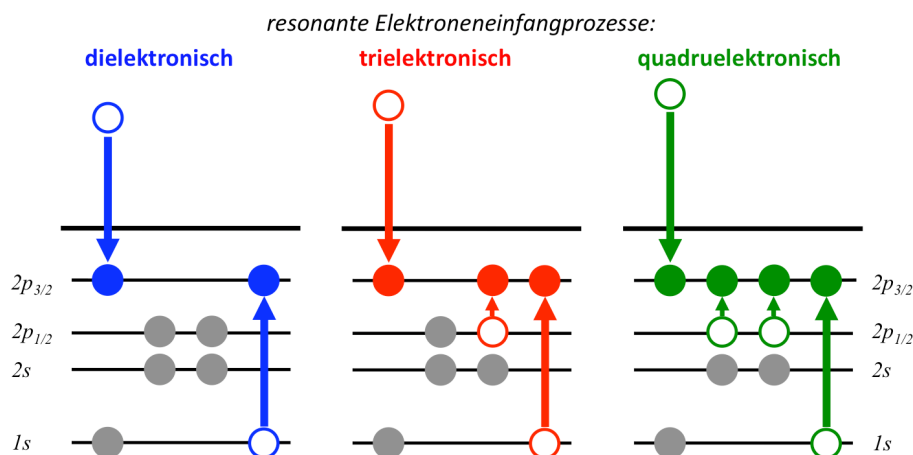
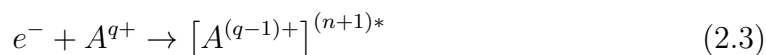


Abbildung 2.3: Schematische Darstellung der resonanten Elektroneneinfangprozesse erster und höherer Ordnung. *Links:* Dielektronischer Einfang (blau). *Mitte:* Trielektronischer Einfang (rot). *Rechts:* Quadrulektronischer Einfang (grün). Dieser Farbcode wird in späteren Abbildungen für die jeweiligen Rekombinationsprozesse angewandt.

wobei für die Untersuchung der  $Z$ -Skalierung relativistischer resonanter Elektronen-Absorptionsraten auf die Ausführungen in [209] verwiesen wird.

**Resonante Einfangprozesse höherer Ordnung.** Neben diesen resonanten Einfang-Prozessen erster Ordnung können auch mehrere gebundene Elektronen des Ions durch den Energietransfer eines eingefangenen Elektrons gleichzeitig angeregt werden. Somit beschreibt die Gleichung



einen allgemeinen  $A_1 \dots A_n - BC_1 \dots C_n$ -Einfangprozess  $n$ -ter Ordnung.

Bei den in dieser Arbeit betrachteten resonanten Absorptionen von Elektronen durchlaufen die Reaktionspartner  $K$ - $LL$ -Einfänge erster Ordnung – *Dielektronische Einfänge* – sowie die besonders untersuchten  $KL$ - $LLL$ -*Trielektronischen Einfänge* zweiter und daneben  $KLL$ - $LLLL$ -*Quadrulektronische Einfänge* dritter Ordnung, welche in Abbildung 2.3 für kohlenstoffartige Systeme beispielhaft illustriert sind.

Es handelt sich also im Speziellen um Einfangprozesse in die  $L$ -Schale unter Anregung eines  $K$ -Schalen-Elektrons und – bei den Prozessen höherer Ordnung – weiterer  $L$ -Schalen-Elektronen auf ein höheres Energieniveau der  $L$ -Schale. Die Target-Ionen sind demnach  $L$ -Schalen-Ionen, also Ionen, bei denen die  $L$ -Schale einfach bis vollständig ionisiert ist: Helium- bis Sauerstoff-artige Ionen. Weiter führt das Schema des Einfangs sofort zu Einschränkungen der möglichen Prozesse für verschiedene Ladungszustände: Es müssen mindestens  $(n + 1)$  freie Plätze in der  $L$ -Schale vorhanden sein mit der Zahl der Ordnung  $n$ , also gleich

der Anzahl der angeregten Elektronen inklusive des eingefangenen freien Elektrons. Ebenso müssen mindestens  $(n - 1)$  Elektronen in der  $L$ -Schale gebunden sein, welche neben dem  $K$ -Schalen-Elektron angeregt werden können. Demnach ist ein dielektronischer Einfang für Helium- bis Sauerstoff-artige Ionen möglich, ein trielektronischer Einfang prinzipiell für Lithium- bis Stickstoff-artige Ionen und ein quadrulektronischer Einfang für Beryllium- bis Kohlenstoff-artige Ladungszustände des Ions. Sollte ein Prozess vierter Ordnung in der  $L$ -Schale – ein *Quintuelektronischer Einfang* – beobachtet werden, wäre dieser nur für Bor-artige Ionen denkbar.

Beim dielektronischen Einfang kann ein Elektron der Energie  $E$  also ein Ion im Grundzustand  $|GZ\rangle$  in einen doppelt angeregten Zustand  $|AZ^{2*}\rangle$  transformieren über den Operator des Coulombfeldes des Ions  $V_{\text{coul}}$ , was durch die Übergangsamplitude  $\langle AZ^{2*}|V_{\text{coul}}|GZ, E\rangle$  repräsentiert wird [2].

Der durch *trielektronischen Einfang* geformte autoionisierende Zustand  $|TE\rangle$  kann durch eine minimale Linearkombination von zweifach und dreifach angeregtem Zustand beschrieben werden, welche den Gesamtdrehimpuls und die Parität teilen, wobei der dreifach angeregte Zustand  $|AZ^{3*}\rangle$  die Superposition dominiert [22]:

$$|TE\rangle = c_1|AZ^{3*}\rangle + c_2|AZ^{2*}\rangle, c_1 > c_2. \quad (2.4)$$

**Paritätsbedingte Auswahlregel.** Die Parität eines gebundenen Elektrons ist abhängig von seiner Drehimpulsquantenzahl  $l$  und lässt sich mit  $\pi_{el} = (-1)^l$  formulieren, wobei  $\pi = 1$  für positive und  $\pi = -1$  für negative Parität steht [2]. Somit ergibt sich die Gesamtparität einer Elektronen-Konfiguration als Produkt der Einzelparitäten der gebundenen Elektronen mit

$$\Pi_{|\text{konfig}\rangle} = (-1)^{\sum_{i=1}^N l_i}, \quad (2.5)$$

wobei  $|\text{konfig}\rangle$  eine beliebige Konfiguration bezeichnet und die Summe  $\sum_{i=1}^N l_i$  über alle  $N$  gebundenen Elektronen der Konfiguration läuft.

Damit ein trielektronischer Einfang möglich ist, muss es nun nach Gleichung 2.4 überlagerte zweifach- und dreifach angeregte autoionisierte Zwischenzustände, also „rein dielektronische“ und „rein trielektronische Zustände“ mit gleicher Parität geben. Da in dieser Arbeit  $K$ - $L$ -Einfangprozesse untersucht wurden, beschränken sich die folgenden Betrachtungen aus Gründen der Einfachheit nur auf Zustände mit besetzten  $K$ - und  $L$ -Schalen.

Der höchste Ladungszustand, für den ein trielektronischer  $KL$ - $LLL$ -Electroneneinfang möglich ist, ist der *Lithium-artiger Ionen* mit der dominanten Grundzustandskonfiguration  $|1s^22s\rangle$ , aus dem heraus nach dielektronischem  $K$ - $LL$ -Einfang als Zustände sowohl  $|1s2s^22p\rangle$  mit nach Gleichung 2.5 negativer und  $|1s2s2p^2\rangle$  mit positiver Parität möglich sind. Somit findet man für Lithium-artige Ionen auch einen nach der Parität passenden trielektronischen  $KL$ - $LLL$ -Zustand. Bei *Beryllium-artigen Ionen*, welche im Grundzustand eine volle  $1s$ - und  $2s$ -Schale

haben mit  $|1s^2 2s^2\rangle$ , ist die einzig mögliche dielektronische Konfiguration  $|1s 2s^2 2p^2\rangle$  mit positiver Parität. Ein trielektronischer Zustand könnte nur  $|1s 2s 2p^3\rangle$  lauten, da der Einfang nur auf einen freien  $2p$ -Platz erfolgen kann und dabei sowohl ein  $1s$ - als auch ein  $2s$ -Elektron auf einen freien Platz in  $2p$  angeregt werden müssen. Dieser Zustand hat negative Parität, was der Bedingung in Gleichung 2.4 widerspricht. Daraus folgt, dass es bei Beryllium-artigen Ionen in erster Näherung ohne Berücksichtigung der Mischung durch höher angeregte Zustände keinen  $KL$ - $LLL$ -trielektronischen Einfang geben kann [22]. Diese Überlegung wird durch die Beobachtungen in Kapitel 4 bestätigt werden.

Bei *Bor-artigen Ionen* mit Grundzustand  $|1s^2 2s^2 2p\rangle$  sind nur dielektronische Zustände negativer Parität ( $|1s 2s^2 2p^3\rangle$ ) möglich. Trielektronisch sind mit  $|1s 2s^2 2p^3\rangle$  und  $|1s 2s 2p^4\rangle$  Zustände mit beiden Paritäten denkbar, da hier auch  $L$ -Schalen-Anregungen innerhalb der  $2p$ -Unterschale möglich sind. So kann es auch für Bor-artige Ionen trielektronischen Einfang geben. Gleiches gilt für *Kohlenstoff-artige Ionen*, deren dielektronische Zustände  $|1s 2s^2 2p^4\rangle$  positive Parität haben, die trielektronischen mit  $|1s 2s^2 2p^4\rangle$  – geformt mit einer  $2p$ -Anregung – und  $|1s 2s 2p^5\rangle$  wieder beide Paritäten möglich machen. Der letzte Ladungszustand, für den trielektronischer Einfang möglich ist, ist der *Stickstoff-artige* Zustand. Der positiven Parität des dielektronischen  $|1s 2s^2 2p^4\rangle$  stehen wieder beide Paritäten durch die möglichen  $2s \rightarrow 2p$  oder  $2p \rightarrow 2p$  Anregungen gegenüber, was auch hier den trielektronischen Einfang nach Gleichung 2.4 ermöglicht.

In der Diskussion der trielektronischen Rekombination in Abschnitt 4.3 werden auf Grundlage dieser Überlegungen weitere Folgerungen zu möglichen Rekombinationskanälen und den daraus resultierenden Stärken gezogen.

### Anregung durch Photonenabsorption

Anders als Elektronen wechselwirken Photonen im semiklassischen Bild nicht mit dem Zentralpotential des Ions, sondern direkt mit dessen Hüllenelektronen. Bei der resonanten Absorption wird die gesamte Energie  $h\nu$  des Photons auf ein gebundenes Elektron übertragen und dieses in ein höheres Energieniveau angeregt.

Die Rate für die resonante Absorption von Photonen  $A_p^a$  ist, wie beispielsweise in [2] gezeigt wird, in der vierten Potenz abhängig von der Kernladung  $Z$ :

$$A_p^a \sim Z^4, \quad (2.6)$$

wobei die Indizes  $a$  und  $p$  analog zu Gleichung 2.2 für die Absorption  $a$  von Photonen  $p$  stehen.

**Auswahlregeln.** Die Anregung eines Atoms oder Ions durch Photonen folgt bestimmten Auswahlregeln, welche auf die Drehimpulsüberträge und Paritätsregel begründet sind.



Bei der Absorption eines Photons mit zirkularer Polarisation ist der Spin in Ausbreitungsrichtung ( $\sigma^+$ ) oder entgegen dieser ( $\sigma^-$ ) gerichtet, so dass diese einen Gesamtdrehimpuls von  $J = 1$  haben und eine entsprechende Drehimpulsänderung in Quantisierungsrichtung im angeregten Ion bewirken. So ändert sich der Drehimpuls projiziert auf die Quantisierungsachse, was mit der Quantenzahl  $M$  angegeben wird, um  $\Delta M = \pm 1$  für zirkular polarisierte  $\sigma^+$  und  $\sigma^-$ -Photonen.  $\pi$ -Licht, welche gemäß den Betrachtungen in Abschnitt 2.1 einen effektiven Gesamtdrehimpuls von  $J = 0$  haben, ändern bei Absorption auch nicht den Drehimpuls des Targetions in Quantisierungsrichtung, so dass für linear polarisiertes Licht die Auswahlregel  $\Delta M = 0$  gilt.

Drehimpulsänderungen in Quantisierungsrichtungen sind daher entscheidend für die entsprechende Quantenzahl  $M$ . Der Drehimpuls  $L$  ändert sich unabhängig von der Polarisation der Photonen um den Betrag 1, so dass die Auswahlregel  $\Delta L = \pm 1$  für photonische Übergänge bei  $L - S$ -Kopplung gilt. Diese Regel ergibt sich auch auf Grund der Parität, die ebenfalls durch  $l$  festgelegt wird (siehe Gleichung 2.5).

Neben den hier angesprochenen Auswahlregeln existieren noch weitere für den Gesamtdrehimpuls ( $\Delta J = 0, \pm 1$  mit dem Verbot von  $J = 0 \rightarrow J = 0$ ) sowie für Multipol-Übergänge höherer Ordnung, zu deren Vertiefung auf die einschlägige Literatur (z. B. [2, 111]) verwiesen wird.

### 2.3.2 Zerfall angeregter Zustände

Angeregte Zustände zerfallen nach ihrer Lebensdauer wieder in den Grundzustand. Hierfür können sie die gleichen Wege nutzen, die auch zur Anregung genutzt werden. Nach dem Prinzip des *detaillierten Gleichgewichts* [2, 34] können die entsprechenden Emissionsraten  $A_x^e$  (mit  $x = \{e, p\}$  für die Emission von Elektronen bzw. Photonen) aus den Absorptionsraten ineinander übergeführt werden:

$$g^e A_x^e = g^a A_x^a, \text{ mit } x = e, p \quad (2.7)$$

Hier stehen  $g^e$  und  $g^a$  für die entsprechenden Entartungsfaktoren für die Emission und Absorption des Projektils.

#### Radiativer Zerfall

Bei der radiativen Abregung fällt das angeregte Elektron auf einen energetisch günstigeren freien Platz unter Aussendung eines Photons. Damit stellt dieser Zerfallskanal den Umkehrprozess der Photoabsorption dar, dessen Rate  $A_p^{e(d \rightarrow i)}$  gemäß dem detaillierten Gleichgewicht mit der Photonenabsorptionsrate  $A_p^{a(i \rightarrow d)}$  durch

$$A_p^{a(i \rightarrow d)} = \frac{2J_d + 1}{2J_i + 1} A_p^{e(d \rightarrow i)} \quad (2.8)$$

ausgedrückt werden kann mit dem Gesamtdrehimpuls  $J_i$  des Ausgangszustands und  $J_d$  der des angeregten Zwischenzustands [2].

Die Symmetrie dieser Prozesse führt zur polarisationsabhängigen Abstrahlcharakteristik, die in Abschnitt 2.4.3 näher besprochen wird.

Bei doppelt angeregten Zuständen, die radiativ zerfallen, werden meist zwei Photonen emittiert, so dass strenggenommen zwei Relaxationsprozesse stattfinden. Es ist jedoch auch möglich, dass sich beide Elektronen über *ein* Photon gemeinsam abregen, was als "Zwei-Elektronen-Ein-Photon"-Prozess (*engl.*: *two electron one photon (TEOP) process*) beispielsweise in [102,205] bezeichnet wird und in [210] gemessen wurde.

### Autoionisierender Zerfall

Als Umkehrprozess des Elektroneneinfangs kann beim autoionisierenden Zerfall die freiwerdende Energie strahlungslos auf ein gebundenes Elektron übertragen werden, welches eine geringere Bindungsenergie hat, und dadurch ionisiert wird. Dies entspricht dem in Abbildung 2.4 dargestellten *Auger-Meitner-Prozess* [6, 139].

Dabei können Elektronen zwei verschiedene Spin-Zustände einnehmen, was in der Ratengleichung

$$A_e^{a(i \rightarrow d)} = \frac{2J_d + 1}{2(2J_i + 1)} A_e^{e(d \rightarrow i)}. \quad (2.9)$$

berücksichtigt wird.  $A_e^{e(d \rightarrow i)}$  wird in der Literatur oft auch als *Auger-Rate* bezeichnet.

Ebenso können auch hier Prozesse höherer Ordnung auftreten, wenn etwa durch die Abregung *zweier* angeregter Elektronen die Energie auf ein gebundenes Elektron übertragen wird, um dieses zu ionisieren. Der analoge Anregungsprozess wäre in diesem Fall der trielektronische Elektroneneinfang. Ein solcher *drei-Elektronen-Auger-Prozess* wurde kürzlich in dreifach geladenem Kohlenstoff experimentell nachgewiesen [59].

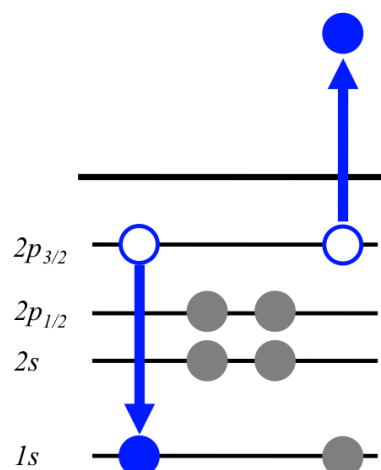


Abbildung 2.4: Illustration des Auger-Meitner-Effekts am Beispiel eines Kohlenstoff-artigen Ions.

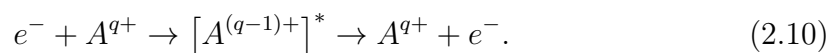
### 2.3.3 Gesamtprozesse mit resonanter Absorption

Die hier untersuchten physikalischen Gesamtprozesse sind demnach zusammengesetzt aus dem *Absorptions-* bzw. *Einfangprozess*, bei welchem durch resonante

Absorption von Elektronen oder Photonen das Targetion angeregt wird, und dem darauf folgenden *Emissionsprozess* mit Abregung durch Emission von Elektronen oder Photonen. Wie oben beschrieben findet bei asymmetrischen Prozessen, also bei solchen, deren Anregungsprojektil ein anderes ist als das Abregungsteilchen, eine Umladung des Ions statt, während für die symmetrischen Prozesse der Endzustand des Ions dem Ausgangszustand vor der Reaktion entspricht und so das Projektil am Targetion lediglich *resonant gestreut* wird. In Abbildung 2.5 sind die verschiedenen Prozesse und ihre Kanäle schematisch dargestellt.

*Anregung durch Elektroneneinfang, Abregung durch Elektronenemission:*  
**Resonante Elektronenstreuung**

Die resonante elastische Streuung verläuft nach dem Reaktionsschema



Bei Mehrfachanregung durch Elektroneneinfang kann ein Elektron bei der Abregung ionisiert werden, die anderen aber radiativ in den Grundzustand übergehen. Dabei wird weniger Energie auf das ionisierte Elektron übertragen.

**Nachweis des Prozesses:** Zur Beobachtung der resonanten Elektronenstreuung ist die Messung der Auger-Elektronen notwendig, welche energieselektiv erfolgen muss. Eine solche Messung ist in EBITs auf Grund des intensiven Elektronenstrahls unmöglich (siehe Kapitel 3.1.1). Dadurch ist er der einzige der vier möglichen Gesamtprozesse, welcher in den vorgestellten Experimenten nicht untersucht werden konnte.

*Anregung durch Elektroneneinfang, Abregung durch Photonenemission:*  
**Resonante Rekombination**

Das Elektron wird resonant eingefangen und bleibt gebunden, weil der autoionisierende Zwischenzustand *radiativ* zerfällt. Wird das Elektron dielektronisch

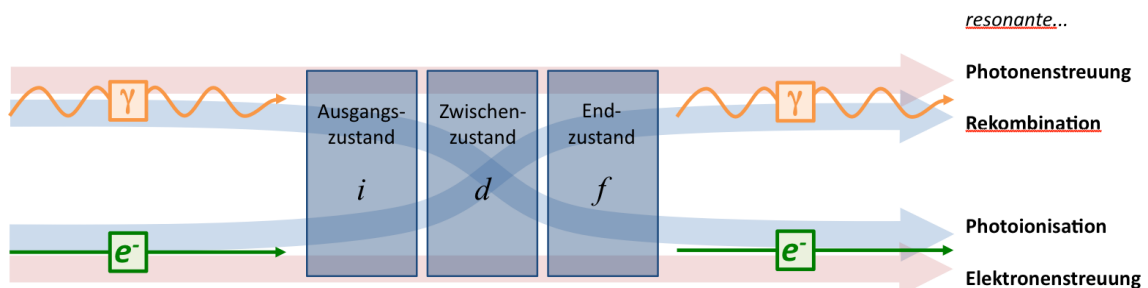
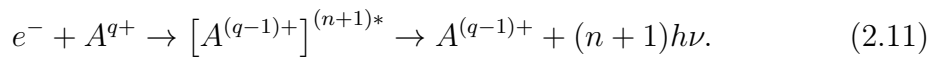


Abbildung 2.5: Die Gesamtprozesse der Anregung von Ionen durch die Absorption von Photonen oder Elektronen und den anschließenden Zerfall des angeregten Zustands über diese Teilchen.

eingefangen, bewirkt dies den Gesamtprozess der **Dielektronischen Rekombination (DR)**, entsprechend hierzu für die Prozesse  $n$ -ter Ordnung die **Trielektronische Rekombination (TR)** bei  $n = 2$  und **Quadruelektronische Rekombination (QR)** für  $n = 3$ . Um den autoionisierenden Zwischenzustand und somit die innerionischen Übergänge zu beschreiben, wird die in Abschnitt 2.3.1 vorgestellte Auger-Notation verwendet, so dass man etwa von einer  $K$ - $LL$ -DR spricht:



**Nachweis des Prozesses:** Die ausgesandten Photonen haben charakteristische Energien, die nachgewiesen werden können, etwa im Falle der  $K$ - $LL$ -DR ein  $K_\alpha$ -Photon.

Da dieser Prozess eine Umladung des Targetions zur Folge hat, kann auch das umgeladene Ion nachgewiesen werden.

*Anregung durch Photonenabsorption, Abregung durch Photonenemission:*  
**Resonante Photonenstreuung**

Diese resonante Streuung oder *Resonanzfluoreszenz* wird beschrieben durch:

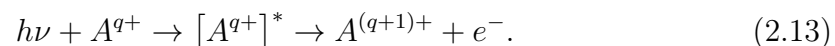


Bei der einfachen Anregung des Ions ist die Energie des emittierten Photons gleich der des anregenden, bei einer Mehrfachanregung sind die Energien der emittierten Photonen dagegen verschieden der des absorbierten Photons.

**Nachweis des Prozesses:** Die emittierten Photonen mit charakteristischer Energie können wie in Abschnitt 3.3.1 ausgeführt nachgewiesen werden, wobei polarisationsabhängige Winkelverteilungen zu beachten sind.

*Anregung durch Photonenabsorption, Abregung durch Elektronenemission:*  
**Resonante Photoionisation**

Der durch Photonenabsorption gebildete angeregte Zustand kann ebenso autoionisierend zerfallen, was zu einer resonanten Photoionisation des Targetions führt. Dieses ist nach dem Prozess um eine Einheit höher geladen:



**Nachweis des Prozesses:** Beide Reaktionsprodukte können im Prinzip nachgewiesen werden. Wie bereits vorher erwähnt ist eine Messung von Elektronen äußerst schwierig, so dass in den vorgestellten Experimenten das umgeladene Ion detektiert wird.

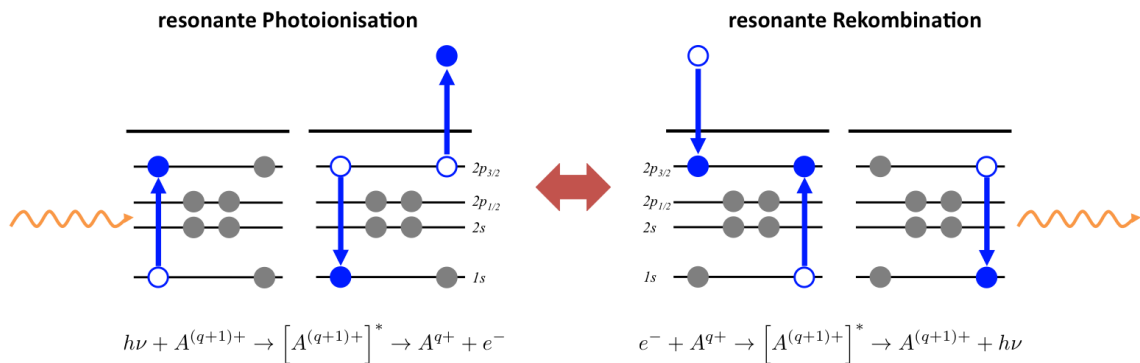


Abbildung 2.6: Schematische Darstellung der resonanten Photoionisation und Rekombination als Umkehrprozesse am Beispiel eines Kohlenstoff-artigen Ions. Der Zwischenzustand ist ein einfach angeregter Zustand, der sowohl durch Absorption eines Photons als auch durch Einfang eines Elektrons auf das niedrigste freie Niveau erreicht werden kann.

### Resonante Rekombination und Photoionisation als Umkehrprozesse

Die Reaktionsschemen der ladungszustandsändernden Prozesse zeigen, dass die resonante Rekombination der Umkehrprozess der resonanten Photoionisation ist, wie Abbildung 2.6 verdeutlicht: hier ist die Rekombination in ein Kohlenstoff-artiges Ion zu einem Stickstoff-artigen Ion gezeigt als Spiegelprozess der Photoionisation eines Stickstoff-artigen Ions zu einem Kohlenstoff-artigen.

Strenggenommen gilt dies – bei der Annahme des Grundzustands des Target-Ions als Ausgangszustand  $i$  – jedoch nur für solche Spezialfälle der resonanten Rekombination, bei der durch Elektroneneinfang und Anregung die beiden freien nächsthöheren Energieniveaus besetzt werden, so dass im Ergebnis ein *einfach* angeregter Zwischenzustand  $d$  entsteht. Ein solcher Zustand kann auch durch Photonenabsorption und der resultierenden Anregung *eines* Hüllenelektrons entstehen und anschließend autoionisierend zerfallen. Bei den weiteren möglichen Reaktionsabläufen der resonanten Rekombination, bei denen das freie Elektron etwa auf ein höheres Niveau – auch innerhalb der gleichen Schale – eingefangen wird, entsteht durch die resultierende Anregung eines Hüllenelektrons ein mehrfach angeregter Zustand, der sich über zwei Photonen stabilisieren kann. Der entsprechende Umkehrprozess wäre eine resonante Photoionisation, deren initialer Prozess entweder eine Photoanregung mit zwei Photonen jeweils resonanter Energie oder die gemeinsame Anregung zweier Hüllenelektronen darstellt, was eine Photoanregung höherer Ordnung ist.

## 2.4 Ansätze zur Berechnung der Prozess-Parameter

Mit dem Gerüst der Quantenmechanik lassen sich die oben beschriebenen Prozesse berechnen – ausgehend von der Wellenfunktion, über die die Energie der Konfigurationen und schließlich die Prozessparameter wie Anregungs- und Zerfallsraten, Wirkungsquerschnitte und Resonanzstärken sowie Winkelverteilungen angegeben werden können.

Die Komplexität der untersuchten Objekte als Mehr-Elektronen-Systeme und die dynamischen Abläufe stellen mitunter große Herausforderungen für die Theorie dar. Zu deren Berechnung sind verschiedene Methoden entwickelt worden, wozu dieser Abschnitt einen Überblick über die Konzepte geben soll [2].

### 2.4.1 Wellenfunktionen als Beschreibungen des Zustands

Jeder *quantenmechanische Zustand*  $\Psi_x$  kann beschrieben werden durch seine *Wellenfunktion*  $\psi$ . Diese Wellenfunktion muss die Schrödinger-Gleichung [179–182]

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (2.14)$$

erfüllen, nach der die Energie  $E$  des Zustands als Eigenwert des *Hamilton-Operators*  $H$  berechnet werden kann.

Das Zentralpotential des Kerns als punktförmige positive Zentralladung, welches auf die Elektronen im Abstand  $r$  wirkt, kann mit  $V(r) = -\frac{Z\alpha}{r}$  angegeben werden, womit sich der Hamilton-Operator eines nichtrelativistischen Ein-Elektronen-Systems zu  $H = -\frac{\Delta}{2\mu} - \frac{Z\alpha}{r}$  ergibt und die Eigenwertgleichung

$$\left(-\frac{\Delta}{2\mu} - \frac{Z\alpha}{r}\right)\psi_{nlm}(\vec{r}) = E_n\psi_{nlm}(\vec{r}) \quad (2.15)$$

durch Wellenfunktionen der Form

$$\psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (2.16)$$

erfüllt wird mit der Radialfunktion  $R_{nl}$  und den Kugelflächenfunktionen  $Y_{lm}(\theta, \phi)$ , welche von den Kugelkoordinaten  $r, \theta$  und  $\phi$  abhängen [2]. Die diskreten Indizes  $n, l$  und  $m$  bezeichnen dabei die bereits in Abschnitt 2.1 angesprochenen Quantenzahlen des Zustands.

Somit ist die Wellenfunktion  $|\psi; n, l, m\rangle$  des Zustands  $\Psi$  durch diese Quantenzahlen charakterisiert. Mit der reduzierten Masse  $\mu = \frac{m_e M}{m_e + M}$  wird das Verhältnis der Kernmasse  $M$  zur Elektronenmasse  $m_e$  berücksichtigt.

Die Bindungsenergien der diskreten Zustände sind dann die Eigenwerte [2]

$$E_n = -\frac{\mu(Z\alpha)^2}{2n^2} \quad (2.17)$$

des Hamilton-Operators  $H$  mit einer Quantisierung durch die Hauptquantenzahl  $n$ , welche nur positive ganzzahlige Werte annehmen kann.

Hieraus ist direkt abzulesen, dass die Energien eines Zustands mit festem  $n$  quadratisch zur Kernladungszahl  $Z$  skalieren:

$$E_n \sim Z^2. \quad (2.18)$$

**Relativistische und quantenelektrodynamische Erweiterungen.** Die *Dirac-Gleichung* [52,63,172]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left( \vec{\alpha} \cdot \vec{p}c + \beta m_e c^2 - \frac{Z\alpha}{r} \right) \psi \quad (2.19)$$

verwendet den relativistischen *Dirac-Hamilton-Operator*  $H_D = \vec{\alpha} \cdot \vec{p}c + \beta m_e c^2$ , wobei  $\alpha$  und  $\beta$  für die *Dirac-Matrizen* [172] stehen und  $\vec{p}$  für den Viererimpuls des Elektrons.

Die entsprechenden Eigenwerte

$$E_{nj} = m_e c^2 \left[ 1 - \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} - \frac{(Z\alpha)^4}{2n^3} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{2}{4n} \right) + \dots \right] \quad (2.20)$$

berücksichtigen neben der Ruheenergie im ersten und der nichtrelativistischen Bindungsenergie im zweiten Term auch die Feinstruktur, welche durch den dritten Term repräsentiert wird. Diese wird neben den relativistischen Massenänderungen des Elektrons vor allem durch die Spin-Bahn-Kopplung  $j$  verursacht.

Weiter muss die Energie des Zustands korrigiert werden für *quantenelektrodynamische (QED)* Effekte, welche zur *Lamb-Verschiebung* [123,142] führen, wie die *Selbstenergie* [27,200] des Elektrons und die *Vakuumpolarisation* [198,202].

### Mehr-Elektronen-Systeme

Auch der die relativistischen Effekte berücksichtigende Dirac-Hamilton-Operator  $H_D$  beschreibt nur die Bindung *eines* Elektrons im Coulomb-Feld des Kerns. Für Mehrelektronen-Systeme müssen die Coulomb-Wechselwirkungen der Elektronen untereinander berücksichtigt werden, welche mit dem Potential

$$v_c^{ij} = \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (2.21)$$

beschrieben werden können.

**Die Breit-Wechselwirkung.** Weitere Korrekturen wie die magnetische Wechselwirkung und relativistische Retardierungseffekte werden mit Hilfe des Breit-Operators  $B_{ij}$  berücksichtigt [37–39]:

$$B_{ij} = -\frac{1}{2r_{ij}} \left[ \alpha_j \cdot \alpha_j + \frac{(\alpha_i \cdot r_{ij})(\alpha_j \cdot r_{ij})}{r_{ij}^2} \right] \quad (2.22)$$

Die Dirac-Matrizen  $\alpha_i$  lassen sich mit den *Pauli Spin Matrizen*  $\sigma_i$

$$\sigma_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

zusammensetzen [172].

**Mehr-Elektronen Hamilton-Operator.** Die Elektron-Elektron-Wechselwirkungen erweitern den Dirac-Hamilton-Operator zu einem entsprechenden Operator für Mehrelektronensysteme - oft als *Dirac-Coulomb-Breit Hamilton-Operator*

$$H_{DCB} = \sum_i H_D^i + \sum_{i<j} v^{ij} + \sum_{i<j} B_{ij}, \quad (2.24)$$

bezeichnet, wobei über die Elektronen  $i$  summiert wird und deren Wechselwirkungen mit den Elektronen  $j$  Berücksichtigung findet [2, 142, 172, 195].

## 2.4.2 Bestimmung der Wellenfunktionen für Mehr-Elektronen-Systeme

Sind die Eigenwerte der Dirac-Gleichung (2.19) für Ein-Elektronen-Systeme vollständig analytisch berechenbar, ist dies für Systeme mit zwei und mehr Elektronen nicht mehr der Fall.

Unterschiedliche numerische Ansätze bestimmen die Wellenfunktion meist durch Variationsverfahren nach dem Grundprinzip der *Hatree-Fock Methode* [100]. Es handelt sich hierbei um ein iteratives Verfahren, bei dem die optimale Wellenfunktion durch Variation der Einzelwellenfunktionen gefunden wird. Das Variationsziel ist eine minimale Energie als Eigenwert des Hamilton-Operators. Dieser ist bei dem allgemeinen Hatree-Fock-Verfahren nichtrelativistisch. Im Rahmen des *Dirac-Fock-Verfahrens* [90] wird statt des nichtrelativistischen Hamilton-Operators der relativistische Dirac-Operator eingesetzt. Das Potential der Mehrelektronen-Systeme wird dadurch berücksichtigt, dass für jedes Elektron ein *effektives Potential* angenommen wird, welches neben dem Kern von den übrigen Hüllenelektronen bestimmt wird. Dabei wird jedoch die Mischung der möglichen Konfigurationen vernachlässigt. Um dies zu beheben, werden hauptsächlich die im Folgenden beschriebenen Verfahren zur Berechnung der Atomstruktur angewandt.

### *Configuration Interaction* - Methode – CI

Die Wechselwirkungen der verschiedenen möglichen Konfigurationen werden mit der *Configuration Interaction (CI)* - Methode (siehe beispielsweise [186]) berücksichtigt, indem die Ausgangswellenfunktion  $|\psi\rangle$  als Linearkombination einer



endlichen, aber ausreichend großen Menge an Konfigurationen  $|\phi_i\rangle$  mit entsprechenden Mischungskoeffizienten  $c_i$  gewählt wird, so dass gilt

$$|\psi_i\rangle = \sum_{i=1}^n c_i |\phi_i\rangle. \quad (2.25)$$

Bei dem Variationsverfahren werden die Mischungskoeffizienten  $c_i$  optimiert, wobei die Wellenfunktionen der Einzelkonfigurationen  $|\phi_i\rangle$  unverändert bleiben.

Die Genauigkeit dieser Methode hängt entscheidend von der Anzahl und Auswahl der mischenden Zustände ab. Dabei müssen für ausreichende Genauigkeiten mitunter etwa einige  $10^4$  angeregte Zustände in die Rechnungen einbezogen werden. Diverse Codes wie der HEBREW UNIVERSITY LAWRENCE LIVERMORE ATOMIC CODE (HULLAC) [12] und der für die eigenen Berechnungen, die in dieser Arbeit ausgeführt wurden, verwendete FLEXIBLE ATOMIC CODE (FAC) [92, 94] beruhen auf dieser Methode.

### *Multiconfiguration Dirac-Fock* - Methode – MCDF

Einen Schritt weiter geht die *Multiconfiguration Dirac-Fock* - Methode [90]: hier werden – ebenfalls ausgehend von der Grundwellenfunktion (Gleichung 2.25) – nicht nur die Mischungskoeffizienten, sondern auch die initialen Konfigurations-Zustands-Funktionen  $|\psi_i\rangle = |\nu\Pi, J, M\rangle$ , welche von der Parität  $\Pi$ , dem Gesamtdrehimpuls  $J$  und der magnetischen Quantenzahl  $M$  abhängen, optimiert. Dazu werden sie als antisymmetrisches Produkt von Ein-Teilchen-Wellenfunktionen  $\psi_n^i(x_i)$  der einzelnen beteiligten Elektronen durch Linearkombination von Slater-Determinanten beschrieben:

$$|\nu\Pi, J, M\rangle = \sum_i^{N_\nu} d_i \begin{vmatrix} \psi_1^i(x_1) & \dots & \psi_m^i(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1^i(x_m) & \dots & \psi_m^i(x_m) \end{vmatrix} \quad (2.26)$$

Die atomare Gesamtwellenfunktion ergibt sich demnach zu

$$|\Psi_{\Pi, J, M}\rangle = \sum_{\nu=1}^N c_\nu |\nu\Pi, J, M\rangle, \quad (2.27)$$

welche mit dem Variationsverfahren optimiert wird.

Bei MCDF wird – wie in den meisten Fällen bei CI ebenfalls – im Gegensatz zum *Multiconfiguration Hatree-Fock* (MCHF)–Verfahren die Optimierung der Wellenfunktion unter Anwendung des relativistischen Dirac-Operators (2.24) durchgeführt, wodurch relativistische Effekte von Beginn an berücksichtigt werden. Weit verbreitete Codes zur Ausführung von MCDF-Rechnungen sind etwa der GRASP-Code [66] sowie MCDFGME (*Multiconfiguration Dirac-Fock and General Matrix Elements*) [109, 110], wobei der Cowan-Code [52] auf dem nichtrelativistischen MCHF-Verfahren basiert.

### Störungstheoretischer Ansatz – RMBPT

Auf ein hiervon grundlegend verschiedenes Verfahren setzen die störungstheoretischen Ansätze. Ausgehend von dem Mehr-Teilchen Hamilton-Dirac-Operator (2.24) wird dieser in einen ungestörten Teil  $H_0$  und einen Störungsteil  $V$  aufgeteilt, so dass der Gesamtoperator

$$H_{DCB} = H_0 + V \quad (2.28)$$

bei einer geeigneten Wahl als Summe aus der Ein-Teilchen-Wechselwirkung

$$H_0 = \sum_i [H_D(i) + U(r_i)] \quad (2.29)$$

der Elektronen mit dem Coulomb-Feld des Kerns und der Wechselwirkung

$$V = - \sum_i \left[ \frac{Z}{r_i} + U(r_i) \right] + \sum_{i < j} \left( \frac{1}{r_{ij}} + B_{ij} \right) \quad (2.30)$$

der Elektronen untereinander ausgedrückt werden kann [2, 96].  $U(r)$  bezeichnet dabei ein Potential, welches die Abschirmungs-Effekte der Elektronen beinhaltet.

Das Eigenwertproblem wird nun mit einer Initialen Wellenfunktion  $\psi_k$ , welche etwa durch ein Hartree-Fock-Verfahren bestimmt wurde, und den Eigenwerten  $E_k^0$  des Operators  $H_0$  mit  $H_0|\psi_k^0\rangle = E_k^0|\psi_k^0\rangle$  mittels Störungstheorie (*engl.: perturbation theory (PT)*) gelöst:

$$E_{PT1} = \langle \psi_k | H_{DCB} | \psi_k \rangle + \sum_n \frac{\langle \psi_k | V | \psi_n \rangle \langle \psi_n | V | \psi_k \rangle}{E_k^0 - E_n^0} \quad (2.31)$$

Störungstheoretische Berechnungen von Energien und Reaktionsparametern, welche in dieser Arbeit mit den experimentellen Daten – insbesondere der Ergebnisse der Photoabsorptionsexperimente – verglichen werden, basieren auf der relativistischen viel-Teilchen Störungstheorie (*engl.: relativistic many body perturbation theory (RMBPT)* [93, 96, 131]), einer störungstheoretischen Berechnung zweiter Ordnung, entwickelt von *Ming Feng Gu*.

### 2.4.3 Berechnung der Prozessparameter über die Wellenfunktionen

Mit den erhaltenen Wellenfunktionen lassen sich die den Prozess charakterisierenden Parameter wie Resonanzenergien, Linienstärken und Verzweigungsverhältnisse der Abregungskanäle berechnen.

### Resonanzenergien

Die Energien der jeweiligen Zustände ergeben sich als Eigenwerte des Hamilton-Operators. Für die Anregung durch *resonanten Elektroneneinfang* muss die Summe aus kinetischer Energie des freien Elektrons  $E_e$  und der Bindungsenergie  $E_e^{\text{bind}}$  des Niveaus, auf welches es eingefangen wird, gleich der Anregungsenergie  $E_{ion}^{\text{ex}}$  des Ions sein, so dass sich für die resonante kinetische Energie des Elektrons ergibt

$$E_e^{\text{res}} = E_{ion}^{\text{ex}} - E_e^{\text{bind}}, \quad (2.32)$$

wobei  $E_{ion}^{\text{ex}}$  auch bei Mehrfachanregung durch etwa trielektronischen Elektroneneinfang die gesamte Anregungsenergie des Ions ausdrückt.

Im Falle der *resonanten Photonabsorption* sind Resonanz- und Anregungsenergie gleich

$$E_p^{\text{res}} = E_{ion}^{\text{ex}}. \quad (2.33)$$

### Absorptions- und Emissions-Raten

Nach *Fermis Goldener Regel* [2,62,74] ist die Übergangsrate  $V_{a \rightarrow b}$  eines Zustands  $a$  in den Zustand  $b$  proportional zur Zustandsdichte der Endzustände  $\rho_b$  und zum Absolutquadrat des Matrixelements des den Übergang beschreibenden Operators  $|V_{ab}|^2 = |\langle \psi_b | V_{ab} | \psi_a \rangle|^2$  mit den Wellenfunktionen  $\psi_{a,b}$  der Ausgangs- und Endzustände:

$$A_{a \rightarrow b} = \frac{2\pi}{\hbar} \rho_b |V_{ab}|^2. \quad (2.34)$$

Hieraus lassen sich die Übergangsraten für die einzelnen besprochenen Teilprozesse ableiten:

**Resonanter Elektroneneinfang.** Da es sich hier um eine Wechselwirkung zwischen Elektronen – dem freien eingefangenen und einem gebundenen Hüllenelektron – handelt, muss bei dieser Wechselwirkung analog zu Gleichung 2.24 der Wechselwirkungsoperator  $V_e^a = V_C + V_B$  aus einem Coulomb- und einem Breit-Term bestehen. Nach [2,52] ergibt sich die Einfangrate  $A_e^a$  zu

$$A_e^{a(i \rightarrow d)} = \frac{2\pi}{2(2J_i + 1)} \sum_{M_i m_s M_d} \int d\Omega_p |\langle \psi_d; J_d M_d | V_e^a | \psi_i; J_i M_i, \mathbf{p} m_s \rangle|^2. \quad (2.35)$$

Sie bezieht sich auf eine Anregung des Zustands  $|\psi_i\rangle$  mit dem Gesamtdrehimpuls  $J_i$  und der Quantenzahl  $M_i$  durch den Einfang eines Elektrons mit Impuls  $\mathbf{p}$  und der Spinprojektion  $m_s$ . Die beiden Möglichkeiten für die Ausrichtung des Elektronenspins des absorbierten Elektrons führen wieder zu dem Faktor 2 analog zu Gleichung 2.7. Da das Elektron prinzipiell aus allen Raumrichtungen eingefangen werden kann, wird über die möglichen Richtungen  $\Omega_k$  integriert.

**Resonante Photonenabsorption.** Für die Bestimmung der Photonen-Absorptionsrate wird der Wechselwirkungsoperator  $V_p^a$  für die Anregung durch ein Photon mit der Wellenzahl  $\mathbf{k}$  und der Polarisation  $\lambda$  über alle Einfallrichtungen des Photons integriert und über die magnetischen Quantenzahlen  $M_i$  und  $M_d$  der Zustände  $\psi_i$  und  $\psi_d$  sowie über alle Polarisationen des absorbierten Photons summiert [2,52]:

$$A_p^{a(i \rightarrow d)} = \frac{2\pi}{2J_i + 1} \sum_{M_i \lambda M_d} \int d\Omega_k |\langle \psi_d; J_d M_d | V_p^a | \psi_i; J_i M_i, \mathbf{k} \lambda \rangle|^2. \quad (2.36)$$

**Autoionisierender Zerfall.** Das detaillierte Gleichgewicht führt direkt zur Autoionisationsrate  $A_e^e$  des angeregten Zustands:

$$A_e^{e(d \rightarrow f)} = \frac{2\pi}{2(2J_d + 1)} \sum_{M_d m_s M_f} \int d\Omega_k |\langle \psi_f; J_f M_f | V_e^e | \psi_d; J_d M_d, \mathbf{p} m_s \rangle|^2 \rho_f. \quad (2.37)$$

**Radiativer Zerfall.** Gleiches gilt für den radiativen Zerfall: hier ergibt die Anwendung von ?? die Rate  $A_p^e$  für die Abregung des Zwischenzustands  $\psi_d$  durch Emission eines Photons.

$$A_p^{e(d \rightarrow f)} = \frac{2\pi}{2J_d + 1} \rho_f \sum_{M_d \lambda M_f} \int d\Omega_k |\langle \psi_f; J_f M_f | V_p^e | \psi_d; J_d M_d, \mathbf{k} \lambda \rangle|^2 \rho_f. \quad (2.38)$$

Gleichung 2.38 beschreibt die totale Rate für die Abstrahlung von Photonen aller Polarisationen. Mitunter können jedoch polarisationsabhängige Abstrahlcharakteristiken auftreten, die im späteren Abschnitt über Winkelverteilungen behandelt werden sollen.

### Wirkungsquerschnitt, Verzweigungsverhältnis und Resonanzstärke

Der **Wirkungsquerschnitt**  $\sigma_{i \rightarrow d \rightarrow f}$  für einen Gesamtprozess  $|\psi_i\rangle \rightarrow |\psi_d\rangle \rightarrow |\psi_f\rangle$  in Abhängigkeit der Projektilenergie  $E_{e,p}$  ist proportional zu dem Produkt aus der Anregungsrate  $A_{e,p}^{a(i \rightarrow d)}$ , des Verzweigungsverhältnisses  $b_{e,p}$  für den betrachteten Abregungskanal und der auf die Energieskala normierten und von der Projektilenergie abhängigen Lorentz-Funktion  $\Gamma_d(E_{e,p})$  [2,52]

$$\sigma_{i \rightarrow d \rightarrow f}(E_{e,p}) = \frac{2\pi}{p^2} b_{e,p} \Gamma_d(E_{e,p}) A_{e,p}^{a(i \rightarrow d)}, \quad (2.39)$$

wobei das **Verzweigungsverhältnis**

$$b_{e,p} = \frac{A_{e,p}^{e(d \rightarrow f)}}{A_e^{e(d \rightarrow f)} + A_p^{e(d \rightarrow f)}} = \frac{A_{e,p}^{e(d \rightarrow f)}}{\Gamma_d} \quad (2.40)$$

durch die Raten für Emission ( $A_{e,p}^e$ ) von Elektronen und Photonen ausgedrückt werden kann mit der Breite  $\Gamma_d = A_e^e + A_p^e$  der Resonanzlinie.

Die **natürliche Resonanzlinie** erscheint in Form einer *Lorentz-Funktion*

$$\Gamma_d(E) = \frac{\Gamma_d/(2\pi)}{(E_i + E - E_d)^2 + \frac{\Gamma_d^2}{4}} \quad (2.41)$$

mit der Energie des Anfangszustands  $E_i$  und des Zwischenzustands  $E_d$  sowie der Resonanzenergie  $E$  und der Linienbreite  $\Gamma_d$ .

Daher ergibt sich die **Resonanzstärke** des jeweiligen Gesamtprozesses mit

$$S_{i \rightarrow d \rightarrow f} = \frac{2\pi}{p^2} \frac{2J_d + 1}{n(2J_i + 1)} \frac{A_{e,p}^{a(i \rightarrow d)} A_{e,p}^{e(d \rightarrow f)}}{A_e^e + A_p^e}, \quad (2.42)$$

wobei der Faktor  $n$  für einen Prozess, der über die gleichen Teilchen zerfällt, durch die er angeregt wird – also für die Resonanzstreuung eines Photons oder Elektrons an dem Ion – zu  $n = 1$  wird und für einen asymmetrischen Prozess wie etwa eine resonante Rekombination oder Photoionisation auf Grund des Elektronenspins  $n = 2$  beträgt.

**Interferenzen mit nichtresonanten Prozessen.** Bei den Prozessen, bei denen eine Umladung des Targetions erfolgt, also der resonanten Rekombination sowie der resonanten Photoionisation, kann der Endzustand ebenso durch nichtresonante Prozesse erreicht werden, wie sie in Abschnitt 2.2 kurz erläutert wurden. Bei der *radiativen Rekombination* wird ein Elektron gleich welcher Energie – also *auch* bei resonanten Energien – in das Targetion eingefangen und die dabei frei werdende Energie wird als Photon abgestrahlt. Dieses Photon hat dann die gleiche Energie wie die Abregung bei resonanter Rekombination. Daher kann bei resonanten Elektronenenergien der Endzustand in Gleichung 2.11 aus dem Ausgangszustand ohne den Umweg der Anregung erfolgen. In der Messung der Produktteilchen, also der Photonen oder der umgeladenen Ionen, ist der Prozess nicht von dem resonanten Prozess unterscheidbar. Dadurch können diese Prozesse quantenphysikalisch interferieren. Die Resonanzlinie hat die Form einer *Fano-Funktion*  $F(E)$ . Der *Fano-Parameter*  $q$  ein Maß für die Asymmetrie und somit der Stärke der Interferenz [73]

$$F(E) = \frac{S_{d,f}}{q^2 \Gamma_d} \frac{2}{\pi} \left[ \frac{(q + \epsilon)^2}{1 + \epsilon^2} - 1 \right], \quad (2.43)$$

wobei  $\epsilon = 2(E - E_{res})/\Gamma_d$  die Resonanzenergie  $E_{res}$  und die Resonanzbreite  $\Gamma_d$  beinhaltet (siehe z. B. auch [147]). Solche Quanteninterferenzen wurden etwa bei der Untersuchung der dielektronischen Rekombination in hochgeladenes Uran [119] und Quecksilber [89] beobachtet.

Gleiches gilt natürlich auch für die resonante Photoionisation, bei der ebenfalls der Endzustand aus Gleichung 2.13 ohne den Umweg über den resonanten Zwischenzustand erreicht werden kann. Das Elektron kann direkt durch den Photoeffekt [69] herausgelöst werden und so mit der entsprechenden resonanten Photoionisation interferieren. Auch dies wurde experimentell untersucht, beispielsweise in [184, 189, 192] insbesondere für die Photoionisation von  $\text{Ar}^{10+}$ .

### Winkelverteilungen der emittierten Photonen und Elektronen

Im Allgemeinen wird die Verteilung der durch Abregung eines angeregten Zustands emittierten Photonen über die Winkelverteilungsfunktion  $W(\theta)$  als Faktor zum Wirkungsquerschnitt berücksichtigt, um den differentiellen Wirkungsquerschnitt des Gesamtprozesses mit Emission eines Photons mit der Wellenzahl  $k$  in die Raumrichtung  $d\Omega$  zu erhalten [47, 67, 83]:

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow d \rightarrow f}}{d\Omega_k} = \frac{\sigma_{i \rightarrow d \rightarrow f}}{4\pi} W(\theta) \quad (2.44)$$

**Resonante Rekombination.** Für den Fall der Bildung eines angeregten Zustands  $d$  durch Elektron-Ion-Wechselwirkung, wie sie bei der resonanten Rekombination vorliegt,  $e^- + A_i^{q+} \rightarrow A_d^{(q+1)+}$ , kann über alle Polarisationsrichtungen gemittelt und die Winkelverteilungsfunktion für E1-Übergänge angegeben werden mit [47, 160]

$$W_e(\theta) = 1 + \beta_{i \rightarrow d \rightarrow f} P_2(\cos\theta), \quad (2.45)$$

wobei  $P_2$  das zweite Legendre-Polynom  $P_2 = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$  bezeichnet und  $\beta_{i \rightarrow d \rightarrow f}$  einen *Dipol-Anisotropie-Parameter* darstellt, welcher in [47] ausführlich diskutiert wird. Der tiefgestellte Index  $e$  steht dabei für die der Relaxation vorangegangene Anregung durch Elektronenabsorption.

Wie die MCDF-Berechnungen [99] unter Einbeziehung dieser Winkelverteilungen ergaben, ist die Photoemission senkrecht zur Achse des anregenden Elektronenstrahls maximal.

**Resonante Photonenstreuung.** Für den Fall einer radiativen Relaxation nach Anregung durch Photonenabsorption (resonante Photonenstreuung) ergibt sich die Abstrahlcharakteristik aus der Drehimpulserhaltung: Werden bei der Photoabsorption die Gesamtdrehimpulse der Zustände nicht verändert, also gilt für den Anregungsübergang  $\Delta J = 0$ , ist die Emission der Photonen unabhängig von der Raumrichtung, in welche sie abgestrahlt werden. Anders verhält es sich bei  $\Delta J = 1$  – Übergängen: hier wird durch das absorbierte Photon der Gesamtdrehimpuls des Zwischenzustands gegenüber dem Ausgangszustand verändert. Bei der Abregung wird diese Drehimpulsänderung rückgängig gemacht. Werden polarisierte Photonen absorbiert, müssen somit die Relaxationsphotonen in der

Polarisationsebene abgestrahlt werden. Dies hat Auswirkungen auf die Messung (siehe Abschnitt 3.3.3 und Kapitel 5).

Die Winkelverteilung der abgestrahlten Photonen nach Absorption linear polarisierten Lichts kann parametrisiert werden mit [2, 196]

$$W_p(\theta, \phi) = 1 + \alpha \cdot \cos(2\theta) - \beta \cdot \cos(2\phi) \cdot \sin^2(\theta) \quad (2.46)$$

wobei der Winkel  $\theta$  in der Polarisationsebene verläuft und in Flugrichtung des anregenden Photons den Wert 0 hat, und  $\phi$  den Winkel zur Polarisationsebene beschreibt.  $\alpha$  und  $\beta$  sind hierbei Parameter, welche in Abhängigkeit der Änderung des Gesamtdrehimpulses bei der Abregung des Zustands stehen. Wird durch die Emission eines Photons der Gesamtdrehimpuls nicht geändert, erhält man eine isotrope Abstrahlcharakteristik und somit werden die Parameter  $\alpha = \beta = 0$  für  $\Delta J = 0$ . Anders sieht es bei Übergängen aus, bei denen Drehimpuls übertragen wird: für die relevanten  $\Delta J = 1$ -Übergänge formen die Parameter

$$\begin{aligned} J = 3/2 \rightarrow J = 1/2 &\implies \alpha = 3/7, \quad \beta = 3/7 \\ J = 1 \rightarrow J = 0 &\implies \alpha = 1/3, \quad \beta = 2/3 \end{aligned} \quad (2.47)$$

den möglichen Abstrahlungsbereich der ausgesandten Photonen.





# Kapitel 3

## Das Experiment

Der Aufbau des Experimentes besteht grundsätzlich aus den Bereichen der Präparation und Kontrolle der hochgeladenen Ionen als *Targets*, der Bereitstellung der Elektronen und Photonen als *Projektile* und den *Detektorsystemen*, mit denen die emittierten Photonen bzw. die umgeladenen Ionen gemessen werden können. Die Datenauswertung erfolgte zum Großteil mit eigener, für die Experimente speziell entwickelter Software, auf die ebenfalls eingegangen wird. Den Abschluss des Kapitels bildet die Beschreibung des FLEXIBLE ATOMIC CODES, mit welchem die eigenen Berechnungen durchgeführt wurden.

## 3.1 Die Präparation des Targets

Das große Interesse an der Forschung mit hochgeladenen Ionen hat eine Reihe von Methoden hervorgebracht, diese zu erzeugen und zu kontrollieren. So kann man beispielsweise mit Beschleunigern die Ionen erzeugen und in Speicherringen einschließen, wie dies etwa am Max-Planck-Institut für Kernphysik in Heidelberg [13, 112] oder an der Gesellschaft für Schwerionenforschung in Darmstadt [32, 79] praktiziert wird.

Eine Alternative hierzu bieten die *Elektronenstrahl-Ionenfallen* (EBIT, von engl.: *electron beam ion trap*), welche als kompakte Anlagen hochgeladene Ionen erzeugen und speichern können. Moderne Varianten sind flexibel einsetzbar und transportabel, so dass sie an externen Strahlquellen zum Einsatz kommen können, was entscheidend für Teile der hier vorgestellten Experimente war. In dieser Arbeit wurden die EBITs des Max-Planck-Instituts für Kernphysik [55, 71] als Anlagen zur Präparation und Speicherung der Targetionen verwendet.

### 3.1.1 Erzeugung und Einschluss hochgeladener Ionen

Der nun folgende Abschnitt soll eine Einführung in das Grundprinzip von Elektronenstrahl-Ionenfallen geben und insbesondere die verwendete FLASH-EBIT näher beleuchten.

#### Funktionsprinzip einer Elektronenstrahl-Ionenfalle

In einer Elektronenstrahl-Ionenfalle (EBIT) [128] werden hochgeladene Ionen durch Elektronenstoßionisation erzeugt und mit elektrostatischen Potentialen in einem definierten Raumbereich eingeschlossen, wie in Abbildung 3.1 schematisch dargestellt ist.

Ein Atom- oder Molekülstrahl des zu untersuchenden Elements bzw. einer chemischen Verbindungen, welche dieses Element enthält, wird in das Reaktionsvolumen eingeleitet. Durch die Kollision mit einem hochenergetischen, dichten Elektronenstrahl werden die Atome bis zu einem Ladungszustand ionisiert, dessen weitere Ionisationsenergie über der kinetischen Energie der Strahlelektronen liegt. Der Elektronenstrahl wird in einer Elektronenkanone erzeugt und elektrostatisch beschleunigt. Dies wird erzielt durch eine Potentialdifferenz zwischen dem negativen Potential der Kathode und dem positiven Potential einer Ringelektrode (*Driftröhre*), welche das Reaktionsvolumen umgibt. Nach Durchlaufen des Reaktionsvolumens wird der Elektronenstrahl in einen Kollektor geführt, wo er abgebremst, aufgeweitet und absorbiert wird.

Zur effektiven Elektronenstoßionisation ist eine hohe Elektronendichte erforderlich. Diese wird durch Kompression des Elektronenstrahls mit Hilfe eines starken magnetischen Felds erreicht, welches in der Regel durch supraleitende Spulen in Helmholtz-Konfiguration erzeugt wird. Im Reaktionsvolumen entsteht so

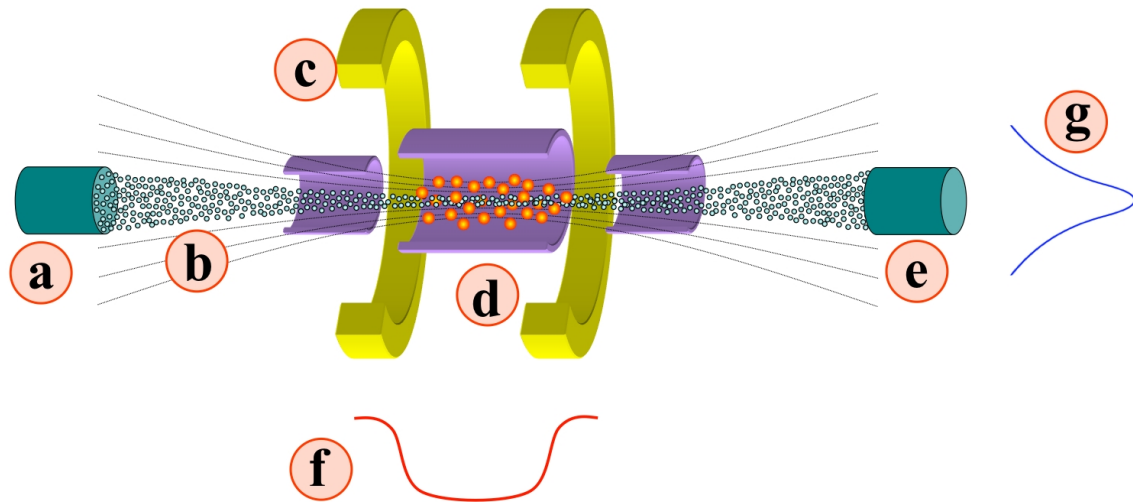


Abbildung 3.1: Prinzip einer Elektronenstrahl-Ionenfalle: In einer Elektronenkanone (a) wird ein Elektronenstrahl (b) erzeugt und mit Hilfe eines starken Magnetfelds supraleitender Helmholtz-Spulen (c) komprimiert. Die Energie des Elektronenstrahls wird durch Potentiale an Driftröhren um das Reaktionsvolumen (d) definiert, in welches ein neutraler Atomstrahl eingeleitet und durch Elektronenstöße ionisiert wird. Danach wird der Elektronenstrahl in einem Kollektor (e) gestoppt. Die Ionen werden durch ein axiales Potential (f) an den Driftröhren und ein radiales Potential (g) der Raumladung des Elektronenstrahls eingeschlossen.

ein homogenes Magnetfeld in Strahlachsenrichtung.

Dabei lässt sich der Wirkungsquerschnitt für die Elektronenstoßionisation mit einer semi-empirischen Formel abschätzen, welche von *Wolfgang Lotz* aufgestellt wurde [132, 133]. Die gewünschte Ionisation ist jedoch nicht der einzige Prozess, der zwischen den Atomen bzw. Ionen und den Strahlelektronen in der EBIT abläuft. So treten die bereits in Kapitel 2.2 diskutierten Konkurrenzprozesse der radiativen sowie resonanten Rekombination ebenso auf wie Anregungen der Ionen durch die stoßenden Elektronen. Auch können die Ionen mit den übrigen Restgas-Atomen wechselwirken und Ladungen austauschen. Die Gesamtheit dieser Kollisionsprozesse trägt zur Ladungszustandsbilanz der Ionen in einer EBIT bei und ist in einer Grundlagenveröffentlichung von *B. M. Penetrante* [158] sowie in diversen wissenschaftlichen Publikationen und Übersichtswerken zu physikalischen Experimenten mit Hilfe einer EBIT (z.B. [15,57,70,87,146]) dargestellt und diskutiert.

Um die so erzeugten hochgeladenen Ionen im Reaktionsvolumen einzuschließen, werden zusätzliche elektrostatische Potentiale angelegt: vor und hinter der zentralen Driftröhre, welche die Beschleunigungsspannung für den Elektronenstrahl definiert, sind weitere Driftröhren angebracht, die mit einem relativ zur zentralen Driftröhre positiven Potential belegt werden. Somit entsteht ein elektrostatischer Potentialkasten, welcher die positiv geladenen Ionen in Strahlrichtung einschließt (siehe Abbildung 3.1).

Der radiale Einschluss der Ionen wird durch das Raumladungspotential des stark komprimierten Elektronenstrahls realisiert. Im Zentrum des Elektronenstrahls ist dieses Potential parabelförmig und es nimmt außerhalb eine logarithmische Form an [158]:

$$V_{rl}(r) = \text{const} \begin{cases} \propto r^2 & \text{für } r \leq r_e \\ \propto \ln(r) & \text{für } r \geq r_e \end{cases} \quad (3.1)$$

Somit ist das negative Potential des Elektronenstrahls minimal auf der Strahlachse, so dass positive Ionen dort radial eingeschlossen werden. Die genaue Form der Raumladung ist abhängig von Anlagenparametern wie dem Radius der Driftröhren sowie Experimentparametern wie dem Strom oder der Energie des Elektronenstrahls und wird an späterer Stelle (Abschnitt 3.2.1 und 4.1.2, Gleichung 3.9) im Zusammenhang mit der Energieschärfe des Elektronenstrahls weiter besprochen.

Die Potentiale der Driftröhren und des Elektronenstrahls bewirken zusammen einen dreidimensionalen Einschluss der erzeugten Ionen und damit eine optimale Präparation des Ionen-Targets für die dargestellten Experimente.

Das Prinzip einer EBIT basiert auf der Elektronenstrahl-Ionenquelle (EBIS), welche bereits in den 1960er Jahren im russischen Dubna entworfen [64] und später als integrierte Quelle und Falle zur dargestellten EBIT am *Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL)* in den USA weiterentwickelt wurde [127,128]. Kurz danach folgten die EBITs beim *National Institute for Standards and Technology (NIST)* [86], in Oxford [188] (Großbritannien), in Berlin [29], in Tokyo (Japan) [58] und in Shanghai (China) [208], welche dem Design der LLNL-EBIT mit vertikalem Strahlverlauf nachempfunden waren. Die EBITs in und aus Heidelberg – dies ist die in Freiburg aufgebaute und an das Max-Planck-Institut für Kernphysik versetzte Heidelberg-EBIT [55], die verwendete FLASH-EBIT [71] und die parallel entwickelte TITAN-EBIT [126] sowie die kürzlich in Betrieb genommene Hyper-EBIT [14] – sind horizontal ausgerichtet, ebenso wie beispielsweise die EBIT in Stockholm (Schweden) [33].

Die Technik der EBITs ohne supraleitenden Magneten wurde zudem ebenfalls für kommerzielle Anwendungen miniaturisiert [211].

## FLASH-EBIT

Die Targets für die hier dargestellten Experimente wurden mit Hilfe der FLASH-EBIT [70,71] präpariert. Dies ist eine transportable EBIT, welche am Max-Planck-Institut für Kernphysik in Heidelberg (MPIK) speziell entwickelt wurde zum Einsatz an externen Strahlquellen wie freie Elektronenlaser oder Synchrotron-Strahlungsquellen. Der Name stammt von dem ersten externen Einsatz dieser EBIT am *Freie-ElektronenLaser Hamburg (FLASH)* [7,70–72].

Die FLASH-EBIT ist in horizontaler Strahl-Ausrichtung angelegt und verfügt über einen supraleitenden 6 T–Magneten zur Kompression und Führung des

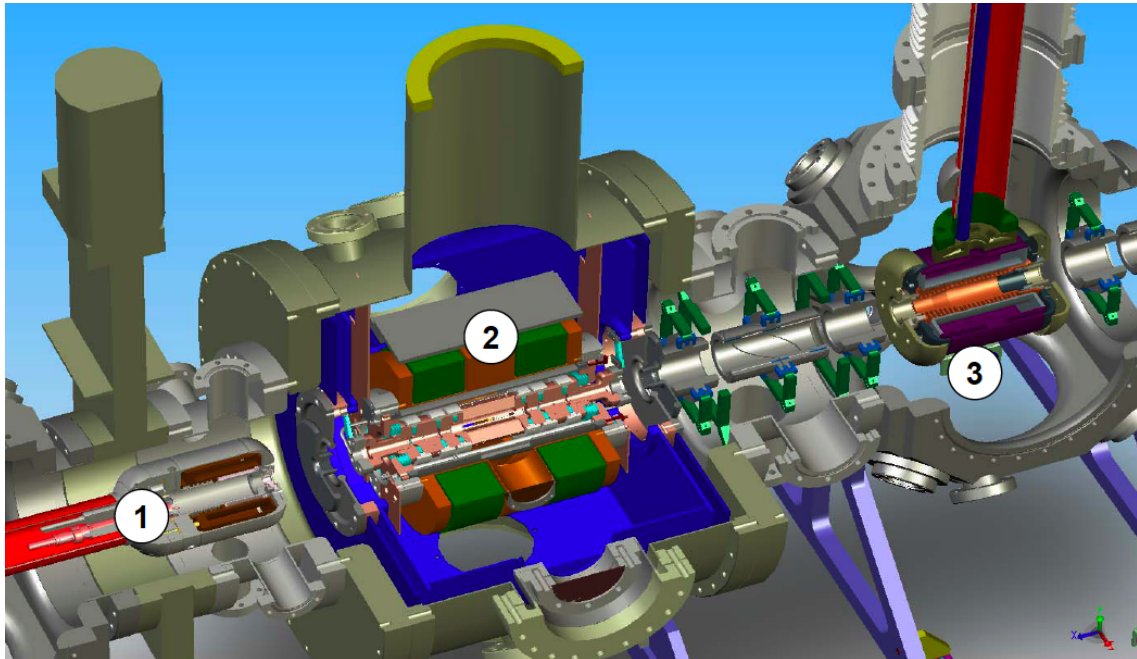


Abbildung 3.2: Konstruktionszeichnung der FLASH-EBIT mit den wesentlichen Elementen *Elektronenkanone* (1), *Fallenelektroden* und *supraleitender Magnet* (2) sowie *Kollektor* (3) [189].

Elektronenstrahls. Die für die Supraleitung notwendige Kühlung des Magneten auf 4 K wird mit Hilfe eines kryogenischen Kältekopfes realisiert.

Der Elektronenstrahl wird von einer Elektronenkanone nach dem Pierce-Prinzip [161] erzeugt. In einer Wolfram-Kathode ist Barium eingeschlossen, welches durch Ausheizen an die Oberfläche diffundiert und somit die Austrittsarbeit der Elektronen herabsetzt. Dabei werden thermisch emittierte Elektronen mit Hilfe einer Elektrode, an welche eine Spannung von mehreren keV angelegt wird, abgezogen und durch elektronenoptische Elemente als Strahl aus der Kanone geführt. Magnetspulen in der Elektronenkanone haben zum einen die Aufgabe, den Strahl zu führen und zum anderen, die magnetischen Restfelder des supraleitenden Magneten auf der Oberfläche der Kathode zu kompensieren, um einen möglichst kleinen Strahldurchmesser zu erreichen (siehe auch [103] und die Ausführungen in 3.2.1).

Aufgefangen wird der Elektronenstrahl in einem Kollektor, in welchem er durch elektro- und magnetostatische Potentiale gestoppt und aufgeweitet wird. Der Kollektor der FLASH-EBIT ist in Form eines Zylinders aufgebaut, welcher in Strahlrichtung offen ist. Dies hat zwei Gründe: zum einen erlaubt es, die in der EBIT erzeugten Ionen aus dem Fallenvolumen herauszuleiten und entweder die Ionen für weitere Experimente zu nutzen oder diese zu analysieren (siehe Abschnitt 3.3.2), zum anderen bietet sich so die Möglichkeit, externe Strahlen wie etwa Photonenstrahlen in das Reaktionsvolumen einzuleiten und diese mit den

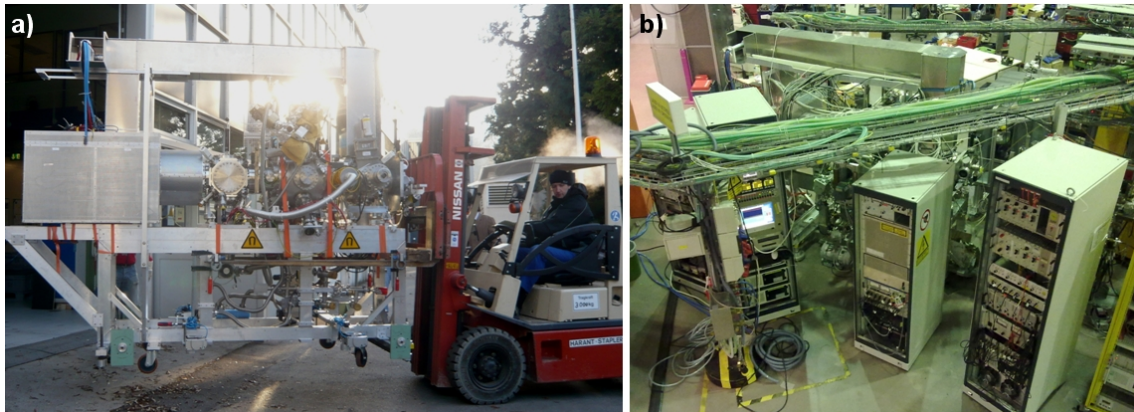


Abbildung 3.3: Photographie der FLASH-EBIT beim Verladen für eine Messkampagne bei BESSY II (a) und an der Beamline in der Speicherringhalle von BESSY II im Sommer 2010 (b).

Ionen zu überlagern, wie es für die in Kapitel 5 dargestellten Photoabsorptionsexperimente nötig war.

Die Driftröhren-Baugruppe, welche zur Umsetzung des EBIT-Prinzips mindestens drei Driftröhren vorsieht, ist bei der FLASH-EBIT aus neun Driftröhren aufgebaut. Diese Baugruppe kann komplett auf ein sogenanntes *Driftröhren-Potential*  $V_{DT}$  gelegt werden. Darüber hinaus können alle Driftröhren einzeln mit zusätzlichen Potentialen belegt werden. Das gibt die Möglichkeit, im Bedarfsfall kompliziertere Fallenpotentiale zu realisieren, um etwa Ionen aus dem Fallenvolumen hinauszuleiten oder gezielt Ionen energetisch zu kühlen (siehe Abschnitt 4.1.2). Die zentrale Driftröhre ist nicht wie die anderen Driftröhren als geschlossener Ring gestaltet, sondern enthält insgesamt acht Öffnungen. Diese Öffnungen erlauben einen senkrecht zur Strahlachse gerichteten Zugang in das Fallenvolumen. Über sie wird zum einen der Atomstrahl der Targetelemente eingeleitet, welche in der EBIT ionisiert werden, zum anderen kann durch sie eine direkte Sichtlinie zu verschiedenen Detektorsystemen realisiert werden, die im Einzelnen in Abschnitt 3.3 beschrieben sind. Daneben sind an diese Öffnungen auch die Vakuumpumpen für das Fallenvolumen angeschlossen.

Die eigentliche Besonderheit der FLASH-EBIT gegenüber anderen EBIT-Modellen besteht in ihrem Aufbau als transportable Experimentierstation für externe Strahlquellen, was durch die kompakte Bauweise und leichte Verladbarkeit erreicht wurde. Die horizontale Ausrichtung des Strahls sowie die longitudinale Sichtachse durch den Kollektor in die Fallenregion ermöglichen das Anknüpfen der FLASH-EBIT an jede Art von modernen Röntgen-Quellen. Diese Strahlen können als Projektile für eine große Bandbreite von Experimenten genutzt werden, so auch für die Photoabsorptionmessungen in dieser Arbeit. Neben dem erwähnten ersten Einsatz bei FLASH [71] wurden mit der FLASH-EBIT dort weitere Experimente durchgeführt [72]. Schon vor den hier dargestellten Experimenten wurde die Synchrotron-Strahlungsquelle BESSY II in Berlin (siehe Ab-

schnitt 3.2.2) für Photoionisationsexperimente genutzt [189–192]. Aktuell war die FLASH-EBIT im Einsatz bei dem neuen Freie-Elektronen-Laser LCLS bei SLAC in Menlo Park, CA, USA [138], wobei die Ergebnisse dieser Kampagne zur Zeit ausgewertet werden [26]. Gleiches gilt für die erst kürzlich beendete Messkampagne der FLASH-EBIT bei dem neuen Positronen-Synchrotron PETRA III [169].

Eine ausführliche Beschreibung des technischen Aufbaus der FLASH-EBIT ist in der Dissertation von *Sascha Epp* zu finden [70]. Die FLASH-EBIT wurde parallel zu der als „Ladungsbrüter“ bei TRIUMF in Vancouver (Canada) eingesetzten und ebenfalls am MPIK aufgebauten TITAN-EBIT [126] entwickelt. Daher ist auch die technische Charakterisierung der TITAN-EBIT, wie sie von *Michael Froese* vorgenommen wurde [81], prinzipiell auf die FLASH-EBIT übertragbar, auch wenn es geringe technische Abweichungen der beiden Anlagen gibt. Weitere Details, vor allem zur Durchführung von Photoabsorptionsexperimenten mit der FLASH-EBIT, finden sich neben den Ausführungen in dieser Arbeit (Kapitel 5) in der Dissertation von *Martin Simon* [189].

## 3.2 Die Projektile: Teilchenstrahlen aus Elektronen und Photonen

Die folgenden Abschnitte erläutern die Erzeugung der Elektronen und Photonen als Projektile für die dargestellten Experimente und deren Einschuss in das Reaktionsvolumen in der EBIT. Es werden die entscheidenden Parameter der Projektilestrahlen insbesondere in Bezug auf die wesentliche Anforderung an die Eigenschaften des Projektilestrahls, die Kontrollierbarkeit seiner Energie, diskutiert.

### 3.2.1 Elektronen als Projektile

Bei der ersten Klasse der Experimente wurden hochgeladene Ionen mit Elektronen kollidiert. Die Projektilelektronen wurden dabei von dem Elektronenstrahl der EBIT bereitgestellt.

#### Der Elektronenstrahl der EBIT

**Beschleunigungspotentiale der EBIT.** Die Energie des Elektronenstrahls wird prinzipiell definiert durch die elektrostatischen Potentiale, welche an die elektronen-optischen Elemente der EBIT angelegt sind. Dies sind im Wesentlichen drei Potentiale: Die Kathodenspannung  $V_{\text{kath}}$ , das Grundpotential für die Driftröhren  $V_{\text{DT}}$  und das Potential der das Reaktionsvolumen umschließenden Driftröhre  $V_{\text{trap}}$  (siehe Abschnitt 3.1.1). Somit ergibt sich für das Beschleunigungspotential  $V_{\text{b}}$ :

$$|V_{\text{b}}| = |V_{\text{kath}}| + |V_{\text{DT}}| + |V_{\text{trap}}| \quad (3.2)$$

Die direkte Kontrolle der Elektronenstrahlenergie erfolgt in der Regel durch die Steuerung des Grundpotentials  $V_{DT}$  der Driftröhren mit einem Netzgerät *HNC 30.000-5pos* des Herstellers *Heinzinger*. Hiermit sind Spannungen von bis zu 30 keV erreichbar, welche extern über eine Steuerspannung sehr präzise eingestellt werden können. Somit sind vorprogrammierte Energieverläufe des Elektronenstrahls realisierbar.

**Raumladungspotential des Elektronenstrahls.** Die für die Ionisation und eine effektive Kollisionsrate notwendige hohe Elektronendichte  $\rho$  des Elektronenstrahls bewirkt ein Raumladungspotential  $V_{rl}$ , welches additiv zu den oben aufgeführten extern angelegten Potentialen die Energie der einzelnen Elektronen im Strahl beeinflusst. Dies wird hier den Darstellungen in beispielsweise [87,203] folgend diskutiert:

Formuliert werden kann das Raumladungspotential über die *Poissonsche Differentialgleichung* der Elektrostatik [164] in Verbindung mit den *Maxwellschen Gleichungen* [137] als

$$\nabla^2 V_{rl} = -\frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad (3.3)$$

wonach der negative Quotient aus der Elektronendichte  $\rho$  und der elektrischen Feldkonstante des Vakuums  $\epsilon_0$  die Divergenz des Gradienten der Raumladung  $V_{rl}$  darstellt. Hierzu ist die Kenntnis der Elektronendichte  $\rho$  erforderlich, welche in Abhängigkeit von Elektronenstrahlstrom  $I_e$  und der Geschwindigkeit der Elektronen  $v_e$  mit dem Strahlquerschnitt  $A$  mit

$$\rho = \frac{I_e}{v_e} \frac{1}{A} = \frac{I_e}{\pi r_e^2 v_e} \quad (3.4)$$

ausgedrückt werden kann. Die Geschwindigkeit ist mit der Energie der Elektronen  $E_e$ , welche in erster Näherung über die externen Potentiale der EBIT bestimmt ist (Gleichung 3.2), über den relativistischen Ansatz [2]

$$v_e = c \sqrt{1 - \left( \frac{E_e}{m_e c^2} + 1 \right)^2} \quad (3.5)$$

verknüpft.

Um den für die Berechnung der Elektronendichte notwendigen Strahlquerschnitt  $A = \pi r_e^2$  zu erhalten, ist eine möglichst genaue Kenntnis des Elektronenstrahlradius notwendig. *Léon Brillouin* gab in [40] eine erste sehr grobe Näherung für den Radius eines zylindrischen Elektronenstrahls an mit der Annahme eines laminaren Flusses der Elektronen unter Vernachlässigung deren thermischer Energie mit

$$r_B = \sqrt{\frac{2m_e I_e}{\pi \epsilon_0 v_e e B^2}}, \quad (3.6)$$



woraus *Gabriel Herrmann* [103] eine deutlich genauere Näherung des Elektronenstrahlradius ableitete, bei dem neben den thermischen Effekten spezielle Parameter der Kathode und der den Strahl umgebenden Apparatur berücksichtigt werden: so wird ein fokussierendes Magnetfeld  $B$  einbezogen, welches bei den vorliegenden Experimenten durch den supraleitenden Magneten der EBIT generiert wird und 6 T beträgt. Der Kathodenradius  $r_c$ , in diesem Fall 1,5 mm, und die Ausheiztemperatur  $T_c$  der Kathode von hier  $\approx 1400$  K finden in dieser Abschätzung ebenfalls Berücksichtigung. Neben dem fokussierenden Magnetfeld  $B$  wird ebenfalls bedacht, dass dessen Rest-Magnetfeld  $B_c$  auf der Kathodenoberfläche den Strahl aufweitet. Zur Minimierung dieses Restmagnetfelds sind in der Elektronenkanone entsprechende Magnetfeldspulen zu dessen Kompensation eingebaut (siehe Abschnitt 3.1.1). Nach den Näherungen von Herrmann ist somit der Radius, der nach Definition 80% des gesamten Strahlstroms umschließt, beschrieben durch [103]

$$r_H = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \sqrt{1 + 4 \left( \frac{8m_e k_b T_c r_c^2}{e^2 B^2 r_B^2} + \frac{B_c^2 r_c^4}{B^2 r_B^4} \right)}} \quad (3.7)$$

mit dem oben erläuterten Brillouin-Radius  $r_B$ .

Das Raumladungspotential  $V_{rl}$  des Elektronenstrahls ist abhängig vom Abstand zur Strahlachse und muss somit die Poisson-Gleichung mit dem Laplace-Operator in Zylinderkoordinaten [111]

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} \quad (3.8)$$

erfüllen. Voraussetzung dafür ist die Stetigkeit der Ableitung  $\frac{\partial V_{rl}}{\partial r}$  am Rand des Elektronenstrahls ( $r = r_e$ ) sowie die Forderung, dass die Raumladung an der Wand der entsprechenden Ringelektrode mit dem Durchmesser  $r_{DT}$  verschwindet, also  $V_{rl}(r=r_{DT}) = 0$ . Daraus folgt die Formulierung des Raumladungspotentials innerhalb und außerhalb des Elektronenstrahls [87, 158, 203]:

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

Für spätere Diskussionen ist die Beziehung zwischen dem Elektronenstrom  $I_e$  und der entsprechenden Elektronendichte  $n_e$  im Elektronenstrahl nützlich, wie sie in [203] aufgestellt wird.  $n_e$  ist abhängig von der Komprimierung des Elektronenstrahls durch das äußere Magnetfeld  $B$ , was durch die Einbeziehung des Herrmann-Radius  $r_H$  (Gleichung 3.7) berücksichtigt wird. Geht man von einer gaußförmigen Verteilung der Elektronendichte aus, welche auf Grund der transversalen Geschwindigkeiten der Elektronen beim Austritt aus der Kathode der Elektronenkanone entsteht, ergibt sich [203]:

$$I_e = n_e \cdot e \cdot \frac{\pi r_e^2 \cdot v_e}{\ln 5} \quad (3.10)$$

**Teilweise Kompensation der Raumladung durch die Ionen.** Die beim Betrieb der EBIT erzeugten positiv hochgeladenen Ionen tragen zu einer teilweisen Kompensation der negativen Raumladung des Elektronenstrahls bei und verändern so das Raumladungspotential. Für die Kompensation sind verschiedene Ionen mit unterschiedlichen Ladungszuständen ursächlich.

Die Einbeziehung der Raumladung der Ionen in die Herleitungen für das Raumladungspotential des Elektronenstrahls führt zu einem *Kompensationsfaktor* [203]

$$f_{\text{komp}} = \frac{\sum_q (n_q q)}{n_e} \quad (3.11)$$

Das mit 3.9 und 3.11 das ausdrückbare Kompensationspotential  $V_{\text{komp}} = f_{\text{komp}} \cdot V_{\text{rl}}$  verringert die Raumladung, so dass sich ein *effektives Raumladungspotential*  $V_{\text{rl}}^{\text{eff}}$  ergibt mit

$$V_{\text{rl}}^{\text{eff}} = V_{\text{rl}} - V_{\text{komp}} = V_{\text{rl}}(1 - f_{\text{komp}}). \quad (3.12)$$

Eine realistische Berechnung der Kompensation ist im Gegensatz zur Berechnung des unkompensierten Raumladungspotentials des Elektronenstrahls nahezu unmöglich, da hier nicht nur eine Sorte von Ladungsträgern (hier Elektronen) mit ausreichend genau abschätzbaren Dichten (siehe hierzu auch [203] und [129]), sondern viele Ionensorten mit unterschiedlichen relativen Ladungszustandsverteilungen und entsprechenden absoluten Ionendichten in die Rechnung einbezogen werden müssten, wobei auch Restgas-Ionen zu beachten sind. Bei der hier besprochenen Kompensation wurde zudem davon ausgegangen, dass die räumliche Ionenverteilung gleich der Elektronenverteilung und somit die Radien beider Ladungswolken gleich sind. In [16] wird darüber hinaus die Raumladungskompensation durch die Ionen mit Beachtung deren thermischer Energie und somit der Bewegung der Ionen diskutiert.

Leichter ist die experimentelle Bestimmung der Kompensation etwa über eine Messung dielektronischer Resonanzen, wie es beispielsweise in [87, 134, 203] durchgeführt wurde.

**Energieschärfe des Projektilstrahls.** Das Raumladungspotential  $V_{\text{rl}}^{\text{eff}}(r)$  vermindert das auf die einzelnen Strahlelektronen wirkende Gesamtpotential durch die in Gleichung 3.2 beschriebenen extern angelegten Spannungen. Dadurch wirkt auf die Elektronen ein Beschleunigungspotential von

$$|V_b(r)| = |V_{\text{kath}}| + |V_{\text{DT}}| + |V_{\text{trap}}| - |V_{\text{rl}}^{\text{eff}}(r)|, \quad (3.13)$$

das damit eine Abhängigkeit von  $r$  aufweist.

Durch die Ausdehnung der Wechselwirkungszone in radialer Richtung bezüglich der Elektronenstrahlachse haben die wechselwirkenden Projektilelektronen demnach eine verbreiterte Energieverteilung. Deren Minimierung ist das Ziel zur Verbesserung der Auflösung. Hierzu gibt es diverse Ansätze, welche in Abschnitt 4.1.2 diskutiert werden.

### 3.2.2 Photonen als Projektile

Röntgen-Photonen im Energiebereich von 700 – 900 eV sind die Projektile der zweiten Klasse von Experimenten im Rahmen dieser Dissertation. Die Erzeugung der Projektile bedarf eines erheblichen experimentellen Aufwands im Rahmen physikalischer Großforschungseinrichtungen. Bei den hier vorgestellten Experimenten wurde auf die Röntgen-Photonen der *Synchrotron-Strahlungsquelle BESSY II* in Berlin zurückgegriffen, weshalb in diesem Abschnitt zuerst die Prinzipien der Synchrotronstrahlung allgemein und später der Aufbau und die Funktionsweise von BESSY II dargestellt werden.

#### Synchrotronstrahlung

Erfahren bewegte geladene Teilchen eine Beschleunigung, wird elektromagnetische Strahlung tangential zur Bewegungsrichtung abgestrahlt – die sogenannte *Bremsstrahlung* [111]. Dieses Phänomen wird in *Synchrotron-Strahlungsquellen* ausgenutzt, um Röntgenstrahlung zu erzeugen. Dabei werden geladene Teilchen in einem Speicherring auf eine Kreisbahn gelenkt, so dass tangential zu dieser Bahn die gewünschte Strahlung abgegeben wird. Nach der klassischen Elektrodynamik (siehe beispielsweise [111]) ist die Strahlungsleistung  $P_s$  der geladenen Teilchen mit relativistischen Geschwindigkeiten  $v_{\text{el}} \approx c$  proportional zur vierten Potenz der kinetischen Energie  $E_{\text{kin}}$  sowie invers proportional zur ebenfalls vierten Potenz der Ruhemasse des geladenen Teilchens  $m_0$ :

$$P_s = \frac{c \cdot q^2 E_{\text{kin}}^4}{6\pi\epsilon_0 r^2 (m_0 c^2)^4}. \quad (3.14)$$

Auf Grund ihrer geringen Masse und der einfachen Möglichkeit ihrer Erzeugung und Beschleunigung eignen sich Elektronen bestens zur Erzeugung von Synchrotronstrahlung.

Moderne Synchrotron-Anlagen bestehen meist aus einer Erzeugungseinheit für Elektronen, welche die Teilchen in ein Beschleunigungssystem einleitet, das die Elektronen auf die gewünschte Energie beschleunigt. Danach werden diese in einen Speicherring geführt, welcher aus geraden Teilstrecken und Ablenk magneten, die die Elektronen auf der Bahn halten, zusammengesetzt ist. In diese Teilstrecken sind sogenannte *Insertion Devices* integriert. Dies sind Bauteile, welche meist periodisch wechselnde Magnetfelder erzeugen, um die Elektronen auf

diesem Stück kontrolliert pendeln zu lassen und so Synchrotronstrahlung im gewünschten Energiebereich entlang der Laufrichtung in ein dahinter befindliches Strahlrohr, die sogenannte *Beamline*, abgeben.

Da die Elektronen nach Gleichung 3.14 Leistung abstrahlen, muss ihnen wieder Energie zugeführt werden, um die Teilchen im Speicherring zu halten und bei konstanten Bedingungen die gewünschte steuerbare Synchrotronstrahlung zu erzeugen. Dies geschieht mit Hilfe von Beschleunigungsstrecken, welche auf manchen der Teilstücke des Speicherrings angelegt sind.

Um die Qualität dieser Strahlung bezogen auf die für die Forschung wichtigen Parameter zu quantifizieren, ist die *Brillanz*  $B$  der Synchrotronstrahlung definiert als der Quotient aus der Photonrate pro Fläche, Divergenz des Strahls und dessen Bandbreite (z. B. [144])

$$B = \frac{\text{Photonenrate [1/s]}}{\text{Fläche [mm]} \cdot \text{Divergenz [mrad}^2] \cdot \text{Bandbreite [meV/eV]}} \quad (3.15)$$

In diversen Grundlagenbüchern (z. B. [144]) finden sich umfassende Darstellungen zur Historie, physikalischen Hintergründen und der technischen Realisierung von Synchrotronstrahlungsquellen sowie deren Weiterentwicklung, den *Freie-Elektronen-Lasern* (FEL).

### Die Synchrotron-Strahlungsquelle BESSY II

Die Synchrotron-Strahlungsquelle BESSY II [213] ist eine Einrichtung des Helmholtz-Zentrums Berlin für Materialien und Energie mit Standort in Berlin-Adlershof (siehe Abbildung 3.4). Die folgenden Abschnitte beschreiben kompakt den Aufbau von BESSY II und betrachten insbesondere die verwendete Beamline.

**Von der Elektronenkanone zum Speicherring.** Die Elektronen werden bei BESSY II in einer *Elektronenkanone* erzeugt und verlassen diese mit einer Energie von 70 keV, wonach sie in ein *Mikrotron* [106] als Vorbeschleuniger eingeleitet werden. Hier erreichen Sie eine Energie von 50 MeV. Nach dieser Vorbeschleunigung werden die Elektronen in ein *Synchrotron* [106], dem eigentlichen Hauptbeschleuniger, eingeleitet und auf die geforderte Endenergie von 1,7 GeV beschleunigt [213].

Diese Vorbeschleunigungsstufen, welche in die Injektion in den Speicherring münden, sind in Abbildung 3.4 a schematisch dargestellt.

**Der Speicherring von BESSY II.** Der Speicherring bildet das Kernstück der Synchrotron-Strahlungsquelle. Mit 240 m Umfang gehört er zu den großen Anlagen dieser Klasse von Lichtquellen. Der Elektronenstrahl wird mit Hilfe von 32 Dipolmagneten auf seiner Bahn gehalten, an welchen bereits Synchrotron-Strahlung generiert und genutzt werden kann. Die Fokussierung des Strahls wird

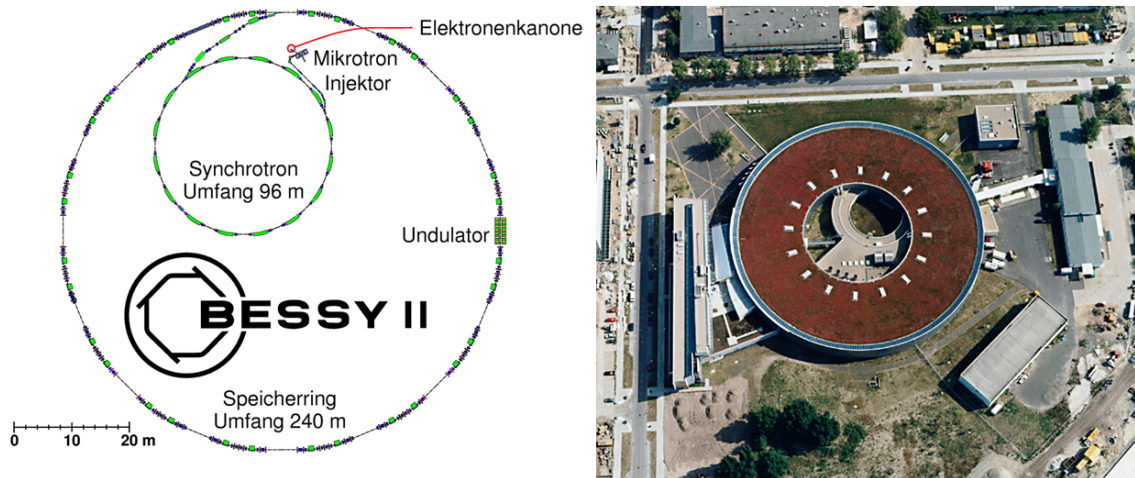


Abbildung 3.4: Die Synchrotron-Strahlungsquelle BESSY II. *Links*: Schematische Darstellung der Beschleuniger-Anlage und des Speicherrings. *Rechts*: Luftbild der Großforschungseinrichtung in Berlin-Adlershof [213].

durch 144 Quadrupol-Magnete gewährleistet, deren negative Einflüsse auf die Elektronenpakete (etwa chromatische Aberrationen) durch 112 Sextupol-Magnete korrigiert werden [213]. So werden die Elektronenpakete 8 bis 10 Stunden im Ring gespeichert, bevor erneut über das oben beschriebene System injiziert wird.

Um Strahlung gewünschter Brillanz zu erhalten, sind in den Ring 15 Insertion Devices integriert, welche zu etwa 50 Beamlines führen. Hauptsächlich werden hier als Insertion Devices *Undulatoren* verwendet. In diesen wird die Auslenkung der Elektronen gering gehalten, um die Divergenz zu minimieren, was die Brillanz deutlich erhöht (siehe Gleichung 3.15). Die Intensität folgt hierbei  $\propto I_e \cdot N^2$  mit dem Elektronenstrom  $I_e$  im Speicherring und der Anzahl  $N$  der alternierenden Magnetfeldperioden des Undulators und ist damit unabhängig von der Magnetfeldstärke [144].

In den Insertion Devices werden die periodischen Magnetfelder erzeugt durch eine Reihe gegenläufig gepolter Dipolmagneten mit dem Abstand  $g$ . Über die Variation dieses Abstands kann die Frequenz der abgestrahlten Photonen kontrolliert werden, was zur Einstellung der Energie der Strahlung verwendet wird. Die etwa 50 Beamlines haben somit je nach entsprechender Insertion Device verschiedene Eigenschaften für die unterschiedlichen Ansprüche des jeweiligen Forschungsprojektes.

Die vorgestellten Experimente wurden im Betriebsmodus *Multi-bunch hybrid* durchgeführt, bei dem 350 Elektronenpakete in den Ring injiziert und somit hohe integrale Photonenflüsse erreicht werden bei einem Ringstrom von ca. 300 mA direkt nach der Injektion. Dieser Modus trägt den Zusatz „hybrid“, da neben den gleichförmigen Elektronenpaketen ein weiteres größeres injiziert wird, welches als Zeitreferenz für einen Ringumlauf dienen kann.

Die Energieverluste der Elektronen durch die Abstrahlung von Photonen an

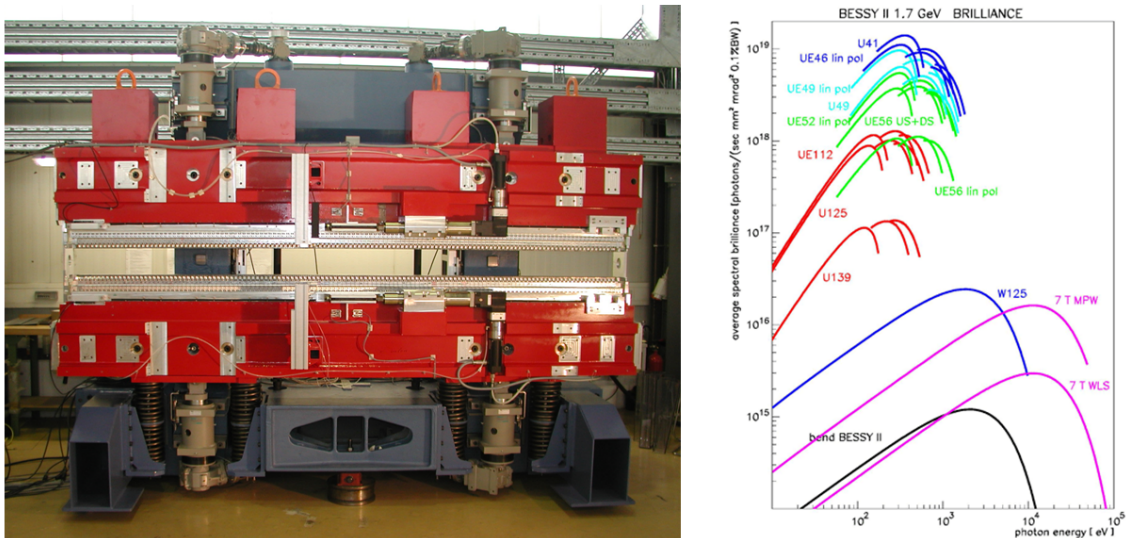


Abbildung 3.5: *Links*: Photographie eines Undulators. *Rechts*: Die Brillanz der verschiedenen Undulator-Beamlines bei BESSY II in Abhängigkeit der Photonenenergie [213].

den Insertion Devices und Dipolmagneten werden durch HF-Resonatoren im Speicherring ausgeglichen.

**Die Beamline U49/2 - PGM1.** Eigentlich beginnen die Beamlines bereits mit dem Undulator im Speicherring, welcher die Photonen für die Experimente bereitstellt und somit die Strahlparameter vorgibt. Bei der für die dargestellten Photoabsorptionsexperimente verwendeten Beamline handelt es sich um den *Undulator U49/2*, der seinen Namen von der Periodenlänge der Magnetfeldstruktur von 49,4 mm trägt. Er ist aus 84 Polmagneten aufgebaut, welche sich zu einem minimalen Abstand von 16,0 mm schließen lassen und produziert damit Photonen, die eine minimale Energie von 84,4 eV bei der nominellen Elektronenenergie von 1,7 GeV im Speicherring erreichen [213].

Wie in Abbildung 3.6 skizziert treten nun die Photonen nach Verlassen des Undulators durch eine Öffnung in der Abschirmungswand auf einen torodialen Spiegel, mit welchem der Strahl in drei verschiedene Strahlrohre geführt werden kann. Bei einer 176°-Stellung dieses Spiegels treffen die Photonen in die *Beamline PGM1* [174]. Kernstück dieser Beamline ist der namensgebende *Plane Grating Monochromator PGM1*, dessen Grundprinzip in [77] beschrieben ist. In einem Monochromator diesen Typs wird der Strahl durch einen Spiegel in vertikale Richtung auf ein Gitter mit einer Gitterkonstante von 600 oder alternativ 1200 Linien/mm gelenkt, welches die für die Monochromatisierung des Strahls notwendige Dispersion bewirkt und den Strahl weiter horizontal in Richtung der experimentellen Anlage führt. Zuvor wird mit Hilfe eines Austrittsspalts der Wellenlängenbereich eingeschränkt, welcher tatsächlich in das Experiment gelangt, womit auch die Auflösung des Strahls definiert wird. Dahinter wird ein letztes Mal

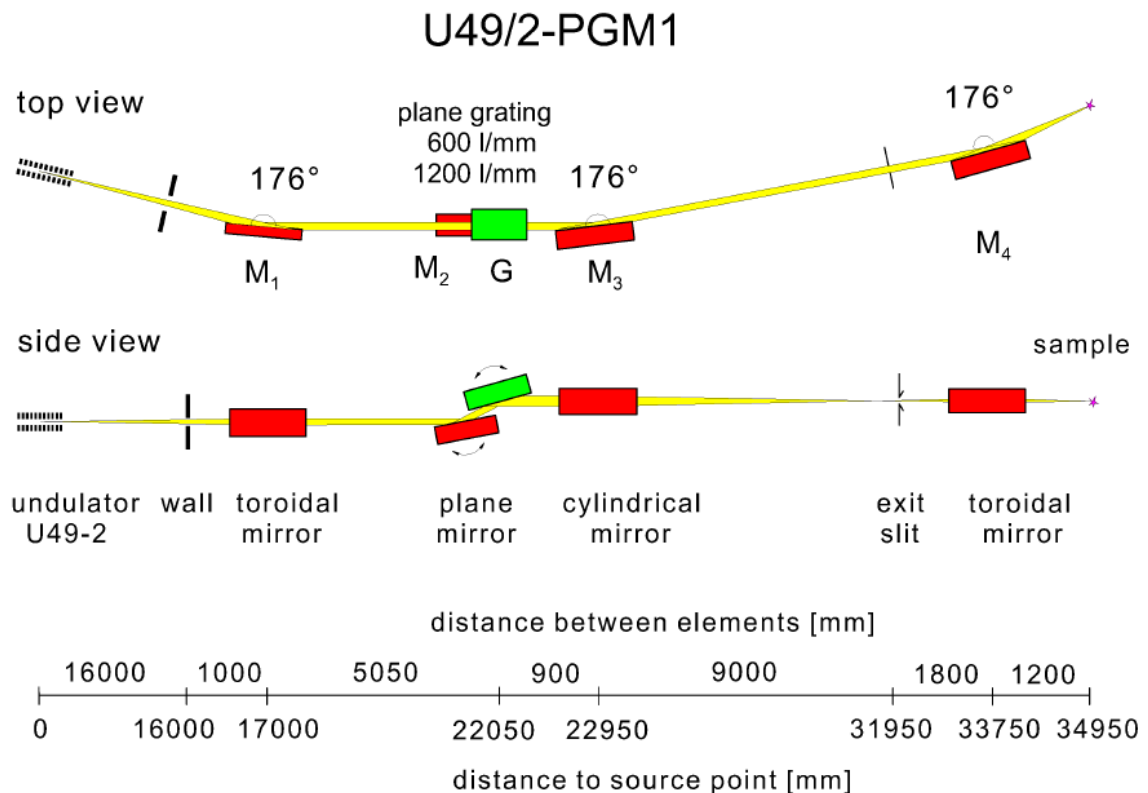


Abbildung 3.6: Schematischer Aufbau der der Beamline U49/2 - PGM1 in Seiten- und Oberansicht [174].

der Strahl über einen Spiegel abgelenkt, bevor er in die Experimentier-Station führt. Dieser Spiegel ist beschichtet, so dass auf ihm ein Photostrom gemessen und somit die relative Intensität des Photonenstrahls bei laufendem Experiment bestimmt werden kann.

Die Beamline U49/2 - PGM1 [185] liefert Photonen im Energiebereich von 85 bis 1600 eV über alle ungeraden Harmonischen der Photonen, welche den Undulator verlassen. Diese Photonen sind dabei linear polarisiert in horizontaler Ausrichtung, was für die Betrachtungen der Detektionseffizienz der Relaxationsphotonen entscheidend ist (siehe Abschnitt 3.3.3). Es werden Photonenflüsse von  $10^{13}$  Photonen/s im Energiebereich bis etwa 500 eV und  $10^{12}$  Photonen/s bei höheren Energien bereitgestellt, wie auch Abbildung 3.7b zu entnehmen ist. Die erreichbare Auflösung liegt für den unteren Energiebereich bis 500 eV bei 25.000 und bei höheren Energien bei 15.000 ( $E/\Delta E$ ). Die Strahldivergenz ist in horizontaler und vertikaler Richtung mit 2 mrad nahezu gleich.

Die gewünschte Photonenenergie wird mit einer kombinierten Modifikation der Parameter für Undulator und Monochromator eingestellt: während durch die Einstellung des Magnetreihenabstands  $g$  im Undulator der Energiebereich für die emittierten Photonen ausgewählt wird, wird durch die Drehung des Gitters im

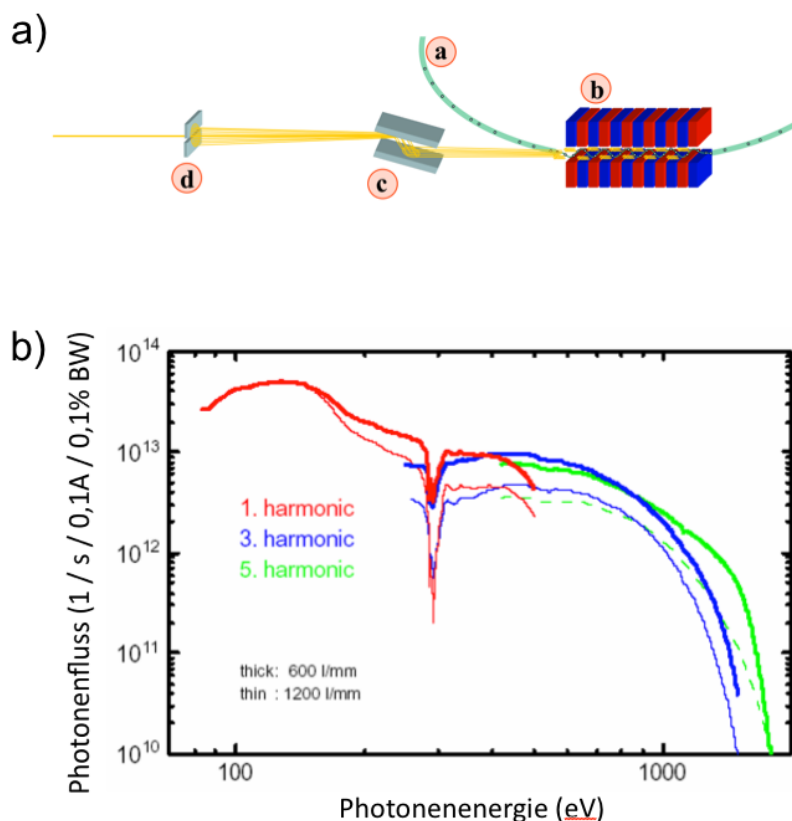


Abbildung 3.7: (a) Vereinfachtes Schema der Beamline. (b) Photonenfluss der Beamline U49/2–PGM1 [185].

Monochromator die gewünschte Photonenenergie auf das Zentrum des Austrittspalts zum Experiment festgelegt. Dies wird über eine spezielle Software mit dem Namen *EMP/2* gesteuert, welche die Einstellungen anhand von Berechnungen oder Tabellen wählt. Es wird ein zur eingestellten Energiestufe proportionales Spannungssignal als Monitor signal ausgegeben, mit dem die Photonenenergie im Datenaufnahmesystem (Abschnitt 3.4.1) erfasst werden kann. Hierbei können systematische Effekte auftreten wie unterschiedliche Einstellzeiten für bestimmte Energieschritte oder Effekte hinsichtlich der Reproduzierbarkeit, welche in Kapitel 5.1.3 bei der Besprechung der Photoabsorptions-Experimente diskutiert werden.

Entscheidend für die Auflösung des Photonenstrahls ist die Öffnung des Austrittspalts zum Experiment, mit welchem der interessante Energiebereich ausgewählt wird. Dieser ist im Bereich von 0 bis  $2000 \mu\text{m}$  variierbar. Ein sehr eng geschlossener Spalt bewirkt eine bessere Auflösung, führt aber zwangsläufig zu einem geringeren Photonenfluss.

**Einschuss in das Reaktionsvolumen.** Nach dem Austrittspalt wird an die Beamline die jeweilige Experimentierstation angeschlossen, und so wurde die



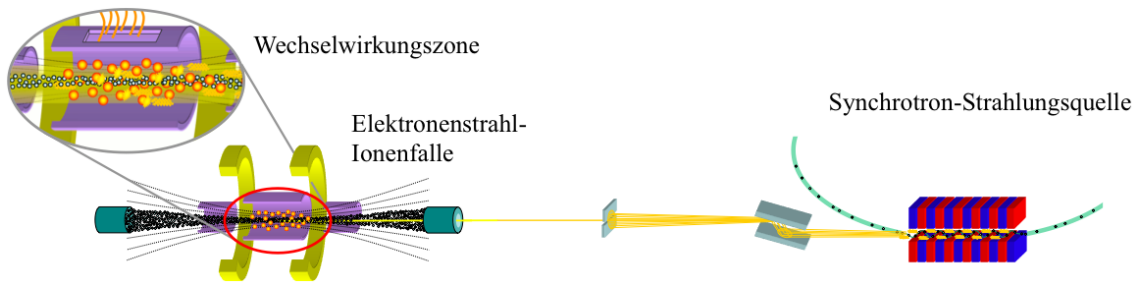


Abbildung 3.8: Schema des Einschusses des Photonenstrahls in das Reaktionsvolumen der EBIT

FLASH-EBIT in Strahlachse an das Vakuum der Beamline angekoppelt, damit der Photonenstrahl parallel zum Elektronenstrahl in die EBIT gelangen kann.

Entscheidend für die Experimente ist der Überlapp zwischen dem Photonenstrahl und der Wolke mit hochgeladenen Ionen in der Wechselwirkungszone, dessen Lage durch den Elektronenstrahl bestimmt wird. Da beide Strahlen einen sehr geringen Durchmesser haben (der Photonenstrahl etwa zwischen 20 und 2000  $\mu\text{m}$ , der Elektronenstrahl typischerweise ca. 60  $\mu\text{m}$ ) und die Strahlen über einen möglichst großen Bereich in der Wechselwirkungszone überlappend laufen sollen, ist eine sehr genaue Justage der EBIT bezüglich des Strahlengangs des Photonenstrahls bereits beim Experimentaufbau zu beachten und im Laufe der Experimente punktuell zu überprüfen.

Nach Erfahrungen mit der schwierigen Suche nach dem Überlapp in früheren Strahlzeiten wurde von *Sascha Epp* ein wirkungsvolles System zur Kontrolle des Strahlüberlapps konstruiert und implementiert, welches in [189] beschrieben ist:

In die Mitte der Wechselwirkungszone wird zur Überprüfung des Überlapps ein sowohl unter Beschuss von Röntgen-Photonen als auch durch Elektronen fluoreszierender YAG-Kristall eingefahren. Daraufhin wird der Elektronenstrahl der EBIT bei sehr niedrigen Strahlparametern aktiviert und die Fluoreszenz auf dem YAG-Kristall detektiert. Da der Kristall relativ zur EBIT raumfest ist, ist nun selbst nach einer Bewegung der EBIT die Strahlposition in ihr bekannt. Nun wird von der anderen Seite der Photonenstrahl in die Wechselwirkungszone geschossen und die EBIT so lange bewegt, bis der Photonenstrahl auf der gleichen Stelle abbildet, auf der zuvor der Elektronenstrahl detektiert wurde.

Die Beobachtung des YAG-Kristalls erfolgt mit Hilfe einer CCD-Kamera, mit welcher über einen 45°-Spiegel durch den Kollektor längs der Strahlrichtung in die Wechselwirkungszone und somit auf den YAG-Kristall gesehen werden kann. Da dieser Spiegel zur Beobachtung des Kristalls in den Strahlengang eingefahren wird, befindet sich in dessen Mitte ein Loch für den Photonenstrahl.

### 3.3 Detektionssysteme

Nachdem in den vorherigen Abschnitten die Präparation des Targets und die Bereitstellung der Projektile dargestellt wurden, soll nun als dritter Baustein der Experimente die Detektion der physikalischen Prozesse und die digitale Aufnahme der Daten erläutert werden.

In Abschnitt 2.3.3 wurden die in den Experimenten beobachteten Prozesse und die Möglichkeiten deren Messung dargestellt, wonach die Detektion von Röntgen-Photonen und von umgeladenen Ionen ermöglicht werden muss. Die entsprechenden Detektionssysteme werden in diesem Abschnitt vorgestellt und ihre Eigenschaften diskutiert.

#### 3.3.1 Detektion von Photonen

Die Relaxations-Photonen tragen Energien im Röntgen-Bereich von ca. 500 eV bis 6 keV, wobei die niedrigeren Energien bei der hier untersuchten Resonanzstreuung von Bedeutung sind ( $L$ - $M$ -Übergänge in  $M$ -Schalen-Ionen von Eisen), die höheren bei den Experimenten zur resonanten Rekombination ( $K$ - $L$ -Übergänge in Argon und Eisen) auftreten.

Keine der Experimente ist auf die exakte Bestimmung der Photonenenergien angewiesen, da lediglich die gehäufte Detektion von Photonen im Energiebereich des entsprechenden Schalenübergangs bei resonanten Projektilenergien als Nachweis für den jeweiligen Prozess dient. Eine energieselektive Detektion der Photonen ist daher zwar notwendig, jedoch hat die geforderte Auflösung einen recht großen Toleranzbereich, in dem die Photonen noch dem entsprechenden Übergang zugeordnet werden können. Eine hohe Zeitauflösung ist jedoch wichtig, um die Ereignisse der entsprechenden Energie der Projektilteilchen direkt zuzuordnen.

Halbleiterdetektoren (siehe z. B. [120, 193]) erfüllen die genannten Voraussetzungen. Sie bestehen aus einem möglichst großen und reinen Einkristall eines – für die Detektion von Photonen idealerweise schweren – Halbleiterelements. Auf diesen treffen die Röntgenphotonen und geben ihre Energie durch den intrinsischen Photoeffekt [1] auf ein Elektron ab, welches im Kristall weitere Sekundärelektronen (Elektron-Loch-Paare) generiert. Durch eine Spannung, die zwischen den Flächen des Kristalls angelegt ist, werden die Elektronen abgezogen und bilden einen Strom, der zur Energie des detektierten Röntgenphotons proportional ist.

Dieser Strom wird in einem *Vorverstärker* in eine messbare Spannung transformiert, welche in einem *Spektroskopie-Verstärker* auf gut messbare Größenordnungen verstärkt wird. Das Ausgangssignal ist ein zur Energie des detektierten Photons proportionaler Spannungspuls, welcher von dem Datenaufnahmesystem eingelesen und digitalisiert werden kann.

Bei Raumtemperatur würde die angelegte Spannung den Kristall zerstören,

weshalb er mit Hilfe von flüssigem Stickstoff gekühlt werden muss. Hierdurch wird auch das Rauschen des Detektorsignals unterdrückt.

Die Messungen dieser Experimente wurden mit Detektoren durchgeführt, die Germanium als Halbleitermaterial verwenden. Die beiden verwendeten Modelle stammen von der Firma *ORTEC Advanced Measurement Technology*.

Die Detektoren waren senkrecht zur Strahlachse des EBIT-Elektronenstrahls und damit auch des Projektil-Photonenstrahls montiert, was auf Grund der Konstruktion der FLASH-EBIT nicht anders möglich war. Zudem wurde der Detektor horizontal in Bezug zur Ausrichtung der EBIT und so in der Polarisationsenebene des Photonenstrahls der BESSY-Beamline angebracht. Die daraus folgenden Einschränkungen für die Messbarkeit der Relaxationsphotonen auf Grund der Abstrahlcharakteristik werden in Abschnitt 3.3.3 diskutiert.

**Rekombinationsmessungen – Detektor Ortec GLP 36360.** Da sich die Rekombinationsprozesse über die Detektion von Photonen nachweisen lassen, welche eine Energie  $> 3$  keV haben, war es möglich, diese mit einem externen Detektor zu messen, der nicht direkt mit dem Vakuum des Reaktionsvolumens verbunden sein musste.

An die Vakuumkammer wurde ein Fenster aus einer *Beryllium-Folie* mit einer Dicke von  $250 \mu\text{m}$  angebracht, welche auf Grund der sehr niedrigen Masse von Beryllium (Massenzahl  $u = 9$ ) auch für niederenergetische Röntgen-Photonen relativ transparent ist. So zeigt die Darstellung der Effizienz des Detektors in Abbildung 3.9 a, dass ab etwa 3 keV Photonenenergie ein Beryllium-Fenster der genannten Dicke für diese Photonen nahezu durchlässig ist.

Der Detektor hat einen aktiven Durchmesser von 36 mm und damit eine Detektionsfläche von  $1000 \text{ mm}^2$  bei einer Tiefe von 13 mm, seine Auflösung bei 5,9 keV ist mit 360 eV angegeben. Er selbst ist ebenfalls mit einem  $250 \mu\text{m}$ -Beryllium-Fenster vor der Umgebungsluft geschützt. Der Detektor hat bei einer Photonenenergie von  $(20 \pm 10)$  keV eine Zeitauflösung von  $(20 \pm 2)$  ns [218].

**Messung der Photonenstreuung – Detektor Ortec IGLET-X-061150-S.** Bei Photonenenergien  $< 3$  eV wird die Effizienz des oben erwähnten GLP-Detektors zu gering, um mit ausreichender Zählrate die Prozesse zu messen. Bei den Messungen zur resonanten Photonenstreuung werden jedoch Photonenenergien von  $\approx 800$  eV erwartet.

Hierfür wurde der Detektortyp *IGLET-X* von *ORTEC* verwendet, welcher deutlich bessere Eigenschaften bei niedrigeren Energien aufweist: so hat er eine Energieauflösung von bis zu 150 eV bei 5,9 keV Photonenenergie. Das den Kristall mit einem Durchmesser von 11 mm und einer aktiven Tiefe von 10 mm schützende Beryllium-Fenster ist mit lediglich  $25 \mu\text{m}$  Stärke extrem dünn und ermöglicht die Detektion von Photonen mit Energien  $\geq 500$  eV bis zu 60 keV. Auch wenn die Effizienz bei den niedrigsten Photonenenergien recht gering ist, wie Abbildung

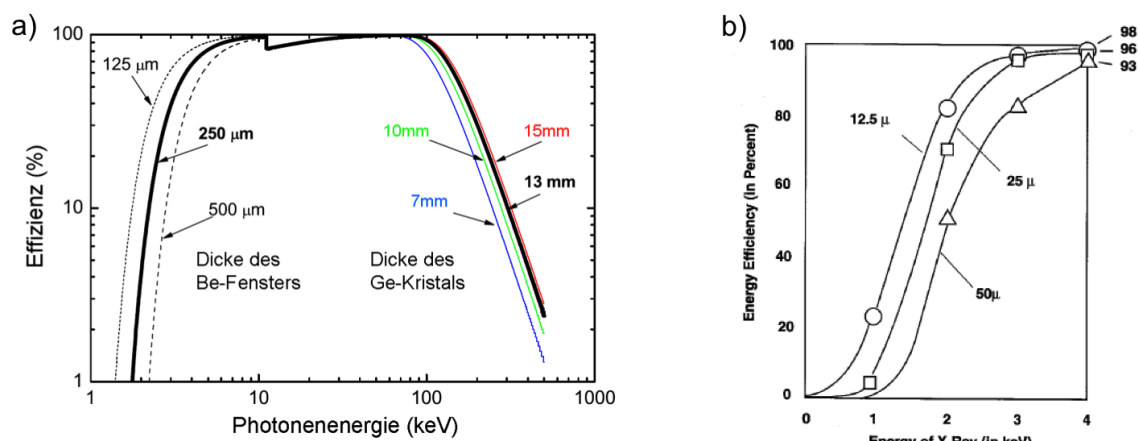


Abbildung 3.9: Effizienz der Photonen-Detektoren in Abhängigkeit der Photonen-Energie. Links: Detektor GLP (verwendet für Rekombinationsmessungen) [220]. Rechts: Detektor IGLET-X (verwendet für die Messung der resonanten Photonenstreuung) [219].

3.9b zeigt, ist sie dennoch ausreichend für eine zufriedenstellende Zählrate bei starken Resonanzlinien. Die aufgeführten Detektor-Eigenschaften wurden [219] entnommen.

Da dieser Detektor in das Vakuum der EBIT eingebaut werden konnte, war kein weiteres Beryllium-Fenster zum Schutz des Vakuums notwendig. Lediglich eine sehr dünne Kohlenstoff-Folie schirmte den Detektor gegenüber dem sichtbaren Streulicht ab, welches von der geheizten Kathode (siehe Kapitel 3.1.1) der Elektronenkanone abgestrahlt wurde.

Der verwendete IGLET-X-Detektor war eine Leihgabe des *Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL)*, mit welchem die Photoabsorptionsexperimente in Kollaboration durchgeführt wurden.

### 3.3.2 Detektion von Ionen mit Ladungszustandsselektion

Um die durch Autoionisation resultierende Umladung der Ionen direkt messen zu können, müssen diese ladungszustandsselektiv detektiert werden. Hierfür müssen die Ionen nach der Reaktion aus dem Wechselwirkungsbereich herausgeleitet, nach Ladungszuständen getrennt und anschließend registriert werden. Die eigentliche Detektion erfolgt dabei durch einfaches Zählen von Ereignissen auf einer zweidimensionalen Detektorfläche, auf welcher die Ionen orts- und zeitaufgelöst, jedoch *nicht* ladungszustandsselektiv und nur in sehr begrenztem Maße energieselektiv ausgelesen werden. Die Selektion nach Ladungszuständen muss daher vor dem Auftreffen auf den Detektor erfolgen, indem in einem Geschwindigkeitsfilter die Strahlengänge der aus dem Reaktionsvolumen extrahierten Ionen gleicher Masse getrennt werden, damit sie unterschiedliche Regionen auf dem positionsempfindlichen Detektor erreichen.

Das Ionen-Detektionssystem wurde von *Martin Simon* im Rahmen seiner Dissertation [189] entwickelt und ist in dieser im Detail beschrieben, weshalb sich die Ausführungen in der vorliegenden Darstellung vor allem auf die Prinzipien des Systems und die vorgenommenen Änderungen beziehen und dabei weniger auf die Konstruktion eingegangen wird.

### Extraktion der Ionen aus der EBIT

Im ersten Schritt müssen die Ionen, nachdem sie mit den Projektilen reagiert haben, aus der Wechselwirkungszone und damit aus der EBIT extrahiert und zu einem Ionenstrahl geformt werden. Dies geschieht im Wesentlichen durch eine geeignete Wahl der longitudinalen Fallenpotentiale in der EBIT:

Ist für einen optimalen Einschluss der Ionen ein nahezu symmetrischer Potentialtopf in Strahlrichtung des Elektronenstrahls ideal, welcher durch die Driftrohren um das Reaktionsvolumen angelegt wird, wird für die Extraktion von Ionen das einschließende Potential an der in Richtung des Kollektors gelegenen Driftrohre geöffnet, um die Ionen kontrolliert in diese Richtung entweichen zu lassen.

In einer solchen Fallenordnung werden kontinuierlich Ionen aus der Wechselwirkungszone hinausgeführt. Da ebenso ständig ein Atomstrahl des Targetelements in die EBIT eingeleitet und von dem Elektronenstrahl ionisiert wird, ist eine gleichbleibende Targetdichte und ein ebenso nahezu gleichbleibender Fluss von extrahierten Ionen zu erwarten.

Sind die Ionen aus der EBIT herausgeführt, müssen sie in die Ladungszustandsselektion bzw. auf den Detektor geleitet werden. Da sie in Strahlrichtung extrahiert werden, jedoch auch der Photonenstrahl in Strahlrichtung in die EBIT eingeleitet wird, würde eine direkte Weiterleitung der Ionen und deren Detektion auf der Strahlachse den Photonenstrahl blockieren und das Experiment behindern.

Daher muss das weitere Detektionssystem räumlich vom Strahlengang des Photonenstrahls getrennt werden. Das geschieht mit einer elektrostatischen Ablenkeinheit (auch *Bender* genannt), welche direkt hinter dem Kollektor der EBIT angebracht ist und die Ionen in einem  $90^\circ$ -Winkel ablenkt. Der Bender besteht im Prinzip aus zwei Ablenkplatten, von welchen die eine geerdet und die andere mit einer sogenannten *Bender-Spannung*  $U_{\text{bend}}$  belegt ist. Die Teilchen gelangen in einem  $45^\circ$ -Winkel über einen Eintrittsspalt in die Konstruktion. Dort werden sie wieder in  $45^\circ$  reflektiert und verlassen durch den entsprechenden Austrittsspalt den Ablenker [189].

Der Bender ist – genau wie der Spiegel zur Beobachtung des YAG-Kristalls (siehe Abschnitt 3.2.2) – mit einem Loch für den Photonenstrahl versehen. Vor und hinter dem Bender sind ionenoptische Linsen implementiert, um den Strahl zu formen und zu fokussieren [187, 189].

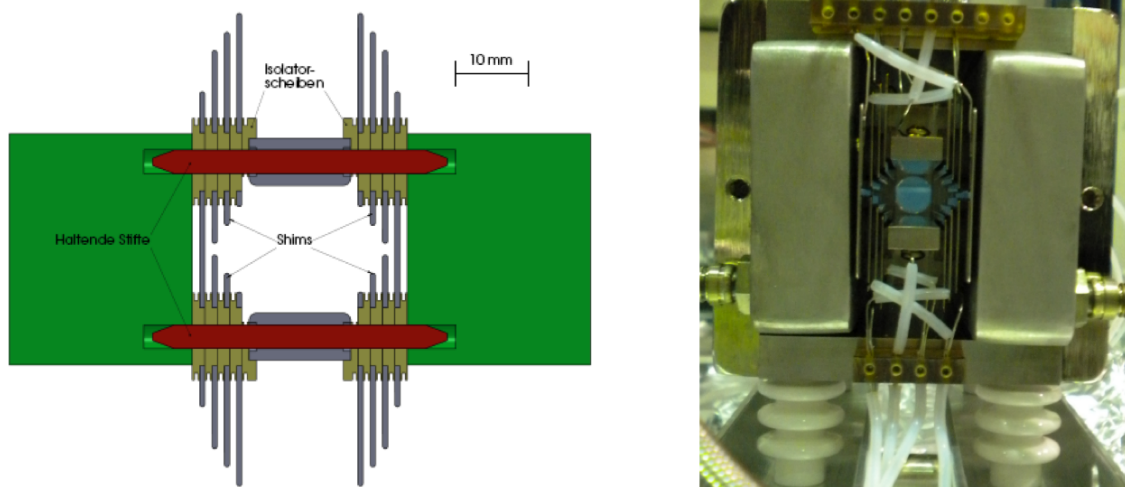


Abbildung 3.10: Der Wienfilter als Konstruktionszeichnung (*links*) und Photographie (*rechts*) nach der Modifikation [194]

### Selektion der Ionen nach Ladungszuständen

Sind die Ionen nun aus der EBIT herausgeführt, zu einem Strahl geformt und aus dem Photonenstrahl abgelenkt, werden sie in die Einheit zur Ladungszustandsselektion eingeleitet.

Hierfür wurde ein Geschwindigkeitsfilter nach dem *Wien-Prinzip* verwendet (z. B. [101]). Dieser erzeugt ein senkrecht gekreuztes elektrisches und magnetisches Feld, was auf Grund der auf geladene Teilchen wirkenden Lorentz-Kraft [111]

$$\vec{F}_L = q \cdot (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (3.16)$$

dazu führt, dass Teilchen bei einer bestimmten Geschwindigkeit  $v_0 = \frac{|E|}{|B|}$  keine ablenkende Kraft erfahren und den Filter ungehindert passieren.

Man erkennt leicht, dass geladenen Teilchen, welche vom gleichen Extraktionspotential beschleunigt werden, in Abhängigkeit ihres *Ladung-zu-Masse-Verhältnisses*  $q/m$  abgelenkt werden. Wenn man davon ausgeht, dass Ionen *eines* Elements gemessen werden, ist die Masse konstant und so mit dieser Anordnung eine Trennung des Ionenstrahls nach Ladungszuständen  $q$  realisiert. Durch die geeignete Wahl von elektrischem und magnetischem Feld können die Ionenstrahlen so getrennt werden, dass genau zwei oder drei Ladungszustände des gesuchten Ions – idealerweise der Target-Ladungszustand und der nach der Reaktion entstandene umgeladene Zustand – auf dem Detektor abgebildet werden.

Diese Form der Ladungszustandsselektion birgt jedoch das Problem, dass Ionen verschiedener Elemente mit gleichem  $q/m$ -Verhältnis den gleichen Strahlenweg nehmen und somit auf dem Detektor auf gleicher Position abgebildet wer-

den. Nimmt man etwa den Fall des Ions  $^{56}\text{Fe}^{14+}$  mit der Ladung  $q = 14$  und der Massenzahl  $u = 56$ , ergibt sich ein  $q/m$ -Verhältnis von 4 – genau wie bei  $^{16}\text{O}^{4+}$ , was auf Grund des nicht absoluten Vakuums ebenfalls in der EBIT präsent ist.

Für die Messungen wurde ein Wien-Filter des Modells 600-B der Firma *Cooltron* verwendet [212]. Er besteht aus zwei Magnetfeldspulen, die innerhalb der Vakuumkammer eingebaut sind und von einem Kühlmittel umflossen werden können, sowie senkrecht dazu angeordneten Elektroden-Platten. Um das Feld im Strahlengang möglichst homogen zu halten, sind weitere Elektroden – sogenannte *Shims* – angebracht, welche mit einem Potentialgradienten belegt werden.

*René Steinbrügge* hat sich bei seiner im Rahmen dieser Dissertation betreuten Diplomarbeit [194] mit der Weiterentwicklung und Verbesserung des Wien-Filters befasst. So wurden Probleme mit der Dichtigkeit der Kühlmittelzuleitungen gelöst und eine neue Konstruktion von *Shims* eingebaut, was die Spannungsfestigkeit des Aufbaus deutlich erhöht.

Der verbesserte Wien-Filter wird in Abbildung 3.10 als Konstruktionszeichnung und als Photographie dargestellt, wobei weitere Details und nähere Erläuterungen in [194] nachgelesen werden können.

### Detektion der Ionen

Die ladungszustandsabhängige Messung der Ionenrate erfolgt über das Zählen der einzelnen Ionen, welche auf Grund der Ladungstrennung im Wien-Filter räumlich separiert hinter dem Filter auf einem positionsempfindlichen Detektor (PSD) auftreffen.

Die Ortsinformation wird mit Hilfe zweier Verzögerungsleitungen (*engl.: delay line anode*) ausgelesen. Diese sind jeweils in parallelen Teilstücken aufgewickelt und gegeneinander gekreuzt angeordnet. Trifft ein Teilchen auf eine Stelle dieser Anode, kann über den Laufzeitunterschied des Signals die jeweilige Position in  $x$ - und  $y$ -Richtung bestimmt und somit eine zweidimensionale Positionsinformation gewonnen werden, wie in Abbildung 3.11 schematisch verdeutlicht ist.

Das Signal eines einzelnen Ions alleine reicht jedoch nicht aus, um messbare Ströme in der Verzögerungsleitungs-Anordnung zu erhalten. Aus diesem Grund muss das Signal eines Ion-

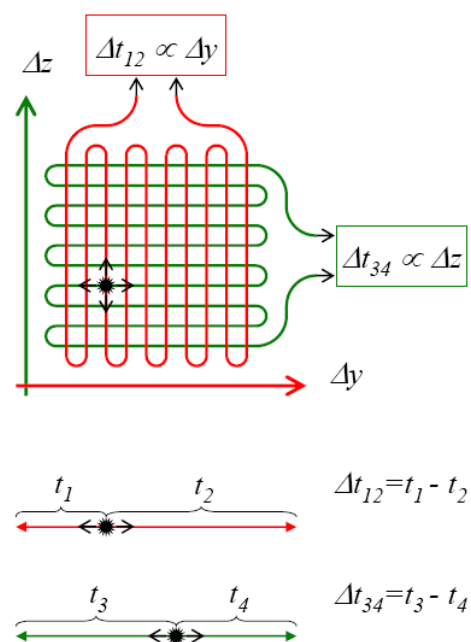


Abbildung 3.11: Prinzip des positionsempfindlichen Detektors mit Messung der Signalverzögerung an den Anodenleitungen [189]

Ereignisses zuvor verstärkt werden. Dies wird durch dem Detektor vorgelagerte *micro channel plates* (MCP, engl. für Mikrokanal-Platten) realisiert. Sie bestehen aus einem sehr engmaschigen Netz von Elektronen-Vervielfacher-Röhrchen, die leicht geneigt zur Ebene stehen, um den geraden Durchflug eines zu detektierenden Teilchens zu erschweren.

Trifft ein Ion auf die Innenfläche eines solchen Röhrchens, wird ein Schauer mehrerer Elektronen ausgelöst, der die kritische Größe der Messbarkeit der Verzögerungsleitungs-Anordnung überschreitet. Die Effizienz – sowohl in der Elektronenvervielfachung als auch in der Unterdrückung des ungehinderten Durchflugs und damit der „Blindheit“ gegenüber einigen Ereignissen – wird dadurch erhöht, dass zwei dieser MCPs in entgegengesetztem Neigungswinkel der Vervielfacher-Kanäle hintereinander montiert sind.

Dabei ist ein elektrostatisches Potential zwischen Vorder- und Rückseite der MCPs angelegt, welches an der Ionen-Seite negativ und an der Seite in Richtung der Verzögerungsleitungen positiv ist mit einer Spannung von in diesem Fall typischerweise 2400 V, so dass die Ionen auf die MCPs geleitet und die Sekundärelektronen in Richtung der Verzögerungsleitungen beschleunigt werden. Die Verstärkung der MCP-Anordnung beträgt bei dieser Spannung  $\approx 10^7$ .

Für die vorgestellten Experimente wurde ein *Delay Line Detektor DLD40* der Firma *RoentDek* verwendet, welcher eine aktive Fläche mit einem Durchmesser von 40 mm und eine Ortsauflösung von 0,1 mm aufweist. Weitere Details des Funktionsprinzips und der Betriebsparameter können im entsprechenden Handbuch [214] nachgelesen werden.

In Abbildung 3.12 wird eine Konstruktionszeichnung sowie eine Photographie des positionsempfindlichen Detektors mitsamt der vorgeschalteten MCPs gezeigt.

Die Signale der Verzögerungsleitungen werden in einem Vorverstärkersystem des Detektorherstellers *RoentDek* zu messbaren NIM-Signalen verstärkt, welche im Datenaufnahmesystem (siehe Abschnitt 3.4.1) weiter verarbeitet werden können [215].

### 3.3.3 Das Detektionssystem im Überblick

Mit den vorgestellten Bausteinen des Detektionssystems, welches in Abbildung 3.13 schematisch zusammengefasst ist, lassen sich die untersuchten Prozesse nun über einen möglichen radiativen Zerfall eines angeregten Zustands mittels Photonendetektion oder über die Detektion der bei den Prozessen umgeladenen Ionen nachweisen.

Wie bei den Prozessen ausgelöst durch Photonen-Absorption (siehe Kapitel 5) angewandt, kann die Detektion beider Kanäle gleichzeitig durchgeführt werden.

**Erfasste Raumwinkel und Effizienz der Detektion.** Mit dem erfassten Raumwinkel ist eine wesentliche Detektoreigenschaft bei beiden Systemen grundle-



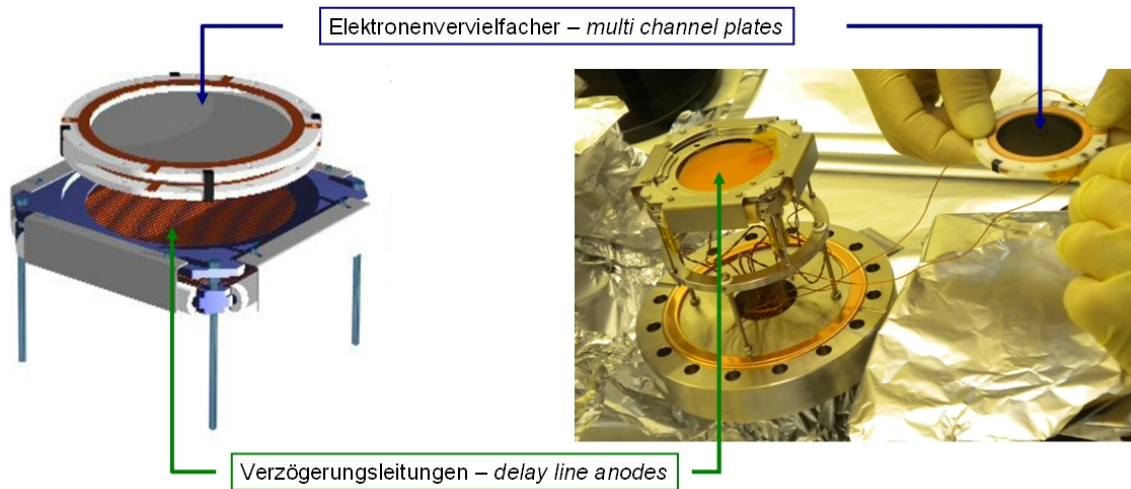


Abbildung 3.12: Der positionsempfindliche Detektor mit vorgeschalteten MCPs als Konstruktionszeichnung des Herstellers ( [214], links) sowie als Photographie beim Tausch der MCPs während der Messkampagne 2010 (rechts).

gend verschieden, was sich zum einen in der Effizienz der Beobachtung der Prozesse und zum anderen in der Beschränkung auf Beobachtungsrichtungen auswirkt: Das **Ionen-Detektionssystem** erfasst im idealen Fall einen Raumwinkel von  $\Omega = 4\pi$  sr und somit jeden Prozess, der aus der Reaktion von Target und Projektil folgt. Dies beruht auf zwei Gründen: Es werden prinzipiell alle Ionen, welche in der EBIT erzeugt werden, aus dem Fallenvolumen heraus in das Ionen-Detektionssystem geleitet. Weiter ergibt sich die idealerweise komplette Detektion aus der Unabhängigkeit der Beobachtungsrichtung, da zum einen *alle* Ionen extrahiert werden und zum anderen ein Prozess im Target selbst, nämlich die Umladung, untersucht wird und so im Gegensatz zu der Beobachtung der Emission von Photonen oder Elektronen der *Impuls* des Abregungsteilchens keine Rolle spielt.

Anders verhält es sich bei der **Detektion der Photonen**: der in 3.3.1 beschriebene Detektor<sup>1</sup> sieht durch seine Detektorfläche mit Durchmesser von 11 mm und den Abstand zum Reaktionsvolumen von etwa 150(10) mm nur einen kleinen Ausschnitt der insgesamt emittierten Photonen und deckt damit einen Raumwinkel von ungefähr  $\Omega \approx 1,34(18) \cdot 10^{-3} \pi$  sr ab, was lediglich  $\approx 1/3000$  des Raumwinkels der Ionendetektion entspricht. Die feste Montageposition lässt nur die Beobachtung von Photonen zu, welche senkrecht zur Reaktionsrichtung abgestrahlt werden. Die Photonen, die durch Abregung eines angeregten Zustands ausgesandt werden, welcher durch resonante Elektronenabsorption geformt wurde, haben eine Winkelverteilung nach Gleichung 2.45, wonach die Abstrahlung senkrecht zur Strahlachse maximal ist. Somit ist der experimentelle Aufbau für

<sup>1</sup>Hier wird als Beispiel der IGLET-X-Detektor diskutiert, analoge Überlegungen gelten auch für den GLP-Detektor.

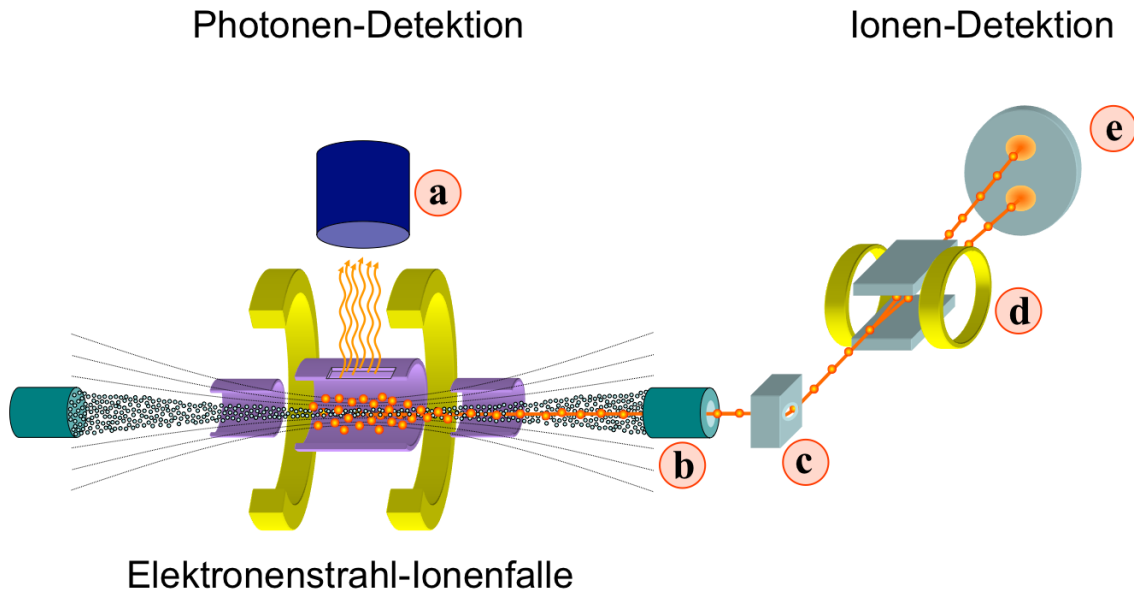


Abbildung 3.13: Das Detektionssystem im Überblick: *Detektion der Photonen:* (a) Röntgen-Detektor. *Detektion der Ionen:* durch dem Kollektor (b) werden die Ionen aus der EBIT geführt und von dem elektrostatischen Ablenker (c) in das Detektionssystem eingeleitet. Dort wird im Wien-Filter (d) der Strahl nach Ladungszuständen getrennt, so dass die Ionen auf dem positionsempfindlichen Detektor (e) gezählt werden können.

die Messung der resonanten Rekombination ideal.

Etwas differenzierter ist dies im Falle der Detektion der Resonanzstreuung von Photonen zu betrachten, bei denen der sich radiativ abregende Zustand durch Absorption eines Photons geformt wurde. Das anregende Licht ist linear polarisiert in horizontaler Ebene, und so liegt der Detektor in der Polarisationsebene der Projektilphotonen. Damit ist der Winkel  $\phi$  in Gleichung 2.46 für den verwendeten Experimentaufbau immer  $\phi = 0$ . Da der Detektor senkrecht zur Strahlachse montiert ist, ist hier  $\theta = 90^\circ$ . Bei den Ergebnisdarstellungen der gemessenen Prozesse wird sich herausstellen, dass sowohl Prozesse mit  $\Delta J = 0$  und  $\Delta J = 1$  von Interesse sind, wobei sich die Winkelverteilung mit den entsprechenden Parametern ergibt zu

$$\begin{aligned}
 \Delta J = 0 & \implies W(90^\circ, 0^\circ) = 1 \\
 \Delta J = 1 \quad (3/2 \rightarrow 1/2) & \implies W(90^\circ, 0^\circ) = 1/7 \\
 \Delta J = 1 \quad (1 \rightarrow 0) & \implies W(90^\circ, 0^\circ) = 0.
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

Dies bedeutet, dass die Beobachtung von  $\Delta J = 0$  Übergängen mit maximaler Stärke möglich ist, bei  $\Delta J = 1$  Übergängen im Falle von  $(J = 3/2 \rightarrow 1/2)$  nur mit einem Siebtel der maximalen Intensität gerechnet werden kann, bei  $J = 1 \rightarrow 0$  Übergängen sogar überhaupt keine Relaxations-Photonen gesehen werden können. In der Ergebnisdarstellung in Kapitel 5 wird dies entsprechend berücksichtigt werden.

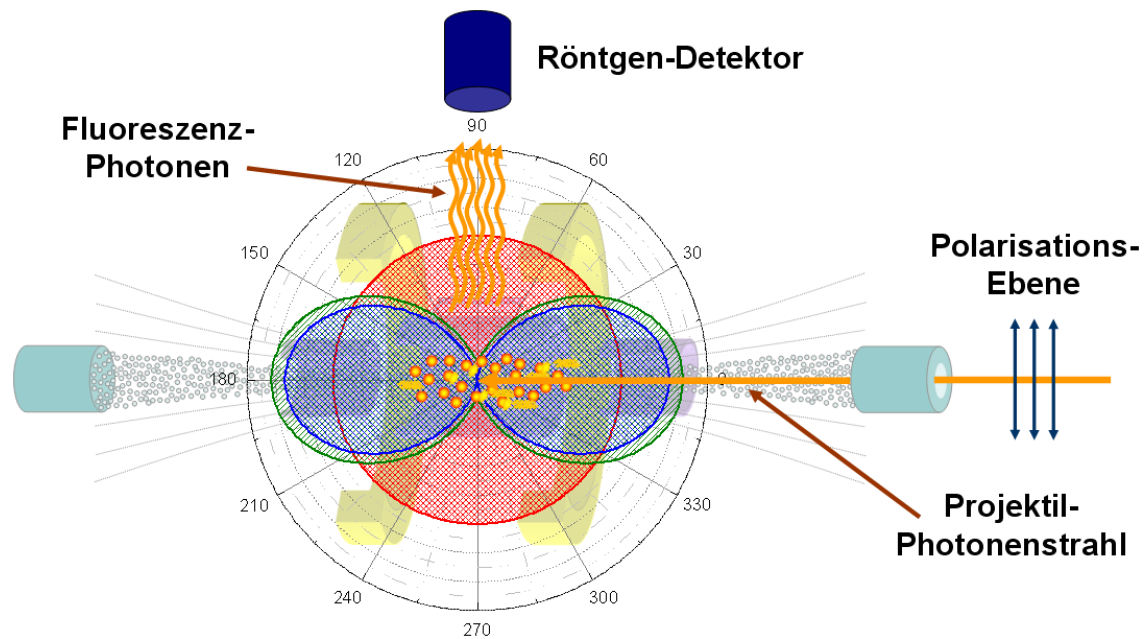


Abbildung 3.14: Abstrahlcharakteristik der Relaxationsphotonen nach resonanter Absorption polarisierten Lichts durch die Target-Ionen. Die rote Kurve zeigt die Charakteristik für  $\Delta = 0$ -Übergänge, die grüne für  $\Delta J = 1(3/2 \rightarrow 1/2)$ - und die blaue für  $\Delta J = 1(1 \rightarrow 0)$ -Abregungen des Zwischenzustands.

### 3.4 Datenaufnahmesystem und Datenanalysesoftware

Die Daten, die mit dem Detektionssystem gewonnen werden, liegen in unterschiedlicher Form als Spannungssignale vor. So werden die Daten des Photonen-Detektors als Intensitätspulse ausgegeben, während der positionsempfindliche Detektor die Laufzeiten der Signale mit NIM-Pulsen weitergibt, welche Start- und Stopp-Signal darstellen. Andere Parameter wie die eingestellte Energie der Projektile – sowohl für Photonen als auch für Elektronen – werden als kontinuierliche Spannungssignale proportional zum Variationsbereich der Projektilenergie wiedergegeben.

Zudem werden die Daten für einzelne Ereignisse, welche von dem Detektionssystem kommen, mit einer hohen Datenrate bzw. Signalfrequenz erzeugt, die vom Datenaufnahmesystem einzeln aufgelöst werden müssen. Eine wichtige Voraussetzung für das Prinzip der Messung ist darüber hinaus die Möglichkeit, Koinzidenzen zu erkennen und die Daten koinzident zuordnen zu können – etwa ein Messsignal zu einer Energieeinstellung.

Nach der Digitalisierung der Messdaten durch das Datenaufnahmesystem sollen die Daten in einer allgemeinen Form vorliegen, die alle notwendigen Informationen enthalten, um in jeder notwendigen Weise zur Analyse weiterverar-

beitet zu werden.

Bei den Experimenten wurde das Datenaufnahmesystem *MPA-3* der Firma *FAST CompTec Communication Technology* verwendet, welches die oben genannten Anforderungen erfüllt. Das mitgelieferte Analyseprogramm *MPA-NT* erwies sich jedoch in verschiedener Hinsicht als nicht ausreichend flexibel und handlich, so dass zur differenzierten und zielgenauen Auswertung ein eigenes Softwarepaket entwickelt wurde, welches auf die Experimente zugeschnittene Auswertungen ermöglicht.

### 3.4.1 Das Datenaufnahmesystem MPA-3

*MPA-3* [217] ist ein Multiparameter-Datenaufnahmesystem, das in modularer Aufbauweise bis zu 16 Eingangskanäle verarbeiten kann. Hierbei können die Digitalisierungsmodule (*ADCs* für engl.: *Analog to Digital Converter*) in drei verschiedenen Modi die eingehenden Spannungssignale interpretieren:

- **PHA – Pulse Height Analysis:** dieser Modus digitalisiert einzelne Ereignisse und ordnet sie entsprechend ihrer Pulshöhe in Kanäle ein. Die Ereignisse werden so sortiert nach Pulshöhen gezählt. In diesem Modus werden vor allem die Signale ausgelesen, welche vom Photonen-Detektor aufgenommen werden, der die Energie der Photonenergebnisse in Pulse mit zur Energie proportionaler Höhe ausgibt (siehe Abschnitt 3.3.1).
- **SVA – Sample Voltage Analysis:** bei dieser Art der Datenaufnahme werden Signale verarbeitet, welche durch kontinuierliche Spannungen repräsentiert werden. Diese müssen extern getriggert werden, so dass sie bei jedem Triggerpunkt in einen Kanal entsprechend der Spannung einsortiert und aufaddiert werden können. Dies ist etwa notwendig bei Monitorsignalen, die – im Gegensatz zu Messereignissen – nicht diskret vorliegen. Solche Monitor-signale sind in diesen Experimenten die Signale zur Energie der Projektilen, also der Photonenergie, die als Monitor-signal vom Monochromator ausgegeben wird, und das Referenzsignal der Elektronenstrahlenergie.
- **TDC – Time to Digital Converter:** in diesem Modus werden Zeitsignale aufgenommen. Die Digitalisierung geschieht hierbei als Differenz zwischen einem Start- und einem Stopp-Signal, die als Pulse in den ADC eingelesen werden. Hierbei wird vorher eine maximale Zeitspanne definiert und diese in Kanäle eingeteilt, wonach die Zeit zwischen *Start* und *Stopp* in den entsprechenden Kanal einsortiert und das Ereignis aufaddiert wird. Dadurch ist dieser Aufnahmemodus ebenfalls diskret, benötigt jedoch zwei Signale. Die Zeit kann hierbei zwischen 150 ns und 3 ms in einer Auflösung von bis zu 50 ns aufgenommen werden. Diese Art der Datenaufnahme wird bei der Verarbeitung der Signale des positionsempfindlichen Detektors (siehe Abschnitt 3.3.2) benötigt.

Die für die Aufnahme im SVA-Modus notwendigen Triggersignale können direkt über den Monitor-Ausgang eines Kanals mit Datenaufnahme im diskreten Modus, also in PHA- oder TDC-Einstellung, erzeugt werden, was koinzidente Datenpaare dieser beiden ADCs ergibt.

Zur Definition einer Koinzidenz kann softwareseitig eine Koinzidenz-Zeit festgelegt werden, in der Datenereignisse aus Kanälen in beliebig zu definierender Kombination als koinzident interpretiert und gespeichert werden.

Daneben erlaubt die Steuerungssoftware MPA-NT, über die die entsprechenden Einstellungen vorgenommen werden, eine Echtzeit-Beobachtung der aufgenommenen Daten. Diese können pro Kanal als Histogramm, aber auch als zweidimensionale Intensitäts-Matrizen durch Kombination zweier Kanäle dargestellt werden. Zudem ist es möglich, Bereiche aus einer Matrix auszuwählen und diese auf eine Achse zu projizieren, um bereits bei der Datenaufnahme Spektren zu erhalten. Dies kann zusätzlich unter der Definition von Bedingungen – etwa in Abhängigkeit eines weiteren Parameters – geschehen.

**Aufbau der Datenaufnahmedatei.** Die Daten werden in sogenannten *list-files* (Datenlisten) in binärer Kodierung gespeichert. Diese werden nach einem festen Schema sortiert, um sie nachträglich auswerten zu können. Das Daten-Schema ist im Allgemeinen so aufgebaut, dass jede Millisekunde ein Zeitstempel gesetzt wird, der auch den *alive* oder *dead*-Status der einzelnen ADC-Kanäle anzeigt, woraus die Aktiv- bzw. Totzeit eines Kanals bestimmt werden kann. Liegt ein Datenpunkt vor, wird eine Synchronisationsmarke geschrieben, danach ein Bit-Code, der anzeigt, in welchen ADCs Daten vorliegen (das sogenannte *Event-Signal-Wort*), und danach in der Reihenfolge der entsprechenden ADCs die koinzidenten Werte der einzelnen ADCs als Kanalnummer in 16-bit-Wörtern. Bei einer ungeraden Anzahl von ADCs mit Messdaten muss auf Grund der 32-bit-Struktur der Daten zusätzlich ein 16-bit-Füllwort geschrieben werden, welches ebenfalls im Event-Signal-Wort angekündigt wird. Liegen zwischen zwei Zeitstempeln mehrere, jedoch nicht koinzidente Daten vor, werden sie nicht in das gleiche Tupel, sondern in ein neues Datentupel geschrieben, welches wieder mit einem Initialisierungswert angezeigt wird. Sollten zwischen zwei Zeitstempeln keine Daten vorliegen, wird kein Datentupel angezeigt und die Zeitstempel folgen direkt aufeinander. Der konkrete Aufbau der Datei wird ausführlich im Handbuch des MPA-3 Systems [217] beschrieben.

Neben der Speicherung in listfiles wird ebenfalls die oben erwähnte Echtzeit-Datenanalyse gespeichert, jedoch als komplettes Histogramm. Um nachträglich den Zeitverlauf nachvollziehen zu können oder Änderungen in den definierten Auswertekonditionen vorzunehmen, muss entweder ebenfalls das listfile eingelesen und die Messung quasi „in der Wiederholung“ angesehen werden oder die listfiles werden direkt weiterverarbeitet.

Da das Programm MPA-NT zwar zur Echtzeitanalyse und Kontrolle der eingestellten Messungen bestens geeignet, jedoch für die anschließende Auswer-

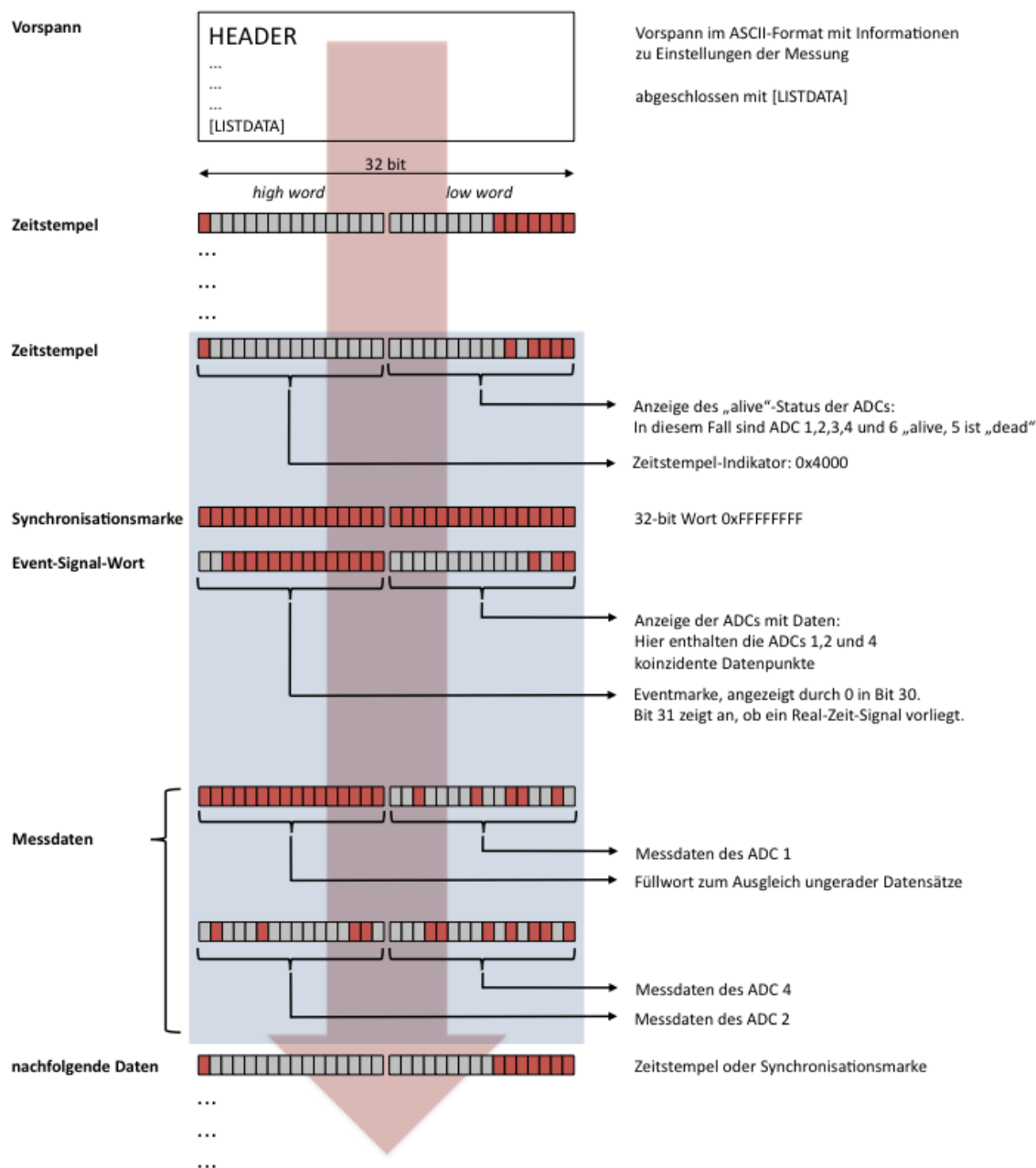


Abbildung 3.15: Datenstruktur der binär codierten *listfile*-Datensätze aus MPA-3. Es ist ein vereinfachtes Diagramm dargestellt, welches die Folge der 32-bit Wörter illustriert. Ein binäres *true* ist als rotes und ein binäres *false* als graues Kästchen angezeigt. Ein einzelner kompletter Datensatz koinzidenter Messpunkte ist blau hinterlegt. Nähere Beschreibung im Text und in [217]

zung zu unflexibel war, wurde der zweite Weg gewählt und ein Softwarepaket zur Datenanalyse der *listfiles* entwickelt, das im Folgenden vorgestellt wird.

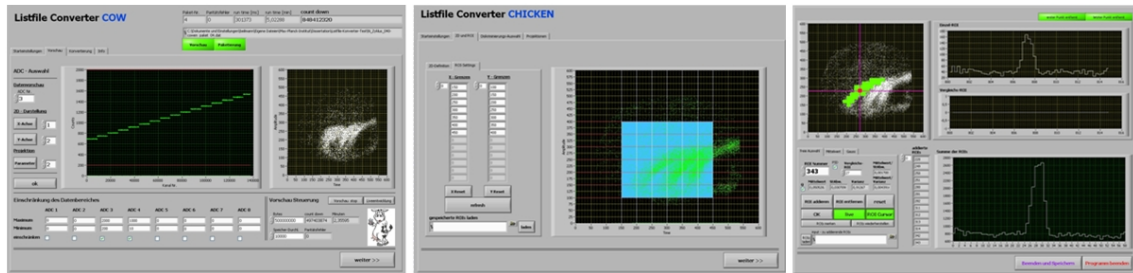


Abbildung 3.16: Bedingungsoberflächen der Software COW mit der Konvertierung der Rohdaten (*links*), CHICKEN mit der Definition und Projektion von ROIs (*mitte*) und SHEEP mit der Erstellung des Gesamtspektrums (*rechts*).

### 3.4.2 Datenanalyse mit speziell entwickelter Software

Den Kern der Datenanalysesoftware bildet die Software-Farm mit den Programmen COW, CHICKEN und SHEEP. Diese Programme ermöglichen es, die Rohdaten des Datenaufnahmesystems zu verarbeiten und in allgemein lesbare Datenlisten einzulesen, beliebige Kombinationen von Datenkanälen zu Matrizen zu verarbeiten und in diesen eine beliebige Anzahl von Auswertebereichen (*ROIs*, von engl.: *region of interest*) zu definieren, die auf einen frei wählbaren Parameter projiziert werden können. Anschließend können die ROIs in sinnvoller Weise kombiniert und die Projektionen aufaddiert werden.

In der Beschreibung der Datenauswertung bei den entsprechenden Ergebnisdarstellungen in den Kapiteln 4 und 5 werden die Auswerteschritte erläutert, die ohne eine vollständige Erwähnung der jeweiligen Software auf die hier dargestellten Programme zurückgreifen.

Die Software wurde unter der Entwicklungsumgebung *LabVIEW* von *National Instruments* [216] erstellt. Es handelt sich hierbei um eine graphische Programmiersprache, deren Quellcode vergleichbar zu einem elektronischen Schaltplan entworfen wird, wobei die verschiedenen Datenwege als Leitungen und die Operationen als Schaltelemente eingefügt werden.

#### cow – Konvertierung der Rohdaten

Die listfiles des Datenaufnahmesystems sind binär kodiert. Damit ist eine direkte Weiterverarbeitung nicht möglich, ohne die Daten entsprechend aufzubereiten. COW übernimmt nun die Aufgabe, diese Binär-Daten in allgemein lesbare ASCII-Listen zu konvertieren, die so aufgebaut sind, dass man sie im Prinzip in jedem Datenauswerteprogramm weiterverarbeiten könnte.

Die Daten werden hierbei in chronologischer Reihenfolge in eine Tabelle eingeordnet. Die erste Spalte der Tabelle stellt demnach die abgelaufene Zeit in ms seit Start der Messung dar, alle weiteren Spalten die einzelnen ADCs. Die Reihen der Tabelle stellen die koinzidenten Werte dar. Wurden zwei oder mehr Werte von MPA-3 als koinzident interpretiert, werden sie auch in COW in einer Reihe

wiedergegeben. Nicht koinzidente Werte, die jedoch innerhalb des gleichen Zeitstempels aufgenommen wurden, werden in verschiedenen, chronologisch angeordneten Reihen mit gleichem Wert für die abgelaufene Zeit geschrieben.

Daneben bietet COW verschiedene Optionen zur Begrenzung, Paketierung und Kontrolle der Daten, die deutlich kleinere Dateien resultieren und die Ergebnis-Dateien leichter weiterverarbeiten lassen.

### CHICKEN – Datenbeziehungen und Projektionen

Nachdem die Daten der binären listfiles mit Hilfe von COW in lesbare ASCII-Tabellen konvertiert, auf die wesentlichen Daten reduziert und sinnvoll paketi-ert wurden, müssen zur Auswertung einige Parameter in Beziehung zu anderen Parametern gesetzt werden, da die COW-Daten zwar den Zeitverlauf der Messung angeben, jedoch keine direkte Aussagekraft über das Messergebnis haben.

Diese Aufbereitung der konvertierten Rohdaten ist die Aufgabe von CHICKEN. Es erstellt aus den koinzidenten Datentupeln zweidimensionale Intensitäts-Matrizen, was einer Zuordnung von bestimmten Messgrößen zu anderen entspricht. Diese Matrizen lassen erste Interpretationen der Messergebnisse zu, da die Daten nun nicht mehr chronologisch, sondern in Abhängigkeiten sortiert sind.

Weiter ist eine Kernfunktion von CHICKEN die Definition von ROIs, deren enthaltene Daten auf einen der koinzidenten Parameter projiziert werden können, was zu Intensitätsspektren führt. Dabei kann ein Parameter eine der Matrixachsen sein wie im Fall der Messungen zur Elektron-Ion-Rekombination, oder es kann auf einen dritten, von den Matrixachsen unabhängigen, jedoch mit beiden Koordinaten des Matrixpunktes koinzidenten Parameter projiziert werden. Dies ist im Fall der Photoionisations-Messungen notwendig, bei denen die Matrix aus den x- und y-Achsen-Werten des positionsempfindlichen Detektors gebildet wird, die Projektion jedoch auf die Energie der Projektilphotonen erfolgt, welche getriggert durch die PSD-Ereignisse koinzident aufgenommen wurde.

### SHEEP – Komposition von Spektren aus den ROI-Projektionen

Eine *kleinteilige* Definition von ROIs mit CHICKEN ist sinnvoll, da auf den ersten Blick auf die Intensitätsmatrix oft nicht erkennbar ist, wie der ideale ROI für die spezielle Auswertung zu wählen ist, oder weil man mehrere verschiedene Auswertungen über die gleiche Matrix vornehmen möchte. Um nun die richtigen ROIs auszuwählen und zu addieren, wurde SHEEP entwickelt.

Aus der Ergebnisdatei resultierend aus CHICKEN und der Datei mit den definierten ROI-Koordinaten können nun die einzelnen ROIs direkt angewählt und angezeigt werden. Hierbei besteht die Möglichkeit, zusätzlich eine Vorschaudatei aus CHICKEN, welche die zweidimensionale Intensitätsmatrix enthält, einzulesen und darzustellen. Darüber wird in SHEEP mit Hilfe der ROI-Koordinaten ein Raster der ROI-Grenzen gelegt und die ausgewählten ROIs werden graphisch auf der



Intensitätsmatrix hervorgehoben.

Es wird das Spektrum des ausgewählten ROIs angezeigt und nach Bestätigung auf ein Gesamtspektrum addiert. Wird danach ein weiteres ROI ausgewählt und addiert, entsteht ein Summenspektrum. Somit können aus kleinteiligen ROIs größere Bereiche komponiert werden, die einen Gesamt-ROI darstellen, welcher das resultierende Spektrum ergibt. Dieses hieraus entstehende Spektrum ist das Spektrum, welches zur Interpretation der Messung in weitere Datenverarbeitungsprogramme importiert und analysiert werden kann.

**Weitere Hilfsprogramme.** Neben den für die Datenanalyse wichtigen Hauptprogrammen wurden eine Reihe von kleineren Hilfsprogrammen entwickelt, die viele nützliche Aufgaben übernehmen, um die Datenauswertung zu erleichtern oder die Daten genauer zu analysieren und darzustellen, wie etwa das *binning* der Spektren (siehe auch Abschnitt 5.1.2).

### 3.5 Der FLEXIBLE ATOMIC CODE zur Berechnung der Atomstruktur

Für die relativistischen *Configuration Interaction*-Berechnungen, die im Rahmen dieser Arbeit zum Vergleich und zur Unterstützung der Analyse der experimentellen Daten durchgeführt wurden, wurde auf das Software-Paket FLEXIBLE ATOMIC CODE (FAC) von *Ming Feng Gu* zurückgegriffen [92, 94]. Dieses Paket soll hier in aller Kürze beschrieben und vor allem die Anwendungen und Resultate für die durchgeführten Rechnungen verdeutlicht werden, wobei sich die Ausführungen sehr stark an der Review-Veröffentlichung [94] über diesen Code orientieren. In dieser sind auch vertiefte theoretische Hintergründe zu den einzelnen errechneten Parametern, Vergleiche mit anderen Programmen zur Berechnung der Atomstruktur und Musterresultate zu finden.

Bei FAC handelt es sich um ein komplettes Software-Paket, mit welchem eine Vielzahl atomarer Parameter und Prozesse der Wechselwirkung von Ionen mit Elektronen und Photonen errechnet werden können, wie sie in Abschnitt 2.4.3 beschrieben sind. So lassen sich mit FAC radiative Übergänge, direkte Elektronenstoßanregungen und -ionisationen, nichtresonante Photoionisation und deren Umkehrprozess, die radiative Rekombination, sowie Autoionisation und als Zeitumkehr die dielektronische Rekombination modellieren.

Der Code führt voll-relativistische Näherungen dieser Prozesse aus, welche auf der Dirac-Gleichung basieren. Dies ermöglicht die Berechnung der genannten Prozesse für eine große Bandbreite von Kernladungen. Um diese in Gänze behandeln zu können, werden sowohl die gebundenen Zustände als auch die Wechselwirkung mit Kontinuumsprozessen in einer selbstkonsistenten Weise integrativ errechnet. Dadurch bietet FAC einen entscheidenden Vorteil gegenüber

weit verbreiteten Codes, welche lediglich die *gebundenen Zustände* errechnen und in einem zweiten Schritt die Kontinuumsprozesse einbeziehen, wodurch Kompatibilitätsprobleme und Umständlichkeiten in der Berechnung entstehen. FAC ist hier vergleichbar mit integrierten Paketen wie dem HEBREW UNIVERSITY LAWRENCE LIVERMORE ATOMIC CODE (HULLAC) [12], welche über ein einzelnes Zentralpotential die Orbitale des Systems errechnen und über *distorted wave functions* die Kontinuumsprozesse berücksichtigen. Trotz dieser Parallelen in der Herangehensweise wurde FAC komplett neu entwickelt und basiert nicht auf den verwandten Codes.

In vielen verschiedenen Gebieten der Atomphysik fand FAC bereits breite Anwendung (siehe beispielsweise [98, 207]) und wurde auch in EBIT-Experimenten des LLNL für verschiedene Prozesse bestätigt [45, 46, 95]. Zudem wird es für die Modellierung von astrophysikalischen und erdgebundenen Plasmen verwendet [30, 167]. FAC-Daten wurden auch in Datenbanken wie CHIANTI [61, 125] integriert.

### Berechnete Prozessparameter

Für die Analyse der experimentellen Untersuchungen der Gesamtprozesse nach Abschnitt 2.3.3 war die Berechnung der Resonanzenergien und Resonanzstärken interessant, weshalb sowohl der jeweilige Anregungsprozess als auch der Abregungsprozess berechnet werden musste. Die *Resonanzenergie* des Projektils folgte dabei aus der Modellierung des Anregungsprozesses – bei der Rekombination war dies die Berechnung die Autoionisation als Umkehrung des für die Rekombination initialen Elektroneneinfangs, bei der Photoionisation analog der radiative Übergang.

Die *Resonanzstärke* des Gesamtprozesses der ergibt sich als Produkt aus der Absorptionsstärke  $f_{e,p}^{(i \rightarrow d)}$  als Maß für die Anregung und dem realen Verzweigungsverhältnis  $b_{e,p}^{\text{real}}$  für die Relaxation

$$S_{\text{ges}} \propto f_{e,p}^{(i \rightarrow d)} \cdot b_{e,p}^{\text{real}}. \quad (3.18)$$

Folgt man dem allgemeinen Verzweigungsverhältnis in Gleichung 2.40 und zieht in Betracht, dass im realen Prozess der angeregte Zustand sowohl radiativ als auch autoionisierend nicht nur einen, sondern mehrere mögliche Zerfallswege gehen kann, ergibt sich dieses reale Verzweigungsverhältnis zu

$$b_{e,p}^{\text{real}} = \frac{\sum_k A_{e,p}^{e(d \rightarrow f)}}{\sum_k A_e^{e(d \rightarrow f)} + \sum_k A_p^{e(d \rightarrow f)}} \quad (3.19)$$

mit der Rate  $A_{e,p}^{e(d \rightarrow f)}$  für die Emission von Elektronen  $e$  bzw. Photonen  $p$ . So steht bei der Beschreibung des Abregungsprozesses im Rahmen der Rekombination sowie der resonanten Photonenstreuung die Emissionsrate  $A_p^{e(d \rightarrow f)}$  für Photo-

nen im Zähler, wobei für die Photoionisation die Emissionsrate  $A_e^{e(d \rightarrow f)}$  für Elektronen wesentlich ist.

Die Absorptionsstärken  $f_{e,p}^{a(i \rightarrow d)}$  lassen sich für den Fall der Anregung durch Photonenabsorption mit der gewichteten Oszillatorstärke gemäß Gleichung (25) in [94] ausdrücken sowie für den resonanten Elektroneneinfang nach Gleichung (72) in [94]:

$$f_e^{a(i \rightarrow d)} = \frac{g_i}{2g_f} \frac{\pi^2}{E_{res}} \cdot A_e^a \quad (3.20)$$

mit der resonanten kinetischen Energie  $E_{res}$  der eingefangenen Elektronen, den statistischen Gewichten  $g_i$  und  $g_f$  sowie der Elektronen-Einfangrate  $A_e^a$  (vergleiche Gleichung 2.35 in Abschnitt 2.4.3 sowie die Gleichungen (70) und (71) in [94]).

FAC liefert bei der Berechnung der radiativen Übergänge die Werte für die Resonanzenergie  $E_{res}$  der Photonenabsorption sowie die Absorptionsstärke  $f_p^{a(i \rightarrow d)}$  und die individuellen radiativen Emissionsraten  $A_p^e$ , welche zur Summe aller von einem angeregten Niveau ausgehenden radiativen Zerfälle  $\sum_k A_p^e$  zusammengesetzt werden können. Die Berechnung der Autoionisation ergab die Werte für die Resonanzenergie  $E_{res}$  der eingefangenen Elektronen und analog die Einfangstärke  $f_e^{a(i \rightarrow d)}$  und entsprechend die Emissionsraten  $A_e^e$  bzw. deren Summe  $\sum_k A_e^e$ .

Mit diesen Werten ließen sich die Gesamtprozesse für die Analysen der experimentellen Ergebnisse modellieren.

### Syntax und Berechnungscode

Die Berechnungen werden entlang eines Codes ausgeführt, der in eine Kommandozeilenoberfläche eingegeben wird. Hierbei wird zu Beginn das untersuchte System mit dem Befehl `SetAtom('A')` definiert, wobei A für das entsprechende Element steht. Nachfolgend wurden hier die eventuellen Einschränkungen für die Berechnungen gesetzt. So wurde mit `SetBreit('n')` die Hauptquantenzahl vorgegeben, bis zu welcher die Breit-Wechselwirkung einbezogen werden sollte. Ein  $n=0$  lässt die Breit-Wechselwirkung komplett unberücksichtigt, wobei ein  $n=-1$  diese in allen Schalen einbezieht. Die Konfigurations-Berücksichtigung wird an gleicher Stelle mit `SetMixCut('a')` definiert, wobei der Parameter a eine Zahl  $\leq 1$  sein kann, die eine untere Grenze für den Mischungs-Koeffizienten nach Gleichung 2.25 setzt. Somit werden alle Konfigurationen, welche einen Beitrag kleiner „a“ haben, nicht in die weitere Berechnung mit einbezogen. Mit diesen Einstellungen kann die Relevanz von Konfigurationsmischungen untersucht werden.

Mit `Config(a*n1 b*n2 ..., group = 'x')` werden die Konfigurationsgruppen festgelegt, welche in die Rechnung einbezogen werden. Dabei stehen die Zahlen a, b etc. für die Anzahl der Elektronen in den Schalen  $n_1, n_2, \dots$ . In dieser allgemeinen Form werden alle möglichen Orbitalbesetzungen mit entsprechender Gesamtelektronenzahl in der jeweiligen Schale permutiert. Es gibt jedoch

```

C:\Dokumente und Einstellungen\beilmann\Eigene Dateien\Programme\FAC_Datei\FAC\bin...
>>> Setfcton('Ar')
>>> Config('1*2 2*5', group = 'n2')
>>> Config('1*1 2*6', group = 'n3')
>>> ConfigEnergy(0)
>>> OptimizeRadial(['n2'])
>>> ConfigEnergy(1)
>>> Structure('ar.en.b', ['n2', 'n3'])
>>> MemENTable('ar.en.b')
>>> PrintTable('ar.en.b', 'ar.en', 1)
>>> TransitionTable('ar.tr.b', ['n2'], ['n3'])
>>> PrintTable('ar.tr.b', 'ar.tr', 1)
>>>

```

Abbildung 3.17: Bildschirmfoto der Komandooberfläche von FAC bei der Berechnung der radiativen Übergänge von Stickstoff-artigem Argon mit angeregter  $K$ -Schale.

auch die Möglichkeit, konkretere Konfigurationen mit  $s, p, d, \dots$  – Orbitalen festzulegen. Der String „ $x$ “ gibt der Gruppe einen Namen für die weitere Verarbeitung.

Es folgen diverse Rechenschritte zur Festlegung der optimalen Konfigurationsenergie und des Radialpotentials, bevor die Ergebnistabellen der entsprechenden Prozesse erstellt werden. So wird mit dem Befehl `Structure('x')` eine Tabelle erstellt, welche die Energieniveaus des Systems mit den Konfigurationen „ $x$ “ ausgibt und die Konfigurationen charakterisiert. Parameter der radiativen Übergänge von den Zuständen  $x_2$  nach  $x_1$  werden mit `TransitionTable('file', 'x1', 'x2')` in die Datei „file“ geschrieben. Analog verhält es sich mit der Autoionisation, wobei der entsprechende Befehl `AITable('file', 'x1', 'x2')` lautet. Die Dateien „file“ enthalten dabei Daten im Binärformat. Soll nun eine lesbare Tabelle mit ASCII-Zeichen geschrieben werden, wird die Datei „file“ über den Befehl `PrintTable('ASCII-file', 'file', n)` entsprechend dem Formatparameter „ $n$ “ in die Datei „ASCII-file“ umgeschrieben. Zuvor müssen mit einem `Structure`-Befehl die Energieniveaus ausgerechnet und mit `MemENTable('file')` in den Zwischenspeicher geladen werden, so dass die errechneten Parameter den Energien zugeordnet werden können.

Ein Beispiel einer Berechnung und deren Syntax ist in Abbildung 3.17 zu sehen, die ein Bildschirmfoto der Kommandozeilen-Oberfläche bei der Berechnung radiativer Raten von Stickstoff-artigem Argon mit Anregung der  $K$ -Schale zeigt, wie es nach einem dielektronischen Einfang in Kohlenstoff-artiges Argon vorliegt. Die einzelnen Elemente sind in der Abbildung erläutert.

## Kapitel 4

# Resonante Rekombination und die Bedeutung der Prozesse höherer Ordnung

Möchte man die innere Struktur von hochgeladenen Ionen studieren, müssen die Projektile eine Energie von meist einigen keV tragen, um die entsprechenden Niveaus – insbesondere die *K*-Schale – anzuregen. Die gute Kontrolle über die Elektronenstrahlenergie und deren relativ leicht zu erreichender weiter Energiebereich machen daher Elektronen-Rekombinations-Experimente besonders interessant für diese Studien.

Solche Experimente liefern Resonanzenergien und Rekombinationsstärken, welche etwa für die Plasmaphysik zur Analyse und Kontrolle von Tokamak-Plasmen [31, 82, 165, 204] oder für die Interpretation astrophysikalischer Objekte [43, 65, 121, 173, 175, 176] interessant sind. Auch für grundlegende atomphysikalische Untersuchungen sind sie geeignet [25, 75, 89, 119, 150, 162].

Die hier vorgestellten Experimente fokussieren sich vor allem auf die Untersuchung der Elektronen-Korrelationen, die bereits von experimentellen Untersuchungen von zwei-Elektronen-ein-Photon-Stabilisierungen bei der dielektronischen Rekombination in Helium-artiges Argon [210] bekannt sind.

In dieser Arbeit sollen die Elektronen-Korrelationen anhand der multiplen Anregung eines Ions durch resonante Rekombination systematisch untersucht werden. Erste Beobachtungen dieses Effektes der trielektronischen Rekombination wurden in niedrigem Energiebereich innerhalb der *L*-Schale bei Speicherringexperimenten berichtet [154, 176, 178] und schließlich im Rahmen der dieser Dissertation vorausgegangenen Diplomarbeit [18] für Anregungen mit Schalenübergängen unter Anregung der *K*-Schale, welche bei um Größenordnungen höheren Energien ablaufen, erstmals nachgewiesen [22].

In dem folgenden Kapitel werden nun die Experimente und die erzielten Ergebnisse vorgestellt und eine systematische Analyse der Effekte vorgenommen.

## 4.1 Experimentelles Vorgehen

Sowohl die Targetproduktion als auch die Bereitstellung der Projektilen fand bei den Experimenten zur resonanten Elektron-Ion-Rekombination mit Hilfe des Elektronenstrahls der EBIT (siehe Abschnitt 3.2.1) in einem Vorgang statt. Dies ließ eine vergleichsweise kompakte Versuchsanordnung zu.

### 4.1.1 Messprinzip der Rekombinations-Experimente

Der Prozess der resonanten Rekombination kann durch Detektion des emittierten Relaxationsphotons nachgewiesen werden (siehe Abschnitt 2.3.3). Hierzu wurde der in Abschnitt 3.3.1 beschriebene Röntgenphotonen-Detektor verwendet, welcher die ausgesendeten Photonen in einem Winkel von  $90^\circ$  zur Projektilstrahlachse detektiert.

Diese Methode hat den Nachteil, dass die Selektion nach Ladungszuständen erschwert ist, und so erhält man bei den Messungen ein Gesamtspektrum, bei dem eng benachbarte Rekombinationsresonanzen aller möglichen Ladungszustände der L-Schalen-Ionen gemeinsam auftreten.

Da in den dargestellten Experimenten vor allem auf die Analyse der Resonanzen höherer Ordnung abgezielt wird, ist eine sehr gute Auflösung der Rekombinationsresonanzen erforderlich. Diese wird – wie nachfolgend erläutert wird – vor allem durch Optimierungen der Falleneinstellungen erreicht. So wird auch der Nachteil der gemeinsamen Messung aller Ladungszustände ausgeglichen, da diese nun ausreichend gut aufgelöst werden können.

**Variation der Elektronenstrahlenergie.** Auf Grund der einfachen Ansteuerung (siehe Kapitel 3.2.1) war eine lineare Variation der Projektilenergie über die erwarteten Resonanzenergien, zu deren Abschätzung die theoretischen Werte der MCDF-Berechnungen von *Zoltan Harman* [99] herangezogen wurden, problemlos möglich. Die Variation erfolgte in langsamen Dreiecksrampen mit einer Geschwindigkeit von  $2 \text{ eV/s}$ , was eine quasistatische Verteilung der Ladungszustände sicherstellte.

**Anordnung zur Datenaufnahme.** Die bei den Messungen gesammelten Daten beschränken sich auf die energieselektiven Photonenergebnisse des Röntgenphotonendetektors und auf das Referenzsignal für die Elektronenstrahlenergie. Diese wurden mit Hilfe des in Kapitel 3.4.1 beschriebenen Datenaufnahmesystems *MPA-3* digitalisiert und gespeichert:

- **Photonendetektion.** Die Daten des Photonendetektors liegen als Spannungspulse vor, welche nach den Verstärkerstufen wie in Kapitel 3.3.1 beschrieben die Energie der einzelnen Photonenergebnisse angeben. Sie werden demnach im *MPA-3* System im Modus *PHA - Pulse Height Analysis* digitalisiert.

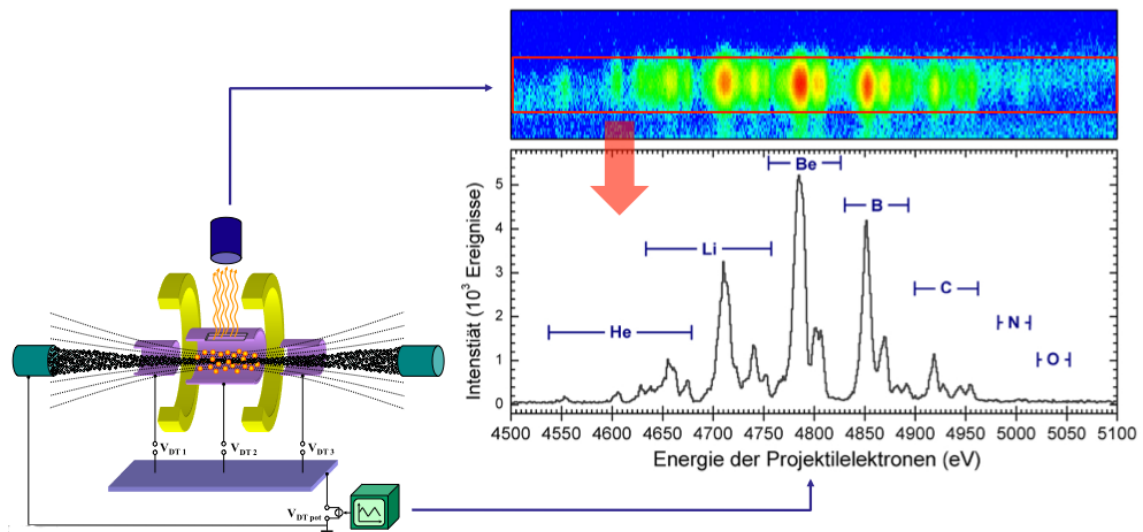


Abbildung 4.1: Experimenteller Aufbau für die Experimente zur resonanten Absorption von Elektronen am Beispiel eines Spektrums der  $K$ - $LL$ -Rekombination in Eisen.

lisiert. Jeder Puls erzeugt ein Monitor-Signal, welches zur Triggerung der Messung der Projektilektronen-Energie verwendet wird.

- **Energie der Projektilektronen.** Die Elektronenstrahlenergie wurde durch eine externe programmierbare Steuerspannung kontrolliert, deren Digitalisierung im kontinuierlichen *SVA - Sample Voltage Analysis*-Modus durch diskrete Photonenergebnisse getriggert wurde.

So konnten koinzidente Datenpaare von Photonenergie und Elektronenstrahlenergie-Referenz gespeichert werden, welche zu den später dargestellten Resonanzspektren führten.

Abbildung 4.1 zeigt ein kombiniertes Schema des experimentellen Aufbaus und des Prinzips der Spektrenerstellung für diese Experimente.

Die mit MPA-3 digitalisierten Datenlisten wurden zu zweidimensionalen Intensitätsmatrizen aufbereitet, welche die Anzahl der Ereignisse in Abhängigkeit der Elektronenenergie und der Photonenergie darstellen. Die Ereignisse mit einer Photonenergie in der Umgebung der jeweiligen  $K_{\alpha}$ -Linie wurden dann aufaddiert und auf die Projektilenergieachse projiziert, wie in Abbildung 4.1 am Beispiel der  $K$ - $LL$ -Rekombination in hochgeladenes Eisen dargestellt ist.

Um die Auflösung zu optimieren, wurden jeweils mehrere schmale ROI-Streifen definiert.

#### 4.1.2 Die Auflösung der Rekombinationsmessungen

Weil die Resonanzen höherer Ordnung oft energetisch sehr nahe bei anderen Resonanzlinien erster Ordnung liegen, sind sie nur mit einer guten Energieauflö-

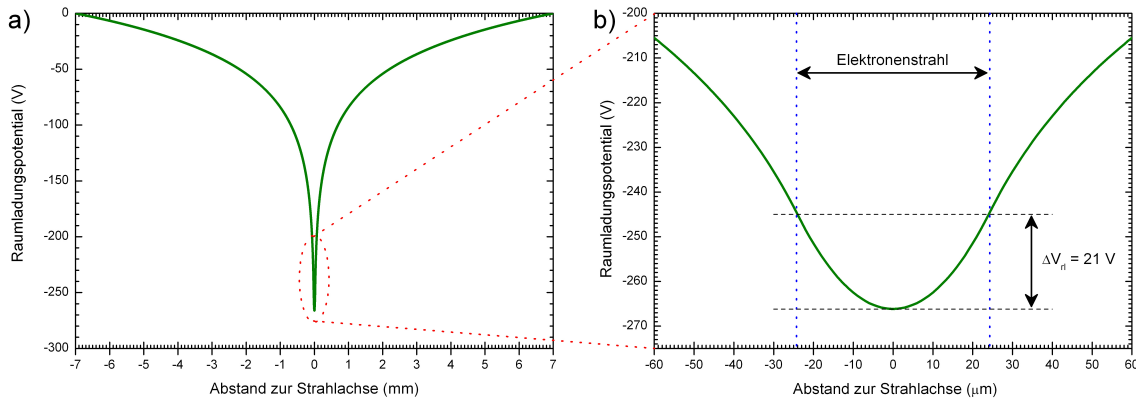


Abbildung 4.2: Unkompensiertes Raumladungspotential eines Elektronenstrahls der FLASH-EBIT bei typischen Betriebsparametern für die Elektron-Ion-Kollisionsexperimente:  $I_e = 100 \text{ mA}$ ,  $E_e = 5 \text{ keV}$ . (a) Gesamtes Raumladungspotential innerhalb der zentralen Fallendrifröhre. (b) Ausschnitt des Raumladungspotentials um das Volumen des Elektronenstrahls. Innerhalb des Hermann-Radius des Elektronenstrahls variiert die Energie der Elektronen um  $\Delta E_e \approx 21 \text{ eV}$ .

sung zu erkennen. Vor allem für Elemente mit niedriger Kernladungszahl ist eine gute Auflösung entscheidend, da die Energieaufspaltung quadratisch von der Kernladungszahl abhängt.

Die Energie des Elektronenstrahls wird durch seine Raumladung nach Gleichung 3.9 verbreitert, was die Auflösung der Rekombinationsmessungen limitiert. Diese Gleichung soll hier nochmals diskutiert werden:

$$V_{rl}(r) = \frac{I_e}{4\pi\epsilon_0 v_e} \begin{cases} \left(\frac{r}{r_e}\right)^2 + \ln\left(\frac{r_e}{r_{DT}}\right)^2 - 1 & \text{für } r \leq r_e, \\ 2 \cdot \ln\left(\frac{r_e}{r_{DT}}\right) & \text{für } r \geq r_e. \end{cases} \quad (4.1)$$

In Abbildung 4.2 ist das radiale Raumladungspotential für einen Elektronenstrahl der FLASH-EBIT mit einer Stromstärke von  $I_e = 100 \text{ mA}$  und einer nominellen Strahlenergie von  $E_e = 5 \text{ keV}$  – typische Werte zur Messung der  $K$ - $LL$ -Rekombination in hochgeladenes Eisen – in Abhängigkeit des Abstands  $r$  von der Strahlachse dargestellt.

Die Ionen können mit den Projektilektronen grundsätzlich im gesamten Querschnitt des Elektronenstrahls wechselwirken. Dieser erstreckt sich auch deutlich über den durch den Hermann-Radius (Gleichung 3.7, [103]) bestimmten Wert hinaus, da der Strahl laut Definition nur 80% des Strahlstroms umfasst. Aus der Graphik 4.2 ist ersichtlich, dass bei den angegebenen Konditionen die mit den Ionen kollidierenden Elektronen eine Energiebandbreite von 21 eV alleine innerhalb des Hermann-Radius besitzen. Dies bewirkt die entscheidende Limitierung der Auflösung.

Zwei Ansatzpunkte zur Verringerung dieser Energiebreite sind nun denkbar: zum einen kann man das Raumladungspotential minimieren, zum anderen kann die räumliche Ausdehnung der Ionenwolke im Potentialtopf beschränkt werden,



was zu einem verringerten Radius der tatsächlichen Wechselwirkungszone führt. Während der Wert des Raumladungspotentials durch Gleichung 4.1 gegeben ist, wird die Ausdehnung der Ionenwolke maßgeblich durch die Temperatur der Ionen bestimmt.

Nach den Ausführungen in [158] durchlaufen die Ionen in einer EBIT bei der Wechselwirkung mit dem Elektronenstrahl eine Temperaturentwicklung  $\frac{d}{dt}(N_i k T_i)$ , welche auf folgende Faktoren zurückzuführen ist:

$$\frac{d}{dt}(N_i k T_i) = \left[ \frac{dE_i}{dt} \right]^{\text{El}} + \sum_j \left[ \frac{dE_i}{dt} \right]_j^{\text{Ion}} - \left[ \frac{dE_i}{dt} \right]^{\text{Vax}} - \left[ \frac{dE_i}{dt} \right]^{\text{Vrad}} \quad (4.2)$$

Die Ionen erfahren eine Erhöhung ihrer Temperatur und damit ihres aus der kinetischen Energie abgeleiteten Bewegungsradius durch die Kollision mit den Elektronen des Strahls  $\left[ \frac{d}{dt}(N_i k T_i) \right]^{\text{El}}$  sowie durch Stöße der Ionen  $i$  und  $j$  untereinander  $\sum_j \left[ \frac{d}{dt}(N_i k T_i) \right]_j^{\text{Ion}}$ . Ihre Temperatur wird dagegen verringert und der Bewegungsradius eingeschränkt durch den Effekt des Verdampfungskühlens [118, 159], bei dem durch axialen Verlust  $\left[ \frac{d}{dt}(N_i k T_i) \right]^{\text{Vax}}$  wie durch radialen Verlust  $\left[ \frac{d}{dt}(N_i k T_i) \right]^{\text{Vrad}}$  energiereicher Ionen die Temperatur des Gesamtensembles abgesenkt wird.

### Minimierung der Raumladungsverbreiterung und der Aufheizung der Ionen

Die naheliegendste Methode zur Verbesserung der Auflösung ist es, den Strom zu verringern. In Gleichung 4.1 ist zu erkennen, dass die Raumladung linear von der Stromstärke  $I_e$  abhängt, weshalb mit einer Verringerung des Stroms die Raumladungsverbreiterung minimiert wird. Zudem bestimmt der Elektronenstrahlstrom und die sich daraus ergebende Elektronendichte  $n_e$  (siehe Gleichung 3.10) die Kollisionsrate der Elektronen und Ionen und hat somit einen direkten Einfluss auf die Aufheizung der Ionen. Die genannte Gleichung zeigt neben einer linearen Abhängigkeit von der Elektronenstrahldichte  $n_e$  auch eine lineare Abhängigkeit von der Ionendichte  $n_i$ , die wiederum ebenfalls von der Elektronendichte  $n_e$  abhängt, da diese in die Produktionsrate der Ionen eingeht. Daneben zeigt Gleichung (7) in [159] eine  $1/v_e$ -Abhängigkeit der Aufheizung von der Geschwindigkeit der Elektronen.

Herkömmliche Methoden zur Auflösungsverbesserung – wie beispielsweise angewandt in [89, 134] – setzen daher an dem Parameter des Strahlstroms  $I_e$  an. Dies bietet Vorteile bei der Bestimmung absoluter Resonanzenergien (siehe etwa die Messungen in [87, 134]).

Jedoch hat diese Methode einen entscheidenden Nachteil: So wird mit einer Verringerung des Elektronenstrahlstroms sowohl die Target- als auch die Projektildichte drastisch minimiert. Die Zählrate der zu messenden Ereignisse verrin-

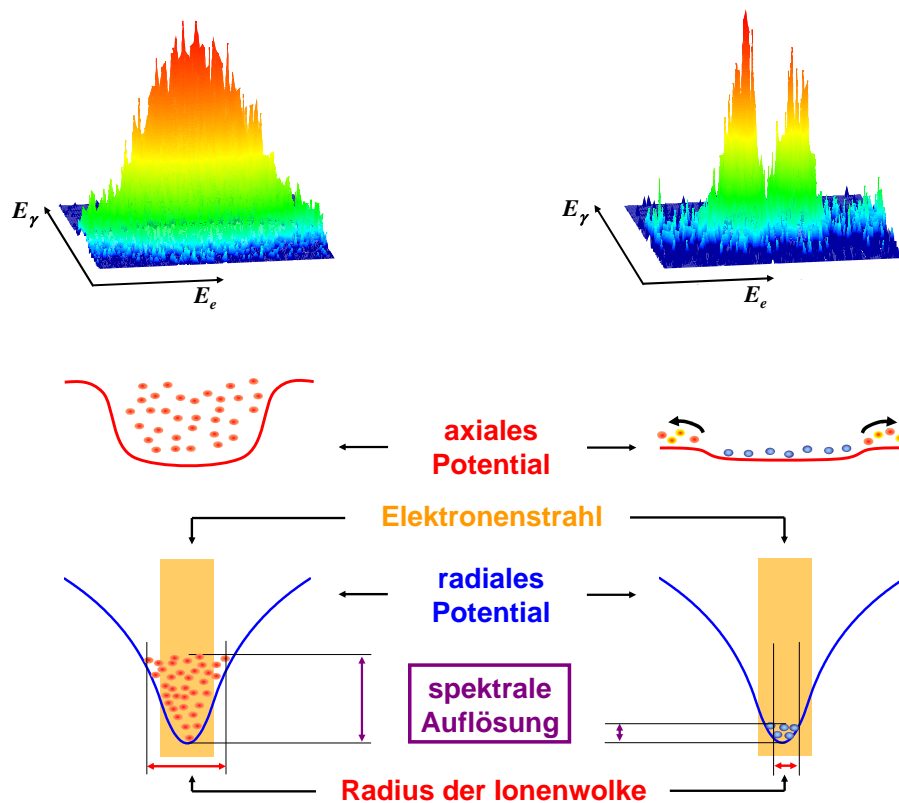


Abbildung 4.3: Prinzip der Auflösungsverbesserung der Rekombinationsmessungen durch evaporatives Kühlen. Durch Konzentration der kalten Ionen im Inneren des Elektronenstrahls erfahren sie nur eine geringe Bandbreite der Raumladungsverbreiterung.

gert sich stark und somit die Statistik, was insbesondere für die mitunter schwachen Resonanzlinien der zu messenden Effekte entscheidend ist.

### Forciertes evaporatives Kühlen

Um auch schwächere Resonanzlinien mit einer hohen Auflösung zu messen, wurde bei den vorgestellten Experimenten eine alternative Methode der Auflösungsverbesserung angewandt, die auf aktives Kühlen via Evaporation beruht [19].

Bei diesem Vorgehen wird mit einer vergleichsweise hohen Stromstärke des Elektronenstrahls bei der Messung sowohl eine hohe Target- als auch Projektil-dichte gewährleistet. Durch Absenkung der Iontemperatur soll erreicht werden, dass sich die Ionen in einem kleinstmöglichen Radius um die Elektronenstrahlachse bewegen, so dass sie nur eine geringe Bandbreite der Elektronenstrahlenergie erfahren. Ist der Radius der Ionen klein genug, wird die Bandbreite auf Grund des im Bereich kleiner Radien parabelförmig verlaufenden Raumladungspotentials sehr schmal, wie Abbildung 4.3 zeigt.

Um dies zu erreichen, wird in Gleichung 4.2 an dem Term  $\left[\frac{d}{dt}(N_i k T_i)\right]^{V_{ax}}$  an-

gesetzt und versucht, den Verlust energiereicher Ionen durch axiales Entweichen aus der Falle zu maximieren. Der radiale Anteil der Ionen-Evaporation bleibt dabei aktiv unangetastet, da dieser wiederum lediglich vom Strom und der Energie der Elektronen abhängt.

So wird die Falle axial extrem abgeflacht, damit nur noch die energieärmsten Ionen mit hohen Ladungszuständen verbleiben können.

Betrachtet man erneut Gleichung 4.1, geht auch der Radius der Driftröhren als Randbedingung in das Raumladungspotential ein. Dies hat zur Folge, dass Driftröhren mit unterschiedlichen Radien bei gleichen angelegten Potentialen und Elektronenströmen unterschiedliche Raumladungspotentiale bewirken, was bei der gegebenen Geometrie zu einer *natürlichen Falle* auch ohne externe Potentiale führt. Um die Falle möglichst seicht zu gestalten, muss dieses natürliche Fallenpotential ausgeglichen werden durch ein im Vergleich zu den benachbarten Falldriftröhren positives Potential an der zentralen, die Wechselwirkungszone umgebenden Driftröhre. Von den Einstellungen der externen Fallenpotentiale wird so eine scheinbar *invertierte Falle* angelegt.

In Abbildung 4.4 a ist die Entwicklung der Auflösung zweier benachbarter Resonanzlinien der dielektronischen Rekombination in Kohlenstoff-artiges Krypton [19] dargestellt in Abhängigkeit einer positiven Spannung an der zentralen Driftröhre gegen die umgebenden Driftröhren. Es ist deutlich zu erkennen, wie die Auflösung die Energiebandbreite des Elektronenstrahls innerhalb des Hermann-Radius [103] unterschreitet, was darauf zurückschließen lässt, dass die Ionenwolke einen deutlich kleineren Radius als der Elektronenstrahl abdeckt.

Quantitativ bewertet werden kann der Erfolg der Kühlmethode durch den Auflösungsparameter  $R$  als den Quotienten der gemessenen Halbwertsbreite der Resonanzlinien zum unkompensierten Raumladungspotential des Elektronenstrahls

$$R = \frac{\Delta E_{\text{exp}}}{e \cdot \Delta V_{rl}} \quad (4.3)$$

im Vergleich zu anderen Messungen der gleichen Resonanzen nach der herkömmlichen Methode. Abbildung 4.4 b zeigt einen Vergleich zu entsprechenden Messungen an den EBITs in Heidelberg [54, 87], Shanghai [206], Dresden [177] und Berlin [82, 165]. Die Auflösungen der verglichenen Messungen zeigen einen Quotienten  $R > 1$ . Dagegen sind die Messungen mit der angesprochenen Kühlmethode mit einem Quotienten  $R < 1$  deutlich schärfer aufgelöst. Details zu dieser Methode werden in [18] und [19] ausgeführt.

Es ist anzumerken, dass die Auflösungsverbesserung durch die Kühlung in erster Linie auf die Bewegungseinschränkung beruht und *nicht* auf eine Minimierung des Dopplereffekts. Die Dimension, in der die Auflösung erreicht werden soll, ist die Elektronenstrahlenergie und nicht die Energie der ausgesandten Photonen. Die Doppler-Verbreiterungen sind durch die begrenzte Auflösung des Röntgendetektors (siehe Abschnitt 3.3.1) nicht messbar. Ein Kollisions-Dopplereffekt für heiße Ionen tritt natürlich auch bei der Wechselwirkung mit Elektro-

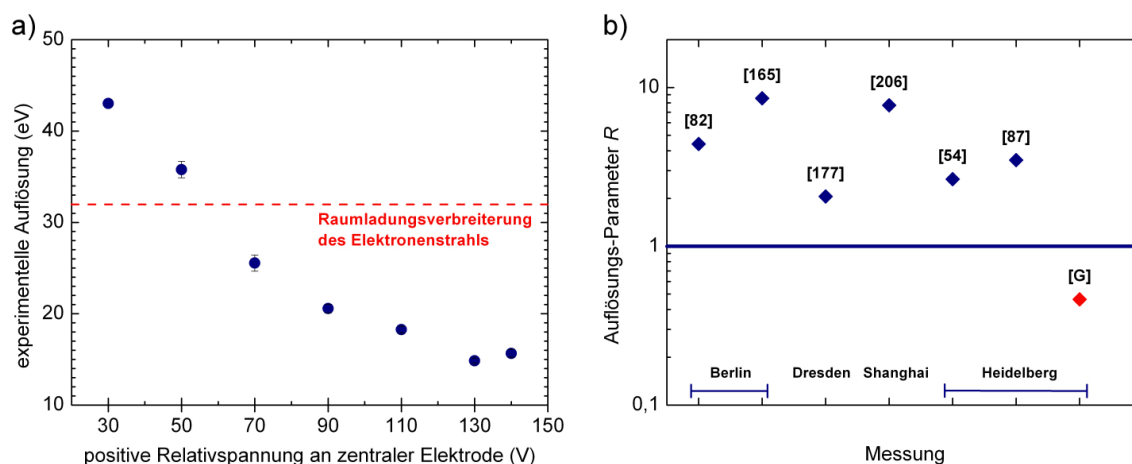


Abbildung 4.4: Quantisierung der Auflösungsverbesserung durch evaporatives Kühlen am Beispiel einer  $K$ - $LL$ -Resonanz in Kohlenstoff-artiges Krypton [19]. (a) Experimentelle Auflösung in Abhängigkeit der positiven Spannung an der zentralen Driftröhre gegenüber den benachbarten Driftröhren. (b) Auflösungsparameter  $R$  verschiedener Rekombinationsmessungen der entsprechenden Resonanz im Vergleich zu der mit der angewandten Methode erreichten Auflösung.

nen auf, was zu einer weiteren Verbreiterung der Linie führt, die mit dieser Methode eingedämmt wird. Dies ist jedoch ein nachgeordneter – wenn auch positiver – Effekt der Kühlmethode gegenüber dem dominanten Effekt der schmalen Energie-Bandbreite des Elektronenstrahls bei der Kollision mit einer komprimierten Ionenwolke.

### 4.1.3 Kalibrationen und systematische Effekte

Eine erste Kalibration der Elektronenstrahlenergie kann mit Hilfe der bekannten angelegten Spannungen für die Potentiale an den Elektroden – nach Abzug der abgeschätzten Raumladung des Elektronenstrahls – vorgenommen werden, um die detektierten Resonanzen energetisch ein- und den theoretisch erwarteten Resonanzen zuzuordnen.

Für das Ziel der Messungen ist es ausreichend, die erhaltenen Spektren nach ihrer Identifikation auf errechnete Resonanzenergien zu kalibrieren. Hierzu wurden die MCDF-Berechnungen von *Zoltán Harman* [99] zur Grundlage genommen, welche bereits in mehreren Experimenten [18,22,87–89,134] in einem weiten Bereich von Ionen überprüft wurden und Fehler von weniger als 10 eV aufweisen.

Dazu wurden zwei isolierte, starke dielektronische Resonanzen – in der Regel Helium- und Kohlenstoff-artige Resonanzen – verwendet und die Energie damit linear kalibriert. Hierbei ist zu bedenken, dass die Raumladung des Elektronenstrahls auch von der Energie der Elektronen abhängt und eine lineare Kalibration

nur in erster Näherung gerechtfertigt ist.

Die gerechneten Resonanzstärken mussten ebenfalls auf die experimentellen Werte angepasst werden: auf Grund der speziellen Ladungszustandsverteilung in der EBIT durch die Produktionseffizienz einzelner Ionensorten und durch die Verluste auf Grund des evaporativen Kühlens lag nicht jedes Targetion in der gleichen Teilchen-Dichte vor. Es ist jedoch davon auszugehen, dass beim Überstreichen der Resonanzenergie in der vorgestellten Weise (langsam und in beide Richtungen) die Produktionsrate einer Ionensorte nahezu konstant ist. Daher ist es möglich, für jede Resonanzgruppe – also einzeln für Helium-, Lithium- etc.-artige Resonanzen – die Stärke einer intensiven Resonanzlinie zur Normierung für alle weiteren Linien dieser Gruppe anzuwenden. Dies ist besonders wichtig bei der Identifikation von Resonanzen höherer Ordnung. Eine solche Skalierung ist möglich, da keine *absoluten* Resonanzstärken gemessen wurden, sondern es bei der Analyse der Spektren in der folgenden Ergebnisdarstellung jeweils auf die *Stärkenverhältnisse* innerhalb einer Resonanzgruppe ankommt.

## 4.2 Ergebnisse der Experimente zur resonanten Rekombination

Nachdem in der Diplomarbeit [18] der grundsätzliche Nachweis der *KL-LLL*-Rekombinationsresonanzen höherer Ordnung bei Messungen an Krypton erbracht wurde, konzentrieren sich die hier vorgestellten Experimente auf Ionen leichter Elemente, um Abhängigkeiten der Rekombination höherer Ordnung von der Kernladungszahl zu diskutieren. So werden im Folgenden die Ergebnisse der Untersuchungen in Helium- bis Sauerstoff-artigem Argon und Eisen vorgestellt, deren experimentelle Besonderheiten erläutert und die Spektren besprochen.

### 4.2.1 Rekombination in hochgeladenes Argon

Argon hat mit  $Z = 18$  auf Grund der  $Z^2$ -Skalierung der Energieniveaus für die hier untersuchte *K-L*-Rekombination eine Resonanzenergie im Bereich von  $2,1 - 2,5$  keV. Dies führt zu Energien für die gemessenen Relaxationsphotonen von  $\approx 3,3$  keV, was für die verwendete Anordnung mit Beryllium-Fenster nahe der unteren Grenze der Detektor-Empfindlichkeit ist (siehe Abschnitt 3.3.1).

#### Resonanzspektren

**Übersichtsspektrum.** Ein Übersichtsspektrum über die Rekombinationsresonanzen in verschiedene Schalen des Ions wird in Abbildung 4.5 gezeigt.

Dieses zeigt Linien von Helium- bis Sauerstoff-artigem Argon. Hierfür wurde die Elektronenstrahlenergie im Bereich von  $2,1$  bis  $3,4$  keV variiert, wodurch

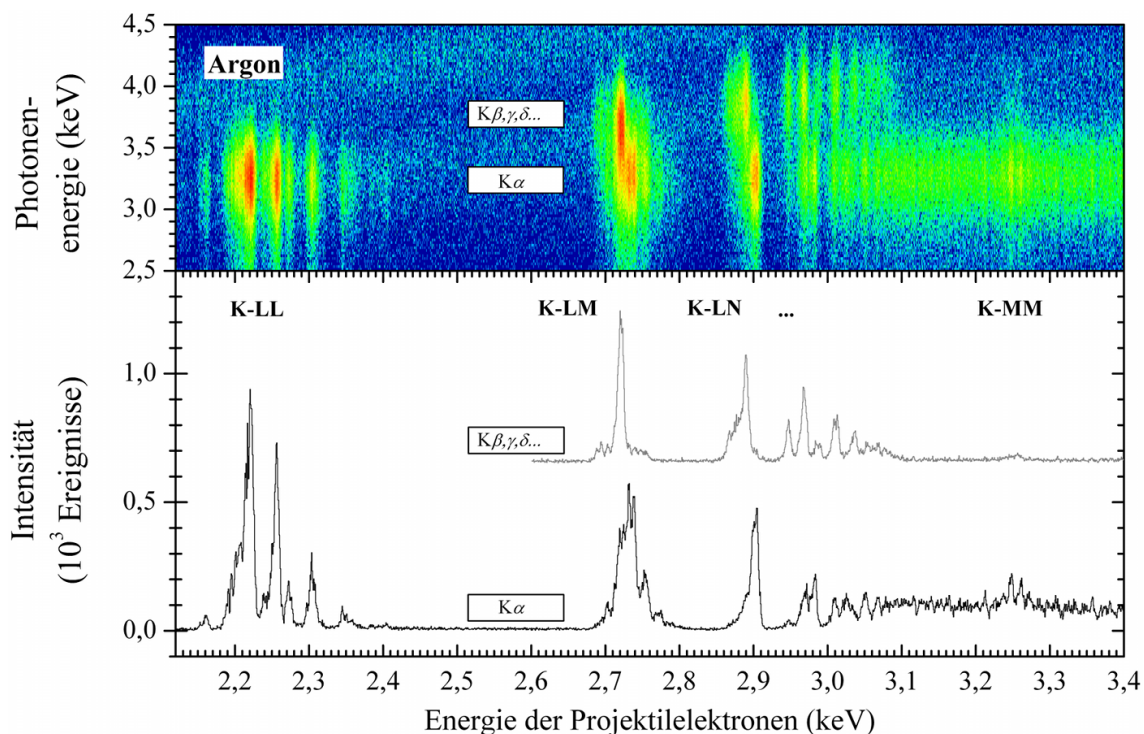


Abbildung 4.5: Übersichtsspektrum über die resonante Rekombination in Argon. *Oben*: Zweidimensionale Intensitätsmatrix der Photonenergebnisse in Abhängigkeit der Photonenergie und der Energie der Projektilektronen. *Unten*: Projektionen verschiedener Schnitte auf die Achse der Energie der Projektilektronen.

neben der hauptsächlich untersuchten  $K$ - $LL$  Rekombination auch die Serien für  $K$ - $LM$ ,  $K$ - $LN$  etc. sichtbar werden.

Im unteren Bereich der Abbildung 4.5 sind bei einem Schnitt in der energetischen Region der Photonenergie um die  $K_\alpha$ -Energie die gut voneinander getrennten Schalen-Serien sichtbar. Die Serien-Grenze ist bei etwa 3,08 keV erreicht. Höhere Energien der stoßenden Elektronen führen zu einer direkten Stoß-Anregung eines Elektrons aus der  $K$ -Schale, der so gebildete angeregte Zustand zerfällt radiativ unter Aussendung eines Photons mit der  $K$ - $L$ -Übergangsenergie und führt im zwei-dimensionalen Intensitätsbild (Abb. 4.5 a) zu dem Streifen, der aus kontinuierlichen Photonenergebnissen entsteht.

Während bei einer  $K$ - $LL$ -Rekombination ein in der Regel doppelt angeregter Zustand entsteht, bei dem zwei  $L$ -Schalen-Elektronen angeregt sind, entstehen bei anderen Rekombinationsserien Anregungen in verschiedenen Schalen. So ist bei einer  $K$ - $LM$ -Rekombination in der Regel ein  $L$ - und ein  $M$ -Schalen-Elektron auf einem angeregten Energieniveau platziert, welche sich prinzipiell beide in die  $K$ -Schale abregen können – dann natürlich unter Aussendung eines entsprechend höherenergetischen Photons. Dies ist im Intensitäts-Bild an den Resonanzen mit höheren Photonenergien erkennbar. Neben dem bereits besprochenen  $K_\alpha$ -Schnitt

wird ein kummulierter Schnitt  $K_{\beta,\gamma,\delta,\dots}$  gezeigt, der diese Resonanzen abbildet.

Dieser Schnitt zeigt auch explizit die Seriegrenze zwischen Rekombination und direkter Anregung, da bei direkter Anregung nur ein einfach angeregter Zustand mit einem Elektron auf einem angeregten  $L$ -Schalen-Platz entsteht und so kein Photon aus einer Abregung eines höheren Niveaus emittiert wird.

Eine dritte Variante von Rekombinations-Resonanzen zeigt sich in der  $K_{\alpha}$ -Photonenenergie-Region bei einer Elektronenenergie von etwa 3,25 keV: bei diesen Energien ist es möglich, dass ein Elektron, das in die  $M$ -Schale eingefangen wird, mit seiner überschüssigen Energie ein  $K$ -Schalen-Elektron ebenfalls in die  $M$ -Schale anregt und so zu einer  $K$ - $MM$ -Rekombination führt. Hierbei wird der doppelt angeregte Zustand auf zwei angeregten  $M$ -Schalen-Niveaus vornehmlich über eine Zwischenstation in der  $L$ -Schale abgeregt. Eines der  $L$ -Schalen-Elektronen zerfällt daraufhin in die  $K$ -Schale, wobei ein  $K_{\alpha}$ -Photon ausgesendet wird und was zu der Resonanz im Intensitätsbild und im  $K_{\alpha}$ -Schnitt führt.

**Spektrum der  $K$ - $L$ -Resonanzen.** Die hauptsächlich zu untersuchenden Resonanzen liegen im Bereich von 2,1 bis 2,5 keV, dessen Spektrum in Abbildung 4.6 gezeigt wird. Dort sind die erwähnten theoretischen Resonanzlinien mit ihren skalierten Linienstärken eingetragen. Bei der gezeigten Aufnahme handelt es sich um Untersuchungen mit Einstellungen, welche die Produktion von niedrigeren Ladungszuständen (Bor- bis Stickstoff-artiges Argon) forcieren, um die dort prominent auftretenden Resonanzen höherer Ordnung untersuchen zu können.

Bei Energien von 2,36 keV und 2,41 keV sind deutliche Resonanzen zu erkennen, die sich der trielektronischen Rekombination in Bor-artige und Kohlenstoff-artige Argon-Ionen zuordnen lassen.

Im Falle der (in violetter Farbe markierten) Kohlenstoff-artigen Resonanzen übersteigt die Rekombination höherer Ordnung an Intensität die der ersten Ordnung. Eine qualitative und quantitative Diskussion dieser überraschenden Beobachtung wird gemeinsam mit den Daten der Eisen-Messungen im folgenden Abschnitt 4.3 gegeben werden.

### 4.2.2 Rekombination in hochgeladenes Eisen

Bei der Messung der Rekombination in Eisen fiel auf, dass die je nach Rampesteigung getrennten Spektren deutlich gegeneinander verschoben erschienen. Dies lässt sich mit einem apparativen Effekt erklären und wurde entsprechend bei der Auswertung bedacht, indem die Spektren unter Berücksichtigung der Verschiebung aufaddiert wurden.

#### Resonanzspektren

Bei Eisen waren die Energieniveaus und die Rekombinationsresonanzen mit der erreichten Auflösung besonders gut separiert, wie in Abbildung 4.7 zu sehen ist.

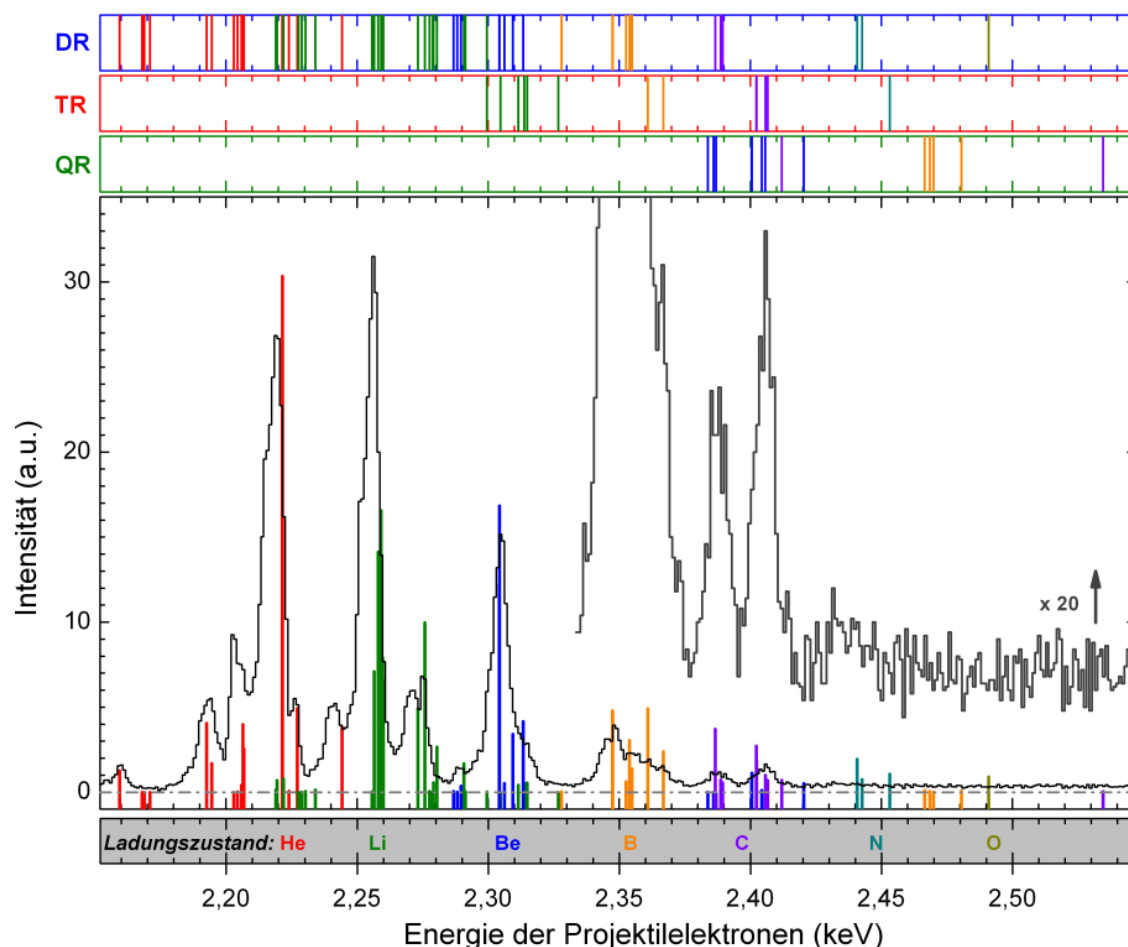


Abbildung 4.6: Spektrum der  $K$ - $LL$ -Rekombination in Argon. Die theoretischen Resonanzenergien nach [99] sind sortiert nach der Ordnung des Rekombinationsprozesses über dem Spektrum angegeben sowie die relativen Stärken im Spektrum skaliert auf jeweils eine starke Resonanz. Unter dem Spektrum erklärt sich der Farbcode für die Ladungszustände

Die Effekte höherer Ordnung sind eindeutig und gut getrennt zu erkennen: sowohl in Bor-artigem als auch in Kohlenstoff-artigem Eisen werden die DR-Resonanzen begleitet von Resonanzlinien, die der trielektronischen Rekombination zuzuordnen sind. Ebenso ist im rechten Teil des Spektrums, in dem die Daten in 20-facher Vergrößerung zusätzlich aufgetragen sind, auch die trielektronische Rekombination in Stickstoff-artigem Eisen zu erkennen. Lediglich die sehr schwach erwarteten TR-Resonanzen in Lithium-artigem Eisen sind auf Grund der Überdeckung durch Beryllium-artige Resonanzen erster Ordnung nicht zu identifizieren.

Zusätzlich zu den trielektronischen Resonanzen ist in dem Spektrum bei einer Projektilektronenenergie von 4975 eV eine Resonanzlinie zu erkennen, die nach den theoretischen Werten eindeutig der Rekombination dritter Ordnung – der *quadruelektronischen Rekombination* – zuzuordnen ist. Nach [99] tragen mit



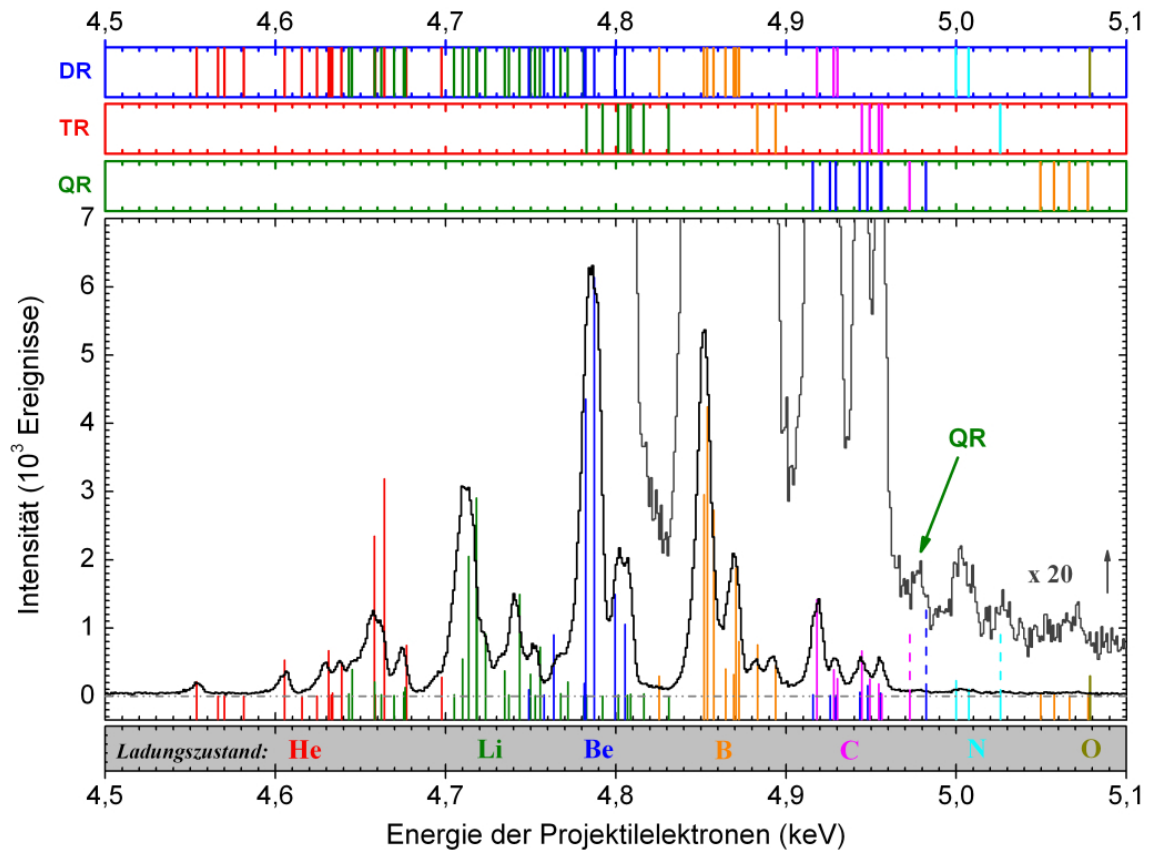


Abbildung 4.7: Spektrum der  $K$ - $LL$ -Rekombination in Eisen mit Angabe der theoretischen Resonanzenergien nach [99] analog zu Abbildung 4.6

Beryllium-artigem und Kohlenstoff-artigem Eisen zwei Ladungszustände etwa gleichstark zu dieser gemessenen Linie bei. Dies ist der erste berichtete Nachweis der quadreelektronischen Rekombination überhaupt.

Neben den nachweisbaren Resonanzen höherer Ordnung ist auch interessant, dass an der Stelle, an der *energetisch* die trielektronischen Resonanzen in Beryllium-artiges Eisen zu erwarten wären, keine Resonanzlinien gemessen wurden. Dies bestätigt die Überlegungen aus Abschnitt 2.3.1, wonach die trielektronische Rekombination in der isoelektronischen Reihe Beryllium-artiger Ionen aus Paritätsgründen verboten ist.

### 4.2.3 Zusammenstellung der $K$ - $L$ -Resonanzspektren in Argon, Eisen und Krypton

Gemeinsam mit der resonanten  $K$ - $L$ -Rekombination in Krypton [18, 22] kann man nun einen guten Gesamtüberblick über die Abhängigkeit der Rekombination von der Kernladung  $Z$  erhalten. Abbildung 4.8 zeigt die Zusammenstellung der Spektren mit auf das Quadrat der Kernladung normierten Energieachsen, der

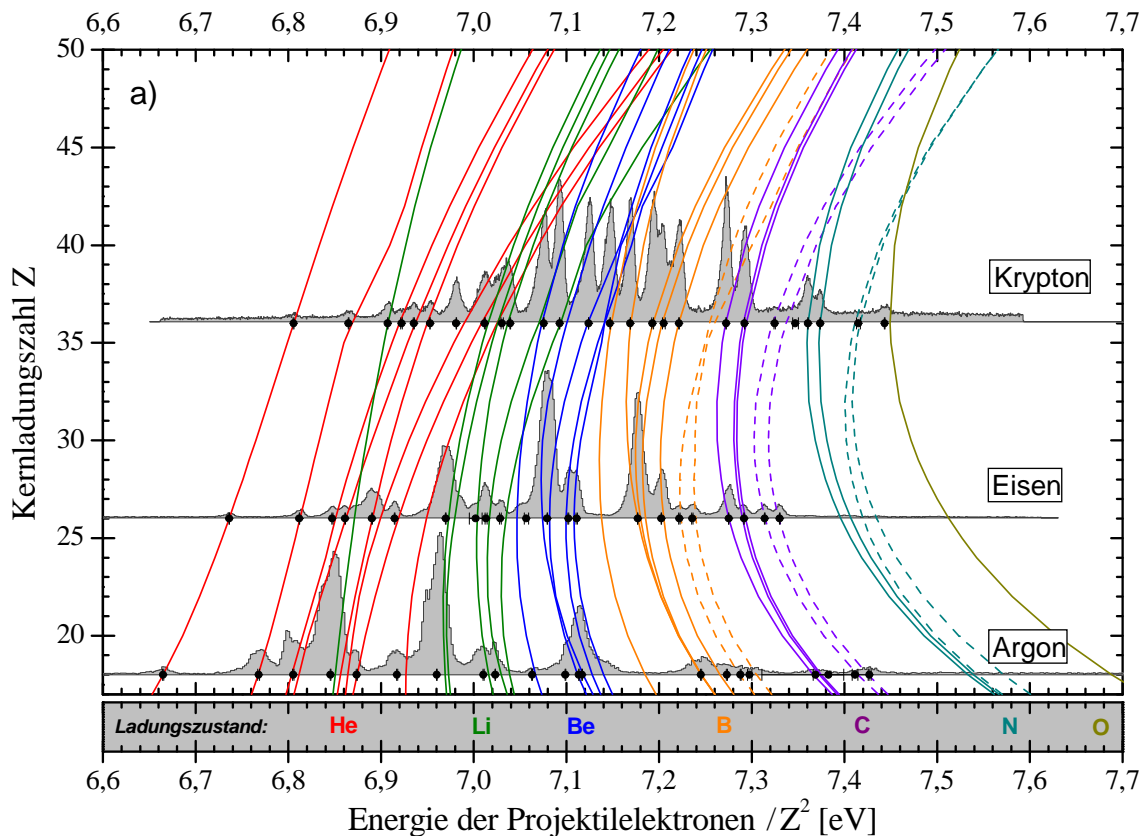


Abbildung 4.8: Zusammenstellung der gemessenen  $K$ - $LL$ -Rekombinatiosspektren in Argon, Eisen und Krypton mit auf  $1/Z^2$  skalierte Energieachse für die Projektilektronen. Ausgewählte starke Resonanzen sind in ihren theoretischen Verläufen [99] in Abhängigkeit der Kernladungszahl dargestellt

sogenannten *Rydberg-Skalierung*. Für ausgewählte und in den meisten Spektren identifizierte Einzelresonanzen sind die theoretisch erwarteten Energieabhängigkeiten von der Kernladung  $Z$  dem Diagramm als durchgezogene Linien hinzugefügt, um die Verläufe der Resonanzen deutlich zu machen. Die Daten hierfür entsamen wiederum MCDP-Rechnungen von *Zoltan Harman* [99]. Sie sind in der Abbildung 4.9 für den erweiterten  $Z$ -Bereich von 17 bis 92 dargestellt. Die stärker werdende Feinstruktur mit zunehmender Kernladung wird dort deutlich. In den Graphiken der Abbildung 4.8 und 4.9 sind die eingezeichneten trielektronischen Resonanzen als unterbrochene Linien dargestellt.

Es ist möglich, dass manche eingezeichnete Resonanzverläufe bei niedrigen oder hohen Kernladungszahlen eine verschwindende Stärke haben, wobei andere bei bestimmten Kernladungen sehr stark werden. Dieses Phänomen ist im Rahmen dieser Arbeit vor allem für die trielektronischen Resonanzen interessant, was im folgenden Abschnitt diskutiert wird.

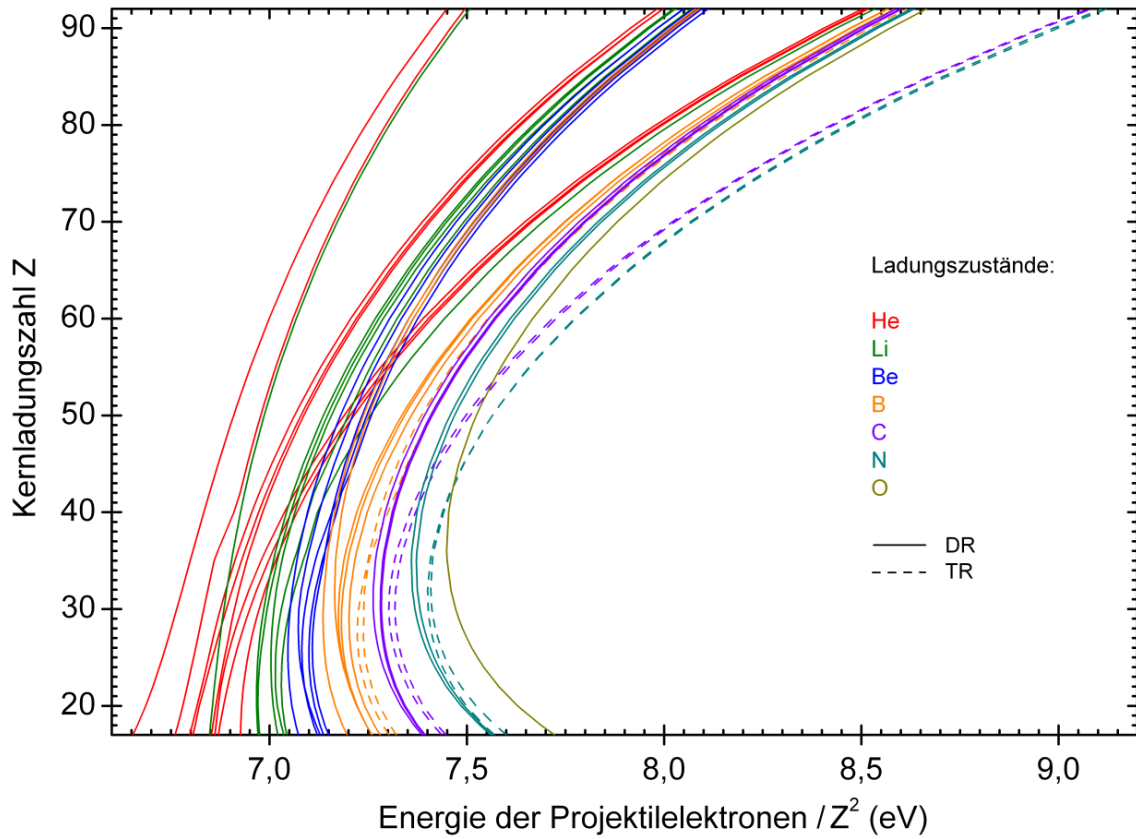


Abbildung 4.9: Skalierung der Resonanzenergie der  $K$ - $LL$ -Rekombination in Abhängigkeit der Kernladung  $Z$ . Die Achse der Energie der Projektilektronen ist mit  $1/Z^2$  skaliert. Es sind ausgewählte Resonanzen dargestellt, wobei die Resonanzen für die TR als unterbrochene Linien gezeigt werden.

### 4.3 Diskussion der resonanten Rekombination höherer Ordnung

Nach dem ersten, vergleichsweise schwachen Nachweis der trielektronischen Rekombination in hochgeladenes Krypton bei Kohlenstoff- und Stickstoff-artigen Ladungszuständen in [18, 22] zeigen die Rekombinationsspektren der entsprechenden Ladungszustände von Eisen und Argon erstaunlich große relative Intensitäten der Prozesse höherer Ordnung gegenüber den entsprechenden dielektronischen Prozessen erster Ordnung.

Am besten wird dies deutlich mit einer Zusammenstellung der entsprechenden Spektren mit durch  $1/Z^2$  normalisierten Energieachsen entsprechend der Darstellung in Abschnitt 4.2.3. In Abbildung 4.10 sind die Spektren der resonanten Rekombination in Argon, Eisen und Krypton im Energiebereich von  $7,1 - 7,5 \text{ eV}/Z^2$  dargestellt, welcher die Resonanzenergien insbesondere von Kohlenstoff-artigen Resonanzen abdeckt. Ionen dieser isoelektronischen Reihe weisen

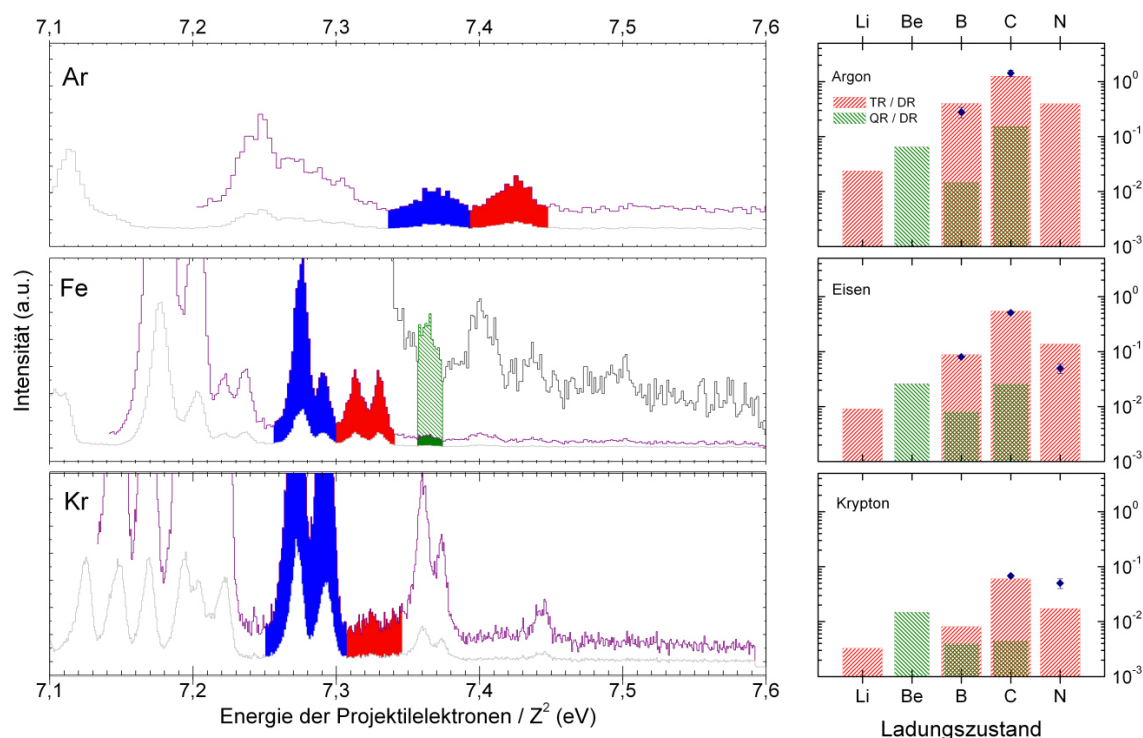


Abbildung 4.10: Ausschnitt der Rekombinationsspektren in Argon, Eisen und Krypton in der Region Kohlenstoff-artiger Ionen. Die DR ist blau, die TR rot und die QR grün markiert. Daneben sind theoretische Stärkeverhältnisse der jeweiligen TR/DR sowie die experimentell ermittelten Verhältnisse dargestellt.

die stärksten trielektronischen Resonanzen auf (siehe unten) und sind in der Abbildung entsprechend markiert.

### 4.3.1 Stärkenverhältnisse

Zur quantitativen Analyse der Resonanzstärke wird das Verhältnis TR/DR der trielektronischen zur dielektronischen Rekombination betrachtet. In Abbildung 4.10 sind die Spektren der Rekombination in Argon, Eisen und Krypton im Energiebereich der Kohlenstoff-artigen TR dargestellt und die theoretischen sowie experimentellen Stärkeverhältnisse zwischen den TR- und DR-Beiträgen zur  $K$ - $L$ -Rekombination eines Ladungszustands des jeweiligen Ions aufgetragen. Hier fallen die unterschiedlichen Stärkenverhältnisse abhängig von der isoelektronischen Sequenz auf, die nun diskutiert werden sollen:

Es ist offensichtlich, dass für Lithium-artige Ionen eine große Anzahl von möglichen trielektronischen Konfigurationen denkbar ist, da beim dielektronischen Einfang für die Anregung des  $1s$ -Elektrons sowohl die  $2s$ - als auch die  $2p$ -Unterschale offensteht, also beide Paritäten möglich sind. Dies lässt einen starken Beitrag der TR bei Lithium-artigen Ionen erwarten. Jedoch ist es bei der Bildung

eines dreifach angeregten Zustands notwendig, dass als *einziges*  $L$ -Schalen-Elektron das  $2s$ -Elektron mit angeregt wird, was die trielektronische Einfangwahrscheinlichkeit deutlich herabsetzt. Dies führt – wie später durch die MCDF-Rechnungen [99] untermauert – zu einer vergleichsweise geringen Stärke der trielektronischen Rekombination für Lithium-artige Ionen.

Anders verhält es sich, wenn mehrere  $L$ -Schalen-Elektronen für Anregungen zur Verfügung stehen. Mit Ausnahme der isoelektronischen Reihe des Berylliums, für welche die trielektronische Rekombination verboten ist, bieten die übrigen Ladungszustände deutlich mehr Möglichkeiten für die Bildung eines dreifach angeregten Zustands: hier können sowohl  $2s \rightarrow 2p$  als auch  $2p \rightarrow 2p$   $L$ -Schalen-Anregungen neben dem Einfang auf das  $2p$ -Niveau und der Anregung  $1s \rightarrow 2p$  die für TR notwendige Konfiguration bilden. Am prominentesten wird dies für Kohlenstoff-artige Ionen: hier stehen vier  $L$ -Schalen-Elektronen für die Inner-Schalen-Anregung zur Verfügung, und gleichzeitig gibt es in der  $L$ -Schale noch vier freie Plätze im  $2p$ -Niveau, auf welches das  $1s$ , das  $L$ -Schalen- und das Kontinuums-Elektron angeregt bzw. eingefangen werden können. Bei Stickstoff-artigen Ionen wirkt die auf drei reduzierte Anzahl der  $L$ -Schalen-Valenzen dem entgegen, so dass hier die Stärke wieder geringer erwartet wird, was die Experimente bestätigen (siehe Abbildung 4.10 und 4.12).

### 4.3.2 $Z$ -Skalierung der trielektronischen Rekombination

Auf Grund ihrer großen trielektronischen Resonanzstärke fokussieren sich die folgenden Betrachtungen auf die Kohlenstoff-artigen Ionen, wenngleich sie auch auf die anderen Ladungszustände entsprechend übertragbar sind, wie später gezeigt wird.

Abbildung 4.11 zeigt die theoretische Rekombinations-Stärke für die Kohlenstoff-artige dielektronische und trielektronische Rekombination in Abhängigkeit der Kernladung  $Z$  aus MCDF-Rechnungen [21, 99]. Zusätzlich ist das Verhältnis TR/DR mit den entsprechenden experimentellen Werten für Argon, Eisen und Krypton dargestellt.

Betrachtet man, dass bei der  $K$ - $L$ -Rekombination ein Schalenübergang von der  $K$ - in die  $L$ -Schale stattfindet und dieser energetisch sehr dominant ist, würde man intuitiv erwarten, dass die Effekte höherer Ordnung im Vergleich zu den Effekten erster Ordnung eine untergeordnete Rolle spielen. Das experimentell festgestellte und theoretisch bestätigte Verhalten der trielektronischen Resonanzen ist jedoch überraschend: Bereits bei Kernladungen  $Z \leq 20$  übertrifft die trielektronische Rekombination in Kohlenstoff-artige Ionen den dielektronischen Prozess.

Zum Verständnis dieses Verhaltens muss die allgemeine  $Z$ -Skalierung der einzelnen Teil-Prozesse der Rekombination untersucht werden, die erst nach dem radiativen Zerfall des angeregten Zustands vollständig abgeschlossen ist.

Die Skalierung der dielektronischen Rekombination als Prozess erster Ord-

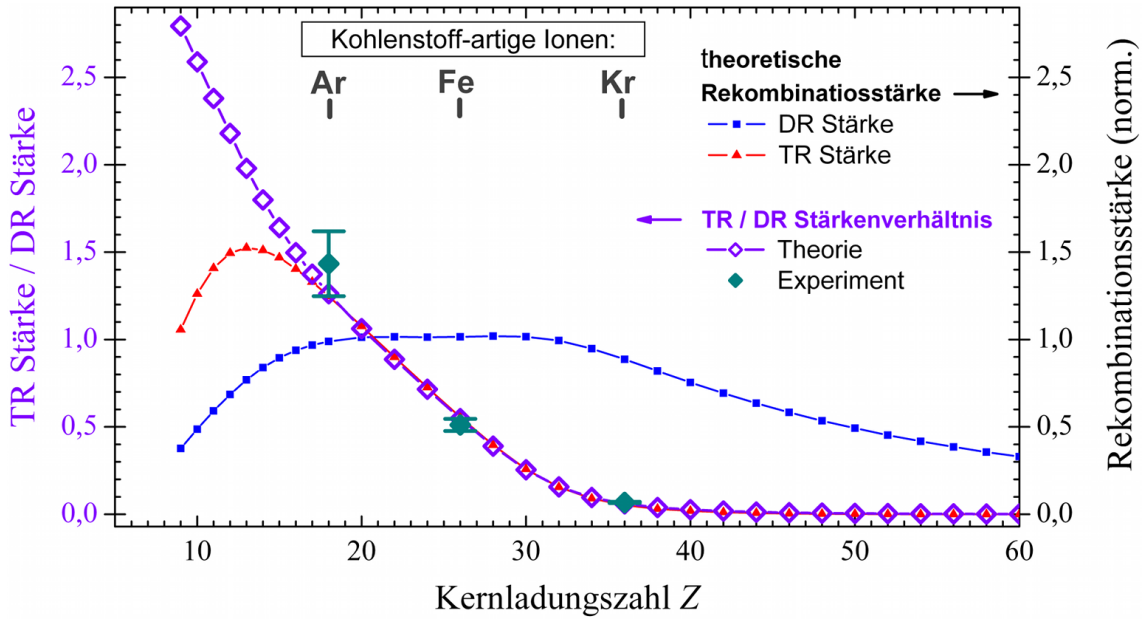


Abbildung 4.11: Normierte Resonanzstärke der DR und TR in Kohlenstoff-artige Ionen in Abhängigkeit der Kernladung  $Z$  (rechte Ordinate) sowie das Stärkeverhältnis von TR zur DR (linke Ordinate) [99]. Die experimentellen Stärkeverhältnisse für Argon, Eisen und Krypton sind eingetragen.

nung wurde in [199] näher beleuchtet und in [114] mit experimentellen Daten empirisch vertieft: So folgt aus der  $Z$ -Unabhängigkeit der Rate für den resonanten Elektroneneinfang –  $A_e^a \sim Z^0$  (vgl. Kapitel 2.3.1 und [2]) – und der Skalierung der radiativen Zerfallsrate mit der vierten Potenz der Kernladungszahl  $A_p^e \sim Z^4$  [2]) für die Skalierung des Gesamtprozesses der schalenübergreifenden dielektronischen Rekombination, deren Resonanzenergie von der Energie des Schalenübergangs dominiert wird und daher  $E_{\text{res}} \sim Z^2$  skaliert, über die Resonanzstärke der dielektronischen Rekombination nach Gleichung 2.42

$$S_{i \rightarrow d \rightarrow f}^{DR} \sim \frac{1}{E} \cdot \frac{A_e^a A_p^e}{A_e^e + A_p^e} \quad (4.4)$$

durch Einsetzen der  $Z$ -Abhängigkeiten die allgemeine Skalierung für die dielektronische Rekombination [114, 199]

$$S_{i \rightarrow d \rightarrow f}^{DR} \sim \frac{1}{b_1 Z^{-2} + c_1 Z^2} \quad (4.5)$$

mit den Koeffizienten  $b_1$  für den autoionisierenden und  $c_1$  für den radiativen Zerfallskanal des angeregten Zwischenzustands. Hierdurch lässt sich die Skalierung der Rekombination, wie sie in Abbildung 4.11 illustriert wird, besser verstehen: Die Elektroneneinfangrate hat keinen Einfluss auf die allgemeine  $Z$ -Skalierung des Prozesses (siehe oben), jedoch spielen die Abregungsprozesse eine dominierende Rolle. Die Rekombination wird durch den radiativen Zerfall

komplettiert, dem der autoionisierende Zerfall als Konkurrenz-Prozess entgegenarbeitet. Dieser Auger-Zerfall ist bei sehr niedrigen  $Z$  dominant. Daher steigt die DR-Resonanzstärke zunächst bei niedrigen Kernladungen mit  $Z^2$  an, erreicht bei mittleren  $Z$  eine Region, in der beide Prozesse etwa gleich stark wirken und sich die Stärke daher recht unabhängig von der Kernladung entwickelt und fällt dann bei größeren  $Z$  mit  $Z^{-2}$  ab, wie sich in Gleichung 4.5 erkennen lässt.

Dieses Verhalten lässt sich nicht auf die Rekombination höherer Ordnung übertragen, da die Annahme einer  $Z$ -unabhängigen Skalierung der Elektroneneinfangrate  $A_e^a$  bei den Einfangprozessen höherer Ordnung nicht mehr gehalten werden kann, denn hier ist ein weiteres Elektron beteiligt. Verglichen mit der zentralen Coulomb-Kraft skaliert daher die Elektron-Elektron-Wechselwirkung mit  $1/Z$ . Diese Abhängigkeit des Wechselwirkungsoperators führt nach Gleichung 2.35 durch die Quadrierung des Matrixelements zu einer Abhängigkeit der trielektronischen Einfangrate von

$$A_e^{a,TE} \sim \frac{1}{Z^2}. \quad (4.6)$$

Nach einem trielektronischen Einfang (TE) kann der angeregte Zustand  $|d\rangle$  nun auf drei Wegen zerfallen: erstens durch Gesamtabregung unter Aussendung eines Elektrons (vgl. *drei-Elektronen Auger-Effekt* [59]), zweitens unter Aussendung eines Elektrons und eines Photons, und drittens durch rein radiative Abregung. Dies führt zu einer Modifikation der Resonanzstärkenbeziehung (Gleichung 4.5) zu

$$S_{i \rightarrow d \rightarrow f}^{TR} \sim \frac{1}{E} \cdot \frac{A_e^a A_p^e}{A_e^{e,TE} + A_e^e + A_p^e}, \quad (4.7)$$

wonach analog zu Gleichung 4.5 mit Gleichung 4.6 der Prozess der trielektronischen Rekombination die Abhängigkeit von der Kernladung  $Z$  aufweist [21]

$$S_{i \rightarrow d \rightarrow f}^{TR} \sim \frac{1}{a_2 Z^{-2} + b_2 + c_2 Z^4}. \quad (4.8)$$

Der Koeffizient  $a_2$  beschreibt den zwei-Elektronen Auger-Effekt,  $b_2$  den autoionisierenden Zerfall erster Ordnung und  $c_2$  den radiativen Zerfall. Der Index 2 verdeutlicht dabei die Ordnung des Gesamtprozesses.

Der radiative Zerfall bewirkt somit eine  $Z^{-4}$ -Skalierung der Resonanzstärke bei größeren Kernladungen und dominiert bezüglich der Kernladung früher den Gesamtprozess, weshalb das Maximum des Stärkenverlaufs nach der Parametrisierung (4.8), wie in Abbildung 4.11 abzulesen, zu kleineren Kernladungszahlen verschoben ist.

Die dort gezeigten theoretischen Werte sind keine nach dem Skalierungsgesetz errechneten Verläufe, sondern jeweils einzeln und unabhängig voneinander mit MCDF [99] errechnete Resonanzstärken. Der Verlauf dieser errechneten Stärken gibt die  $Z$ -Skalierungen nach den vorherigen Überlegungen nach den Gleichungen 4.5 und 4.8 sehr gut wieder.

Stärkenverhältnis TR/DR in Abhängigkeit von  $Z$ . Die oben diskutierten Skalierungen erklären die Stärke der TR, sind jedoch noch keine Erklärung für ihre *Dominanz* gegenüber der dielektronischen Rekombination in den Kohlenstoff-artigen Ionen.

Die große Zustandsdichte in der  $L$ -Schale und die daraus resultierende starke Mischung dieser Zustände legen eine Gleichwertigkeit der DR- und TR-Prozesse nahe. Jedoch muss eine quantitative Berücksichtigung des radiativen Zerfalls der durch beide Einfangordnungen angeregten Zustände in die Überlegungen einbezogen werden, um die Gesamtprozesse zu beschreiben. Hier spielen die möglichen *radiativen Zerfallswege* eine große Rolle, deren Zahl für dreifach angeregte Zustände größer ist als für doppelt angeregte. Dies lässt letztendlich den Gesamtprozess der TR bei niedrigem  $Z$  für Kohlenstoff-artige Ionen über die DR dominieren, was in Abbildung 4.11 experimentell und durch die *ab initio*-Rechnungen [99] gezeigt ist [21].

**Betrachtungen für übrige  $L$ -Schalen-Ionen.** Analog gelten die gleichen Überlegungen der Skalierungen für die übrigen Ionen der  $L$ -Schale. Die herangezogenen MCDF-Rechnungen [99] lassen auch die Analyse entsprechender Stärkeverhältnisse der TR zur DR für die weiteren isoelektronischen Reihen zu, und so ist in Abbildung 4.12 neben dem in Abbildung 4.11 dargestellten Stärkenverhältnis für Kohlenstoff-artige Ionen das entsprechende Verhältnis für ausgewählte Lithium-, Bor- und Stickstoff-artige Ionen verglichen.

Die Verläufe sind wie nach den Diskussionen der Gleichungen 4.5 und 4.8 erwartet analog zu den Kohlenstoff-artigen Ionen. Lediglich die *Dominanz* der trielektronischen Rekombination ist nicht so deutlich wie für die Kohlenstoff-artigen Sequenzen, was durch die Überlegungen in Abschnitt 4.3.1 begründet wird.

### 4.3.3 Trielektronische Rekombination in theoretischen Berechnungen

Die gemeinsame Anregung zweier gebundener Elektronen bei resonanter Rekombination höherer Ordnung wird durch Elektronenkorrelationen und Konfigurationsmischungen verursacht. Dies soll nun im Weiteren anhand der eigenen im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Berechnungen der  $K$ - $LL$ -Rekombination in hochgeladenes Eisen diskutiert werden.

Zu deren Durchführung wurde auf den FLEXIBLE ATOMIC CODE (FAC) [94] zurückgegriffen, welcher in Kapitel 3.5 näher beschrieben ist. Mit ihm ist es möglich, diverse Parameter wie die Konfigurationsmischung oder die Stärke der Breit-Wechselwirkung zu variieren, was eine vertiefte Analyse der Effekte zulässt.

Zum Erhalt der Resonanzstärken  $S$  wurden die resonanten Elektroneneinfangstärken  $f_e^{(i \rightarrow d)}$ , welche den Einfang eines Elektrons durch ein Ion im Grund-



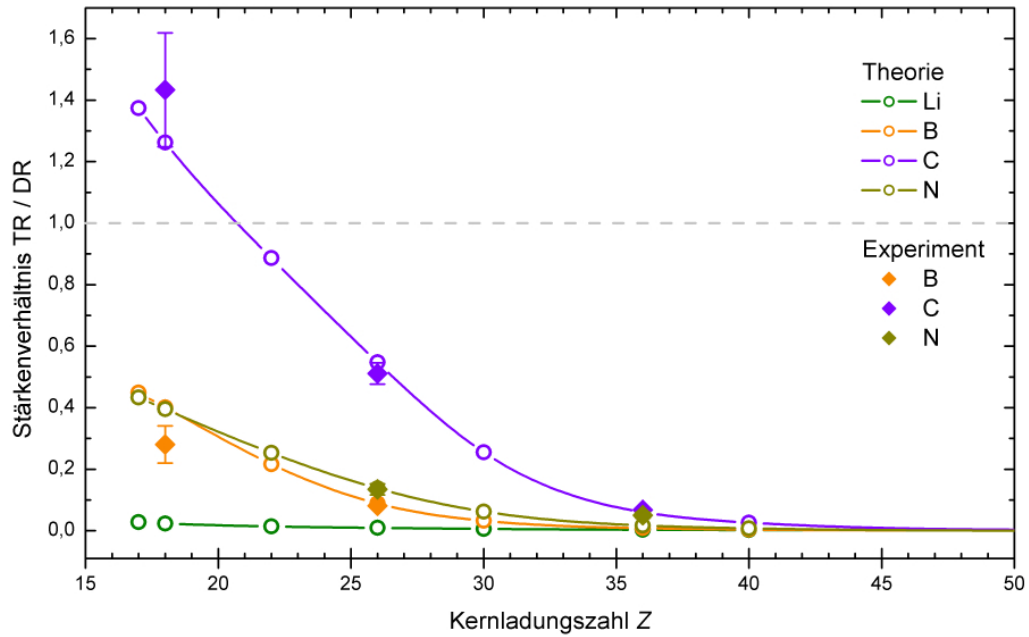


Abbildung 4.12:  $Z$ -Skalierung der Stärkenverhältnisse TR/DR für Lithium-, Bor-, Kohlenstoff-, und Stickstoff-artige Ionen für ausgewählte Elemente nach [99] und der Vergleich zu den experimentellen Werten von Argon, Eisen und Krypton.

zustand beschreiben, multipliziert mit der Summe der radiativen Emissionsraten  $\sum_i A_p^e$  aller denkbaren Zerfälle in die oben benannten Konfigurationen geteilt durch die Summe der radiativen und autoionisierenden Raten  $\sum_i A_{p,e}^e$

$$S \propto \frac{f_e^{(i \rightarrow d)} \cdot \sum_i A_p^e}{\sum_i A_e^e + \sum_i A_p^e}, \quad (4.9)$$

welche mit Hilfe von FAC berechnet wurden.

Mit diesen Stärken und den mit FAC errechneten Resonanzenergien wurden Gauß-Verteilungen, welche eine Halbwertsbreite in der Größe der erreichten experimentellen Auflösung von hier  $\approx 7$  eV tragen, gefaltet, um synthetische Spektren zu erstellen und mit den gemessenen zu vergleichen. Hierzu wurden die Ladungszustandsverteilungen an die gemessenen Daten angepasst. Analog zu den vorherigen Spektren, in denen die MCDF-Rechnungen mit den experimentellen Daten verglichen wurden, wurde auch bei dem Vergleich mit den FAC-Rechnungen die Energieachse des gemessenen Spektrums auf die Rechnungen kalibriert.

Einen Vergleich sowohl der MCDF [99] als auch der FAC-Berechnungen mit den entsprechend kalibrierten experimentellen Daten zeigt Abbildung 4.13. Zwischen beiden Spektren sind die Resonanzlinienpositionen beider Rechnungen für prominente Rekombinationsresonanzen angegeben. Eine gesonderte Betrachtung der Linien für Bor- und Kohlenstoff-artige Resonanzen in Abbildung 4.14,

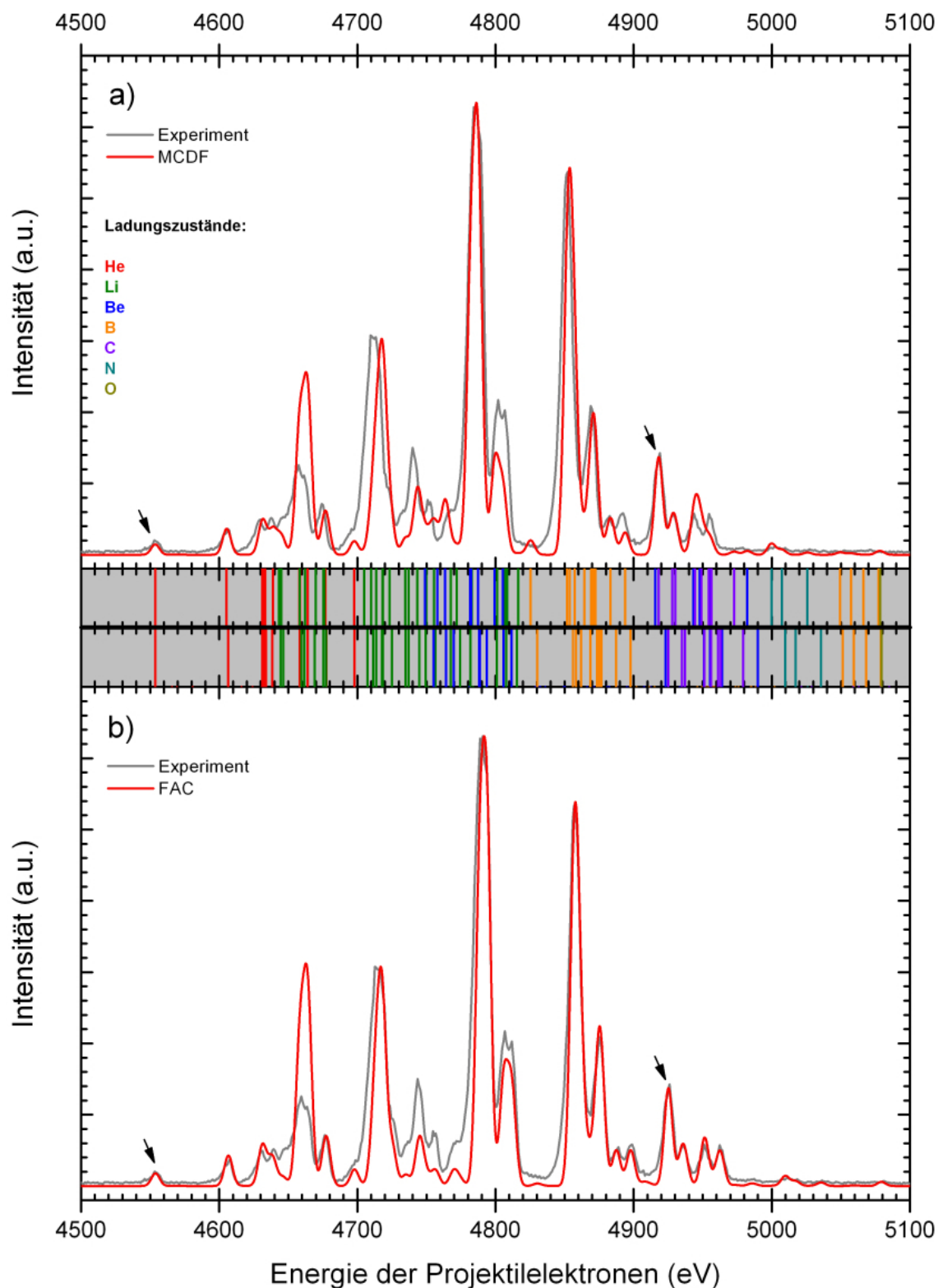


Abbildung 4.13: Vergleich der experimentellen Spektren der  $K$ - $LL$ -Rekombination in Eisen mit theoretischen Spektren berechnet mit MCDF [99] (*oben*) FAC (diese Arbeit, *unten*). Die experimentellen Spektren sind jeweils auf eine Helium-artige und eine Kohlenstoff-artige Resonanz der entsprechenden berechneten Werte skaliert. Die errechneten Resonanzenergien ausgewählter Resonanzen sind zwischen den Spektren dargestellt.

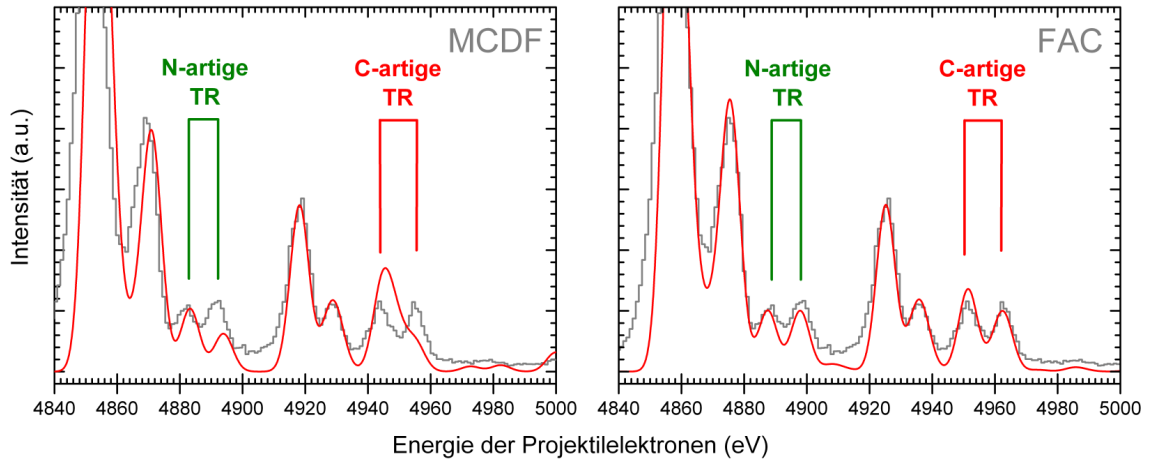


Abbildung 4.14: Ausschnitt des Vergleichs mit den Theorien für Kohlenstoff-artiges Eisen. Links: MCDF [99]. Rechts: FAC, diese Arbeit

in denen die TR-Resonanzen besonders gut zu erkennen sind, zeigt die Unterschiede beider Berechnungen in der Reproduktion des gemessenen Spektrums für Resonanzen höherer Ordnung. Die FAC-Berechnungen dieser Arbeit weisen hierbei eine deutlich bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen auf als die MCDF-Rechnungen aus [99]. Die MCDF-Rechnungen sind jedoch als *Average-Level-Rechnungen* [66,91] ausgeführt und haben daher eine gewisse Fehlertoleranz, welche bei dedizierten *Optimized-Level-Rechnungen* wie beispielsweise in [22] deutlich geringer ist.

**Konfigurations-Mischung.** Um die Rolle der Konfigurationsmischung zu untersuchen, wurden für die Gruppe der Kohlenstoff-artigen Resonanzen Rechnungen mit der Einbeziehung solcher Konfigurationen ausgeführt, welche mit einem Mischungskoeffizienten  $c$  gemäß Gleichung 2.25 größer einer festgelegten Konstante  $c_{\min}$  zur Berechnung beitragen. Gerade für die trielektronische Rekombination spielt diese Mischung eine entscheidende Rolle:

In der Diskussion der resonanten Absorption wurde mit Gleichung 2.4 besprochen, dass trielektronischer Einfang nur als Linearkombination des dreifach angeregten Zustands mit einem zweifach angeregten (dielektronischen) Zustand passender Parität und Drehimpuls existieren kann. Für den Fall der Rekombination in ein Kohlenstoff-artiges Ion ergibt sich ein trielektronischer Zustand durch [22]

$$|\text{TR}\rangle = c_1|1s2s^22p_{1/2}2p_{3/2}^3\rangle + c_2|1s2s^22p_{1/2}^22p_{3/2}^2\rangle. \quad (4.10)$$

Ein dreifach angeregter Zustand mit Anregung eines  $2s$ -Elektrons ist nach den Ausführungen in Abschnitt 2.3.1 aus Paritätsgründen nicht möglich.

Würde man diese Konfiguration in einem Modell unabhängiger Teilchen wie etwa der Hartree-Fock-Näherung betrachten, würde der Term mit der zweifach

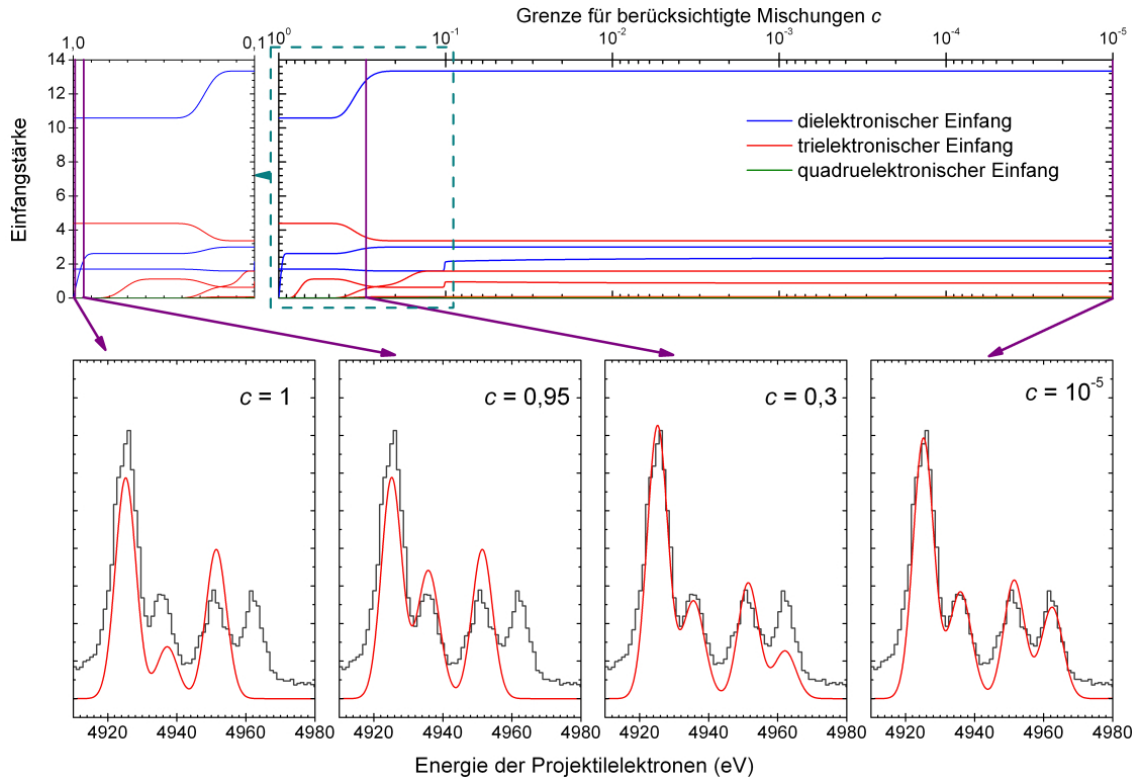


Abbildung 4.15: Bedeutung der Konfigurationsmischung. *Oben*: mit FAC errechnete Einfangstärken für resonanten Elektroneneinfang in Abhängigkeit der Mischungsgrenze  $c_{min}$ . *Unten*: Vergleich der experimentellen mit theoretischen Spektren unter Berücksichtigung ausgewählter Mischungsgrenzen  $c_{min}$ .

angeregten Konfiguration entfallen und die Gesamtamplitude

$$\langle 2s^2s^22p_{1/2}2p_{3/2}^3 | V_{coul} | 1s^22s^22s_{1/2}^2, E_{res} \rangle = 0 \quad (4.11)$$

verschwinden. Einzig die Berücksichtigung mischender Konfigurationen ermöglicht eine endliche Amplitude für trielektronische Einfänge [22]

$$\langle TR | V_{coul} | 1s^22s^22p_{2/2}^2, E_{res} \rangle = c_2 \langle 1s2s^22p_{1/2}^22p_{3/2}^2 | V_{coul} | 1s^22s^22p_{1/2}^2, E_{res} \rangle. \quad (4.12)$$

Diese Relevanz der Konfigurationsmischungen in der Evolution der trielektronischen Resonanzen zeigt sich in Abbildung 4.15. Hier stellt die obere Graphik die Einfangstärken  $f_e^{a(i \rightarrow d)}$  für resonanten Elektroneneinfang unter Berücksichtigung aller Konfigurationen dar, für die  $c \geq c_{min}$  gilt. Erst unter der Einbeziehung aller Konfigurationen, welche einen Koeffizienten  $c < 10^{-2}$  tragen, reproduziert das theoretische Spektrum die experimentellen Daten mit ausreichender Genauigkeit. Nähern sich die errechneten Resonanzstärken der *dielektronischen Resonanzen* bereits bei einer restriktiveren Grenze für die Konfigurationsberücksichtigung dem gemessenen Spektrum an, ist für die Wiedergabe der *trielektronischen*

*Rekombination* eine Berücksichtigung auch sehr kleiner Konfigurationsbeiträge notwendig. So wurden in den dargestellten Berechnungen stets alle Konfigurationen mit  $c \geq 10^{-5}$  einbezogen.

#### 4.3.4 Elektronenkorrelation und Breit-Wechselwirkung

Die Breit-Wechselwirkung spielt eine große Rolle bei der Elektronenkorrelation. Wie in Abschnitt 2.4.1 mit Gleichung 2.24 ausgeführt, ist neben dem Dirac-Operator  $H_D$  und dem Coulomb-Term  $v_C^{ij}$  (Gleichung 2.21) auch der Term  $B_{ij}$  (Gleichung 2.22) für die Breit-Wechselwirkung zu berücksichtigen, um die Elektronenkorrelation vollständig zu beschreiben.

Oft wird dieser Beitrag lediglich als kleine Korrektur in der Energie des jeweiligen Zustands einbezogen. Da es sich bei der Breit-Wechselwirkung um einen relativistischen Effekt handelt, werden solche Verschiebungen jedoch erst bei sehr schweren Ionen messbar.

In einem EBIT-Experiment in Tokyo mit Lithium-artigem Iod  $I^{50+}$ , Holmium  $Ho^{64+}$  und Bismuth  $Bi^{80+}$  wurden dielektronische *K-LL*-Rekombinationsresonanzen gemessen und das Verhältnis der Resonanzlinien der autoionisierenden Zustände  $[2s2p_{1/2}^2]_1$  und  $[2s2p_{1/2}^2]_0$  mit theoretischen Berechnungen verglichen, welche mit Einbeziehung der Breit-Wechselwirkung und ohne diese erstellt wurden [150]. Es zeigte sich eindeutig, dass nur die Rechnungen unter Einbeziehung der Breit-Wechselwirkung die experimentellen Ergebnisse ausreichend genau reproduzieren konnten. Ein weiteres Experiment mit Wasserstoff-artigem Uran  $U^{91+}$  zeigt dies ebenfalls anhand von Resonanzstärken [25]. Auch der Vorschlag eines Experimentes zur Bestimmung des Einflusses der Breit-Wechselwirkung auf die Winkelabhängigkeit der nach der dielektronischen Rekombination emittierten Photonen [80] nennt wieder Lithium-artige Ionen von Iod bis Uran als ideale Targets.

Die trielektronische Rekombination als Effekt zweiter Ordnung, bei dem die Elektronenkorrelation quadratisch in die Wechselwirkung eingeht [21], sollte auch die Breit-Wechselwirkungseinflüsse zeigen.

So wurden in einer weiteren Analyse des Eisen-TR-Spektrums in Kohlenstoff-artiges  $Fe^{20+}$  die Beiträge der Breit-Wechselwirkung analysiert, indem die Stärken der beiden aufgelösten Resonanzgruppen der trielektronischen Rekombination untersucht und deren Verhältnis mit den FAC-Berechnungen verglichen wurden. Die erste Gruppe umfasst den Energiebereich von 4938 eV bis 4952 eV, die zweite Gruppe die Resonanzen mit Elektronenenergien von ca. 4952 eV bis 4964 eV.

Zur Analyse wurden die errechneten Resonanzstärken dieser beiden TR-Resonanzgruppen analog zu der Auswertung der TR/DR-Verhältnisse aus dem vorherigen Abschnitt addiert und ins Verhältnis gesetzt, jeweils mit und ohne Berücksichtigung der Breit-Wechselwirkung. Dies wurde verglichen mit den experimentell durch Gauß-Fit bestimmten Resonanzstärken der beiden gemessenen Resonanzgruppen und ist in Tabelle 4.2 sowie in Abbildung 4.16 dargestellt.

Tabelle 4.1: Theoretische Elektronen-Einfangstärken und Resonanzstärken für die trielektro-  
nische Rekombination aus FAC-Berechnungen mit (m.B.) und ohne (o.B.) Berücksichtigung  
der Breit-Wechselwirkung. Die trielektro-nischen Resonanzen in Kohlenstoff-artiges Eisen sind  
in Normalschrift dargestellt, während die quadru-elektronischen Resonanzen in Beryllium-artiges  
Eisen, die sich im energetischen Bereich der beiden Resonanzgruppen befinden und die Stärke-  
verhältnisse beeinflussen könnten, grau dargestellt sind. Die Schreibweise  $a[b]$  ist als  $a \cdot 10^b$  zu  
verstehen.

Konfiguration	$J$	mit Breit		ohne Breit		$\Delta$ (m.B. - o.B.)	
		$f_e^{(i \rightarrow d)}$	$S_{TR}$	$f_e^{(i \rightarrow d)}$	$S_{TR}$	$f_e^{(i \rightarrow d)}$	$S_{TR}$
<b>Resonanzgruppe A</b>							
$(1s2s^22p_{1/2})_02p_{3/2}^3$	3/2	3,372	1,730	3,312	1,639	0,309	0,220
$(1s2s^22p_{1/2})_12p_{3/2}^3$	5/2	0,078	0,033	0,075	0,298	-0,008	-0,003
<b>gesamt</b>			<b>1,760</b>		<b>1,669</b>		<b>0,091</b> (+5,4%)
<i>QR in Be-artiges Fe:</i>							
$(1s2p_{1/2})_02p_{3/2}^3$	3/2	3[-4]	1,6[-4]	3[-4]	1,6[-4]	4,3[-6]	2,9[-6]
$(1s2p_{1/2})_12p_{3/2}^3$	5/2	1,2[-3]	6,2[-4]	1,1[-3]	5,6[-4]	-1,0[-4]	5,3[-5]
<b>gesamt incl. Be-QR</b>			<b>1,761</b>		<b>1,670</b>		<b>0,091</b> (+5,4%)
<b>Resonanzgruppe B</b>							
$(1s2s^22p_{1/2})_12p_{3/2}^3$	1/2	0,875	0,516	0,903	0,531	-0,027	-0,011
$(1s2s^22p_{1/2})_12p_{3/2}^3$	3/2	1,589	0,884	1,907	1,088	-0,267	-0,179
<b>gesamt</b>			<b>1,400</b>		<b>1,619</b>		<b>-0,219</b> (-13,5%)
<i>QR in Be-artiges Fe:</i>							
$(1s2p_{1/2})_12p_{3/2}^3$	3/2	7[-4]	4,6[-4]	7[-4]	4,6[-4]	-7,7[-6]	-6,1[-7]
$(1s2p_{1/2})_12p_{3/2}^3$	1/2	3,6[-3]	2,8[-3]	3,6[-3]	2,7[-3]	-3,9[-5]	-3,79[-5]
<b>gesamt incl. Be-QR</b>			<b>1,403</b>		<b>1,622</b>		<b>-0,219</b> (-13,5%)

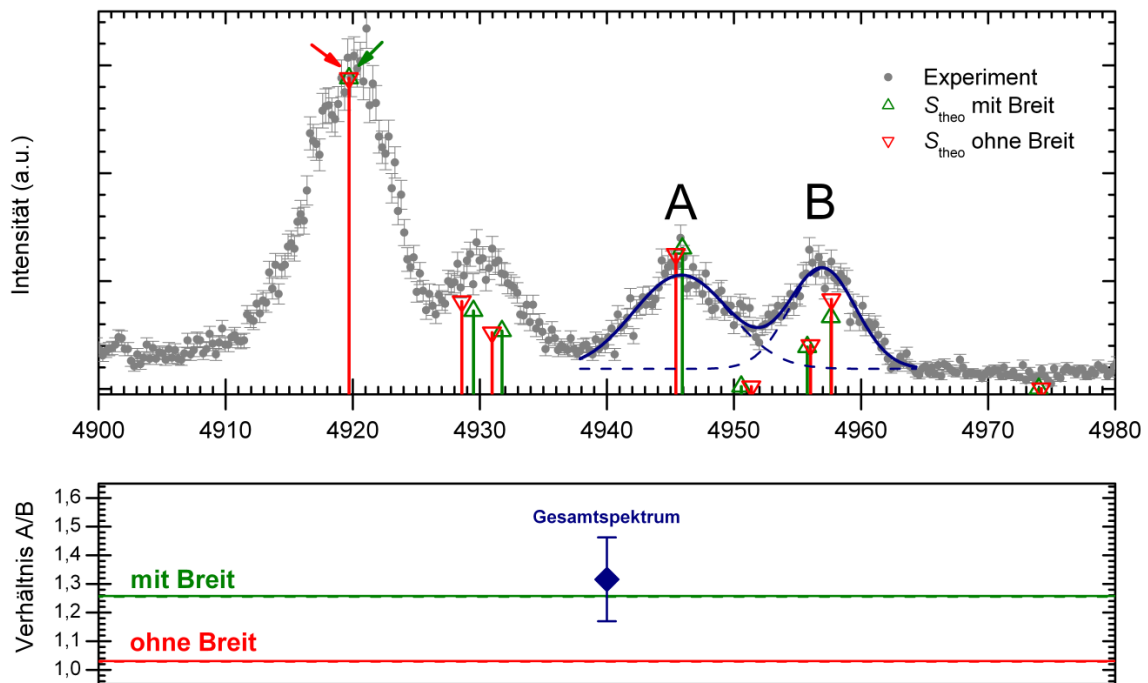


Abbildung 4.16: Stärke der Breit-Wechselwirkung in der TR: *Oben*: experimentelles Spektrum der Rekombination in Kohlenstoff-artiges Eisen und die theoretischen Stärken der Resonanzen mit und ohne Berücksichtigung der Breit-Wechselwirkung. *Unten*: Verhältnis der Stärken der Resonanzgruppen A und B der TR in Kohlenstoff-artiges Eisen mit und ohne Berücksichtigung der Breit-Wechselwirkung sowie der experimentelle Wert für A/B

**Diskussion.** Die experimentellen Ergebnisse lassen eine eindeutige Entscheidung zugunsten der Berechnungen mit Einbeziehung der Breit-Wechselwirkung zu, welche die gemessenen Daten sehr gut reproduzieren.

In den Energiebereichen der Kohlenstoff-artigen TR-Resonanzen liegen sowohl nach den MCDF-Rechnungen als auch nach den hier durchgeführten FAC-Rechnungen Resonanzen der quadruelktronischen Rekombination in Beryllium-artige Ionen. Um eine Verfälschung der Stärkenverhältnisse weitestgehend zu vermeiden, sind in Tabelle 4.2 ebenfalls die Einfangstärken und Resonanzstärken der jeweiligen Beryllium-artigen QR-Resonanzen in grauer Schriftfarbe angegeben.

Die mit FAC errechneten Einflüsse der Beryllium-artigen QR-Resonanzen auf die TR-Stärkeverhältnisse sind minimal und ändern nichts an der Aussage, dass sich die Theorie mit Breit-Wechselwirkung eindeutig gegenüber der Rechnung ohne deren Berücksichtigung durchsetzt.

Diese Ergebnisse zeigen, welches Potential in der Analyse der resonanten Rekombination höherer Ordnung für die Untersuchung quantenphysikalischer Effekte ruht, die auf Elektronenkorrelation gründen.

Tabelle 4.2: Stärkeverhältnis der Resonanzgruppen A und B in Experiment und Theorie mit Breit-Wechselwirkung (m.B.) sowie ohne Breit-Wechselwirkung (o.B.). Wieder sind die Stärkeverhältnisse, welche die Beträge Beryllium-artiger QR berücksichtigen, in grauer Schrift dargestellt.

Experiment	Theorie	
$\left[ \frac{S(A)}{S(B)} \right]$	$\left[ \frac{S(A)}{S(B)} \right]_{\text{m.B.}}^{\text{FAC}}$	$\left[ \frac{S(A)}{S(B)} \right]_{\text{o.B.}}^{\text{FAC}}$
1,316(146)	1,257	1,031
	1,255	1,029



## Kapitel 5

# Resonante Absorption von energiereichen Photonen

Ein wesentlicher Nachteil von Elektronen als Projektilen zur Untersuchung der Atomstruktur ist die Begrenzung der Auflösung durch die Raumladung des Elektronenstrahls. Photonen dagegen wechselwirken untereinander nicht, und so können mit ihnen äußerst monochromatische Strahlen präpariert werden.

Die zweite Gruppe von Experimenten dieser Arbeit beschäftigte sich mit der resonanten Absorption von Photonen im Energiebereich von 700 – 900 eV durch Natrium-artiges Eisen  $\text{Fe}^{15+}$  und wurde mit der FLASH-EBIT an der Synchrotron-Strahlungsquelle BESSY II in Berlin im Sommer 2010 durchgeführt. Natrium-artiges Eisen ist eine wichtige Komponente, die zur „*unaufgelösten Übergangsgruppe*“ (UTA) von Eisen-M-Schalen-Ionen in den Spektren aktiver galaktischer Kerne [17, 171] beiträgt.

In seiner Dissertation [189] demonstrierte *Martin Simon* eine neue Methode zur Untersuchung der Photoionisation an hochgeladenen Ionen [190–192]. Das Verfahren ermöglichte Untersuchungen, die mit der zuvor hauptsächlich angewandten „*merged beam*“-Methode [117, 201] nicht realisierbar waren.

Im Rahmen der in dieser Arbeit vorgestellten Experimente wurde als Weiterführung der Arbeit aus [190] die Photoionisation und darüber hinaus auch die resonante Photonenstreuung an diesen Targets untersucht. Das Ziel war dabei eine hochaufgelöste und präzise Absolutmessung der Resonanzenergien der *L-M*-Photoabsorption dieser besonders für die Astrophysik interessanten Ionen.

Ein Hauptaugenmerk soll auch bei diesen Experimenten auf die Überprüfung theoretischer Modelle und die Bedeutung der Konfigurationsmischung gelegt werden.

## 5.1 Experimentelles Vorgehen

Der Aufbau der Photoabsorptionsexperimente wurde in den Kapiteln 3.1.1 und 3.2.2 ausführlich dargestellt. Dieser Abschnitt beschäftigt sich mit dem Messprinzip und den systematischen Einflüssen auf die Messdaten.

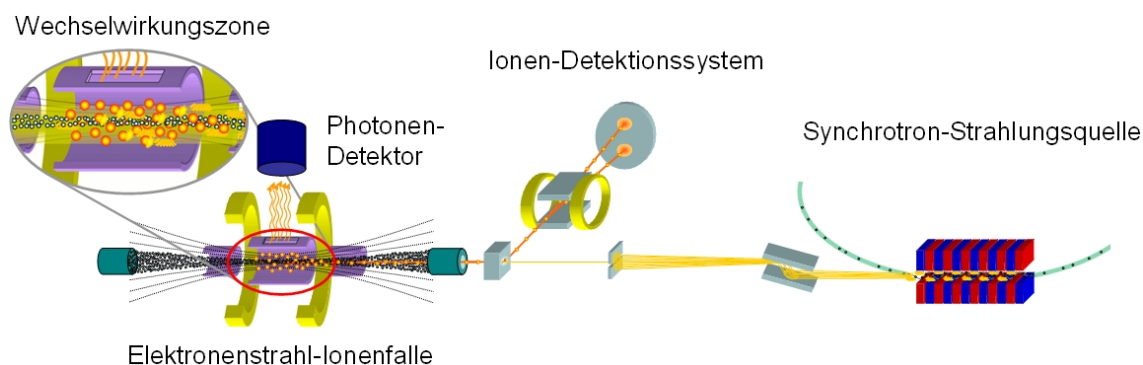


Abbildung 5.1: Gesamtaufbau für die Experimente zur Wechselwirkung von Ionen mit Photonen: Die in der EBIT erzeugten und gefangenen hochgeladenen Ionen werden mit Röntgenphotonen aus der Synchrotronstrahlungsquelle BESSY II überlagert und mit einem ladungszustandsselektiven Ionendetektionssystem sowie einem Photonendetektor nach der Reaktion analysiert.

### 5.1.1 Messprinzip der Photoabsorptions-Experimente

Nach der Überlagerung der in der EBIT erzeugten Ionen-Wolke mit dem energetisch kontrollierbaren Photonenstrahl von BESSY II wurden die Prozesse der *Photoionisation* durch Detektion der umgeladenen Ionen und die *radiative Abbreugung* der angeregten Zwischenzustände mit einem Röntgen-Detektor gemessen (Abbildung 5.1)

**Grundprinzip der Messung.** Die Energie der Projektil-Photonen wurde über die erwarteten Resonanzenergien *stufenweise* variiert, da zur Einstellung einer bestimmten Photonen-Energie eine Änderung sowohl des Magnetreihenabstands des Undulators als auch der Gitterstellung des Monochromators notwendig war (siehe Kapitel 3.2.2). Für jede Messung wurde ein Energiebereich festgelegt, der in äquidistanten Energiestufen durchlaufen wurde.

Nach dem Erreichen der maximal eingestellten Energie startet die Rampe von neuem mit gleichen Stufen, so dass mehrere Durchläufe eine Gesamtmessung ergeben.

**Energieauflösung und Schrittweite.** Um eine optimale Messung zu erreichen, muss die Energieauflösung der Projektilphotonen entsprechend gewählt

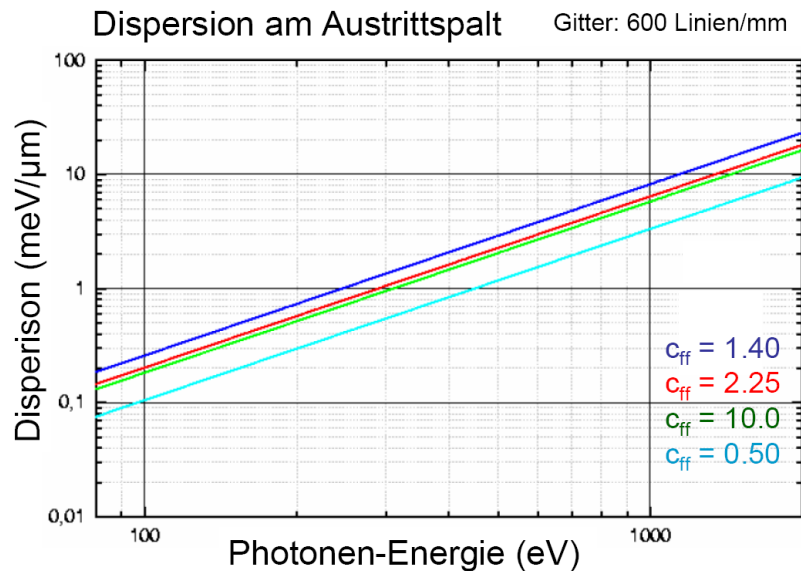


Abbildung 5.2: Dispersion des Photonenstrahls im Abhängigkeit der Öffnung des Austrittsspalts und der sog. „Fix-Fokus-Konstante“  $c_{ff}$  (siehe [174]).

und die Schrittweite an diese angepasst werden. Die Dispersion des Photonenstrahls bei entsprechenden Spaltöffnungen ist in Abbildung 5.2 dargestellt.

Da die Auflösung mit dem Austrittsspalt eingestellt wird, ändert sich mit dieser auch der Photonfluss. Daher ist es sinnvoll, nur in sehr engem Energiebereich eine hohe Auflösung einzustellen – also etwa in nächster Umgebung um eine bereits lokalisierte Resonanz.

Abhängig von der Wahl der Schrittweite und der Auflösung treten verschiedene systematische Effekte auf, die sich auf die Bestimmung der Photonenergie auswirken und in Abschnitt 5.1.3 diskutiert werden.

**Anordnung der Datenaufnahme.** Im Wesentlichen wurden die Daten mit Hilfe des Datenaufnahmesystems *MPA-3*, welches in Kapitel 3.4.1 beschrieben ist, digitalisiert und gespeichert:

- **Photonen.** Die Photonenergie wird analog der Datenaufnahme der DR-Experimente digitalisiert. Ein Photon löst ein Triggersignal für die kontinuierlichen Datenaufnahmen wie etwa die Energie der Projektilphotonen aus.
- **Ionen.** Der positionempfindliche Detektor (Abschnitt 3.3.2) liefert insgesamt vier Signale: für die  $x$ - und  $y$ -Achse jeweils ein Start- und ein Stopp-Signal. Mit je einem Start-Stopp-Paar wird ein *TDC - Time to Digital Converter* Modul gespeist, welches die Laufzeit digitalisiert. Auch hier wird ein Triggersignal erzeugt, das ein Ereignis anzeigt.

Neben diesen Daten wird die Energie der Projektilphotonen koinzident zu den oben genannten Werten aufgenommen. Weiter wird als zusätzliche Normie-

rungsoption ein Zeitsignal erzeugt, das die Verweildauer auf einer bestimmten Energiestufe angibt.

- **Energie der Projektilphotonen.** Die zur Energie der Projektilphotonen proportionale Monitorspannung des *EMP*-Systems (Abschnitt 3.2.2) wird im *MPA-3*-System als *SVA - Sample Voltage Analysis*-Signal digitalisiert.
- **Zeitnormierungssignal.** Zur Zeitnormierung der Messpunkte wurde zusätzlich ein hier so benanntes *TIMING*-Signal von einem Funktionsgenerator als regelmäßige Pulse im kHz-Bereich erzeugt. Diese Pulse triggerten die Digitalisierung einer konstanten Spannung im *SVA*-Modus. Daraus ergibt sich eine der Verweildauer auf einer Energiestufe entsprechende Ereignissumme.

Für die *koinzidente Messung* der Detektor-Signale und der Energie der Projektilphotonen wurde ein allgemeines Triggersignal aus den vorhandenen Pulsen erzeugt: Es war nicht notwendig, dass alle möglichen Signale (Ionen, Photonen) *untereinander* konzident waren, doch benötigt jedes dieser Ereignisse einen koinzidenten Wert für die Photonenenergie. Die so aufgenommenen Daten konnten mit der *MPA-NT* Software in die erwähnten Koinzidenz-Beziehungen gesetzt und damit in Echtzeit beobachtet werden.

Außerhalb der Datenaufnahme mit dem primären System (*MPA-3*) wird eine zusätzliche Datei vom Monochromator-Steuerungssystem *EMP* erzeugt, die weitere hilfreiche Daten für die jeweilige Messung enthält. Neben den Werten für die eingestellten Start- und Stopp-Energien der angelegten Energierampe und den „gemessenen“ Energiewerten je Energiestufe werden diverse andere Parameter wie die Anzahl der Durchläufe für die jeweilige Messung oder experimentelle Einstellungen sowie der Photonenfluss gespeichert.

Dabei wird die „gemessene“ Photonenenergie aus der Messung des Winkels des Monochromator-Gitters von der Monochromator-Steuerungssoftware errechnet. Der Photonenfluss ergibt sich aus dem auf dem letzten Spiegel vor dem Experiment gemessenen *Spiegelstrom* (siehe Abschnitt 3.2.2) und wird für jeden Datenpunkt von Durchlauf zu Durchlauf innerhalb einer Messung aufaddiert. Zusätzlich werden neben der Gesamtdatei auch Einzel-Dateien als Zwischenspeicherung nach jedem Durchlauf geschrieben.

### 5.1.2 Aus der Messung resultierende Resonanzspektren

Analog zur Messung der Rekombination (Abschnitt 4.1.1) lassen sich die Messdaten der radiativen Abregung als Intensitätsmatrix aus der gemessenen Relaxationsphotonen-Energie und der Energie der Projektilphotonen darstellen. Ein Bereich der Relaxationsphotonen-Energie (ROI) kann daraus ausgewählt werden und wird auf die Achse der Projektilphotonen-Energie projiziert. In Abbildung 5.3 und 5.8 des Abschnitts 5.1.4 ist dieses Verfahren dargestellt.

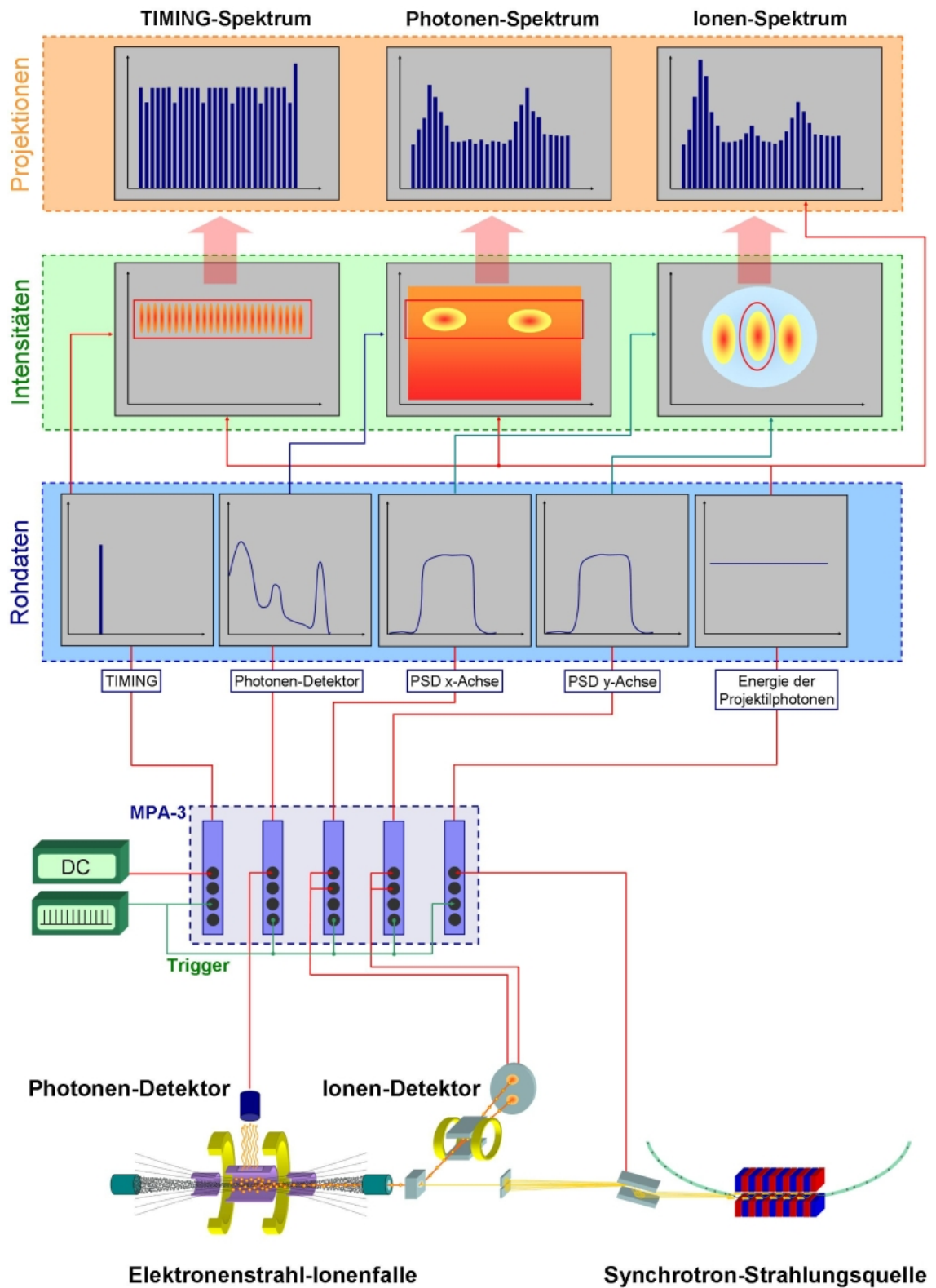


Abbildung 5.3: Schema des Messaufbaus für die Photoabsorptionsmessungen mit der Datenaufnahme und Weiterverarbeitung der Rohdaten.

Bei der Messung der durch Photoionisation umgeladenen Ionen wird eine Intensitätsmatrix aus den  $x$ - und  $y$ -Informationen des PSD erzeugt, wie ebenfalls in den Abbildungen 5.3 und 5.8 zu erkennen ist. Durch Kenntnis des Detektionsortes des Photoions lässt sich eine ROI definieren. Die Daten, die die ROI-Bedingung erfüllen, werden ebenfalls auf die koinzident zugeordnete Energie der Projektilphotonen projiziert.

Die Auflösung der Spektren und deren Signal-zu-Rausch-Verhältnis hängen mit der richtigen Wahl der ROI zusammen. Wählt man die ROI zu groß, werden viele Ereignisse in das Spektrum mit einbezogen, die den Untergrund erhöhen und das eigentliche Signal stören. Eine zu begrenzt gewählte ROI kann eine zu geringe Statistik verursachen. Daher wurden mit CHICKEN sehr kleinteilige ROI gewählt und in der Analyse mit SHEEP diese zu dem endgültigen Spektrum zusammengesetzt. Es wurde darauf geachtet, dass zum einen keine Nebeneffekte durch andere Ionensorten in die Spektren einfließen, aber auch keine scheinbar „störenden“ Ereignisse entfernt wurden, die genau innerhalb des interessanten Bereiches lagen. So waren die gewählten ROI immer zusammenhängend und insellos.

**Binning der Datenpunkte.** Das Monitorsignal für die Energie ist auf jedem Schritt nicht *exakt* konstant und wird in mehrere benachbarte Digitalisierungskanäle geschrieben. Diese Signale müssen später alle der gleichen Photonen-Energie zugeordnet werden. Bei ausreichender Trennung der Datenpunkte wird dies von einer speziell angefertigten Software ausgeführt.

### 5.1.3 Systematische Effekte und deren Korrektur

**Reproduzierbarkeit der vom Monochromator errechneten Energie.** Enthält eine Messung mehrere Durchläufe, werden jeweils die errechneten Energiewerte des letzten Durchlaufs gespeichert und als Energieachse für die gesamte Messung verwendet. Da bei jedem Durchlauf jede Energie neu angefahren wird, kann es hierbei zu kleinen Abweichungen kommen. Zu deren Abschätzung wurden die Zwischenspeicherungen des EMP-Programms, die nach jedem Durchlauf angelegt werden, ausgewertet. Exemplarisch wurden hier jeweils von einer Messung bei großer (0,25 eV), mittlerer (0,1 eV) und kleiner Schrittweite (0,05 eV) vier zufällig ausgewählte Durchläufe miteinander verglichen. Abbildung 5.4 stellt die relative Streuung der für die vier ausgewählten Durchläufe gespeicherte Energie pro eingestelltem Energieschritt dar. Diese beträgt nicht mehr als  $\pm 10$  meV.

**Allgemeine Reproduzierbarkeit der Resonanzen.** Um diese abzuschätzen, wurden für manche Einstellungen die gleichen Resonanzen mehrmals bei konstanten Parametern gemessen und miteinander verglichen. Wichtig war hierbei, dass sowohl die Schrittweite als auch die Breite des Austrittsspalts, der genaue

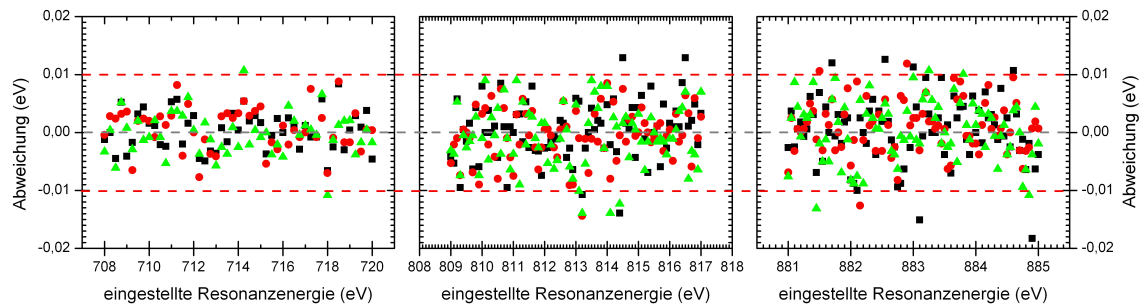


Abbildung 5.4: Reproduzierbarkeit der gemessenen Energieeinstellung am Monochromator: Streuung der gemessenen Photonenergie nach Monochromatoreinstellung für vier ausgewählte Durchläufe in drei verschiedenen Messungen mit Schrittweiten von (*Links*, a) 0,25 eV, (*Mitte*, b) 0,1 eV und (*Rechts*, c) 0,05 eV.

Energiebereich und eine vergleichbare Anzahl von Durchläufen bei konstanten Bedingungen der Ionenproduktion und -extraktion gleich gewählt und die Messungen direkt hintereinander ausgeführt wurden.

Anhand der Messung zweier Photoionisationslinien soll in Abbildung 5.5 die allgemeine Reproduzierbarkeit getestet werden. Da es sich um Messungen an Ionen unterschiedlicher Ladungszustände bei verschiedenen Resonanzenergien handelt, lag auf Grund des experimentellen Ablaufs einige Zeit und diverse Neueinstellungen des Aufbaus dazwischen, so dass mit dem Vergleich beider Messungen allgemeine Aussagen über die Reproduzierbarkeit getroffen werden können.

(1) In einer Messreihe wurde die  $2p_{1/2} \rightarrow 3d_{3/2}$  PI-Linie der Photoionisation von  $\text{Fe}^{14+}$  bei konstanten Bedingungen mit einer Schrittweite von 0,2 meV und einer Spaltöffnung von  $500 \mu\text{m}$  im Energiebereich von 800 eV bis 815 eV gemessen. Es erfolgten einige Messungen direkt nacheinander.

(2) Als zweite Messung wird die  $2s \rightarrow 3p_{3/2}$  PI-Linie in  $\text{Fe}^{15+}$  dargestellt. Hier werden drei Messpunkte miteinander verglichen, die jeweils 5 bzw. 6 Durchläufe enthalten und bei einer Schrittweite von 0,05 meV und einer Spaltöffnung von  $200 \mu\text{m}$  aufgenommen wurden.

Die Ergebnisse sind in Abbildung 5.5 zusammengestellt und es ergibt sich für beide Linien eine Reproduzierbarkeit von  $\pm 20 \text{ meV}$  um den Mittelwert der Messung.

**Reproduzierbarkeit nach einer Injektion.** Im verwendeten Operationsmodus des Synchrotrons wurden im Abständen von 8 Stunden neue Elektronenpakete injiziert. Hierdurch war es notwendig, Messungen zu unterbrechen, da der Photonenfluss für die Zeit der Injektion ausgesetzt ist. Zudem wird der Magnetreihenabstand des Undulators bei der Injektion maximal geöffnet, was eine große mechanische Veränderung gegenüber den eingestellten Parametern bedeutet. Bei einer Neueinstellung der vorherigen Parameter nach einer Injektion ist daher mit

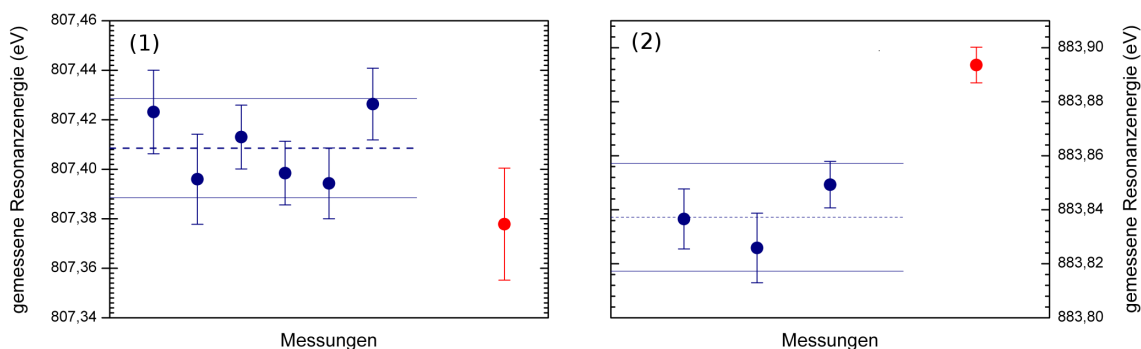


Abbildung 5.5: Messung der Reproduzierbarkeit der gemessenen Resonanzenergie für zwei ausgewählte Linien: (a)  $2p_{1/2} \rightarrow 3d_{3/2}$  in  $Fe^{14+}$ , (b)  $2s \rightarrow 3p_{3/2}$  in  $Fe^{15+}$ . Zwischen den blau und rot dargestellten Messwerten lag eine Injektion des Synchrotrons.

möglichen Abweichungen von den vorherigen Werten zu rechnen, was ebenfalls überprüft wurde.

Hierzu wurden die genannten Linien ein weiteres Mal nach der Injektion mit gleichen Einstellungen gemessen und deren ermittelte Resonanzenergie mit den vorherigen Werten verglichen. Diese Ergebnisse sind in Abbildung 5.5 als rote Punkte dargestellt. Es ist anzumerken, dass der Vergleichspunkt der Linie (1) eine geringere Statistik aufweist und daher einen größeren Fehler trägt.

Die Reproduzierbarkeit nach einer Injektion konnte somit auf maximal  $\pm 50$  meV bestimmt werden.

**Gesamter systematischer Fehler.** Aus diesen Abschätzungen setzt sich der konstante systematische Fehler der gemessenen Resonanzenergien nach quadratischer Addition wie in Tabelle 5.1 dargestellt zusammen:

Tabelle 5.1: Zusammenstellung der systematischen Fehler

Fehlerquelle	$\Delta x$
Messung der Monochromatorenergie	$\pm 10$ meV
Reproduzierbarkeit der Resonanzen	$\pm 20$ meV
Reproduzierbarkeit nach Injektion	$\pm 50$ meV
<b>Quadratische Summe der Fehler</b>	<b><math>\pm 55</math> meV</b>

**Energieverschiebungen durch die Wahl der Schrittweite.** Es stellt sich heraus, dass die Photoionisationsresonanzen bei scheinbar niedrigeren Energien auftreten, je kleiner die Schrittweite der Projektilenergie-Stufenrampe gewählt wurde. Diese Verschiebungen lassen sich wie folgt verstehen:



Beim Durchfahren der Energierampe muss jede Stufe neu eingestellt werden, was mechanische Veränderungen am Monochromator-System erfordert, wie in Abschnitt 3.2.2 beschrieben ist. Das Monitorsignal für die Photonenenergie wird dabei auf die nächste Stufe gesetzt, sobald die Einstellungen für die entsprechende Energie begonnen werden. Das bedeutet im Umkehrschluss, dass dieses Signal bereits während der laufenden Neuausrichtung der Monochromatisierungsmechanik die nächste angestrebte Energiestufe anzeigt. Die Datenaufnahme selbst erfolgt aus technischen Gründen kontinuierlich, so dass auch während der mechanischen Umstellung Ereignisse detektiert und aufgezeichnet werden.

Dies führt dazu, dass während der Einstellphase die wechselwirkenden Photonen bereits zur nächsten Energiestufe zugeordnet werden, obwohl sie noch eine niedrigere Energie zwischen den beiden Stufen besitzen. Resonante Prozesse werden so den höheren Energien zugeordnet.

Die Verschiebung hat im Extremfall die Dimension *eines* Energieschrittes, in der Praxis jedoch deutlich weniger. Auch hängt sie davon ab, wie lange gemessen wird im Vergleich zur Einstellzeit, welche wieder von der Schrittweite abhängt. Bei sehr kleinen Schrittweiten verschwindet die systematische Verschiebung nahezu.

Dieser Effekt kann durch lineare Verschiebungen der gemessenen Resonanzenergien korrigiert werden.

**Energieverschiebung durch Lage des Reaktionsbereichs im Strahlprofil.** Der Photonenstrahl weist eine Dispersion in der Brennebene auf. Somit hat genau genommen nur ein Teil des Strahls die nominell eingestellte Photonenenergie. Dies führt neben der Verbreiterung der gemessenen Resonanzlinien zu Unsicherheiten der exakten Photonenenergie bedingt durch Justierfehler.

Wird der Austrittsspalt nicht exakt auf der optischen Achse – das heißt in diesem Falle zentriert nach nomineller Photonenenergie – geschlossen, hat der Strahl eine leicht von dem eingestellten Wert abweichende Photonenenergie. Es ist jedoch durch eine sehr genaue Wartung und Einstellung der Beamline sichergestellt, dass der Austrittsspalt bestmöglich die energetische Mitte und die Intensitätsmitte des Photonenstrahls umschließt.

Ist der Spalt weiter geöffnet und hat der Strahl eine vertikale Ausdehnung größer als die Ionenwolke, ist die Energie der mit den Ionen *wechselwirkenden* Photonen abhängig vom konkreten Ort der Reaktion. Ab welcher Spaltöffnung dies der Fall ist, lässt sich durch eine Betrachtung der erreichten Auflösung der Resonanzenergien bestimmen: Die Bandbreite des Photonenstrahls hängt linear von der Spaltöffnung ab (siehe Abbildung 5.2). Wenn Photonen der gesamten Bandbreite des Photonenstrahls mit Target-Ionen wechselwirken, ändert sich die Auflösung der gemessenen Resonanzlinien linear mit der eingestellten Spaltöffnung. Übertrifft nun die räumliche Ausdehnung des Photonenstrahls die der Ionenwolke, reagiert nicht mehr die gesamte energetische Bandbreite der Photo-

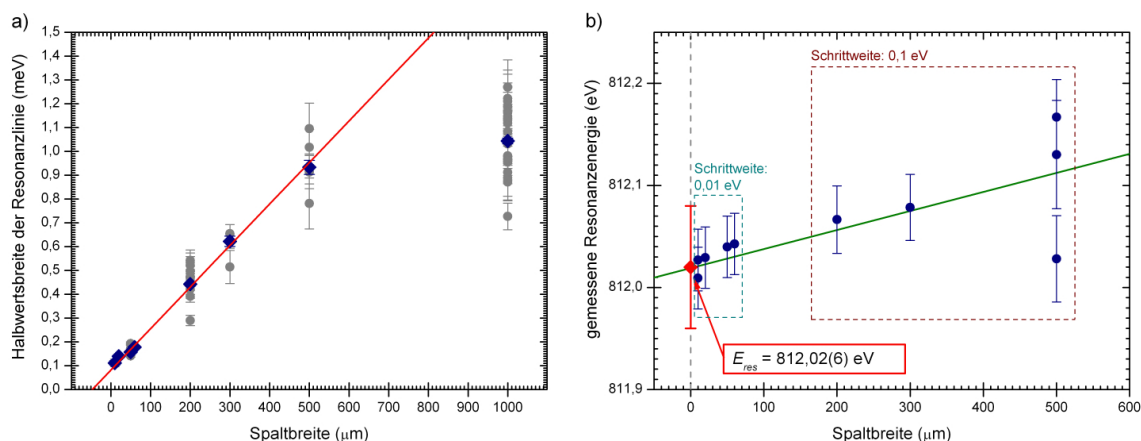


Abbildung 5.6: Korrektur systematischer Verschiebungen. (a) Auflösung der gemessenen Resonanzenergien in Abhängigkeit der Öffnung des Austrittsspalts zur Kontrolle der Überdeckung von Photonenstrahl und Ionenwolke. (b) Verschiebungsfunktion für die gemessenen Resonanzenergien in Abhängigkeit der Spaltöffnung ermittelt an der  $2p_{1/2} \rightarrow 3d_{5/2}$ -Resonanz in  $\text{Fe}^{15+}$ .

nen mit den Ionen und die lineare Abhängigkeit der Auflösung ist nicht mehr gegeben. In diesem Fall kann nicht mehr davon ausgegangen werden, dass die Ionen hauptsächlich mit Photonen der eingestellten Energie wechselwirken und es tritt die beschriebene Abhängigkeit der Wechselwirkungsenergie von der Lage der Ionenwolke im Strahlprofil ein. Weicht diese von der energetischen Mitte ab, findet der Hauptteil der Reaktionen bei leicht verschiedenen Energien statt.

Abbildung 5.6 a zeigt die besprochene Abhängigkeit der Auflösung von der Spaltöffnung. In dieser sind die Halbwertsbreiten aller in die folgenden Auswertungen einbezogenen gemessenen Resonanzen im Energiebereich von 700-900 eV in grauen Punkten und die nach statistischen Fehlern gewichteten Mittelwerte der Messungen bei gleicher Spaltöffnung in blauen Rauten dargestellt. Die rote Gerade stellt die Anpassung einer linearen Funktion an die Mittelwerte der Resonanzen mit einer Spaltöffnung  $\leq 500 \mu\text{m}$  dar. Hier zeigt sich die genannte lineare Abhängigkeit der Auflösung von der Spaltöffnung, welche für die Resonanzen, die bei einer Spaltöffnung von  $1000 \mu\text{m}$  gemessen wurden, nicht mehr gilt. Hier ist der Photonenstrahl also räumlich größer als die Ionenwolke. Somit ist für die Messungen bei  $1000 \mu\text{m}$  Spaltöffnung die Abhängigkeit der tatsächlichen Energie der wechselwirkenden Photonen von der Ausrichtung der Ionenwolke zu beachten.

**Korrektur der systematischen Verschiebung** Um die diskutierten Fehlerinflüsse durch die *Schrittweite* sowie durch die *Spaltbreite* abzuschätzen, wurden Messungen der stärksten Photoionisationslinie in  $\text{Fe}^{15+}$ , welche bei einer Energie von ca. 812 eV zu finden ist, bei verschiedenen Einstellungen von Spaltbreite und Schrittweite miteinander verglichen. Die gemessenen Resonanzenergien, die nach der notwendigen Kalibration der Photonenenergie (siehe nächsten

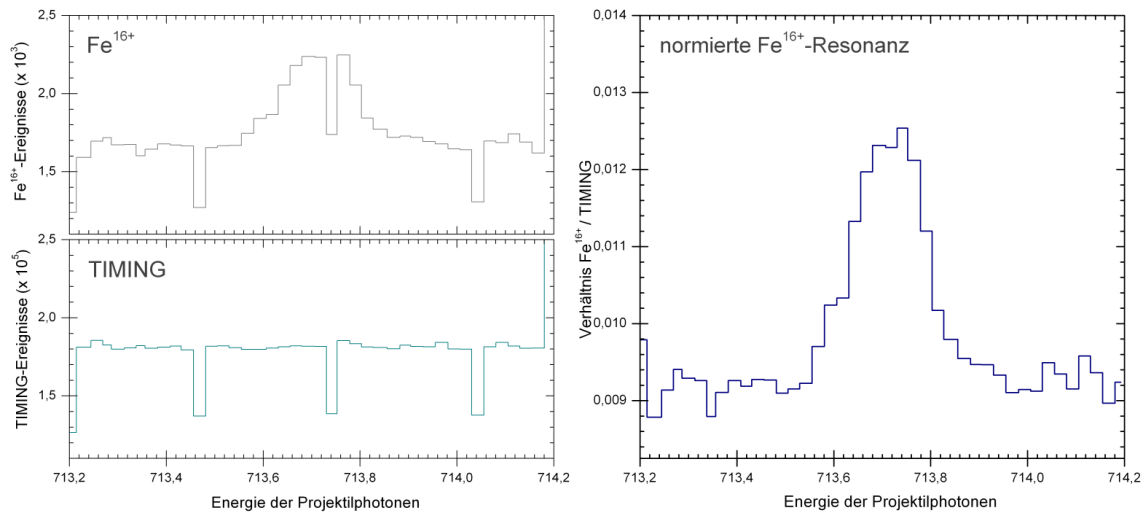


Abbildung 5.7: Normierung der Resonanzlinien auf die Verweildauer je Energiestufe der Projektilphotonen mit Hilfe des TIMING-Signals. *Links oben:* gemessenes Spektrum. *Links unten:* TIMING-Signal mit erkennbarer Zeitstruktur. *Rechts:* Normiertes Spektrum.

Absatz) ermittelt wurden, sind in Abbildung 5.6 b dargestellt.

Da bei kleinen Spaltbreiten und Schrittweiten die eingestellten Energien den tatsächlichen Energien der wechselwirkenden Photonen am besten entsprechen, kann die so ermittelte lineare Verschiebungsfunktion zur Korrektur angesetzt werden.

Die Daten bei einer Spaltöffnung von  $1000 \mu\text{m}$  wurden nicht in die Korrektur einbezogen, da sie auf Grund der großen Bandbreite und der damit verbundenen Unsicherheit der Energiebestimmung (siehe oben) vergleichsweise weit streuen.

In Abbildung 5.6 b ist ebenfalls dargestellt, bei welcher Schrittweite der Photonenenergie-Stufenrampe die Resonanzen gemessen wurden. Es zeigt sich, dass bei gleicher Schrittweite die Messungen eine lineare Abhängigkeit von der Spaltbreite zeigen, weshalb die allgemeine Korrektur der Resonanzen in Abhängigkeit der Spaltbreite den Vorzug gegenüber einer Verschiebung nach Schrittweite erhielt.

### Normierung auf die Verweildauer einer Energiestufe

Bei kleinen Schrittweiten der Projektilphotonenenergie sind die Einstellzeiten für die Monochromator-Mechanik unterschiedlich, da nicht bei jedem Schritt der Magnetreihenabstand des Undulators geändert wird. Da diese Unregelmäßigkeit jeweils an der gleichen Energiestufe auftritt, ergeben sich Artefakte im gemessenen Spektrum einer Resonanzlinie, wie in Abbildung 5.7 zu sehen ist.

Das erwähnte TIMING-Signal registriert für jede Stufe die Verweildauer auf ihr. Mit diesem Signal kann nun das Spektrum normiert werden, was Abbildung 5.7 verdeutlicht.

### Kalibration der Photonenenergie

Eine möglichst genaue *absolute* Bestimmung der Resonanzenergien erfordert eine bestmögliche Kalibration der Photonenenergie. Diese wurde von den Betreuern der verwendeten Beamline durchgeführt und basiert auf die Messung der Photoabsorption in neutrales Neon, für welches eine Resonanzlinie bei 867,12(3) eV im verwendeten Bereich der Projektilenergie sehr genau bekannt ist [51,76]. Hierzu wurde eine in die Beamline integrierte Absorptionsgaszelle hinter dem Austrittsspalt verwendet [76,174].

Kalibrationen wurden mehrmals während der Strahlzeit durchgeführt. Der Fehler der bekannten Kalibrationslinie geht in den Gesamtfehler der Angabe der Resonanzenergie ein.

### Zusammenfassung der systematischen Effekte und deren Korrekturen

Nach den oben angeführten Überlegungen wurden die ermittelten Werte für die Resonanzenergien mit folgenden Schritten korrigiert:

- Normierung der Aufnahmezeiten der Datenpunkte mit dem TIMING-Signal
- Zuordnung der eingestellten Photonenenergien
- Kalibration der Photonenenergie mit Hilfe der Neon-Absorptionsmessungen
- lineare Verschiebung der Energien in Abhängigkeit der Spaltöffnung mit der Verschiebungsfunktion

Die Fehler der jeweils ermittelten Resonanzenergie setzen sich zusammen aus dem statistischen Fehler der Resonanzlinie, den Fehlern durch systematische Effekte und den Unsicherheiten der Referenzlinie zur Kalibration sowie der Verschiebungsfunktion. Zur Angabe der endgültigen Resonanzenergien wurden Einzelmessungen gewichtet nach den jeweiligen Fehlern gemittelt.

### 5.1.4 Testmessungen der Photoabsorption in $\text{Fe}^{14+}$

Die  $\text{Fe}^{14+}$ –Resonanzen bei ca. 794 eV ( $2p_{3/2} \rightarrow 3d_{5/2}$ ) und 807 eV ( $2p_{1/2} \rightarrow 3d_{3/2}$ ) eignen sich bestens für Testmessungen des Versuchsaufbaus und der Stabilität der Konditionen, da sie in beiden Zerfallskanälen große Resonanzstärken haben: nach [96] und den experimentellen Ergebnissen in [189] sind es die beiden stärksten Photoionisationsresonanzen in  $\text{Fe}^{14+}$  und haben nach den RMBPT-Berechnungen in [96] einen bedeutenden radiativen Anteil an der Abregung des Zwischenzustands. Da diese radiative Abregung einen  $\Delta J = 0$ –Übergang darstellt, werden nach Gleichung 2.46 Relaxationsphotonen in isotrope Raumrichtungen unabhängig von der Polarisation der absorbierten Photonen abgestrahlt.

Abbildung 5.8 zeigt die Ergebnisse dieser Testmessungen der Photoabsorption durch  $\text{Fe}^{14+}$  im Energiebereich von 792 – 810,5 eV.

Klar zu erkennen sind neben den aus [189, 190] bekannten Photoionisationsresonanzen die entsprechenden Resonanzlinien des radiativen Zerfalls.

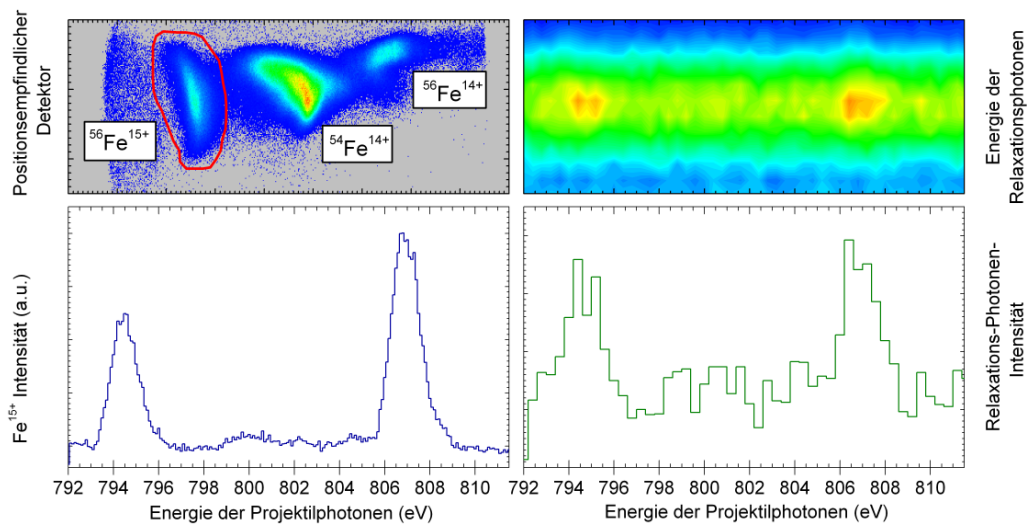


Abbildung 5.8: Testmessungen beider Zerfallskanäle der durch Photoabsorption angeregten  $2p_{3/2} \rightarrow 3d_{5/2}$  und  $2p_{1/2} \rightarrow 3d_{3/2}$  Übergänge in  $\text{Fe}^{14+}$ . *Links*: autoionisierender Zerfall. *Rechts*: radiativer Zerfall. *Oben*: Intensitätsmatrizen. *Unten*: Resonanzspektren als Projektionen auf die Energie der Projektilphotonen.

## 5.2 Photoabsorption in $\text{Fe}^{15+}$

Nach den vorher dargestellten Testmessungen wurde das Natrium-artige Eisenion  $\text{Fe}^{15+}$  untersucht. Im Folgenden werden die Bestimmungen der absoluten Resonanzenergien der  $L$ - $M$ -Photoionisation sowie die Ergebnisse der Resonanzspektroskopie in diesem Energiebereich dargestellt.

### 5.2.1 Resonante Photoionisation

Nach den berechneten Resonanzenergien und -stärken aus [96] treten die Resonanzen der Photoionisation in  $\text{Fe}^{15+}$  in messbarer Stärke im Energiebereich von 700 – 900 eV auf, welcher von dem in Abbildung 5.9 a gezeigten Übersichtsspektrum abgedeckt ist. Dieses ist mit einer Schrittweite von 1 eV und einer Spaltbreite von 1000  $\mu\text{m}$  aufgenommen und zeigt die drei wesentlichen Resonanzgruppen mit den Übergängen  $2p \rightarrow 3s$ ,  $2p \rightarrow 3d$  und  $2s \rightarrow 3p$ , welche in den Detailmessungen unterhalb des Spektrums dargestellt sind. In diesen Detailspektren sind jeweils die Resonanzenergien aus [96] sowie die Werte resultierend aus den eigenen CI-Rechnungen unter Verwendung von FAC dargestellt.

Die Übersicht des  $2p \rightarrow 3s$ -Bereichs in Abbildung 5.9 b wurde mit einer Spaltbreite von 1000  $\mu\text{m}$  und einer Energie-Schrittweite von 0,25 eV durchgeführt und zeigt die beiden möglichen Resonanzen dieser Übergänge, wovon die stärkere ( $2p_{3/2} \rightarrow 3s$ ), deren angeregter Zustand ein  ${}^2P_{3/2}^0$ -Level darstellt, zusätzlich mit einer sehr hohen Auflösung bei einer Spaltbreite von 50  $\mu\text{m}$  (Schrittweite: 0,025 eV) gemessen wurde. Hieran kann für diese Resonanzgruppe der hauptsächliche Vergleich mit verschiedenen theoretischen Werten angestellt werden, welcher in Abbildung 5.10 dargestellt ist.

Die meisten Übergänge beinhaltet der Bereich der  $2p \rightarrow 3d$ -Übergänge. Dieser ist in den Abbildungen 5.9 c und d gezeigt, wo gleich fünf autoionisierende Resonanzen gemessen werden konnten. Als ausgewählte Linie für den detaillierten Vergleich mit den Theorien in Abbildung 5.10 c wurde als stärkste autoionisierende Resonanz der  $2p_{1/2} \rightarrow 3d_{5/2}$ -Übergang auf ein  ${}^2P_{3/2}^0$ -Niveau bestimmt. An dieser wurden auch die in dem vorstehenden Abschnitt durchgeführten Korrekturen ermittelt.

Als dritte Gruppe wurden Resonanzen des Übergangs  $2s \rightarrow 3p$  detektiert, welche  $2s$ -Löcher erzeugen und daher für den Vergleich mit den theoretischen Vorhersagen von besonderem Interesse sind (Abbildung 5.9 e). Hiervon wurde die  $2s \rightarrow 3p_{3/2}$ -Anregung auf das Level  ${}^2P_{3/2}^0$  für detaillierte Vergleiche ausgewählt. In dieser Resonanzgruppe sind verschiedene Resonanzen sehr eng benachbart. Linie 11 beinhaltet wie in der Abbildung erkennbar zwei Resonanzen und stellt daher zwei nicht aufgelöste überlagerte Linien dar.

**Vergleiche mit theoretischen Berechnungen.** Insgesamt wurden 10 Photoionisations-Linien detektiert, deren ermittelte Resonanzenergien in Tabelle 5.2

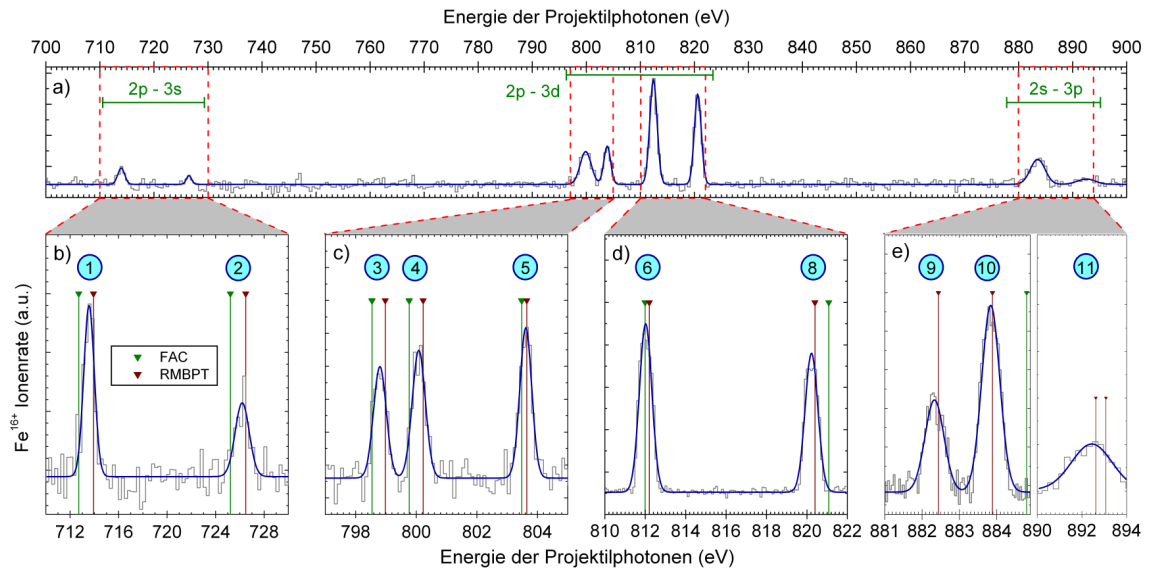


Abbildung 5.9: Spektrum der Photoionisation in  $\text{Fe}^{15+}$ . In Teil (a) ist das Übersichtsspektrum im Energiebereich von 700 bis 900 eV zu sehen, wobei (b) bis (e) Details der jeweiligen Resonanzgruppen zeigen. Es sind die theoretischen Resonanzenergien der Rechnungen mit RMBPT [96] und FAC (diese Arbeit) eingetragen.

zusammengestellt und sowohl mit den eigenen Berechnungen als auch mit verschiedenen Rechnungen aus der Literatur verglichen sind. Dies sind neben der bereits erwähnten *störungstheoretischen* RMBPT-Rechnung [96] *Multiconfiguration Dirac-Fock*-Rechnungen mit Hilfe des YODA- [41] und des GRASP-Codes [3, 4, 66, 91] sowie weiterer *Configuration Interaction*-Rechnungen mit den Paketen AUTOSTRUCTURE [8, 130] und CIV3 [104, 105, 116].

Diese Rechnungen werden auch in Abbildung 5.10 mit Resonanzen der jeweiligen Übergangsgruppe, die mit hoher Auflösung aufgenommen wurden, dargestellt.

Insgesamt reproduzieren die RMBPT-Rechnungen aus [96] die gemessenen Resonanzenergien am zuverlässigsten, und so kann auch bei diesen Experimenten die Bestätigung der störungstheoretischen Rechnungen, welche schon in [189] erfolgte, bekräftigt werden. Das gilt für alle drei Resonanzgruppen in diesem Spektrum. Unter 1 eV Abweichung zu den Messdaten zeigen – zumindest in den  $2p \rightarrow 3s$  und  $2p \rightarrow 3d$  Übergängen – auch die für diese Arbeit durchgeführten Rechnungen mit dem *relativistischen Configuration Interaction Code* FAC, wobei die Diskrepanz für die erste Gruppe der Resonanzen tendenziell größer ist. Dieses Verhalten zeigen auch die verglichenen CI-Rechnungen mit AUTOSTRUCTURE [130] mit minimal größeren Abweichungen.

Tabelle 5.2: Resonanzenergien für die Photoabsorption in Natrium-artiges Fe XVI. Die experimentellen sowie berechneten Werte dieser Arbeit werden mit theoretischen Werten verglichen. Hierbei handelt es sich um eine störungstheoretische Berechnung (RMBPT, [96]), zwei Multiconfiguration Dirack-Fock Rechnungen (mit YODA-Code [41] und GRASP-Code [3]) sowie zwei auf Configuration Interaction basierende Berechnungen (mit AUTOSTRUCTURE [130] und dem civ3-Code [116]). Die Werte, welche den experimentellen Daten am nächsten sind, sind in blauer Schrift hervorgehoben. <sup>(i)</sup> zwei nicht aufgelöste Linien.

Resonanzlinie		Resonanzenergien (eV)			Abweichungen $\Delta E$ (eV)					
Nr.	dominanter Übergang	Level	<i>Ergebnisse dieser Arbeit</i>			zu verglichenen theoretischen Werten				
			Experiment	FAC	$\Delta E$	Störungstheorie		Multiconfiguration Dirac-Fock		
						RMBPT	YODA	GRASP	AS	civ3
1	$2p_{3/2} \rightarrow 3s$	$2P_{3/2}^o$	713,53(6)	712,71	-0,82	<b>0,40</b>	-1,86	-1,71	-1,30	5,38
2	$2p_{1/2} \rightarrow 3s$	$2P_{1/2}^o$	726,09(9)	725,22	-0,88	<b>0,39</b>	-1,90	-1,72	-1,08	4,73
3	$2p_{3/2} \rightarrow 3d_{5/2}$	$2P_{3/2}^o$	798,80(7)	798,54	-0,26	<b>0,18</b>	-1,33	-0,66	<b>0,18</b>	5,85
4	$2p_{3/2} \rightarrow 3d_{5/2}$	$4D_{1/2}^o$	800,08(6)	799,77	-0,31	0,14	-1,13	-0,60	<b>0,12</b>	5,84
5	$2p_{1/2} \rightarrow 3d_{5/2}$	$4D_{3/2}^o$	803,61(6)	803,48	-0,13	<b>0,03</b>	-1,06	-0,29	0,66	5,62
6	$2p_{1/2} \rightarrow 3d_{5/2}$	$2P_{3/2}^o$	812,02(6)	811,99	<b>0,03</b>	0,18	-0,54	0,08	0,66	6,16
7	$2p_{1/2} \rightarrow 3d_{3/2}$	$2P_{1/2}^o$	814,97(7)	815,26	0,29	<b>0,25</b>	-0,27	0,71	0,81	7,03
8	$2p_{1/2} \rightarrow 3d_{3/2}$	$2P_{3/2}^o$	820,21(6)	821,08	0,87	0,19	<b>0,07</b>	1,61	2,47	6,56
9	$2s \rightarrow 3p_{1/2}$	$2P_{1/2}^o$	882,11(6)	884,80	2,69	<b>0,32</b>	1,02			
10	$2s \rightarrow 3p_{3/2}$	$2P_{3/2}^o$	883,62(6)	886,29	2,66	<b>0,26</b>	1,00			
11 <sup>(i)</sup>	$2s \rightarrow 3p_{3/2}$	$2P_{1/2}^o$	892,44(10)	895,23	2,79	<b>0,18</b>	1,49			
	$2s \rightarrow 3p_{3/2}$	$2P_{3/2}^o$		895,78	3,34	<b>0,64</b>	1,98			



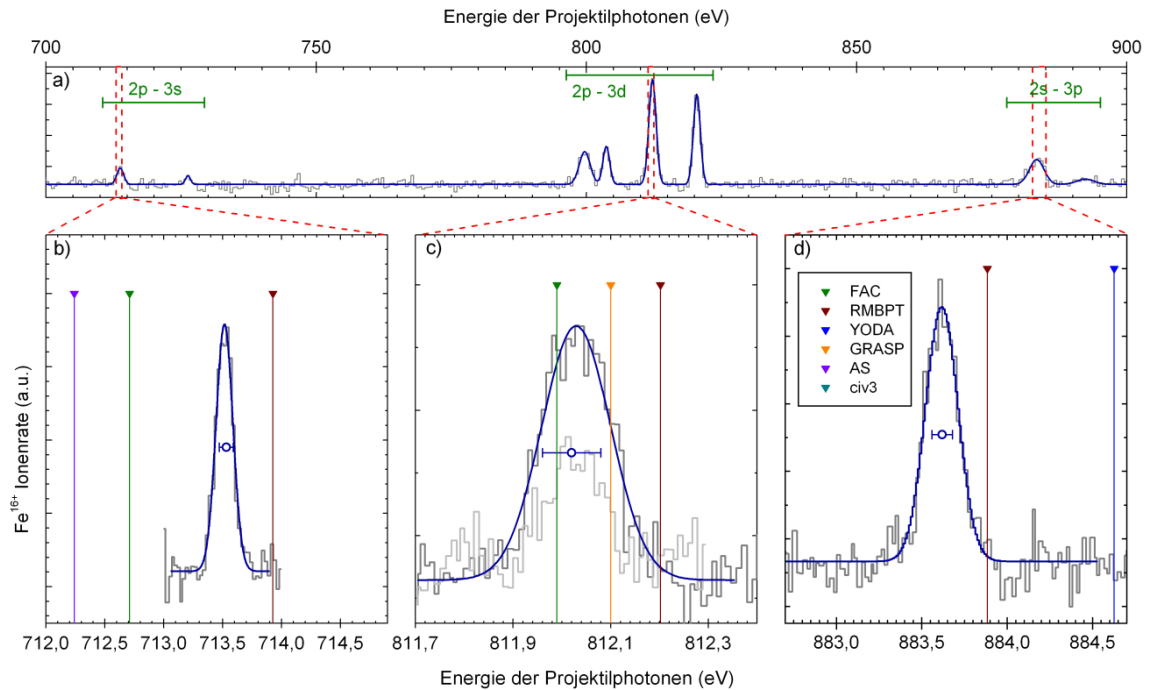


Abbildung 5.10: Detailspektren ausgewählter Resonanzen der drei Übergangsgruppen in  $\text{Fe}^{15+}$  mit hoher Auflösung und dem Vergleich diverser theoretischer Berechnungen.

Auffällig ist jedoch sowohl bei diesen AUTOSTRUCTURE-Rechnungen als auch bei den MCDF-Rechnungen mit dem GRASP-Code, dass die errechnete Resonanzenergie für Linie 10 ( $2p_{1/2} \rightarrow 3d_{3/2}$ ) sehr deutlich über dem gemessenen Wert liegt. Die YODA-Ergebnisse [41] treffen dagegen für diese Linie gut, wobei sie für die anderen Resonanzen deutlicher abweichen. Es zeigt sich die Tendenz, nach der für die ersten beiden Resonanzgruppen bei steigender Resonanzenergie die Werte auch besser passen. Die Übereinstimmungen der GRASP-Werte mit dem Experiment folgen einem ähnlichen Verhalten.

Bei den Werten der Rechnungen mit dem *nichtrelativistischen* CI-Code CIV3 [116], bei welchen zur Berücksichtigung relativistischer Effekte Breit-Pauli-Operatoren in den Hamilton-Operator eingefügt wurden [105], kann allgemein eine sehr große Abweichung festgestellt werden, weshalb diese nicht weiter beachtet werden.

Für die Übergangsgruppe  $2s \rightarrow 3p$  bieten nur die RMBPT-Rechnungen und die MCDF-Berechnungen mit dem YODA-Code neben den eigenen FAC-Rechnungen Werte für die Resonanzenergien. Diese Übergänge sind besonders schwer zu rechnen, da hier kein  $2p$ -Elektron als eines der äußersten Schale, sondern ein inneres  $2s$ -Elektron auf ein höheres Niveau angeregt wird. Sowohl die FAC- als auch die YODA-Rechnungen sehen die Energien 1 – 3 eV zu hoch. Lediglich die RMPBT-Rechnungen bieten auch in diesem Bereich zuverlässige und mit dem Experiment in Einklang stehende Werte für die Resonanzenergien.

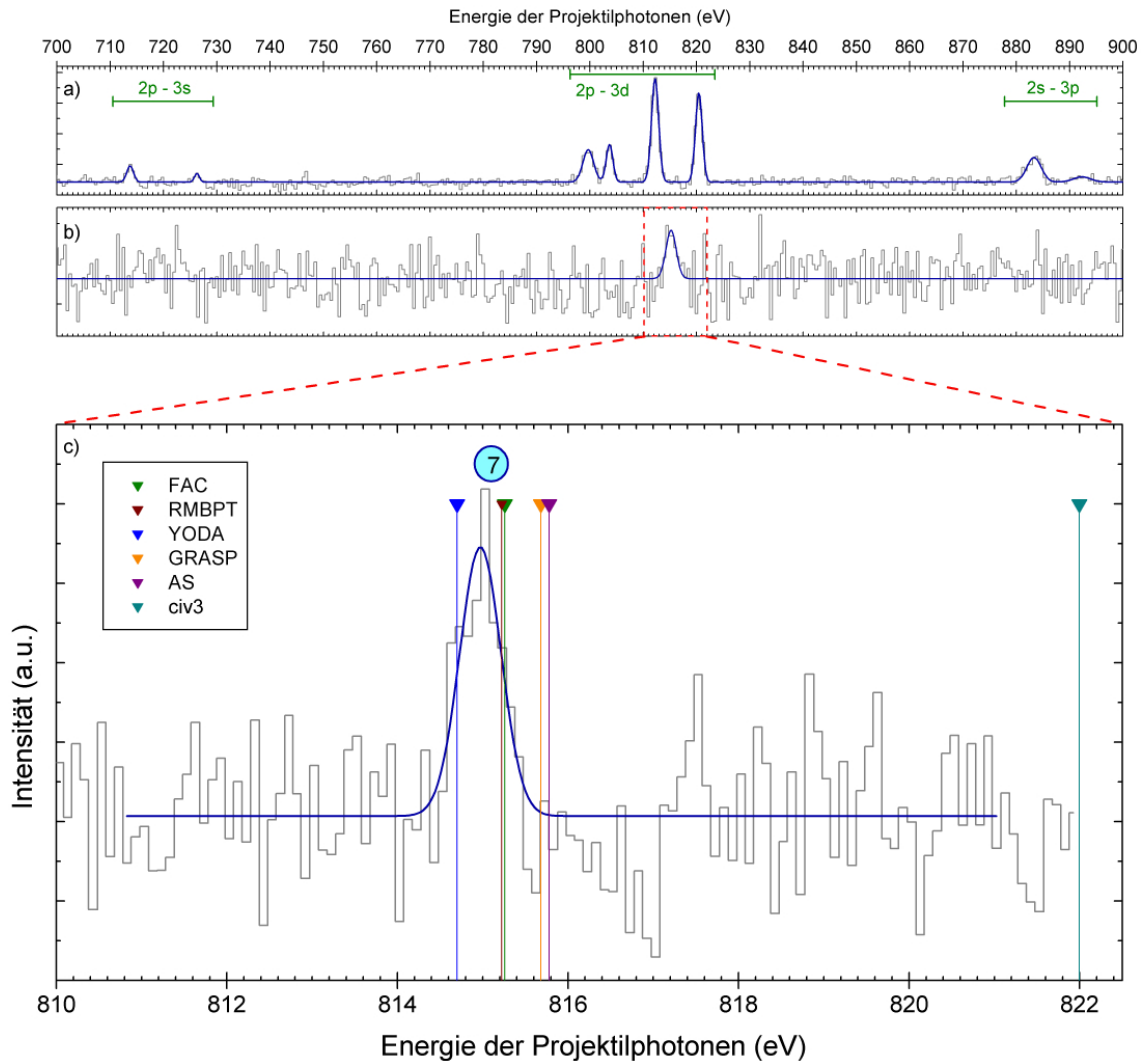


Abbildung 5.11: Resonanzstreuung in  $\text{Fe}^{15+}$ . (a) Vergleichsspektrum der Photoionisation. (b) Übersichtsspektrum der Resonanzstreuung. (c) Detailspektrum der  $2p_{1/2} \rightarrow 3d_{3/2}$ -Resonanz.

## 5.2.2 Resonante Photonenstreuung

Die Messung der radiativen Relaxation als zweiter Zerfallsweg der photoangeregten Ionen ist in Abbildung 5.11 b als Übersichtsmessung analog zur Photoionisation dargestellt, welche zur Orientierung über dem Spektrum (a) angegeben ist.

Eine Diskussion des gemessenen Spektrums erfordert eine kurze Diskussion der Winkelverteilung der emittierten Photonen. Diese strahlen nach den Ausführungen in Kapitel 2.4.3 in Abhängigkeit der Drehimpulsänderung des relaxierenden Übergangs nur in bestimmte Raumrichtungen bezüglich der Polarisation der anregenden Photonen und der Quantisierungsachse.

Der Grundzustand von  $\text{Fe}^{15+}$  hat den Gesamtdrehimpuls  $J = 1/2$ . Nach Ta-

Tabelle 5.3: Oszillatorstärken und radiative Raten für die gemessenen Resonanzen. Wieder steht  $a[b]$  für  $a \cdot 10^b$ . Die Stärken  $S_r$  errechnen sich mit  $S_r(4\pi) = f_p^{a(i \rightarrow d)} \cdot A_p^e$  und  $S_r(90^\circ) = f_p^{a(i \rightarrow d)} \cdot \theta \cdot A_p^e$  mit  $\theta = 1$  für  $\Delta J = 0$  und  $\theta = 1/7$  für  $\Delta J = 1$  (in diesem Fall bedeutet  $\Delta J = 1$  jeweils ein  $J$ -Übergang  $3/2 \rightarrow 1/2$ ).

Nr.	$\Delta J$	FAC, diese Arbeit				RMBPT [96]			
		$f_p^{a(i \rightarrow d)}$	$A_p^e$	$S_r(4\pi)$	$S_r(90^\circ)$	$f_p^{a(i \rightarrow d)}$	$A_p^e$	$S_r(4\pi)$	$S_r(90^\circ)$
1	1	1,3[-1]	7,1[11]	9,1[10]	<b>1,3[10]</b>	6,7[-2]	7,3[11]	4,8[10]	<b>6,9[9]</b>
2	0	6,4[-2]	7,2[11]	4,7[10]	<b>4,7[10]</b>	3,3[-2]	7,5[11]	2,4[10]	<b>2,4[10]</b>
3	1	4,5[-1]	3,1[12]	1,4[12]	<b>2,0[11]</b>	2,0[-1]	2,8[12]	5,6[11]	<b>8,0[10]</b>
4	0	2,9[-1]	4,0[12]	1,2[12]	<b>1,2[12]</b>	1,6[-1]	4,6[12]	7,5[11]	<b>7,5[11]</b>
5	1	2,4[-1]	1,7[12]	3,9[11]	<b>5,6[10]</b>	2,1[-1]	3,0[12]	6,2[11]	<b>9,8[10]</b>
6	1	2,1[0]	1,5[13]	3,1[13]	<b>4,4[12]</b>	9,9[-1]	1,4[13]	1,4[13]	<b>2,0[12]</b>
7	0	1,7[0]	2,4[13]	4,0[13]	<b>4,0[13]</b>	8,3[-1]	2,4[13]	2,0[13]	<b>2,0[13]</b>
8	1	1,2[0]	8,8[12]	1,1[13]	<b>1,5[12]</b>	6,1[-1]	8,9[12]	5,5[12]	<b>7,8[11]</b>
9	0	1,6[-1]	2,6[12]	4,1[11]	<b>4,1[11]</b>	9,7[-2]	3,3[12]	3,2[11]	<b>3,2[11]</b>
10	1	2,7[-1]	2,3[12]	6,1[11]	<b>8,7[10]</b>	2,2[-1]	3,6[12]	7,8[11]	<b>1,1[11]</b>

belle 5.2 haben die angeregten Konfigurationen, welche Übergänge in messbarer Stärke generieren, Drehimpulse von  $J = 1/2$  und  $J = 3/2$ , so dass die Drehimpulsänderungen der beobachtbaren Übergänge entweder  $\Delta J = 0(1/2 \rightarrow 1/2)$  oder  $\Delta J = 1(3/2 \rightarrow 1/2)$  betragen.

Durch die Detektoranordnung, welche in Kapitel 3.3.3 diskutiert wird, werden die  $\Delta J = 0$ -Übergänge in voller Stärke, die entsprechenden  $\Delta J = 1$ -Übergänge jedoch um den Faktor  $1/7$  vermindert gemessen.

In Tabelle 5.3 sind die Oszillatorstärken  $f_p^{a(i \rightarrow d)}$  und radiativen Raten  $A_p^e$  der genannten Resonanzen bezüglich des Grundzustands aus den relativistischen *Configuration Interaction* (FAC) Rechnungen dieser Arbeit und den störungstheoretischen RMBPT-Rechnungen aus [96] zusammengestellt und die Stärken der radiativen Resonanzen abgeschätzt, indem ein Wert  $S_r$  angegeben ist, welcher dem Produkt aus der Oszillatorstärke und der radiativen Rate entspricht. Dieser Wert ist einmal für eine angenommene isotrope Abstrahlung angegeben ( $S_r(4\pi)$ ) und dann mit dem genannten Faktor für die Detektionsrichtung multipliziert ( $S_r(90^\circ)$ ).

Der kleine Raumwinkel der Photonendetektion (siehe Kapitel 3.3.1) erlaubt nur die Messung starker Resonanzen im Bereich von  $S_r \approx 10^{13} \text{ s}^{-1}$ . Die Auswertung der Tabelle 5.3 zeigt, dass nur Linie 7 eine messbare Resonanzstärke für den radiativen Zerfall aufweist. Alle anderen Linien sind nach beiden theoretischen Berechnungen mindestens eine Größenordnung schwächer in genannter Raumrichtung.

Das gemessene Spektrum bestätigt die theoretischen Vorhersagen: lediglich Linie 7 wurde in dem untersuchten Energiebereich in signifikanter Stärke gemessen, welche in Abbildung 5.11 c dargestellt und ihre Resonanzenergie mit den verschiedenen Berechnungen aus Tabelle 5.2 verglichen ist. Wiederum sind es die RMPBT-Berechnungen [96] und die eigenen Rechnungen mit Hilfe von FAC, die die Linie am besten vorhersagen, genauso wie die MCDF-Rechnungen mit dem YODA-Code [41], die wie erwähnt für die Resonanzgruppe 6, 7 und 8 gute Übereinstimmungen zeigen im Gegensatz zu den vergleichsweise großen Abweichungen zu allen übrigen Resonanzen.

### 5.2.3 Detaillierte Überprüfung der theoretischen Berechnungen

Linie 7 ist in mehrfacher Hinsicht eine besondere Resonanz: zum einen ist sie die oben besprochene einzige messbare Resonanz der radiativen Relaxation des photoangeregten autoionisierenden Zwischenzustands, zum anderen scheint sie sich *vollständig* radiativ abzuregen, da auch bei intensiver Analyse des entsprechenden Energiebereichs kein signifikanter Anstieg an photoionisiertem Eisen  $\text{Fe}^{15+}$  gemessen werden konnte, wie auch Abbildung 5.12 verdeutlicht. Dort sind die Resonanzen des autoionisierenden und radiativen Zerfalls der Resonanzgruppe mit den Linien 6, 7 und 8 dargestellt.

Dies verdeutlicht die Bedeutung der hier zum ersten Mal realisierten Detektion beider Abregungskanäle. Nur so kann ein vollständiges Spektrum der *Photoabsorption* gemessen werden.

**Verzweigungsverhältnisse.** In Tabelle 5.4 sind die errechneten Autoionisationsraten diverser Modelle der drei eng benachbarten Resonanzlinien 6, 7 und 8 zusammengestellt und untereinander verglichen. Es soll eine Aussage getroffen werden, welche Berechnung diese ausschließlich radiative Relaxation von Linie 7 richtig vorhersagt. Da die verschiedenen Berechnungen der Raten sich zwar im gleichen Größenordnungsbereich bewegen, jedoch von Modell zu Modell im Detail unterschiedlich sind, bietet diese Tabelle zusätzlich eine relative Aussage über die Stärke des autoionisierenden Zerfallskanals von Linie 7, indem ein prozentualer Vergleich der Autoionisationsrate von Linie 7 zu den benachbarten Linien 6 und 8 gezogen wurde.

Dies wird verglichen mit einer relativen Aussage der experimentellen Obergrenze für eine Autoionisationsresonanz von Linie 7, indem die Unsicherheiten des Untergrunds in dem Bereich der Energie der Resonanz ins Verhältnis zu den benachbarten Linien gesetzt wurde.

Das Experiment sieht die obere Grenze der Autoionisation der Linie 7 bei ca. 3% gegenüber 6 und 8, was jedoch eine sehr vorsichtige obere Grenze darstellt.

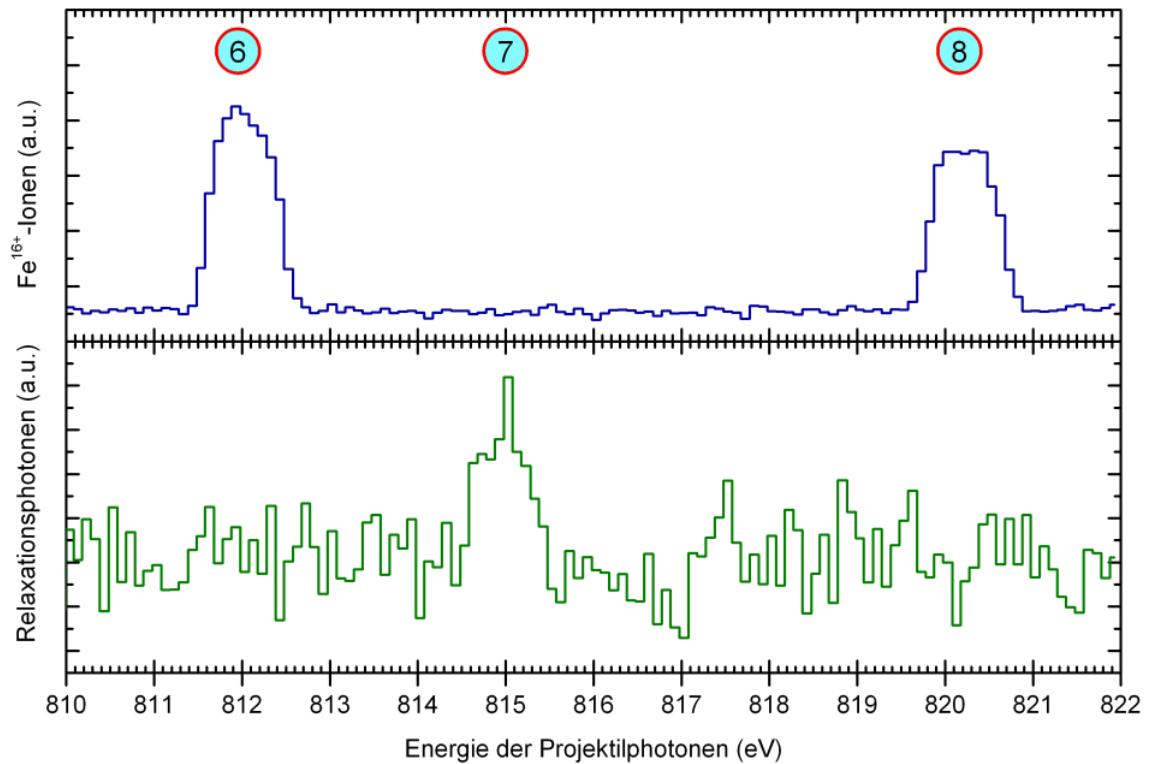


Abbildung 5.12: Resonanzlinien 6, 7 und 8 zur Diskussion der errechneten Zerfallsstärken diverser theoretischer Modelle.

Die tatsächliche wird weit darunter liegen, wie man in den Spektren in Abbildung 5.12 zweifelsfrei erkennen kann.

Die RMPBT-Rechnungen [96] machen die deutlichste Aussage, dass diese Linie nahezu nicht autoionisierend zerfällt, und auch die MCHF-Berechnungen (nichtrelativistische *Multiconfiguration Hartree-Fock*-Methode) mit dem Code von Cowan [41,52] sowie die MCDF-Rechnungen mit dem YODA-Code [41] sehen die Autoionisationsrate dieser Linie unter einem Prozent verglichen mit den benachbarten Linien. Dagegen ist diese Vorhersage bei den *Configuration Interaction*-Rechnungen nicht so klar: die eigenen Berechnungen mit Hilfe des FAC-Codes sehen zwar die Autoionisation der Linie 7 um eine Größenordnung geringer als die der Nachbarn, jedoch deutlich stärker als die anderen Berechnungen.

Fast gar nicht unterdrückt sieht die *Configuration Interaction*-Rechnung mit dem HULLAC-Paket diese Linie. Dieses Ergebnis überrascht, denn der Absorptionsstärkenvergleich zwischen den RMPBT- und HULLAC-Rechnungen in [96] attestiert HULLAC eine zumindest in der Größenordnung mit RMPBT übereinstimmende Genauigkeit. Die Originalpublikation [17] der HULLAC-Daten beinhaltet leider keine konkrete Angabe von Energien, Oszillatorstärken oder Raten für die Resonanzen. Die hier gezeigten Daten stammen daher aus [96], in welcher für die drei stärksten Absorptionsresonanzen pro Ladungszustand auch die Autoio-

Tabelle 5.4: Autoionisationsraten der Linien 6, 7 und 8 im Vergleich verschiedener Rechnungen. Daneben sind die prozentualen Verhältnisse der Linie 7 zu den Linien 6 und 8 angegeben

Rechnung	Ref.	Linie 6	Linie 7		Linie 8	
		$A_e^e$	$\leftarrow$ %	$A_e^e$	% $\rightarrow$	$A_e^e$
CI (FAC)	diese Arbeit	2,59[13]	12,6	3,26[12]	5,00	6,53[13]
RMBPT	[96]	2,11[13]	0,08	1,68[10]	0,04	4,03[13]
MCDF (YODA)	[41]	5,01[13]	0,40	2,00[11]	0,48	4,16[13]
MCHF (Cowan)	[41]	1,98[13]	0,35	6,90[10]	0,21	3,26[13]
CI (HULLAC)	[17, 96]	2,63[13]	52,9	1,39[13]	22,0	6,33[13]
Experiment	diese Arbeit		< 3		< 3	

nisationsraten aus den HULLAC-Rechnungen angegeben sind. Da in dieser Veröffentlichung sowohl in den Abbildungen als auch in der Diskussion vor allem von *Absorption* die Rede ist, die Raten jedoch für die *Autoionisation* angegeben sind, könnte vermutet werden, dass die HULLAC-Vergleichswerte möglicherweise die *totalen* Zerfallsraten und nicht ausschließlich die Autoionisation angeben, auch wenn diese in der entsprechenden Tabelle anders bezeichnet sind.

**Konfigurationsmischung.** Analog zu den Analysen des Beitrags der Konfigurationsmischung bei der resonanten Rekombination in Abschnitt 4.3.3 wird hier auch dieser Aspekt bei den Photoionisationsspektren der Linien 6, 7 und 8 getestet. Wiederum wurden theoretische Spektren mit FAC erzeugt, bei denen jeweils ein minimaler Konfigurationsmischungskoeffizient  $c_{\min}$  definiert wurde. Die Vergleiche mit den experimentellen Daten sind in Abbildung 5.13 gezeigt. Dabei wurde wie in den Auswertungen der Rekombination das theoretische Spektrum, bei welchem auch die kleinsten Konfigurationen eine Rolle spielen (hier das Spektrum mit  $c_{\min} = 10^{-5}$ ), anhand der stärksten Resonanz (Linie 6 bei  $\approx 812$  eV) auf die experimentellen Stärken normiert und diese Normierung für alle übrigen Darstellungen dieses Vergleichs angewandt.

Die Spektren werden ebenfalls erst ausreichend gut reproduziert, wenn auch Konfigurationen mit sehr kleinen Mischungsbeiträgen in die Rechnung einbezogen werden. Es fällt auf, dass ausgerechnet die diskutierte Linie 7 als einzige in dem Spektrum auftaucht, bei dem die Konfigurationsmischung deaktiviert ist ( $c_{\min} = 1$ ). Sie nimmt bei wenigen Mischungen an Stärke zu, doch wenn einige Konfigurationen mehr zur Mischung beitragen, also die Grenze abgesenkt wird, verliert diese Autoionisationsresonanz wieder an Stärke. Wie besprochen übertrifft sie jedoch weiterhin die untere Grenze der experimentell festgestellten Stärke für diese Linie. Auch ein Test mit  $c_{\min} = 10^{-10}$  veränderte das Spektrum nicht signifikant. Die Überschätzung der Linie 7 bleibt bei den FAC-Rechnungen

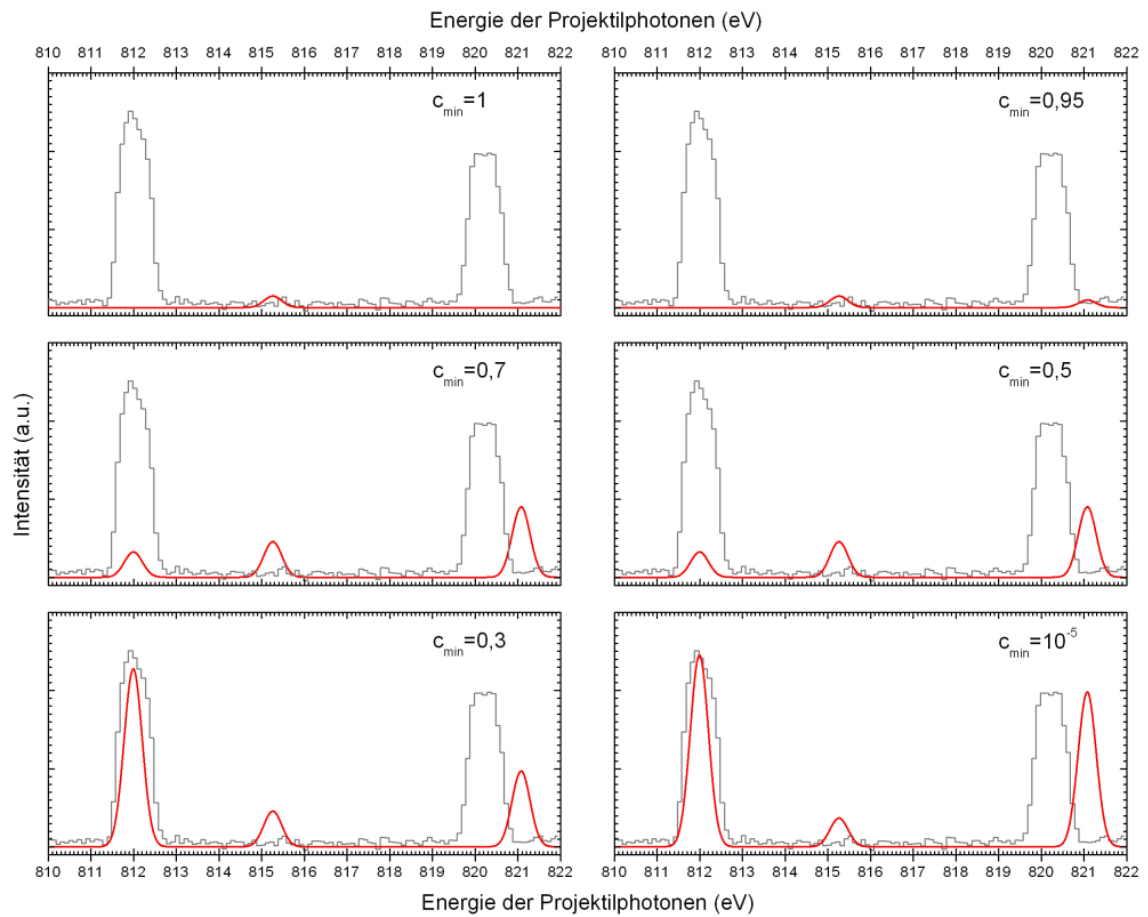


Abbildung 5.13: Bedeutung der Konfigurationsmischung bei der Berechnung der Photoionisation der Linien 6, 7 und 8. Dargestellt ist jeweils das experimentelle Spektrum im Vergleich mit theoretischen Spektren (FAC, diese Arbeit) unter Berücksichtigung verschiedener Grenzen für die Konfigurationsmischung  $c_{\min}$ .

bestehen.





# Kapitel 6

## Zusammenfassung und Ausblick

Die vorgelegte Arbeit beschäftigte sich mit der experimentellen Untersuchung von Elektronen-Korrelations-Effekten in hochgeladenen Ionen. Die Beobachtung dynamischer Prozesse, welche auf den Auger-Meitner-Effekt beruhen, erfolgte dabei in zwei unterschiedlichen Experimenten. So wurde in der ersten Gruppe der Experimente die resonante Elektron-Ion-Rekombination mit Anregungen der *K*-Schale in Helium- bis Sauerstoff-artigen Argon- und Eisen-Ionen und in der zweiten Gruppe der zur Rekombination zeitumgekehrte Prozess der resonanten Photoionisation in Natrium-artigen Eisen-Ionen erforscht. Die Analyse der Ergebnisse erfolgte anhand eigener Configuration Interaction-Rechnungen der Vorgänge sowie in der Literatur verfügbarer theoretischer Berechnungen.

Hierbei wurden die Target-Ionen in einer Elektronenstrahl-Ionenfalle, der transportablen FLASH-EBIT [71], erzeugt und mit Elektronen sowie Photonen kollidiert. Der Strahl mit Projektil-Elektronen für die Rekombinationsmessungen wurde in der EBIT selbst erzeugt, wobei durch die Anwendung einer neuen Methode zur Kühlung der Ionen eine hohe Energieschärfe der Kollisionsprozesse und damit die höchste Auflösung für Experimente dieser Art erreicht werden konnte. Für die Kollision der Ionen mit Photonen, die für die durchgeführten Experimente Energien im Bereich von 700 – 900 eV trugen, wurden die Projektilphotonen von der Synchrotron-Strahlungsquelle BESSY II in Berlin bereit gestellt, wo im Sommer 2010 die entsprechende Messkampagne durchgeführt wurde. Die theoretischen Berechnungen für die nach verschiedenen Aspekten differenzierten Analysen wurden mit Hilfe des Software-Pakets FLEXIBLE ATOMIC CODE [94] ausgeführt.

Die Untersuchungen zur resonanten Elektron-Ion-Rekombination zielte vor allem auf die systematische Charakterisierung der bisher nahezu ignorierten Inter-Schalen trielektronischen Rekombination (TR) im Energiebereich einiger keV ab. Es stellte sich eine überraschende Stärke dieser Effekte höherer Ordnung vor allem in Kohlenstoff-artigen Ionen heraus. Eine Diskussion ihrer Skalierung in Abhängigkeit der Kernladung des einfangenden Ions ergab, dass das Verhältnis der Stärken der trielektronischen Rekombination zum dielektronischen Prozess

erster Ordnung (DR) bei kleinerem  $Z$  deutlich zunimmt. Die TR kann in Ionen ab einer Kernladung von  $Z = 20$  die DR somit an Stärke übertreffen und die gesamte Rekombination dominieren. Intuitive Vermutungen, trielektronische Rekombination in diesem Energiebereich sei vernachlässigbar, wurden eindrucksvoll widerlegt.

Bei der Messung der resonanten Photoionisation konnten absolute Resonanzenergien einer Vielzahl von Übergängen in  $\text{Fe}^{15+}$  gemessen werden, was den bisher höchsten photoionisierten Ladungszustand darstellt. Die durchgeführte gemeinsame Detektion des autoionisierenden und radiativen Zerfallskanals der durch Photoabsorption angeregten Ionen eröffnete erstmals die Möglichkeit einer vollständigen Labor-Messung des Absorptionsspektrums starker Photoabsorptionslinien in diesem Ion, da sich einzelne dominante Resonanzen autoionisierend, andere nahezu ausschließlich radiativ abregen. Hier erlaubten Experimente mit zuvor durchgeführten Herangehensweisen im Falle der Photoionisationsmessung [189] oder der Resonanzspektroskopie [70] nur einen selektiven Blick auf das Absorptionsspektrum. Daneben stellen die Messungen des radiativen Zerfallskanals eine Resonanzspektroskopie an hochgeladenen Ionen in einem Energiebereich dar, welcher um über eine Größenordnung höher als bisher durchgeführte Experimente liegt.

Die Durchführung eigener theoretischer Berechnungen nach dem relativistischen Configuration Interaction Verfahren ermöglichte die selektive Analyse der gemessenen Spektren nach diversen Phänomenen. So konnte gezeigt werden, dass die Einbeziehung von Konfigurationen auch mit sehr geringen Beiträgen zur Konfigurationsmischung relevant ist, um die Resonanzen vor allem der Rekombination höherer Ordnung, aber auch die der Photoabsorption mit ausreichender Genauigkeit zu reproduzieren. Weiter demonstrierten die Analysen, dass relativistische Effekte wie die Breit-Wechselwirkung an Elektronen-Korrelations-Mechanismen höherer Ordnung wie der TR auch in mittelschweren Ionen überprüfbar sind. Entsprechende Untersuchungen an Rekombinationsresonanzen erster Ordnung erfordern dagegen sehr schwere Ionen als Targets und hohe Projektilenergien, um die Einflüsse der Breit-Wechselwirkung in messbarer Größenordnung zu beobachten.

Die Ergebnisse dieser Arbeit motivieren zu weiterführenden Untersuchungen der genannten Prozesse. So können weitere systematische Studien der  $KL$ - $LLL$ -TR neben den fundamentalen atomphysikalischen Fragestellungen der Elektronen-Korrelation neue Erkenntnisse für die Plasmaphysik liefern. Technische Plasmen, wie sie mit dem Ziel der Kernfusion generiert werden, benötigen ein vertieftes Verständnis der Elektron-Ion-Rekombinationsprozesse zu deren Diagnostik und Kontrolle, wobei man unter Vernachlässigung der TR-Prozesse teilweise weniger als die Hälfte der beteiligten Stärken im Blick hat. Die Berücksichtigung dieser Mechanismen könnte auch zur Lösung der offenen Fragen bezüglich der Opazitäts-Diskrepanzen in der Astrophysik beitragen, und so sollten

diese Prozesse intensiver studiert werden.

Weiterführende Experimente in diesem Bereich sind am Max-Planck-Institut für Kernphysik bereits geplant bzw. in der Durchführung. Hoffentlich werden auch Speicherring-Experimente diese Mechanismen in den Fokus nehmen.

Einen Schritt weiter ist man bereits bei der Fortsetzung der Photoabsorptionsexperimente. Die FLASH-EBIT hat nach den dargestellten BESSY-Experimenten bereits Messkampagnen an den neuesten Röntgen-Quellen – dem Freie-Elektronen-Laser LCLS und dem Positronen-Synchrotron PETRA III – erfolgreich bestritten, bei denen Resonanz-Laserspektroskopie und genauere Analysen der polarisierten Emission von Relaxationsphotonen durchgeführt wurden, indem mehrere Röntgen-Detektoren in verschiedenen Abstrahlungsrichtungen an die EBIT montiert wurden.

Dynamische Elektronen-Korrelations-Prozesse beschäftigen die Atomphysik intensiv, und gerade die hier dargelegten neuen Aspekte der Rekombinationsmessungen sind vielversprechende, vielseitige Herangehensweisen, die interessante Einblicke in die Quantendynamik atomarer Systeme in Zukunft bieten werden.



# Literaturverzeichnis

- [1] Lehrbücher der Experimentalphysik: [24,60,84].
- [2] Lehrbücher der Theoretischen Physik: [28,124,140].
- [3] AGGARWAL, K. M., AND KEENAN, F. P. Energy levels and radiative rates for inner shell transitions of Fe XVI. *Astronomy and Astrophysics* 463, 1 (2007), 399.
- [4] AGGARWAL, K. M., AND KEENAN, F. P. Effective collision strengths for inner shell transitions of Fe XVI. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 41, 1 (2008), 015701.
- [5] ARTEMYEV, A. N., SHABAEV, V. M., TH, AND SURZHYKOV, A. S. Negative-continuum dielectronic recombination into excited states of highly charged ions. *Physical Review A* 79 (2009), 032713.
- [6] AUGER, P. Sur l'effet photoélectrique composé. *Journale de Physique et Radium* 6 (1925), 205.
- [7] AYVAZYAN, V., BABOI, N., BÄHR, J., BALANDIN, V., BEUTNER, B., BRANDT, A., BOHNET, I., BOLZMANN, A., BRINKMANN, R., BROVKO, et al. First operation of a free-electron laser generating GW power radiation at 32 nm wavelength. *The European Physical Journal D - Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics* 37, 2 (2006), 297.
- [8] BADNELL, N. R. Dielectronic recombination of Fe<sup>22+</sup> and Fe<sup>21+</sup>. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* 19, 22 (1986), 3827.
- [9] BADNELL, N. R., BAUTISTA, M. A., BUTLER, K., DELAHAYE, F., MENDOZA, C., PALMERI, P., ZEIPPEN, C. J., AND SEATON, M. J. Updated opacities from the Opacity Project. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 360, 2 (2005), 458.
- [10] BADNELL, N. R., O'MULLANE, M. G., SUMMERS, H. P., ALTUN, Z., BAUTISTA, M. A., COLGAN, J., GORCZYCA, T. W., MITNIK, D. M., PINDZOLA, M. S., AND ZATSARINNY, O. Dielectronic recombination data for dynamic finite-density plasmas. *Astronomy and Astrophysics* 406, 3 (2003), 1151.

- [11] BAHCALL, J. N., BASU, S., PINSONNEAULT, M., AND SERENELLI, A. M. Helioseismological Implications of Recent Solar Abundance Determinations. *The Astrophysical Journal* (2005), 1049.
- [12] BAR-SHALOM, A. HULLAC, an integrated computer package for atomic processes in plasmas. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 71, 2-6 (2001), 169.
- [13] BAUMANN, P., BLUM, M., FRIEDRICH, A., GEYER, C., GRIESER, M., HOLZER, B., JAESCHKE, E., KRAMER, D., MARTIN, C., AND MATL, K. The Heidelberg Heavy Ion Test Storage Ring TSR. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 268, 2-3 (1988), 531.
- [14] BAUMANN, T. Persönliche Mitteilung. 2011.
- [15] BECKER, R., BRINZANESCU, O., AND STÖHLKER, TH. Limitation of EBIS/T Ion Yield by Radiative Recombination. *AIP Conference Proceedings* 572, 1 (2001), 119.
- [16] BECKER, R., AND KLEINOD, M. 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, 4 (1994), 1063.
- [17] BEHAR, E., SAKO, M., AND KAHN, S. M. Soft X-Ray Absorption by Fe<sup>0+</sup> to Fe<sup>15+</sup> in Active Galactic Nuclei. *The Astrophysical Journal* 563 (2001), 497.
- [18] BEILMANN, C. Beobachtung resonanter Elektroneneinfangprozesse höherer Ordnung in hochgeladenem Krypton. Diplomarbeit, Universität Heidelberg, 2008.
- [19] BEILMANN, C., CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R., MOKLER, P. H., AND ULLRICH, J. High resolution resonant recombination measurements using evaporative cooling technique. *Journal of Instrumentation* 5, 09 (2010), C09002.
- [20] BEILMANN, C., MOKLER, P. H., BERNITT, S., HARMAN, Z., KEITEL, C. H., POSTAVARU, O., ULLRICH, J., AND CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R. Higher-order resonant inter-shell electronic recombination for heavy highly charged ions. *Physica Scripta* 2011, T144 (2011), 014014.
- [21] BEILMANN, C., MOKLER, P. H., BERNITT, S., KEITEL, C. H., ULLRICH, J., CRESPO LÓPEZ URRUTIA, J. R., AND HARMAN, Z. Prominent Higher-Order Contributions to Electronic Recombination. *Physical Review Letters* 107 (2011), 143201.

- [22] BEILMANN, C., POSTAVARU, O., ARNTZEN, L. H., GINZEL, R., KEITEL, C. H., MÄCKEL, V., MOKLER, P. H., SIMON, M. C., TAWARA, H., TUPITSYN, I. I., ULLRICH, J., CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R., AND HARMAN, Z. Intershell trielectronic recombination with  $K$ -shell excitation in  $\text{Kr}^{30+}$ . *Phys. Rev. A* 80, 5 (2009), 050702.
- [23] BELL, R. H., AND SEATON, M. J. Dielectronic recombination. I. General theory. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* 18, 8 (1985), 1589.
- [24] BERGMANN, L., SCHAEFER, C., et al. *Lehrbuch der Experimentalphysik, Bände 1-8*. deGruyter.
- [25] BERNHARDT, D., BRANDAU, C., HARMAN, Z., KOZHUHAROV, C., MÜLLER, A., SCHEID, W., SCHIPPERS, S., SCHMIDT, E. W., YU, D., ARTEMYEV, A. N., TUPITSYN, I. I., BÖHM, S., BOSCH, F., CURRELL, F. J., FRANZKE, B., GUMBERIDZE, A., JACOBI, J., MOKLER, P. H., NOLDEN, F., SPILLMAN, U., STACHURA, Z., STECK, M., AND STÖHLKLER, TH. Breit interaction in dielectronic recombination of hydrogenlike uranium. *Physical Review A* 83, 2 (2011), 020701.
- [26] BERNITT, S. *Persönliche Mitteilung*. 2011.
- [27] BETHE, H. A. The Electromagnetic Shift of Energy Levels. *Physical Review* 72, 4 (1947), 339.
- [28] BETHE, H. A., AND SALPETER, E. E. *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms*, Springer, 1977.
- [29] BIEDERMANN, C., FÖRSTER, A., FUSSMANN, G., AND RADTKE, R. First results from the Berlin EBIT. *Physica Scripta* 1997, T73 (1997), 360.
- [30] BITTER, M., GU, M. F., VAINSHTEIN, L. A., BEIERSDORFER, P., BERTSCHINGER, G., MARCHUK, O., BELL, R., LEBLANC, B., HILL, K. W., JOHNSON, D., AND ROQUEMORE, L. New Benchmarks from Tokamak Experiments for Theoretical Calculations of the Dielectronic Satellite Spectra of Heliumlike Ions. *Physical Review Letters* 91 (2003), 265001.
- [31] BITTER, M., HSUAN, H., BUSH, C., COHEN, S., CUMMINGS, C. J., GREK, B., HILL, K. W., SCHIVELL, J., ZARNSTORFF, M., BEIERSDORFER, P., OSTERHELD, A., SMITH, A., AND FRAENKEL, B. Spectra of heliumlike krypton from Tokamak Fusion Test Reactor plasmas. *Physical Review Letters* 71, 7 (1993), 1007.
- [32] BLASCHE, K., BOHNE, D., FRANZKE, B., AND PRANGE, H. The SIS Heavy Ion Synchrotron Project. *IEEE Transactions on Nuclear Science* 32, 5 (1985), 2657.

- [33] BÖHM, S., ENULESCU, A., FRITIO, T., ORBAN, I., TASHENOV, S., AND SCHUCH, R. First results from the Stockholm Electron Beam Ion Trap. *Journal of Physics: Conference Series* 58, 1 (2007), 303.
- [34] BOLTZMANN, L. *Vorlesungen über Gastheorie*. BiblioBazaar, 2009.
- [35] BRANDAU, C., KOZHUHAROV, C., HARMAN, Z., MÜLLER, A., SCHIPPERS, S., KOZHEDUB, Y. S., BERNHARDT, D., BÖHM, S., JACOBI, J., SCHMIDT, E. W., MOKLER, P. H., BOSCH, F., KLUGE, H. J., STÖHLKER, TH., BECKERT, K., BELLER, P., NOLDEN, F., STECK, M., GUMBERIDZE, A., REUSCHL, R., SPILLMANN, U., CURRELL, F. J., TUPITSYN, I. I., SHABAEV, V. M., JENTSCHURA, U. D., KEITEL, C. H., WOLF, A., AND STACHURA, Z. Isotope Shift in the Dielectronic Recombination of Three-Electron Nd<sup>57+</sup>. *Physical Review Letters* 100, 7 (2008), 073201.
- [36] BRANDAU, C., KOZHUHAROV, C., MÜLLER, A., SHI, W., SCHIPPERS, S., BARTSCH, T., BÖHM, S., BÖHME, C., HOFFKNECHT, A., KNOPP, H., GRÜN, N., SCHEID, W., STEIH, T., BOSCH, F., FRANZKE, B., MOKLER, P. H., NOLDEN, F., STECK, M., STÖHLKER, TH., AND STACHURA, Z. Precise Determination of the  $2s_{1/2} - 2p_{1/2}$  Splitting in Very Heavy Lithium-like Ions Utilizing Dielectronic Recombination. *Physical Review Letters* 91, 7 (2003), 073202.
- [37] BREIT, G. The Fine Structure of He as a Test of the Spin Interactions of Two Electrons. *Physical Review* 36 (1930), 383.
- [38] BREIT, G. Derivation of Hyperfine Structure Formulas for One Electron Spectra. *Physical Review* 37 (1931), 51.
- [39] BREIT, G. Dirac's Equation and the Spin-Spin Interactions of Two Electrons. *Physical Review* 39 (1932), 616.
- [40] BRILLOUIN, L. A Theorem of Larmor and its Importance for Electrons in Magnetic Fields. *Physical Review* 67, 7-8 (1945), 260.
- [41] BRUCH, R., SAFRONOVA, U. I., SHLYAPTSEVA, A. S., NILSEN, J., AND SCHNEIDER, D. New comprehensive theoretical analysis of the doubly excited states of sodium-like iron. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 60, 4 (1998), 605.
- [42] BRYANS, P., KRECKEL, H., ROUEFF, E., WAKELAM, V., AND SAVIN, D. W. Molecular Cloud Chemistry and the Importance of Dielectronic Recombination. *The Astrophysical Journal* 694, 1 (2009), 286.
- [43] BURGESS, A. Dielectronic Recombination and the Temperature of the Solar Corona. *The Astrophysical Journal* 139 (1964), 776.



- [44] BURGESS, A. A General Formula for the Estimation of Dielectronic Recombination Coefficients in Low-Density Plasmas. *The Astrophysical Journal* 141 (1965), 1588.
- [45] CHEN, H., GU, M. F., BEHAR, E., BROWN, G. V., KAHN, S. M., AND BEIERSDORFER, P. Laboratory Measurements of High- $n$  Iron  $L$ -Shell X-Ray Lines. *The Astrophysical Journal Supplement Series* (2007), 319.
- [46] CHEN, H., GU, M. F., BEIERSDORFER, P., BOYCE, K. R., BROWN, G. V., KAHN, S. M., KELLEY, R. L., KILBOURNE, C. A., PORTER, F. S., AND SCOFIELD, J. H. Electron Impact Excitation Cross Section Measurement for  $n = 3$  to  $n = 2$  Line Emission in  $\text{Fe}^{17+}$  to  $\text{Fe}^{23+}$ . *The Astrophysical Journal* (2006), 653.
- [47] CHEN, M. H., AND SCOFIELD, J. H. Relativistic effects on angular distribution and polarization of dielectronic satellite lines of hydrogenlike ions. *Physical Review A* 52, 3 (1995), 2057.
- [48] CHEVALLIER, M., COHEN, C., CUE, N., DAUVERGNE, D., DURAL, J., GANGNAN, P., KIRSCH, R., L'HOIR, A., LELIÈVRE, D., LIBIN, J. F., MOKLER, P. H., POIZAT, J. C., PRINZ, H. T., RAMILLON, J. M., REMILLIEUX, J., CHOMAZ, P. R., ROZET, J. P., SANUY, F., SCHMAUS, D., STEPHAN, C., TOULEMONDE, M., VERNHET, D., AND WARCZAK, A. Upper-limit determination of resonant trielectronic recombination cross-section for krypton using crystal channeling. *Physical Review A* 61, 2 (2000), 022724.
- [49] COHEN, S. A., WERLEY, K. A., POST, D. E., BRAAMS, B. J., PERKINS, J. L., AND PEARLSTEIN, D. Two-dimensional fluid simulations of the ITER SOL plasma. *Journal of Nuclear Materials* 176-177 (1990), 909.
- [50] COMPTON, A. H. A Quantum Theory of the Scattering of X-rays by Light Elements. *Physical Review* 21 (1923), 483.
- [51] CORENO, M., AVALDI, L., CAMILLONI, R., PRINCE, K. C., DE SIMONE, M., KARVONEN, J., COLLE, R., AND SIMONUCCI, S. Measurement and ab initio calculation of the Ne photoabsorption spectrum in the region of the  $K$  edge. *Physical Review A* 59, 3 (1999), 2494.
- [52] COWAN, R. D. *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (Los Alamos Series in Basic and Applied Sciences, 3). University of California Press, 1981.
- [53] CRENSHAW, D. M., KRAEMER, S. B., AND GEORGE, I. M. Mass loss from the nuclei of active galaxies. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* 41, 1 (2003), 117.

- [54] CRESPO LÓPEZ URRUTIA, J. R., BRAUN, J., BRENNER, G., BRUHNS, H., LAPIERRE, A., GONZÁLEZ MARTÍNEZ, A. J., MIRONOV, V., SORIA ORTS, R., TAWARA, H., TRINCZEK, M., AND ULLRICH, J. Optimization of the charge state distribution of the ion beam extracted from an EBIT by dielectronic recombination. *Review of Scientific Instruments* 75, 5 (2004), 1560.
- [55] CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R., DORN, A., MOSHAMMER, R., AND ULLRICH, J. The Freiburg Electron Beam Ion Trap/Source Project FreEBIT. *Physica Scripta T80B* (1999), 502.
- [56] CUMMINGS, J., COHEN, S. A., HULSE, R., POST, D. E., REDI, M. H., AND PERKINS, J. Power radiated from ITER by impurities. *Journal of Nuclear Materials* 176-177 (1990), 916.
- [57] CURRELL, F. J. (Herausgeber), *The Physics of Multiply and Highly Charged Ions: Volume 1: Sources, Applications and Fundamental Processes*. Springer, 2003.
- [58] CURRELL, F. J., ASADA, J., ISHII, K., MINOH, A., MOTOHASHI, K., NAKAMURA, N., NISHIZAWA, K., OHTANI, S., OKAZAKI, K., SAKURAI, M., SHIRAIISHI, H., TSURUBUCHI, S., AND WATANABE, H. A New Versatile Electron-Beam Ion Trap. *Journal of the Physical Society of Japan* 65, 10 (1996), 3186.
- [59] DE FILIPPO, E., LANZANÒ, G., ROTHARD, H., AND VOLANT, C. Three-Electron Auger Process from Beam-Foil Excited Multiply Charged Ions. *Physical Review Letters* 100, 23 (2008), 233202.
- [60] DEMTRÖDER, W. *Experimentalphysik, Bände 1-4*. Springer.
- [61] DERE, K. P., LANDI, E., MASON, H. E., MONSIGNORI FOSSI, B. C., AND YOUNG, P. R. CHIANTI - an atomic database for emission lines. *Astronomy and Astrophysics Supplement Series* 125, 1 (1997), 149.
- [62] DIRAC, P. A. M. The Quantum Theory of the Emission and Absorption of Radiation. *Proceedings of the Royal Society A* 114 (1927), 243.
- [63] DIRAC, P. A. M. The Quantum Theory of the Electron. *Proceedings of the Royal Society A* 117V, 778 (1928).
- [64] DONETS, E. D. 25 years with EBIS. *Physica Scripta* 1997, T71 (1997), 5.
- [65] DUBAU, J., AND VOLONTE, S. Dielectronic recombination and its applications in astronomy. *Reports on Progress in Physics* 43, 2 (1980), 199.
- [66] DYALL, K. GRASP: A general-purpose relativistic atomic structure program. *Computer Physics Communications* 55, 3 (1989), 425.

- [67] EICHLER, J., AND MEYERHOF, W. E. *Relativistic Atomic Collisions*. Academic Press, 1995.
- [68] EINSTEIN, A. Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt. *Annalen der Physik* 322 (1905), 132.
- [69] EINSTEIN, A. Zur Elektrodynamik bewegter Körper. *Annalen der Physik* 17 (1905), 891.
- [70] EPP, S. W. *Röntgen-Laserspektroskopie hochgeladener Ionen in einer EBIT am Freie-Elektronen-Laser FLASH*. Dissertation, Universität Heidelberg, 2007.
- [71] EPP, S. W., CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R., BRENNER, G., MÄCKEL, V., MOKLER, P. H., TREUSCH, R., KUHLMANN, M., YURKOV, M. V., FELDHAUS, J., SCHNEIDER, J. R., WELLHÖFER, M., MARTINS, M., WURTH, W., AND ULLRICH, J. Soft X-Ray Laser Spectroscopy on Trapped Highly Charged Ions at FLASH. *Physical Review Letters* 98, 18 (2007), 183001.
- [72] EPP, S. W., CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R., SIMON, M. C., BAUMANN, T., BRENNER, G., GINZEL, R., GUERASSIMOVA, N., MÄCKEL, V., MOKLER, P. H., SCHMITT, B. L., TAWARA, H., AND ULLRICH, J. X-ray laser spectroscopy of highly charged ions at FLASH. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 43, 19 (2010), 194008.
- [73] FANO, U. Effects of Configuration Interaction on Intensities and Phase Shifts. *Physical Review* 124, 6 (1961), 1866.
- [74] FERMI, E. *Nuclear Physics: A Course Given by Enrico Fermi at the University of Chicago*, The University of Chicago Press.
- [75] FLAMBAUM, V. V., GRIBAKINA, A. A., GRIBAKIN, G. F., AND HARABATI, C. Electron recombination with multicharged ions via chaotic many-electron states. *Physical Review A* 66, 1 (2002), 012713.
- [76] FOLLATH, R., SCHMIDT, J. S., SIEWERT, F., HOLLDACK, K., ZESCHKE, T., FRENTRUP, W., SCHMITZ, D., AND SAWHNEY, K. J. S. Commissioning of the U49/2-PGM1 beamline. *AIP Conference Proceedings* 705, 1 (2004), 348.
- [77] FOLLATH, R., AND SENF, F. New plane-grating monochromators for third generation synchrotron radiation light sources. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 390, 3 (1997), 388.
- [78] FRANCK, J., AND HERTZ, G. Über Zusammenstöße zwischen Elektronen und Molekülen des Quecksilberdampfes und die Ionisierungsspannung

- desselben. *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft* 16 (1914), 457.
- [79] FRANZKE, B. The Heavy Ion Storage and Cooler Ring Project ESR at GSI. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 24-25 (1987), 18.
- [80] FRITZSCHE, S., SURZHYKOV, A., AND STÖHLKER, TH. Dominance of the Breit Interaction in the X-Ray Emission of Highly Charged Ions Following Dielectronic Recombination. *Physical Review Letters* 103 (2009), 113001.
- [81] FROESE, M. W. The TITAN Electron Beam Ion Trap: Assembly, Characterization, and First Tests. Master's thesis, University of Manitoba, 2006.
- [82] FUCHS, T., BIEDERMANN, C., RADTKE, R., BEHAR, E., AND DORON, R. Channel-specific dielectronic recombination of highly charged krypton. *Physical Review A* 58, 6 (1998), 4518.
- [83] GAIL, M., GRÜN, N., AND SCHEID, W. Angular distribution of radiation emitted after resonant transfer and excitation. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 31, 20 (1998), 4645.
- [84] GERTHSEN, C., *et al.* *Gerthsen Physik*, Springer, 2010.
- [85] GILLASPY, J. D. Highly charged ions. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 34, 19 (2001), R93.
- [86] GILLASPY, J. D., ROBERTS, J. R., BROWN, C. M., AND FELDMAN, U. The NIST EBIT: A progress report. *AIP Conference Proceedings* 274, 1 (1993), 682.
- [87] GONZÁLEZ MARTÍNEZ, A. J. *Quantum Interference in the Dielectronic Recombination of Heavy Highly Charged Ions*. Dissertation, Universität Heidelberg, 2005.
- [88] GONZÁLEZ MARTÍNEZ, A. J., CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R., BRAUN, J., BRENNER, G., BRUHNS, H., LAPIERRE, A., MIRONOV, V., SORIA ORTS, R., TAWARA, H., TRINCZEK, M., ULLRICH, J., ARTEMYEV, A. N., HARMAN, Z., JENTSCHURA, U. D., KEITEL, C. H., SCOFIELD, J. H., AND TUPITSYN, I. I. Benchmarking high-field few-electron correlation and QED contributions in  $\text{Hg}^{75+}$  to  $\text{Hg}^{78+}$  ions. I. Experiment. *Physical Review A* 73, 5 (2006), 052710.
- [89] GONZÁLEZ MARTÍNEZ, A. J., CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R., BRAUN, J., BRENNER, G., BRUHNS, H., LAPIERRE, A., MIRONOV, V., SORIA ORTS, R., TAWARA, H., TRINCZEK, M., ULLRICH, J., AND SCOFIELD, J. H. State-Selective Quantum Interference Observed in the Recombination of Highly

- Charged  $\text{Hg}^{75+ \dots 78+}$  Mercury Ions in an Electron Beam Ion Trap. *Physical Review Letters* 94, 20 (2005), 203201.
- [90] GRANT, I. P., MAYERS, D. F., AND PYPHER, N. C. Studies in multiconfiguration Dirac-Fock theory. I. The low-lying spectrum of Hf III. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* 9, 16 (1976), 2777.
- [91] GRANT, I. P., MCKENZIE, B. J., NORRINGTON, P. H., MAYERS, D. F., AND PYPHER, N. C. An atomic multiconfigurational Dirac-Fock package. *Computer Physics Communications* 21, 2 (1980), 207.
- [92] GU, M. F. Indirect X-Ray Line-Formation Processes in Iron *L*-Shell Ions. *The Astrophysical Journal* (2003), 1241.
- [93] GU, M. F. Wavelengths of  $2l \rightarrow 3l'$  Transitions in *L*-Shell Ions of Iron and Nickel: A Combined Configuration Interaction and Many-Body Perturbation Theory Approach. *The Astrophysical Journal Supplement Series* (2005), 105.
- [94] GU, M. F. The Flexible Atomic Code. *Canadian Journal of Physics* (2008), 675.
- [95] GU, M. F., BEIERSDORFER, P., BROWN, G. V., CHEN, H., THORN, D. B., AND KAHN, S. M. Wavelength Measurements of Ni *L*-Shell Lines between 9 and 15 Å. *The Astrophysical Journal* (2007), 1172.
- [96] GU, M. F., HOLCZER, T., BEHAR, E., AND KAHN, S. M. Inner-Shell Absorption Lines of Fe VI–Fe XVI: A Many-Body Perturbation Theory Approach. *The Astrophysical Journal* 641, 2 (2006), 1227.
- [97] HÄNSCH, T. W., AND WALTHER, H. Laser spectroscopy and quantum optics. *Reviews of Modern Physics* 71 (1999), S242.
- [98] HANSEN, S. B., FOURNIER, K. B., FAENOV, A. YA, MAGUNOV, A. I., PIKUZ, T. A., SKOBELEV, I. YU, FUKUDA, Y., AKAHANE, Y., AOYAMA, M., INOUE, N., UEDA, H., AND YAMAKAWA, K. Measurement of  $2l-nl'$  x-ray transitions from  $\approx 1\mu\text{m}$  Kr clusters irradiated by high-intensity femtosecond laser pulses. *Physical Review E* 71 (2005), 016408.
- [99] HARMAN, Z. Persönliche Mitteilung.
- [100] HARTREE, D. R. Approximate Wave Functions and Atomic Field for Mercury. *Physical Review* 46, 8 (1934), 738–743.
- [101] HAZEWINDUS, N., AND VAN NIEUWLAND, J. M. Wien Filter. US Patent 4019989, 1977.

- [102] HEISENBERG, W. Zur Quantentheorie der Multiplettstruktur und der anomalen Zeemaneffekte. *Zeitschrift für Physik A: Hadrons and Nuclei* 32, 1 (1925), 841.
- [103] HERRMANN, G. Optical Theory of Thermal Velocity Effects in Cylindrical Electron Beams. *Journal of Applied Physics* 29, 2 (1958), 127.
- [104] HIBBERT, A. CIV3 – A general program to calculate configuration interaction wave functions and electric-dipole oscillator strengths. *Computer Physics Communications* 9, 3 (1975), 141.
- [105] HIBBERT, A., GLASS, R., AND FROESE FISCHER, C. A general program for computing angular integrals of the Breit-Pauli Hamiltonian. *Computer Physics Communications* 64, 3 (1991), 455.
- [106] HINTERBERGER, F. *Physik der Teilchenbeschleuniger und Ionenoptik* Springer, 2008.
- [107] HOLCZER, T., BEHAR, E., AND KASPI, S. Is the Fe *M*-Shell Absorber Part of the Outflow in Active Galactic Nuclei? *The Astrophysical Journal* 632, 2 (2005), 788.
- [108] IGLESIAS, C. A., AND ROGERS, F. J. Updated OPAL Opacities. *The Astrophysical Journal* 464 (1996), 943.
- [109] INDELICATO, P., AND DESCLAUX, J. P. MCDFGME, a Multiconfiguration Dirac Fock and General Matrix Elements Program. <http://dirac.spectro.jussieu.fr/mcdf> (2005).
- [110] INDELICATO, P., AND DESCLAUX, J. P. The MCDFGME Multiconfiguration Dirac-Fock Program. V2010.
- [111] JACKSON, J. D. *Klassische Elektrodynamik*. deGruyter, 2006.
- [112] JAESCHKE, E., INGWERSEN, H., REPNOW, R., WALCHER, T., HUCK, B., AND KOLB, B. First operation of the Heidelberg heavy-ion postaccelerator. *Nuclear Instruments and Methods* 157, 1 (1978), 195.
- [113] JANEV, R. K., PRESNYAKOV, L. P., AND SHEVELKO, V. P. *Physics of Highly Charged Ions*. Springer, 1985.
- [114] KAVANAGH, A. P., WATANABE, H., LI, Y. M., O’ROURKE, B. E., TOBIYAMA, H., NAKAMURA, N., MCMAHON, S., YAMADA, C., OHTANI, S., AND CURRELL, F. J. Dielectronic recombination in He-like, Li-like, and Be-like highly charged ions in the *KLL* and *KLM* manifolds. *Physical Review A* 81, 2 (2010), 022712.

- [115] KIM, Y. S., AND PRATT, R. H. Direct radiative recombination of electrons with atomic ions: Cross sections and rate coefficients. *Physical Review A* 27, 6 (1983), 2913.
- [116] KISIELIUS, R., HIBBERT, A., FERLAND, G. J., FOORD, M. E., ROSE, S. J., VAN HOOF, P. A. M., AND KEENAN, F. P. Inner-shell photoexcitation of Fe XV and Fe XVI. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 344, 3 (2003), 696.
- [117] KJELDSSEN, H. Photoionization cross sections of atomic ions from merged-beam experiments. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 39, 21 (2006), R325.
- [118] KLOTS, C. E. Evaporative cooling. *The Journal of Chemical Physics* 83, 11 (1985), 5854.
- [119] KNAPP, D. A., BEIERSDORFER, P., CHEN, M. H., SCOFIELD, J. H., AND SCHNEIDER, D. Observation of Interference between Dielectronic Recombination and Radiative Recombination in Highly Charged Uranium Ions. *Physical Review Letters* 74, 1 (1995), 54.
- [120] KNOLL, G. F. *Radiation Detection and Measurement*, Wiley, 2000.
- [121] KRAEMER, S. B., FERLAND, G. J., AND GABEL, J. R. The Effects of Low-Temperature Dielectronic Recombination on the Relative Populations of the Fe M-Shell States. *The Astrophysical Journal* (2004), 556.
- [122] KRAMERS, H. A. On the theory of X-ray absorption and of the continuous X-ray spectrum. *Philosophical Magazine Series 6* 46, 275 (1923), 836.
- [123] LAMB, W. E., AND RETHERFORD, R. C. Fine Structure of the Hydrogen Atom by a Microwave Method. *Physical Review* 72, 3 (1947), 241.
- [124] LANDAU, L. D., LIFSCHITZ, E. M., *et al.* *Lehrbuch der theoretischen Physik, Bände 1-10*, Deutsch (Harri), Jan.
- [125] LANDI, E., AND GU, M. F. Iopscience - atomic data for high-energy configurations in Fe XVII-XXIII. *The Astrophysical Journal* (2006), 1171.
- [126] LAPIERRE, A., BRODEUR, M., BRUNNER, T., ETTENAUER, S., GALLANT, A. T., SIMON, V., GOOD, M., FROESE, M. W., CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R., AND DELHEIJ, P. The TITAN EBIT charge breeder for mass measurements on highly charged short-lived isotopes – First online operation. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 624, 1 (2010), 54.

- [127] LEVINE, M. A., MARRS, R. E., BARDSLEY, J. N., BEIERSDORFER, P., BENNETT, C. L., CHEN, M. H., COWAN, T., DIETRICH, D., HENDERSON, J. R., KNAPP, D. A., OSTERHELD, A., PENETRANTE, B. M., SCHNEIDER, M. B., AND SCOFIELD, J. H. The use of an electron beam ion trap in the study of highly charged ions. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 43, 3 (1989), 431.
- [128] LEVINE, M. A., MARRS, R. E., HENDERSON, J. R., KNAPP, D. A., AND SCHNEIDER, M. B. The Electron Beam Ion Trap: A New Instrument for Atomic Physics Measurements. *Physica Scripta* 1988, T22 (1988), 157.
- [129] LIANG, G. Y., CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R., BAUMANN, T. M., EPP, S. W., GONCHAR, A., LAPIERRE, A., MOKLER, P. H., SIMON, M. C., TAWARA, H., MÄCKEL, V., YAO, K., ZHAO, G., ZOU, Y., AND ULLRICH, J. Experimental Investigations of Ion Charge Distributions, Effective Electron Densities, and Electron-Ion Cloud Overlap in Electron Beam Ion Trap Plasma Using Extreme-Ultraviolet Spectroscopy. *The Astrophysical Journal* 702, 2 (2009), 838.
- [130] LIANG, G. Y., WHITEFORD, A. D., AND BADNELL, N. R. R-matrix inner-shell electron-impact excitation of  $\text{Fe}^{15+}$  including Auger-plus-radiation damping. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 41, 23 (2008), 235203.
- [131] LINDGREN, I. The Rayleigh-Schrodinger Perturbation and the Linked-Diagram Theorem for a Multi-Configurational Model Space. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* 7, 18 (1974), 2441.
- [132] LOTZ, W. An empirical formula for the electron-impact ionization cross-section. *Zeitschrift für Physik A: Hadrons and Nuclei* 206, 2 (1967), 205.
- [133] LOTZ, W. Electron-impact ionization cross-sections and ionization rate coefficients for atoms and ions from hydrogen to calcium. *Zeitschrift für Physik A: Hadrons and Nuclei* 216, 3 (1968), 241.
- [134] MÄCKEL, V. Spektroskopische Untersuchung dielektronischer Resonanzen von hochgeladenen Ionen. Diplomarbeit, Universität Heidelberg, 2006.
- [135] MÄCKEL, V., KLAWITTER, R., BRENNER, G., CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R., AND ULLRICH, J. Laser spectroscopy on forbidden transitions in trapped highly charged  $\text{Ar}^{13+}$  ions. *Physical Review Letters* 107 (2011), 143002.
- [136] MASSEY, H. S. W., AND BATES, D. R. The properties of neutral and ionized atomic oxygen and their influence on the upper atmosphere. *Reports on Progress in Physics* 9, 1 (1942), 62.



- [137] MAXWELL, J. C. A Dynamical Theory of the Electromagnetic Field. *Philosophical Transactions of the Royal Society* 155 (1865), 459.
- [138] MCNEIL, B. Free electron lasers: First light from hard X-ray laser. *Nature Photonics* 3, 7 (2009), 375.
- [139] MEITNER, L. Über die  $\beta$ -Strahl-Spektren und ihren Zusammenhang mit der  $\gamma$ -Strahlung. *Zeitschrift für Physik A: Hadrons and Nuclei* 11, 1 (1922), 35.
- [140] MESSIAH, A. *Quantenmechanik, Bände 1 und 2*, deGruyter.
- [141] MILLIKAN, R. A. The Isolation of an Ion, a Precision Measurement of its Charge, and the Correction of Stokes's Law. *Physical Review (Series I)* 32 (1911), 349.
- [142] MOHR, P. J., PLUNIEN, G., AND SOFF, G. QED corrections in heavy atoms. *Physics Reports* 293, 5-6 (1998), 227.
- [143] MOKLER, P. H., AND STÖHLKER, TH. The Physics of Highly Charged Heavy Ions Revealed by Storage/Cooler Rings. *Advances in Atomic, Molecular and Optical Physics* 37 (1996), 297.
- [144] MÖLLER, T., AND FALTA, J. (Herausgeber), *Forschung mit Synchrotronstrahlung: Eine Einführung in die Grundlagen und Anwendungen*, Vieweg+Teubner, 2010.
- [145] MOTT, N. F., AND MASSEY, H. S. W. *The Theory of Atomic Collisions*. Clarendon Press, 1933.
- [146] MÜLLER, A. Elektron-Ion Collisions: Fundamental Processes in the Focus of Applied Research. *Advances in Atomic, Molecular and Optical Physics* 55 (2008), 293.
- [147] MÜLLER, A. Resonance phenomena in electron-ion and photon-ion collisions. *Journal of Physics: Conference Series* 194, 1 (2009), 012002.
- [148] MÜLLER, A., HOFMANN, G., WEISSBECKER, B., STENKE, M., TINSCHERT, K., WAGNER, M., AND SALZBORN, E. Correlated two-electron transitions in electron-impact ionization of  $\text{Li}^+$  ions. *Physical Review Letters* 63, 7 (1989), 758.
- [149] MÜLLER, C., VOITKIV, A. B., CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R., AND HARMAN, Z. Strongly Enhanced Recombination via Two-Center Electronic Correlations. *Physical Review Letters* 104, 23 (2010), 233202.

- [150] NAKAMURA, N., KAVANAGH, A. P., WATANABE, H., SAKAUE, H. A., LI, Y., KATO, D., CURRELL, F. J., AND OHTANI, S. Evidence for Strong Breit Interaction in Dielectronic Recombination of Highly Charged Heavy Ions. *Physical Review Letters* 100, 7 (2008), 073203.
- [151] NATIONAL INSTITUTE FOR STANDARDS AND TECHNOLOGY. <http://physics.nist.gov/cuu/Constants/index.html> (2011).
- [152] NIERING, M., HOLZWARTH, R., REICHERT, J., POKASOV, P., UDEM, TH., WEITZ, M., HÄNSCH, T. W., LEMONDE, P., SANTARELLI, G., ABGRALL, M., LAURENT, P., SALOMON, C., AND CLAIRON, A. Measurement of the hydrogen  $1S$ - $2S$  transition frequency by phase coherent comparison with a microwave cesium fountain clock. *Physical Review Letters* 84, 24 (2000), 5496.
- [153] OPPENHEIMER, J. R. On the Quantum Theory of the Capture of Electrons. *Physical Review* 31, 3 (1928), 349.
- [154] ORBAN, I., LOCH, S. D., BÖHM, S., AND SCHUCH, R. Recombination Rate Coefficients of Be-like Si. *The Astrophysical Journal* 721, 2 (2010), 1603.
- [155] OSTERBROCK, D. E., AND FERLAND, G. J. *Astrophysics Of Gaseous Nebulae And Active Galactic Nuclei*, University Science Books, 2005.
- [156] PÁLFFY, A., SCHEID, W., AND HARMAN, Z. Theory of nuclear excitation by electron capture for heavy ions. *Physical Review A* 73 (2006), 012715.
- [157] PAULI, W. Über den Zusammenhang des Abschlusses der Elektronengruppen im Atom mit der Komplexstruktur der Spektren. *Zeitschrift für Physik* 31 (1925), 765.
- [158] PENETRANTE, B. M., BARDSLEY, J. N., DEWITT, D., CLARK, M., AND SCHNEIDER, D. Evolution of ion-charge-state distributions in an electron-beam ion trap. *Physical Review A* 43, 9 (1991), 4861.
- [159] PENETRANTE, B. M., BARDSLEY, J. N., LEVINE, M. A., KNAPP, D. A., AND MARRS, R. E. Evaporative cooling of highly charged dysprosium ions in an enhanced electron-beam ion trap. *Physical Review A* 43, 9 (1991), 4873.
- [160] PERCIVAL, I. C., AND SEATON, M. J. The Polarization of Atomic Line Radiation Excited by Electron Impact. *Philosophical Transactions of the Royal Society A* 251, 990 (1958), 113.
- [161] PIERCE, J. R. Rectilinear electron flow in beams. *Journal of Applied Physics* 11, 8 (1940), 548.

- [162] PINDZOLA, M. S., BADNELL, N. R., AND GRIFFIN, D. C. Dielectronic recombination between hyperfine levels of the ground state of  $\text{Bi}^{82+}$ . *Physical Review A* 45, 11 (1992), R7659.
- [163] PLANCK, M. Zur Theorie des Gesetzes der Energieverteilung im Normalspektrum. *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft* 2, 17 (1900), 237.
- [164] POISSON, S. D. Remarques sur une équation qui se présente dans la théorie des attractions des sphéroïdes. *Bulletin de la société philomatique de Paris t.3* (1812), 588.
- [165] RADTKE, R., BIEDERMANN, C., FUCHS, T., FUSSMANN, G., AND BEIERSDORFER, P. Measurement of the radiative cooling rates for high-ionization species of krypton using an electron beam ion trap. *Physical Review E* 61, 2 (2000), 1966.
- [166] RAMAN, C. V., AND KRISHNAN, K. S. The Negative Absorption of Radiation. *Nature* 122, 3062 (1928), 12.
- [167] ROBBINS, D. L., YA, PIKUZ, T. A., CHEN, H., BEIERSDORFER, P., MAY, M. J., DUNN, J., REED, K. J., AND SMITH, A. J. Measurement of the polarization of the  $k$ -shell resonance line emission of  $\text{S}^{13+}$  and  $\text{S}^{14+}$  at relativistic electron beam energies. *Physical Review A* 70 (2004), 022715.
- [168] ROGERS, F. J., AND IGLESIAS, C. A. Astrophysical Opacity. *Science* 263, 5143 (1994), 50.
- [169] RUDOLPH, J. Persönliche Mitteilung. 2011.
- [170] RUTHERFORD, E. The Scattering of  $\alpha$  and  $\beta$  Particles by Matter and the Structure of the Atom. *Philosophical Magazine* 21 (1911), 669.
- [171] SAKO, M., KAHN, S. M., BEHAR, E., KAASTRA, J. S., BRINKMAN, A. C., BOLLER, T., PUCHNAREWICZ, E. M., STARLING, R., LIEDAHL, D. A., CLAVEL, J., AND SANTOS-LLEO, M. Complex resonance absorption structure in the X-ray spectrum of IRAS 13349+2438. *Astronomy and Astrophysics* 365, 1 (2001), L168.
- [172] SAKURAI, J. J. *Modern Quantum Mechanics*, Addison Wesley, 1993.
- [173] SAVIN, D. . W., BEHAR, E., KAHN, S. . M., GWINNER, G., SAGHIRI, A. A., SCHMITT, M., GRIESER, M., REPNOW, R., SCHWALM, D., WOLF, A., BARTSCH, T., MÜLLER, A., SCHIPPERS, S., BADNELL, N. R., CHEN, M. H., AND GORCZYCA, T. W. Dielectronic Recombination (via  $N = 2 \rightarrow N' = 2$  Core Excitations) and Radiative Recombination of Fe XX:

- Laboratory Measurements and Theoretical Calculations. *The Astrophysical Journal Supplement Series* (2002), 337.
- [174] SAWHNEY, K. J. S., SENF, F., AND GUDAT, W. PGM beamline with constant energy resolution mode for U49-2 undulator at BESSY-II. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 467-468 (2001), 466.
- [175] SCHIPPERS, S. Astrophysical relevance of storage-ring electron-ion recombination experiments. *Journal of Physics: Conference Series* 163, 1 (2009), 012001.
- [176] SCHIPPERS, S., LESTINSKY, M., MÜLLER, A., SAVIN, D. W., SCHMIDT, E. W., AND WOLF, A. Dielectronic Recombination Data for Astrophysical Applications: Plasma Rate-Coefficients for  $\text{Fe}^{q+}$  ( $q=7-10, 13-22$ ) and  $\text{Ni}^{25+}$  Ions from Storage-Ring Experiments. *International Review of Atomic and Molecular Physics* 1 (2010), 109.
- [177] SCHMIDT, M., ZSCHORNACK, G., GROSSMANN, F., HELLER, R., KENTSCH, U., KRELLER, M., LANDGRAF, S., OVSYANNIKOV, V. P., AND ULLMANN, F. Report on the current developments and experiments of the Dresden EBIT System. *Journal of Physics: Conference Series* 72, 1 (2007), 012020.
- [178] SCHNELL, M., GWINNER, G., BADNELL, N. R., BANNISTER, M. E., BÖHM, S., COLGAN, J., KIESLICH, S., LOCH, S. D., MITNIK, D., MÜLLER, A., PINDZOLA, M. S., SCHIPPERS, S., SCHWALM, D., SHI, W., WOLF, A., AND ZHOU, S. G. Observation of Trielectronic Recombination in Be-like Cl Ions. *Physical Review Letters* 91, 4 (2003), 04300.
- [179] SCHRÖDINGER, E. Quantisierung als Eigenwertproblem. *Ann. Phys.* 384, 4 (1926), 361.
- [180] SCHRÖDINGER, E. Quantisierung als Eigenwertproblem. *Ann. Phys.* 384, 6 (1926), 489.
- [181] SCHRÖDINGER, E. Quantisierung als Eigenwertproblem. *Ann. Phys.* 385, 13 (1926), 437.
- [182] SCHRÖDINGER, E. Quantisierung als Eigenwertproblem. *Ann. Phys.* 386, 18 (1926), 109.
- [183] SCHUCH, R., LINDROTH, E., MADZUNKOV, S., FOGLE, M., MOHAMED, T., AND INDELICATO, P. Dielectronic Resonance Method for Measuring Isotope Shifts. *Physical Review Letters* 95 (2005), 183003.
- [184] SCHWARZ, M. Photoionisation von neonartigem Argon in einer Elektronenstrahl-Ionenfalle. Diplomarbeit, Universität Heidelberg, 2009.

- [185] SCHWARZKOPF, O., FOLLATH, R., AND SCHMIDT, J. S. U49/2-PGM1 - Datenblatt, erhältlich über Internetpräsenz [213]. (2003).
- [186] SHERRILL, C., AND SCHAEFER, H. *The Configuration Interaction Method: Advances in Highly Correlated Approaches, Advances in Quantum Chemistry* 34. (1999) 143.
- [187] SIKLER, G., GINZEL, R., SIMON, M. C., AND CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R. Erfindungsanmeldung: Compact Combined Electrostatic 2D Steerer-Lens and Beam Profile Monitor for Charged Particles. Max-Planck-Institut für Kernphysik, 2009.
- [188] SILVER, J. D., VARNEY, A. J., MARGOLIS, H. S., BAIRD, P. E. G., GRANT, I. P., GROVES, P. D., HALLETT, W. A., HANDFORD, A. T., HIRST, P. J., HOLMES, A. R., HOWIE, D. J. H., HUNT, R. A., NOBBS, K. A., ROBERTS, M., STUDHOLME, W., WARK, J. S., WILLIAMS, M. T., LEVINE, M. A., DIETRICH, D. D., GRAHAM, W. G., WILLIAMS, I. D., O'NEIL, R., AND ROSE, S. J. The Oxford electron-beam ion trap: A device for spectroscopy of highly charged ions. *Review of Scientific Instruments* 65, 4 (1994), 1072.
- [189] SIMON, M. C. *Photoionisation hochgeladener Ionen durch weiche Röntgenstrahlung in einer Elektronenstrahl-Ionenfalle*. Dissertation, Universität Heidelberg, 2010.
- [190] SIMON, M. C., CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R., BEILMANN, C., SCHWARZ, M., HARMAN, Z., EPP, S. W., SCHMITT, B. L., BAUMANN, T. M., BEHAR, E., BERNITT, S., FOLLATH, R., GINZEL, R., KEITEL, C. H., KLAWITTER, R., KUBIČEK, K., MÄCKEL, V., MOKLER, P. H., REICHARDT, G., SCHWARZKOPF, O., AND ULLRICH, J. Resonant and Near-Threshold Photoionization Cross Sections of  $\text{Fe}^{14+}$ . *Physical Review Letters* 105, 18 (2010), 183001.
- [191] SIMON, M. C., SCHWARZ, M., EPP, S. W., BEILMANN, C., SCHMITT, B. L., HARMAN, Z., BAUMANN, T. M., MOKLER, P. H., BERNITT, S., GINZEL, R., HIGGINS, S. G., KEITEL, C. H., KLAWITTER, R., KUBIČEK, K., MÄCKEL, V., ULLRICH, J., AND CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R. Photoionization of  $\text{N}^{3+}$  and  $\text{Ar}^{8+}$  in an electron beam ion trap by synchrotron radiation. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 43, 6 (2010), 065003.
- [192] SIMON, M. C., SCHWARZ, M., SCHMITT, B. L., BEILMANN, C., EPP, S. W., BAUMANN, T. M., KUBICEK, K., GINZEL, R., HIGGINS, S. G., KLAWITTER, R., MÄCKEL, V., BERNITT, S., MOKLER, P. H., ULLRICH, J., AND CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R. Photoionization of ions in arbitrary charge states by synchrotron radiation in an electron beam ion trap. *Journal of Physics: Conference Series* 194, 1 (2009), 012009.

- [193] SPIELER, H. *Semiconductor Detector Systems (Semiconductor Science and Technology)*. Oxford University Press, 2005.
- [194] STEINBRÜGGE, R. F. Weiterentwicklung eines Geschwindigkeitsfilters zur Beobachtung ladungsändernder Prozesse hochgeladener Ionen. Diplomarbeit, Universität Heidelberg, 2010.
- [195] SUCHER, J. Foundations of the relativistic theory of many-electron atoms. *Physical Review A* 22 (1980), 348.
- [196] SURZHYKOV, A. Photoexcitation and subsequent radiative decay - Persönliche Mitteilung. 2011.
- [197] TEAM, O. P. *The Opacity Project, Vol. 1 and Vol. 2*, Taylor & Francis, 1995, 1997.
- [198] UEHLING, E. A. Polarization Effects in the Positron Theory. *Physical Review* 48 (1935), 55.
- [199] WATANABE, H., CURRELL, F. J., KURAMOTO, H., OHTANI, S., O'ROURKE, B. E., AND TONG, X. M. Electron impact ionization of hydrogen-like molybdenum ions. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 35, 24 (2002), 5095.
- [200] WEISSKOPF, V. Über die Selbstenergie des Elektrons. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* 89, 1 (1934), 27.
- [201] WEST, J. B. Photoionization of atomic ions. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 34, 18 (2001), R45.
- [202] WICHMANN, E. H., AND KROLL, N. M. Vacuum Polarization in a Strong Coulomb Field. *Physical Review* 101 (1956), 843.
- [203] WIDMANN, K. *High-Resolution Spectroscopic Diagnostics of Very High-Temperature Plasmas in the Hard X-ray Regime*. Dissertation, Technische Universität Graz, 1999.
- [204] WIDMANN, K., BEIERSDORFER, P., DECAUX, V., ELLIOTT, S. R., KNAPP, D., OSTERHELD, A., BITTER, M., AND SMITH, A. Studies of He-like krypton for use in determining electron and ion temperatures in very-high-temperature plasmas. *Review of Scientific Instruments* 66, 1 (1995), 761.
- [205] WÖFLI, W., STOLLER, CH., BONANI, G., SUTER, M., AND STÖCKLI, M. Two-electron-one-photon transitions in heavy-ion collisions. *Physical Review Letters* 35 (1975), 656.

- [206] ZHI-MIN, H., JIA-MIN, Y., JI-YAN, Z., TUO, Z., BAO-HAN, Z., YAO-NAN, D., ZHI-JIAN, Z., BIN, D., YUE-MING, L., AND JUN, Y. Measurement of the *KLL* dielectronic recombination resonances in He-like to C-like Kr ions. *Chinese Physics Letters* 26, 3 (2009), 033401.
- [207] ZHONG, J. Y., WANG, C., ZHANG, J., LU, X., ZHAO, G., ZENG, J. L., GU, M. F., AND WANG, S. J. Driver-pulse configuration of the nickel-like Ta x-ray laser at 4.48 nm. *Physical Review A* 70 (2004), 053803.
- [208] ZHU, X., LIU, Y., WANG, X., LIU, Y., GUO, P., LU, D., ZHANG, X., HU, W., HE, M., AND LILJEBY, L. Status of the Shanghai EBIT. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 235, 1-4 (2005), 509.
- [209] ZIMMERER, P., GRUN, N., AND SCHEID, W. Scaling of relativistic Auger rates with  $Z$  for ions with two electrons. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 24, 11 (June 1991), 2633+.
- [210] ZOU, Y., CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R., AND ULLRICH, J. Observation of dielectronic recombination through two-electron–one-photon correlative stabilization in an electron-beam ion trap. *Physical Review A* 67, 4 (2003), 042703.
- [211] ZSCHORNACK, G., KRELLER, M., OVSYANNIKOV, V. P., GROSSMAN, F., KENTSCH, U., SCHMIDT, M., ULLMANN, F., AND HELLER, R. Compact electron beam ion sources/traps: Review and prospects. *Review of Scientific Instruments* 79, 2 (2008), 02A703.
- [212] Products, <http://www.colutron.com/products/kit/kit.htm>. Colutron Research Corporation, Boulder, CO, USA, 2010.
- [213] Helmholtz-Zentrum Berlin.  
Internetpräsenz: <http://www.helmholtz-berlin.de>.
- [214] MCP Delay Line Detector Manual. RoentDek Handels GmbH, Kelkheim-Ruppertshain.
- [215] The ATR19 and ATR19-2 Manual. RoentDek Handels GmbH, Kelkheim-Ruppertshain.
- [216] LabVIEW-Grundlagen. National Instruments Corporation, Austin, Texas, USA, 2005.
- [217] MPA-3 Multiparameter Data Acquisition System - User Manual. FAST Com-Tec GmbH, Oberhaching, 2010.

- [218] GLP Series Planar - HPGe Low-Energy Detector - Product Configuration Guide. Ortec Advanced Measurement Technologz, Inc, Oak Ridge, TN, USA
- [219] IGLET and IGLET-X - HPGe Detectors for Low and Very-Low Energy X Rays - Product Configuration Guide. Ortec Advanced Measurement Technologz, Inc, Oak Ridge, TN, USA
- [220] Overview of Semiconductor Photon Detectors. Ortec Advanced Measurement Technologz, Inc, Oak Ridge, TN, USA



# Abkürzungen, Bezeichnungen und Konventionen

Im Folgenden sind in dieser Arbeit häufig verwendete Abkürzungen, Bezeichnungen und Konventionen aufgeführt.

## Abkürzungen

Bei der Beschreibung der Experimente und der Theorie werden eine Reihe von Abkürzungen verwendet, die hier zur Erläuterung zusammengestellt werden.

## Physikalische Konstanten und Variablen

$A_e^a$	Elektronen-Einfangrate
$A_e^e$	Elektronen-Emissionsrate
$A_p^a$	Photonen-Absorptionsrate
$A_p^e$	Photonen-Emissionsrate
$A^{q+}$	Ion mit der Ladung $q+$ (wobei $A$ eine Variable für das Elementsymbol ist)
$\alpha$	<i>meist</i> : Feinstrukturkonstante, $\alpha = 7,2973525698(24) \cdot 10^{-3}$ [151]
$B_{ij}$	Breit-Operator
$c$	Lichtgeschwindigkeit, $c = 2,99792458 \cdot 10^8$ m/s [151]
$c_i$	Mischungskoeffizient für Konfigurationen
$d$	als Index: Zwischenzustand
$e$	Elementarladung [141], $e = -1,602176565(35) \cdot 10^{-19}$ C [151]
$h$	Plancksches Wirkungsquantum [163], $h = 6,62606957(29) \cdot 10^{-34}$ Js [151]

$\hbar$	$h/2\pi$
$E_{res}$	Resonanzenergie für die Absorption von Photonen bzw. den Einfang von Elektronen
$f$	als Index: Endzustand
$f_e^{a(i \rightarrow d)}$	gewichtete Elektronen-Einfangstärke
$f_p^{a(i \rightarrow d)}$	gewichtete Oszillatorstärke für Photonenabsorption
$\gamma$	Photon
$H$	Hamilton-Operator
$i$	als Index: <i>meist</i> : Ausgangszustand <i>selten</i> : laufender Index
$j, J$	Gesamtdrehimpuls $j = l + s$ eines Elektrons bzw. einer Konfiguration
$l, L$	Drehimpulsquantenzahl eines Elektrons bzw. einer Konfiguration
$m, M$	magnetische Quantenzahl eines Elektrons bzw. einer Konfiguration
$n$	(1) Hauptquantenzahl (2) Ordnung eines Prozesses
$\nu$	Frequenz eines Photons
$\psi$	Wellenfunktion
$\Psi$	quantenmechanischer Zustand
$q$	Ladung eines Ions in $e$
$r$	radialer Abstand von einer Strahlachse
$r_{DT}$	Driftröhren-Radius
$r_e$	Radius des Elektronenstrahls
$R_{nl}(r)$	Radialfunktionen
$s, S$	Spin eines Elektrons bzw. einer Konfiguration
$V_{be}$	Beschleunigungs-Potential
$V_{DT}$	Driftröhren-Potential
$V_{rl}$	Raumladungspotential
$W_{e,p}$	Winkelverteilungsfunktion für die Photoemission nach Anregung durch Elektroneneinfang bzw. Photonenabsorption
$Y_{lm}(\theta, \phi)$	Kugelflächenfunktionen

**Prozesse, Methoden und Anlagen**

ADC	<i>Analog to Digital Converter</i> Bauteil zur Digitalisierung von Analogen Messsignalen
BESSY	<i>Berliner Elektronenspeicherring-Gesellschaft für Synchrotronstrahlung</i> , als <i>BESSY II</i> : Synchrotron-Strahlungsquelle bei HZB
CI	<i>Configuration Interaction</i> , Methode zur Berechnung der Atomstruktur
DESY	<i>Deutsches Elektronen-Synchrotron</i> Forschungszentrum in Hamburg
DR	<i>Dielektronische Rekombination</i>
EBIT	<i>Electron Beam Ion Trap</i> , engl. für Elektronenstrahl-Ionenfalle
FAC	FLEXIBLE ATOMIC CODE <i>CI-Software-Paket</i>
FEL	<i>Freie-Elektronen-Laser</i>
FLASH	<i>Freie-Elektronen-Laser Hamburg</i> bei DESY
HULLAC	HEBREW UNIVERSITY LAWRENCE LIVERMORE ATOMIC CODE <i>CI-Software-Paket</i>
HZB	<i>Helmholtz-Zentrum Berlin</i> für Materialien und Energie
LCLS	<i>Lineac Coherent Light Source</i> Freie-Elektronen-Laser bei SLAC
LLNL	<i>Lawrence Livermore National Laboratory</i> Forschungszentrum in Livermore, CA, USA
MCDF	<i>Multiconfiguration Dirac-Fock</i> , Methode zur Berechnung der Atomstruktur
MCP	<i>Multi Channel Plates</i> , engl. für viel-Kanal-Platten (hier: Schriben mit Elektronenvervielfacher-Röhrchen)
MPA	<i>Multiparameter Analyzer</i> Datenaufnahmesystem von <i>FAST ComTec</i> , verwendet in der Version <i>MPA-3</i>
MPIK	<i>Max-Planck-Institut für Kernphysik</i> in Heidelberg
PETRA	<i>Positron-Elektron-Tandem-Ring-Anlage</i> als <i>PETRA III</i> : Synchrotron-Strahlungsquelle bei DESY
PHA	<i>Pulse Height Analysis</i> Datenaufnahmemethode in <i>MPA-3</i> mit Pulshöhenanalyse
PI	<i>Photoionisation</i> hier: resonante Photoionisation
PSD	<i>Position Sensitive Detector</i> , engl. für ortsauflösender Detektor

QR	<i>Quadruelektronische Rekombination</i>
ROI	<i>Region Of Interest</i> , ausgewählter Bereich der Daten
RMBPT	<i>Relativistic Many Body Perturbation Theory</i> , störungstheoretische Methode zur Berechnung der Atomstruktur
SLAC	urspr.: <i>Stanford Linear Accelerator Center</i> , heute: <i>SLAC National Accelerator Laboratory</i> , Forschungszentrum in Menlo Park, CA, USA
SVA	<i>Sample Voltage Analysis</i> Datenaufnahmemethode in <i>MPA-3</i> für kontinuierliche Spannungssignale
TDC	<i>Time to Digital Converter</i> Datenaufnahmemethode in <i>MPA-3</i> für Zeitsignale
TITAN	<i>TRIUMF's Ion Trap for Atomic and Nuclear Science</i> Ionenfallen-Anlage bei TRIUMF
TR	<i>Trielektronische Rekombination</i>
TRIUMF	<i>Tri University Meson Facility</i> Forschungszentrum in Vancouver, BC, Canada

## Bezeichnungen

Im Text der Arbeit werden stellenweise spezielle Fachtermini gebraucht, welche vor allem technische Anlagen oder Bauteile beschreiben und in dem Fachgebiet, in welchem die Experimente durchgeführt wurden, üblich sind. Diese werden beim ersten Auftreten im Text erläutert und eingeführt, sollen hier aber nochmals zusammengestellt werden. Es wird jeweils der Begriff genannt mit einer kurzen Erklärung und der Seitenzahl, auf welchem der Begriff eingeführt wird.

<b>Begriff</b>	<b>Erklärung</b>	<b>Seite</b>
<i>Beamline</i>	Strahlrohr einer Synchrotron-Strahlungsquelle	44
<i>Bender</i>	Elektrostatischer Ablenker für Strahlen geladener Teilchen	53
<i>Driftröhre</i>	Ringelektrode als ionenoptisches Bauteil zur elektrostatischen Beschleunigung geladener Teilchen	34
<i>listfile</i>	Datei des Datenaufnahmesystems <i>MPA-3</i> , welche die Rohdaten des Experiments in binärer Kodierung enthält	61

## Konventionen

### Bezeichnung der Anregungs- und Abregungsprozesse

Die Bildung der angeregten Zustände der untersuchten Gesamtprozesse geschieht durch die resonante Absorption von Photonen oder den resonanten Einfang von Elektronen. Beim Elektroneneinfang handelt es sich strenggenommen *nicht* um einen absoluten Absorptionsprozess, da das Elektron zwar von dem Ion in dieses aufgenommen wird, jedoch seinen Charakter als Elektron behält und im Ion fortbestehen bleibt. Daher ist im Text bei diesem Vorgang meist von *Einfang* anstatt von *Absorption* eines Elektrons die Rede.

Aus Gründen der Konsistenz vor allem in der allgemeinen Beschreibung der physikalischen Vorgänge wird jedoch an manchen Stellen auch für den Elektroneneinfang die Beschreibung „Absorption“ gebraucht, damit in einem Wort unabhängig von der Art des absorbierten oder eingefangenen Projektils der Vorgang beschrieben werden kann. Dies gilt vor allem für Formelzeichen, welche für entsprechenden Vorgänge stehen:

An diese Formelzeichen wird als *hochgestellter Index* der Vorgang spezifiziert mit einem  $a$  für die Absorption bzw. den Einfang des Projektils und mit einem  $e$  für die Emission des jeweiligen Projektils bei der Abregung. An manchen Stellen ist daneben noch die Reihenfolge der Zustände angegeben, um die intuitive Lesbarkeit zu erhöhen, auch wenn die Angabe des Vorgangs ausreichend wäre. So steht der hochgestellte Index  $a(i \rightarrow d)$  für die Absorption des Projektils, welche das Ion vom Zustand  $i$  in den Zustand  $d$  befördert. Welches Projektil den spezifizierten Vorgang initiiert, ist als *tiefgestellter Index* angegeben. Hier bezeichnet  $e$  ein Elektron und  $p$  ein Photon.

Als Beispiel sind hier die Emissionsrate für Photonen  $A_p^e$  und die Übergangsstärke für die Absorption von Elektronen  $f_e^{a(i \rightarrow d)}$  genannt.

### Farbcodierung

In den graphischen Darstellungen der experimentellen Ergebnisse wird zur Verdeutlichung mancher Prozesse ein Farbcode eingesetzt, der jedoch je nach Aussage der Graphik verschiedene Bedeutungen haben kann. Dies sind im Wesentlichen drei Gruppen von Codierungen:

**Ladungszustände.** In den Resonanzspektren der Rekombinationsmessungen sind meist Resonanzen mehrerer Ladungszustände gemeinsam dargestellt und mit theoretischen Daten verglichen. Um die Ladungszustände zu unterscheiden, wird folgender Farbcode angewandt, der sich an der jeweiligen isoelektronischen Sequenz orientiert: rot für Helium, grün für Lithium, blau für Beryllium, orange für Bor, Violett für Kohlenstoff, cyan für Stickstoff und ocker für Sauerstoff. Dieser Farbcode findet sich in den Abbildungen 4.6, 4.7, 4.8, 4.9, 4.12 und 4.13.

**Rekombinationsordnungen.** Wird in einem Spektrum der resonanten Rekombination nach der Ordnung des Prozesses unterschieden, wird die Farbe blau für DR, rot für TR und grün für QR verwendet. Anwendung findet dieser Farbcode in den Abbildungen 2.3, 4.6, 4.7, 4.10, 4.11 und 4.15.

**Theorievergleiche.** Die Spektren der resonanten Photoionisation werden mit diversen theoretischen Berechnungen für die Resonanzenergien verglichen, welche sich nach der Farbe der Positionsangabe im Spektrum unterscheiden. So wird folgender Code verwendet: grün für FAC (eigene Rechnungen), weinrot für RMBPT, blau für YODA, orange für GRASP, violett für AUTOSTRUCTURE und cyan für CIV3. In den Abbildungen 5.9, 5.10 und 5.11 ist diese Codierung zu finden.

# Veröffentlichungen

In dieser Liste sind Fachartikel aufgeführt, welche mit den Experimenten dieser Dissertation in Zusammenhang stehen und in internationalen referierten Fachzeitschriften erschienen sind. Weitere Veröffentlichungen der Ergebnisse dieser Arbeit sind in Vorbereitung und werden in Kürze unter anderem bei *The Astrophysical Journal* und *Physical Review A* eingereicht werden.

## Veröffentlichungen zur resonanten Absorption energiereicher Elektronen

- **BEILMANN, C., MOKLER, P. H., BERNITT, S., KEITEL, C. H., ULLRICH, J., CRESPO LÓPEZ URRUTIA, J. R., AND HARMAN, Z.**  
Prominent Higher-Order Contributions to Electronic Recombination  
*Physical Review Letters* 107 (2011), 143201.
- **BEILMANN, C., MOKLER, P. H., BERNITT, S., HARMAN, Z., KEITEL, C. H., POSTAVARU, O., ULLRICH, J., AND CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R.**  
Higher-order resonant inter-shell electronic recombination for heavy highly charged ions  
*Physica Scripta T144* (2011), 014014.
- **BEILMANN, C., CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R., MOKLER, P. H., AND ULLRICH, J.**  
High resolution resonant recombination measurements using evaporative cooling technique  
*Journal of Instrumentation* 5 (2010), C09002.
- **BEILMANN, C., POSTAVARU, O., ARNTZEN, L. H., GINZEL, R., KEITEL, C. H., MÄCKEL, V., MOKLER, P. H., SIMON, M. C., TAWARA, H., TUPITSYN, I., ULLRICH, J., CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R., AND HARMAN, Z.**  
Intershell trielectronic recombination with *K*-shell excitation in  $\text{Kr}^{30+}$   
*Phys. Rev. A* 80 (2009), 050702.

## Veröffentlichungen zur resonanten Absorption energiereicher Photonen

- SIMON, M. C., CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R., **BEILMANN, C.**, SCHWARZ, M., HARMAN, Z., EPP, S. W., SCHMITT, B. L., BAUMANN, T. M., BEHAR, E., BERNITT, S., FOLLATH, R., GINZEL, R., KEITEL, C. H., KLAWITTER, R., KUBIČEK, K., MÄCKEL, V., MOKLER, P. H., REICHARDT, G., SCHWARZKOPF, O., AND ULLRICH, J.  
Resonant and Near-Threshold Photoionization Cross Sections of Fe<sup>14+</sup>  
*Physical Review Letters* 105 (2010), 183001.
- SIMON, M. C., SCHWARZ, M., EPP, S. W., **BEILMANN, C.**, SCHMITT, B. L., HARMAN, Z., BAUMANN, T. M., MOKLER, P. H., BERNITT, S., GINZEL, R., HIGGINS, S. G., KEITEL, C. H., KLAWITTER, R., KUBIČEK, K., MÄCKEL, V., ULLRICH, J., AND CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R.  
Photoionization of N<sup>3+</sup> and Ar<sup>8+</sup> in an electron beam ion trap by synchrotron radiation  
*Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 43 (2010), 065003.
- SIMON, M. C., SCHWARZ, M., SCHMITT, B. L., **BEILMANN, C.**, EPP, S. W., BAUMANN, T. M., KUBICEK, K., GINZEL, R., HIGGINS, S. G., KLAWITTER, R., MÄCKEL, V., BERNITT, S., MOKLER, P. H., ULLRICH, J., AND CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R.  
Photoionization of ions in arbitrary charge states by synchrotron radiation in an electron beam ion trap  
*Journal of Physics: Conference Series* 194 (2009), 012009.

*Anmerkung:* Bei diesen Veröffentlichungen handelt es sich um die Präsentation der Ergebnisse der Strahlzeit bei BESSY II in den Jahren 2008 und 2009. Die Resultate der Strahlzeit im Jahr 2010, welche in dieser Dissertation dargestellt sind, werden in Kürze veröffentlicht werden.



# Erklärung

Ich versichere, dass ich diese Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.

Heidelberg, den 19. Dezember 2011

Christian Beilmann