

**Fakultät für Physik und Astronomie
Universität Heidelberg**

Bachelorarbeit in Physik
eingereicht von

Maximilian Michael Winterer

geboren in Altötting (Deutschland)

2021

**Inbetriebnahme eines Czerny-Turner-Spektrometers
für Untersuchungen an einer
Elektronenstrahlionenfalle
und
Vermessen optischer Übergänge
in hochgeladenen Xenonionen**

Diese Bachelorarbeit wurde durchgeführt von Maximilian Michael Winterer am
Max Planck Institut für Kernphysik in Heidelberg
unter der Aufsicht von
Prof. Dr. José R. Crespo López-Urrutia

Abstract

This work deals with the measurement of electronic transitions in highly charged ions in the optical range in an electron beam ion trap (EBIT). This thesis is split into two main parts: First, a Czerny-Turner-Spectrometer was put into operation and calibrated, in order to attach it to a small EBIT. The second part consists of the measurement and assignment of optical transitions in highly charged Xe-ions. Estimations showed that transitions resulting from Xe^{13+} to Xe^{36+} were found. Precise analysis in the range from Xe^{30+} to Xe^{34+} was done. Previously known transitions have been reconfirmed and also new lines were found.

Diese Arbeit widmet sich der Vermessung von elektronischen Übergängen in hochgeladenen Ionen im optischen Bereich in einer Elektronenstrahlionenfalle (EBIT). Vor diesem Hintergrund ist die folgende Arbeit zweigeteilt: Als Erstes wurde ein Czerny-Turner-Spektrometer in Betrieb genommen und kalibriert, um es an eine kleine EBIT anzuschließen. Der zweite Teil befasst sich mit dem Vermessen und Zuordnen von optischen Übergängen in hochgeladenen Xe-Ionen. Abschätzungen ergaben, dass Übergänge in Ionen von Xe^{13+} bis hin zu Xe^{36+} gefunden wurden. Eine genauere Zuordnung konnte im Bereich Xe^{30+} bis Xe^{34+} erfolgen. Bereits bekannte Übergänge wurden erneut bestätigt und auch neue Linien wurden gefunden.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
2	Theorie: Elektronische Übergänge	10
2.1	Wasserstoffähnliche Atome	11
2.2	Feinstrukturaufspaltung	12
2.3	Mehrelektronensysteme	13
2.4	Spin-Bahn-Kopplung	14
2.5	Das Wigner-Eckart-Theorem	15
2.6	Zeeman-Aufspaltung	16
2.7	Magnetische Dipolübergänge	18
2.8	Flexible Atomic Code	19
3	Experiment	20
3.1	EBIT	20
3.1.1	Aufbau	20
3.1.2	Wechselwirkungen in der Falle	22
3.2	Grundlagen des optischen Strahlengangs	23
3.2.1	Linse	24
3.2.2	Spiegel	25
3.3	Das Czerny-Turner-Spektrometer	30
3.3.1	Reflexionsgitter	31
3.3.2	Funktionsweise des CT-Spektrometers	33
3.3.3	CCD-Kamera	35
3.4	Entscheidungen bei der Durchführung des Aufbaus	36
3.4.1	Elektronik	38
3.4.2	Optik	40
4	Messungen und Fehler mit Auswertung	44
4.1	Kalibration des Spektrometers	44
4.2	Vermessen von Xenon an der Heidelberg-EBIT	63

5	Analyse und Diskussion	73
5.1	Eigenschaften des Spektrometers	73
5.2	Ergebnisse zu Xenon	74
5.2.1	Zuordnung der Linie bei 792,4890 nm und Identifizierung der be- kannten Linien	75
5.2.2	Zuordnung der Linie bei 730,26 nm	75
5.2.3	Zuordnung der Linie bei 633,69 nm	76
5.2.4	Zuordnung der beiden unbekannt Linien	76
5.2.5	Zuordnung der Linie bei 555,99 nm	77
5.2.6	Zuordnung der Linie bei 598,59 nm	79
5.2.7	Zusammenfassung der Zuordnung der Linien	82
6	Zusammenfassung und Ausblick	84
7	Danksagung	86
8	Anhang	90

1 Einleitung

Dass weißes Licht nicht einfach nur weiß ist, war schon lange bekannt. Schon Kinder kennen das Phänomen, dass Regenbögen am Himmel zu sehen sind, wenn es regnet und gleichzeitig die Sonne scheint. Eine Erklärung des Phänomens wurde jedoch erstmals durch Isaac Newton im Jahr 1666 gefunden, und in den Jahren 1671 und 1672 publiziert. So war Newton in der Lage, Licht (das durch ein Loch in der Abdunklung seines Fensters fiel) mithilfe eines Prismas in seine einzelnen Bestandteile aufzuspalten. Zudem fand er durch weitere Tests, dass die resultierenden Farben des Lichts in dem Licht enthalten sein mussten, und nicht durch das Prisma erzeugt wurden. Damit war die Spektroskopie gegründet (Damit ist hier die Aufspaltung von Licht in seine Bestandteile und die anschließende Analyse des Resultats gemeint). [21]

Die nächsten großen Fortschritte in der Spektroskopie gab es dann durch Dr. Joseph von Fraunhofer, der in seinem Bericht über die Gesetze des Lichts darlegt, wie die zwei grundlegenden, bis heute gängigen Arten der Spektroskopie funktionieren: Brechung des Lichts durch ein Prisma wie bei Newton, und Brechung des Lichts durch ein Gitter. Zudem war es ihm gelungen noch einen Schritt weiter zu gehen: Er konnte Absorptionslinien im Spektrum der Sonne finden und diese sogar mit Spektren von Elementen abgleichen, indem er die jeweiligen Elemente zum Anregen in eine Flamme hielt. Damit war eine Basis für zwei große Dinge gelegt: Erstens konnten Elemente in den Oberflächen von Sternen identifiziert werden. Zweitens wurde damit (noch weit vor den ersten Grundzügen der Quantenmechanik) bereits eines der wichtigsten quantenmechanischen Phänomene experimentell gefunden: die aus diskreten Energielevel resultierenden diskreten Emissionslinien in Atomen. [19]

Der heutige Stand der Dinge ist bereits extrem weit über diese Erkenntnisse von Newton und Fraunhofer hinaus: Die Quantenmechanik als Erklärung für dieses und ähnliche Phänomene wurde eingeführt, die Spektren von Atomen sind weitestgehend bekannt, die Zusammensetzungen von Sternen durch Spektroskopie zu Analysieren ist im Vergleich zu damals um ein vielfaches leichter geworden. Die Motivation für diese Arbeit

und die dafür verwendeten Methoden bleiben fast dieselben. Diese Arbeit soll einen Beitrag zu den Spektren hochgeladener Ionen (HCI) liefern. Zum Aufnehmen der Spektren wird mit einem Czerny-Turner-Spektrometer gearbeitet. Dieses Spektrometer beruht auf der konstruktiven und destruktiven Interferenz von Licht durch ein Gitter, genau wie bei Fraunhofer. Ein Unterschied ergibt sich in der Art der Gitter, wie im Theorieteil in Unterabschnitt 3.3.1 erklärt wird. Auch wenn die Zusammensetzung der äußersten Schicht von Sternen heute nicht mehr so rätselhaft ist, so sind doch noch viele Teile des Universums in ihrer Zusammensetzung weniger klar. In astrophysikalischen Wolken beispielsweise geben Atome aus verschiedenen Gründen, z.B. Photoionisation, schnell viele ihrer Elektronen ab, und werden somit zu HCIs. Die Spektren von HCIs sind nicht dieselben, wie die der zugehörigen neutralen Atome, was deren Bestimmung erfordert. Die Spektren von HCIs sind weitestgehend unerforscht, wie beispielsweise ein kurzer Blick in die, zu diesem Thema recht leer wirkende, NIST-Datenbank (National Institute of Standards and Technology-Datenbank) zeigt. Für Zuordnungen werden auch die relativen Intensitäten der Linien anstatt nur die Energie der Linie selbst relevant. [9]

Es gibt jedoch noch weitere Argumente um in Arbeiten wie dieser die Arbeit von Fraunhofer zu Spektren von Atomen fortzusetzen. In dieser Arbeit wird Xenon als HCI betrachtet. Xenon weist viele stabile Isotope auf, wie aus Nuklidkarten wie in Quelle [1] hervorgeht. Damit stellt Xenon eine hervorragende Möglichkeit, um nach Isotopenshifts in den elektronischen Übergängen zu suchen, dar. Die Grundidee ist dabei die folgende: Angenommen Neutronen im Kern von Atomen wirken über eine fünfte Kraft (jenseits des Standardmodells) mit Elektronen in der Schale, dann führt dies zu Energieshifts in den energetischen Levels der Elektronen. Die Folge sind energetischen Verschiebungen in den elektronischen Übergängen, und damit Verschiebungen der Linien im Spektrum der emittierten Photonen. Eine solche Wechselwirkung könnte dann durch ein neues Teilchen vermittelt werden, das z.B. mit Dunkler Materie assoziiert werden könnte. Da Xenon viele stabile Isotope besitzt, können diese Isotope auf Verschiebungen der Linien in den Spektren zueinander untersucht und damit Rückschlüsse auf Wechselwirkungen zwischen Neutronen und Elektronen gezogen werden (Dabei muss zuvor natürlich die Verschiebung der Linien durch das Variieren des Kernradius und der Masse in den Isotopen herausgerechnet werden). Der Vorteil HCIs gegenüber neutraler Atome ist der, dass die Elektronen (die für die elektronischen Übergänge zuständig sind) in HCIs deutlich stärker gebunden sind, als die in neutralen Atomen, für die elektronischen Übergänge zuständigen, Elektronen. Damit sind die Elektronen in HCIs auch deutlich näher am Kern, sodass eventuelle Wechselwirkungen als stärker angenommen werden können. Und

darüber hinaus: sollte die Kraft sehr kurzreichweitig sein, so könnte man sie womöglich nur in den innersten Schalen spüren. Das macht hochgeladene Xenonionen zu einem guten Testkandidaten für diese Isotopenshifts und für daraus resultierende Hinweise auf eine fünfte Kraft, wenn die elektronischen Übergänge präzise vermessen werden. [15]

Schließlich noch eine letzte, wichtige Motivation für die Untersuchung von hochgeladenen Xenonionen und HCIs allgemein: Mit präzise gemessenen Übergängen, kann man diese gut auf Variationen in der Feinstrukturkonstante α untersuchen. Diese Konstante beschreibt die Stärke der Kopplung zwischen geladenen Teilchen und einem elektromagnetischem Feld, die wichtigste Wechselwirkung in der Atomphysik. Bis zum heutigen Stand wurde im Rahmen der möglichen Genauigkeit noch keine Variation in α nachgewiesen. Für genauere Tests sollen nun auch HCIs zum Einsatz kommen. Aufgrund der vielen möglichen Ladungszustände und aufgrund der vielen möglichen Ausgangsatome bestehen viele Tuningmöglichkeiten um das Experiment abzuwandeln und gezielt einzelne Effekte extrahieren zu können. [16]

An dieser Stelle sollte nun klar sein, warum HCIs und speziell hochgeladene Xenonionen untersucht werden. Um dem Leser dieser Arbeit die erzielten Ergebnisse aufzuzeigen, werden jetzt zunächst die für ein Verständnis der Auswertungen notwendigen Grundlagen in der Theorie gelegt.

2 Theorie: Elektronische Übergänge

Hochgeladene Ionen bezeichnen Atome, die durch Abgabe vieler Elektronen in hohe positive Ladungszustände übergegangen sind. Als natürlich auftretendes Beispiel lässt sich Fe^{13+} in der Sonnenkorona anführen [14]. Bei diesem Beispiel liegt die Ionisierungsenergie bei 392,2 eV [2]. Im Rahmen dieser Arbeit wurden an der Heidelberg-EBIT (HD-EBIT) elektronische Übergänge in hochgeladenen Xenonionen vermessen, ausgewertet und mithilfe von Simulationen den jeweiligen quantenmechanischen Zuständen zugeordnet. EBIT steht für Electron Beam Ion Trap, also auf deutsch für Elektronenstrahlionenfalle. Die dafür relevanten Energielevel entstammen der Quantenmechanik und Atomphysik. Daher wird an dieser Stelle in die nötigen Grundlagen der Quantenmechanik und Atomphysik eingeführt. Eine vollständige Einführung in diese Themen würde den Rahmen dieser Arbeit sprengen. Nichtsdestotrotz sollen an dieser Stelle nun die wichtigsten Punkte herausgearbeitet und erläutert werden.

In der Quantenmechanik basiert alles auf der zeitabhängigen Schrödingergleichung. Sie stellt als eine Differentialgleichung die Zustandsgleichung für alle Systeme der Quantenmechanik dar:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = H\Psi(t). \quad (1)$$

Die Lösung der Gleichung und Eigenzustand eines quantenmechanischen Systems ist hier $\Psi(t)$ mit t als Zeit des Systems. i ist die imaginäre Einheit und \hbar das reduzierte Plancksche Wirkungsquantum. H bezeichnet den Hamiltonoperator oder auch Hamiltonian. Dieser beinhaltet alle physikalischen Wechselwirkungen im zu betrachtenden System. Die Observablen des Systems ergeben sich durch die Eigenwerte entsprechender hermitescher Operatoren [22]. Der Hamiltonian ist dabei der hermitesche Operator, der die Eigenenergien E_i des Systems bestimmt:

$$H\Psi(t) = E_i\Psi(t). \quad (2)$$

Diese Energien sind von enormem Interesse in dieser Arbeit. Die zu untersuchenden elektronischen Übergänge finden zwischen eben jenen Energieeigenzuständen statt. Ein analytisches Lösen der Schrödingergleichung für größere Atome (wie für Xenon im Fall dieser Arbeit) ist nicht möglich. Deswegen kommen für theoretische Vorhersagen weitere Modelle und numerische Methoden zum Einsatz. Im Falle dieser Arbeit handelt es sich um den Flexible Atomic Code, der in Unterabschnitt 3.1.2 erläutert wird. Beim Abgleich mit den Messungen zeigt sich auch die Güte solcher Modelle. Um diese Modelle zu verstehen, werden zunächst Systeme erläutert, die dem einfachsten aller Atome ähneln: Wasserstoff. Darauf aufbauend wird im Anschluss auch auf kompliziertere Systeme eingegangen. [16, 25]

2.1 Wasserstoffähnliche Atome

Wasserstoffähnliche Atome sind Atome mit einer Kernladungszahl Z und einem einzigen gebundenen Elektron. Der Hamiltonian ist dann eine Summe aus einem kinetischen Term nach dem Bohrschen Atommodell und einem potentiellen Term für die Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektron und Kern:

$$H_{Bohr} = \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (3)$$

m_e ist die Elektronenmasse, e die Elementarladung, ϵ_0 die elektrische Feldkonstante, und r der Radius in sphärischen Koordinaten (sphärische Koordinaten sind aufgrund der gegebenen Radialsymmetrie zum Lösen der Schrödingergleichung sehr praktisch). Mithilfe eines Separationsansatzes $\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Upsilon(\theta, \phi)$ lässt sich die Schrödingergleichung lösen. Die resultierenden Energielevel sind:

$$E_n = -\frac{m_e Z^2 e^4}{32(\pi\epsilon_0 n)^2}. \quad (4)$$

n steht für das Energielevel bzw. die Schale, kann als Wert jeder natürlichen Zahl annehmen und ist die sogenannte Hauptquantenzahl des jeweiligen Zustands. Diese Energielevel resultieren allein aus dem radialen Anteil des Zustands $R(r)$. Kopplungen durch das

quantisierte Drehmoment sind dabei nicht berücksichtigt (das Drehmoment ist quantisiert, da der Winkelanteil $\Upsilon(\theta, \phi)$ durch Kugelflächenfunktionen gelöst wird). [16, 25, 17]

2.2 Feinstrukturaufspaltung

Der bis hier benutzte Hamiltonian aus Gleichung 3 betrachtet Raum und Zeit nicht als gleichberechtigt. Aus dem Impulsoperator resultierend beinhaltet er die zweite Ableitung nach dem Ort. Die Schrödingergleichung leitet nur einmal nach der Zeit ab. Durch diese intrinsische Asymmetrie in Raum und Zeit kommt man hier auch zu relativistisch nicht gültigen Ergebnissen (in anderen Worten: das System ist nicht lorentzinvariant). Deshalb wurde dieser Ansatz mithilfe der Störungstheorie noch verbessert. Dabei wurden die stärksten relativistischen Effekte sowie das quantisierte Drehmoment berücksichtigt, und es ergibt sich näherungsweise:

$$E_{n,l} = -E_n \left(1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right). \quad (5)$$

Dabei wurde die Nebenquantenzahl l eingeführt, die den quantisierten Bahndrehimpuls beschreibt. l kann als Werte alle ganzen Zahlen von 0 bis $n - 1$ einnehmen. Das hebt die Degeneriertheit der Energielevel mit gleichem n auf. Diese Struktur wird als Feinstruktur bezeichnet. Die hier ebenfalls eingeführte Konstante α ist die sogenannte Feinstrukturkonstante und ist definiert als $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$ (mit c als Lichtgeschwindigkeit). In Gleichung 5 steckt Z^2 sowohl in dem hinteren, additiven Term selbst als auch in E_n aus Gleichung 4. Damit skalieren die Energieshifts durch die Feinstruktur mit Z^4 . Das bedeutet wesentliche Energieshifts für HCIs mit großen Kernladungszahlen (auch wenn im Rahmen von Xenonionen in dieser Arbeit nicht von wasserstoffähnlichen Systemen gesprochen werden kann). Wie erwähnt handelt es sich hierbei jedoch nur um eine Näherung. Letzten Endes stellt die Diracgleichung die Lösung des Problems mit der Lorentzinvarianz dar. Das Ziel dieser Arbeit ist aber nicht eine grundlegende Einführung der relativistischen Quantenmechanik. Jedoch gibt es einen Punkt, der hieraus mitgenommen werden soll: Die Diracgleichung wird von sogenannten Spinoren gelöst. Das wiederum führt zum Konzept des Spin. Der Spin ist ebenfalls quantisiert und lässt sich mathematisch als Drehmoment behandeln. Damit erhält er seine eigene Quantenzahl s . Für Bosonen ist s ganzzahlig, für Fermionen halbzahlig. Die für diesen Fall relevanten Elektronen sind Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen. Der Spin s und der Bahndrehimpuls l koppeln zu dem Gesamtdrehimpuls j . j kann dabei

Werte von $|l - s|$ bis $|l + s|$ annehmen. Für die jeweiligen elektronischen Zustände gilt folgende Notation:

$${}^{2s+1}l_j. \quad (6)$$

Dabei wird für l die spektroskopische Notation mit s, p, d, f, \dots für $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ verwendet. Weitere Korrekturen können für quantenelektrodynamische Effekte gemacht werden, sind jedoch ebenfalls nicht Teil dieser Arbeit. Da, wie erwähnt, HCIs nur selten wasserstoffähnlich sind, wird nun auf den bisherigen Ergebnissen aufbauend zu Mehrelektronensystemen übergegangen. [16, 25, 17]

2.3 Mehrelektronensysteme

Für Mehrelektronensysteme muss die Wechselwirkung der Elektronen untereinander berücksichtigt werden. Das ist genau der Grund, wieso die Schrödingergleichung dann nicht mehr analytisch gelöst werden kann. Der Hamiltonian ist dann

$$H_{ME} = \sum_i H_{Dirac,i} + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}, \quad (7)$$

wobei in den beiden Summen über alle Elektronen bzw. paarweise über alle Elektronen summiert wird, ohne eine Wechselwirkung doppelt zu zählen. Zum Lösen für die Energielevel kommen numerische Berechnungsmethoden zum Einsatz. Auf diese Methoden wird in Unterabschnitt 3.1.2 genauer eingegangen. Stattdessen werden an dieser Stelle die Grundstrukturen der Elektronenkonfiguration in Mehrelektronensystemen erläutert. Für Elektronen als Fermionen im selben System gilt: Keine zwei Elektronen dürfen in allen Quantenzahlen übereinstimmen. Dieses Prinzip ist bekannt als das Pauli-Prinzip. Das bedeutet, dass jedes Elektron in seinem Zustand eine einzigartige Kombination an n , l und m_l besitzt, wobei m_l die z-Komponente von l ist. Die Elektronenkonfiguration des gesamten Atoms gibt man als Aneinanderreihung von $n l^x$ an. x besagt, wie viele Elektronen im Atom mit dem jeweiligen n und l zu finden sind. Für Sauerstoff im Grundzustand beispielsweise schreibt man $1s^2 2s^2 2p^4$. Häufig wird dabei auch das nächstkleinere Edelgas ausgeklammert. Im Fall des Sauerstoffs im Grundzustand ist das Helium, und man schreibt $[He] 2s^2 2p^4$. x wird häufig weggelassen, wenn $x = 1$. [16]

2.4 Spin-Bahn-Kopplung

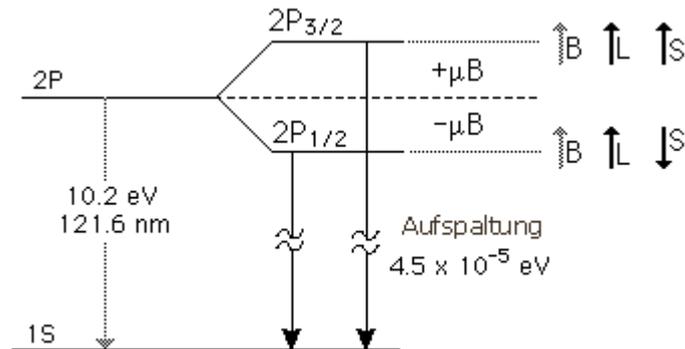


Abbildung 1: Gezeigt ist hier die Feinstrukturaufspaltung durch die Spin-Bahn-Kopplung im Wasserstoffatom im 2P Energie-Level. Je nach Ausrichtung des Bahndrehimpulses $L = 1$ und des Spin $S = 1/2$ ergibt sich ein Gesamtdrehimpuls von $J = 1/2$ oder $J = 3/2$. Diese Aufspaltung der Zustände wird unter Anlegen eines äußeren Magnetfeldes B zu einer messbaren, energetischen Aufspaltung von $4,5 \cdot 10^{-5}$ eV. Abbildung aus [3].

Nun gibt es zwei verschiedene Arten der Kopplung von Bahndrehimpuls und Spin. Für Atome mit kleinem Z koppeln alle l der einzelnen Elektronen zu einem Gesamtbahndrehimpuls $L = \sum_i l_i$, alle einzelnen Spins zu einem Gesamtspin $S = \sum_i s_i$, und L und S zum Gesamtdrehimpuls $J = L + S$. Diese Kopplung heißt L-S-Kopplung, bzw. Russel-Saunders-Kopplung. Für schwerere Atome greift hingegen die sogenannte jj-Kopplung. Durch relativistische Effekte für größere Z ist die Kopplung von l und s für ein einzelnes Elektron groß im Vergleich zur Kopplung mit den Drehimpulsen der anderen Elektronen. Dann koppeln die Drehmomente zum Gesamtdrehimpuls $J = \sum_i j_i$ mit $j_i = |l_i - s_i|, \dots, |l_i + s_i|$. Aufgrund der damit einhergehenden Uneindeutigkeit sind L und S keine guten Quantenzahlen. Stattdessen wird vor allem mit J , als sozusagen guter Quantenzahl, gearbeitet. Für die zu untersuchenden HCIs sind die Z so groß, dass von der jj-Kopplung ausgegangen werden kann. Bei diesen hohen Ladungszuständen sind die verbleibenden Elektronen dann sehr stark gebunden. Dadurch ist hier auch der Effekt der Spin-Bahn-Wechselwirkung und damit der Effekt der Kopplung sehr stark. Dieser Gesamtdrehimpuls aus der Kopplung von Bahndrehimpuls und Spin findet dann auch direkt Anwendung in der Zeeman-Aufspaltung (Abschnitt 2.6), die in Abschnitt 2.6 ein-

geführt wird. Das ist von großer Bedeutung für diese Arbeit, da die, aus diesen Kopplungen resultierenden, Aufspaltungen in den Energielevel zu elektronischen Übergängen mit Aussendung von Photonen (zum Teil im sichtbaren Bereich) führt (Ein Beispiel findet sich in Abbildung 1). Genau diese Übergänge werden im Rahmen dieser Arbeit vermessen. Weitere Aufspaltungen der Energielevel ergeben sich durch den möglichen Spin des Kerns, der mit den Elektronen wechselwirkt, und durch den Stark-Effekt. Spürbar wird im Experiment (wegen des starken Magnetfeldes im Versuch) aber vor allem der Zeeman-Effekt. [16, 17]

2.5 Das Wigner-Eckart-Theorem

Für die folgenden Unterkapitel ist das sogenannte Wigner-Eckart-Theorem von großer Bedeutung. Es wird benutzt, um die relativen Intensitäten von Übergängen zu berechnen. Daraus folgen dann Auswahlregeln für elektronische Übergänge (oder in anderen Worten: es folgt, welche Übergänge erlaubt sind und welche nicht, bzw. welche Übergänge stattfinden und welche nicht). Das Theorem ist ein mächtiges Werkzeug beim Berechnen von Erwartungswerten verschiedener Operatoren bei Eigenzuständen des Drehmoments. Aufgrund der Eindeutigkeit im Folgenden wird nur m anstatt m_j geschrieben. Zu betrachten sind dann die Eigenzustände $|jm\rangle$. Das Wigner-Eckart-Theorem bezieht sich dann auf die Erwartungswerte eines allgemeinen, sphärischen Tensoroperators T^k vom Rang k :

$$\langle j'm'|T_q^k|jm\rangle = \langle jmkq|j'm'\rangle \langle j'||T^k||j\rangle. \quad (8)$$

q steht für die entsprechende Komponente des Operators. $\langle jmkq|j'm'\rangle$ ist der Clebsch-Gordan-Koeffizient, um j mit k zu j' zu koppeln. Die entsprechenden Werte können in entsprechenden Datenbanken wie z.B. in [13] eingesehen werden. Das reduzierte Matrixelement $\langle j'||T^k||j\rangle$ hängt nun nicht mehr von m , m' und q ab. Damit wurden diese Komponenten entkoppelt. [16]

Vektoren werden im folgenden durch fette Schrift gekennzeichnet. Eine abgewandelte Form des Wigner-Eckart-Theorems ist der Projektionssatz. Er gilt für sphärische Ten-

operatoren \mathbf{V} vom Rang eins mit Kommutatorrelation:

$$[V^i, J_i] = i\epsilon_{ijk}J_k. \quad (9)$$

Dann gilt die Aussage, dass der zum Vektoroperator gehörige Erwartungswert proportional zum Erwartungswert von \mathbf{J} ist:

$$\langle jm'|\mathbf{V}|jm\rangle = \frac{\langle jm'|\mathbf{V} \cdot \mathbf{J}|jm\rangle}{j(j+1)} \langle jm'|\mathbf{J}|jm\rangle. \quad (10)$$

Die beiden hier eingeführten Theoreme werden in ihrer mathematischen Form im Folgenden nicht mehr aufgegriffen, da dies den Rahmen dieser Arbeit sprengen würde. Jedoch wird darauf eingegangen werden, dass das Prinzip der beiden Theoreme (die Entkoppelung des Matrixelements von m, m' und q , bzw. die Proportionalität von Erwartungswert eines Vektoroperators und Erwartungswert von J) zur Herleitung der Auswahlregeln für elektronische Übergänge von Bedeutung ist. Für eine genauere Herleitung muss dann jedoch wieder auf Literatur der Atomphysik verwiesen werden. [16]

2.6 Zeeman-Aufspaltung

Da die Ionen in unserem Aufbau einem starken Magnetfeld ausgesetzt sind, muss für die zu untersuchenden Übergänge, wie bereits erwähnt, eine weitere Korrektur berücksichtigt werden: der Zeeman-Effekt [26]. Die Elektronen in den Ionen besitzen einen Bahndrehimpuls und einen Spin, die zum Gesamtdrehimpuls koppeln. Dem folgt ein magnetisches Moment, wodurch die Zustände mit unterschiedlichen L und S in einem äußeren Magnetfeld energetisch aufgespalten werden (zusätzlich zur Feinstrukturaufspaltung). Aufgrund der hohen Protonenmasse im Vergleich zur Elektronenmasse kann der Kernspin für die folgenden Überlegungen vernachlässigt werden. Das magnetische Moment $\boldsymbol{\mu}$ ist dann:

$$\boldsymbol{\mu} = -\mu_B\mathbf{L} - g_s\mu_B\mathbf{S}, \quad (11)$$

mit dem Bohrschen Magneton $\mu_B = e\hbar/2m_e$, und mit g_s als dem anomalen g-Faktor des Spins. Der Hamiltonian \mathbf{H}_{ZE} im externen magnetischen Feld \mathbf{B} wird dann:

$$\mathbf{H}_{ZE} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}, \quad (12)$$

und lässt sich bei den verwendeten Magnetfeldstärken mit der Störungstheorie behandeln. Für die Shifts in den Energieleveln findet man dann (unter Verwendung des Projektionssatzes):

$$\Delta E_{ZE} = \mu_B B_Z g_j m_j. \quad (13)$$

B_Z ist die z-Komponente von \mathbf{B} . g_j ist der Landé-Faktor:

$$g_j = 1 + (g_s - 1) \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}. \quad (14)$$

Nachdem nun die Energieshifts durch den Zeemaneffekt eingeführt wurden, müssen noch die daraus entstehenden Shifts in den zu vermessenden Übergängen untersucht werden. Es ergibt sich für die Energiedifferenz der Level eines elektronischen Übergangs:

$$\Delta E = E^a + \Delta E_{ZE}^a - E^e - \Delta E_{ZE}^e = \Delta E_{FS} + \Delta E_{ZE}, \quad (15)$$

welche in Form eines Photons (das vermessen werden kann) frei wird. a steht für den Anfangszustand und e für den Endzustand. Dabei wurden hier die Energiedifferenz durch die Feinstrukturaufspaltung FS und die durch den Zeeman-Effekt ZE separiert. Es dominiert die Feinstrukturaufspaltung. Damit entstehen kleine Shifts der Feinstrukturaufspaltung durch den Zeeman-Effekt. Diese lassen sich durch Gleichung 13 wie folgt mathematisch beschreiben:

$$\Delta E_{ZE} = \mu_B B_Z (g_j^a m_j^a - g_j^e m_j^e). \quad (16)$$

Ist nun $\Delta m_j = 0$, so gilt:

$$\Delta E_{ZE} = \mu_B B_Z m_j^a (g_j^a - g_j^e). \quad (17)$$

Hingegen wenn $\Delta m_j = \pm 1$, dann gilt:

$$\Delta E_{ZE} = \mu_B B_Z (m_j^a (g_j^a - g_j^e) \pm g_j^e). \quad (18)$$

Diese Fallunterscheidung wird deshalb gemacht, da beim Unterschied in Δm_j die Aus-

wahlregeln für Übergänge zum Tragen kommen. Das wird nun erläutert. [16, 25, 17]

2.7 Magnetische Dipolübergänge

Für die Auswahlregeln bei den Übergängen muss man zwischen elektronischen Dipolübergängen (E1) und magnetischen Dipolübergängen (M1) unterscheiden. Um dies zu erläutern, werden an dieser Stelle die Einsteinkoeffizienten kurz eingeschoben. Die Übergangsrates für spontane Übergänge wird durch die Einsteinkoeffizienten $A_{\Psi',\Psi}$ festgelegt:

$$A_{\Psi',\Psi} = \frac{e^2\omega}{2\pi\hbar c} |\langle \Psi' | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{\epsilon} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} | \Psi \rangle|^2. \quad (19)$$

Dabei ist ω die Kreisfrequenz des zum Übergang gehörigen Photons. $\langle \Psi' | \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{\epsilon} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} | \Psi \rangle$ ist das Übergangsmatrixelement. $\boldsymbol{\alpha}$ ist eine Diracmatrix, die bei einer entsprechenden Herleitung aus dem Dirachamiltonian kommen würde. $\boldsymbol{\epsilon}$ ist die Photonpolarisation und \mathbf{k} ist der Wellenvektor des Photons. Das Übergangsmatrixelement kann mit seinem Übergangsoperator in Multipoloperatoren entwickelt werden. Dabei ist E1 die erste Ordnung und M1 die folgende Ordnung. Grundsätzlich ist die Wechselwirkung durch den elektrischen Dipoloperator viel stärker als die durch den magnetischen Dipoloperator. Allerdings skaliert die Rate der M1-Übergänge in HCIs mit Z^{10} , die Rate der E1-Übergänge nur mit Z^4 . Dadurch können für HCIs M1-Übergänge im sichtbaren Bereich gleich stark oder sogar stärker als E1-Übergänge werden. Aus den Clebsch-Gordan-Koeffizienten und dem Wigner-Eckart-Theorem lassen sich dann folgende Auswahlregeln herleiten: Für E1- und M1-Übergänge sind nur $\Delta j = 0, \pm 1$ und $\Delta m_j = 0, \pm 1$ erlaubt. Und auch hier ist noch speziell der Übergang von $j = 0$ nach $j' = 0$ verboten (für eine Herleitung muss, wie in Abschnitt 2.5 erwähnt, auf Literatur der Atomphysik verwiesen werden). Außerdem sind E1-Übergänge nur zwischen Zuständen entgegengesetzter Parität erlaubt. M1-Übergänge sind hingegen nur zwischen Zuständen mit gleicher Parität erlaubt. Die M1-Übergänge die dann beobachtet werden können sind dann höchstverbotene E1-Übergänge. Solche verbotenen Übergänge können z.B. für Fe^{13+} auch in der Sonnenkorona bei einer Sonnenfinsternis beobachtet werden, wenn sie nicht vom restlichen Sonnenlicht überstrahlt werden [14]. Nun zurück zu den Übergängen selbst: Falls $\Delta m = 0$ gilt, verhält sich das System als linearer Oszillator in z -Richtung. Gilt aber $\Delta m = \pm 1$, dann verhält sich das System wie ein zirkularer Oszillator in der x - y -Ebene. Das resultierende linear polarisierte Licht wird ab dieser Stelle als π -polarisiert beschrieben. Das rechtszirkular bzw.

linkszirkular polarisierte Licht wird nun als σ^+ - bzw σ^- -polarisiert beschrieben. [16, 25, 17]

2.8 Flexible Atomic Code

Den vermessenen Übergängen sollen nun auch quantenmechanische Zustände zugeordnet werden. Dafür werden theoretische Vorhersagen für die Übergänge mithilfe des Programms Flexible Atomic Code (FAC) gemacht. Das Programm wurde von M. F. Gu entwickelt und basiert auf der Methode der Configuration Interaction [20]. Für ein N -Elektron-System benutzt diese Methode eine antisymmetrische Linearkombination von N Ein-Elektron-System-Wellenfunktionen, die aus der Slaterdeterminante hervorgeht. Wäre die resultierende Gesamtwellenfunktion nicht antisymmetrisch, dann wäre sie nicht normalisierbar, und wäre damit eine unphysikalische Lösung des Systems (auch bekannt als Pauli-Prinzip). Die Antisymmetrie wird als Eigenschaft der Slaterdeterminante aber garantiert. Da das Betrachten aller vorhandenen Elektronen ein rechnerisch für die Simulation zu großer Aufwand wäre, werden abgeschlossene Elektronenschalen in der Berechnung größtenteils vernachlässigt. Der in den Berechnungen verwendete Hamiltonian ist der Dirac-Coulomb-Breit-Hamiltonian, eine abgewandelte Form des Hamiltonians in Gleichung 7 für Mehrelektronensysteme:

$$H_{\text{DCB}} = \sum_i H_{\text{Dirac},i} + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} + B_{ij}. \quad (20)$$

Der hier neu eingeführte Summand B_{ij} berücksichtigt verzögerte Wechselwirkungen, sowie magnetische Wechselwirkungen zwischen den Elektronen. Das Programm FAC errechnet schließlich die Energielevel der Feinstruktur sowie die resultierenden Übergangsenergien und -raten. Dafür werden die Vorfaktoren in der antisymmetrischen Linearkombination variiert, um den Erwartungswert der Energie (für den Hamiltonian in Gleichung 20) zu minimieren. Für die Energien innerhalb der Feinstrukturlevel wird eine relative Ungenauigkeit von 1% erwartet. [16, 25]

3 Experiment

Die theoretischen und eher abstrakten Grundlagen dieser Arbeit wurden dem Leser bis zu dieser Stelle jetzt dargelegt. Dies ermöglicht es, nun auf die experimentellen Aufbauten für diese Arbeit sowie dabei entstehende Komplikationen und zugehörige Lösungsideen einzugehen. Wird im Rahmen dieser Arbeit nun explizit von der Kalibration eines Spektrometers (anstatt von lediglich der Kalibration eines Bildes) gesprochen, so ist das in Betrieb zu nehmende Spektrometer gemeint. Wird hingegen von Messungen zu Xenon und von der Kalibration der Messungen zu Xenon gesprochen, so ist das bereits fertig aufgebaute Spektrometer an der HD-EBIT gemeint.

3.1 EBIT

Die in dieser Arbeit untersuchten elektronischen Übergänge finden in HCIs statt, die in einer sogenannten Elektronenstrahlionenfalle erzeugt und gefangen werden. In einer solchen Falle werden typischerweise zwischen 10^4 und 10^7 Ionen gefangen [16]. Die Form der Falle ist, aufgrund der Geometrie des Elektronenstrahls in der Falle, ungefähr die eines Zylinders [16]. Auf den Mechanismus einer solchen Falle wird nun im Folgenden eingegangen.

3.1.1 Aufbau

Das Grundprinzip hinter der EBIT findet sich in Abbildung 2 veranschaulicht: Aus einer Kathode treten Elektronen aus und werden von der Kathode weg zu den Driftröhren hin beschleunigt. Die gesamte Beschleunigungsspannung ergibt sich als Differenz des Potentials an der Kathode und des Potentials an der mittleren Driftröhre (die gleichzeitig die Falle ist). Die Spulen fokussieren den Elektronenstrahl mit maximalem Fokus im Bereich der mittleren Driftröhre. Dabei werden die Spulen in der HD-EBIT mit verdampfendem, flüssigem Helium gekühlt, sodass sie supraleitend werden, damit das Magnetfeld mehrere Tesla stark wird und die Fokussierung des Elektronenstrahls so stark wie möglich wird. Die Driftröhren bauen im Potential von außen zur mittleren Driftröhre hin auf, während

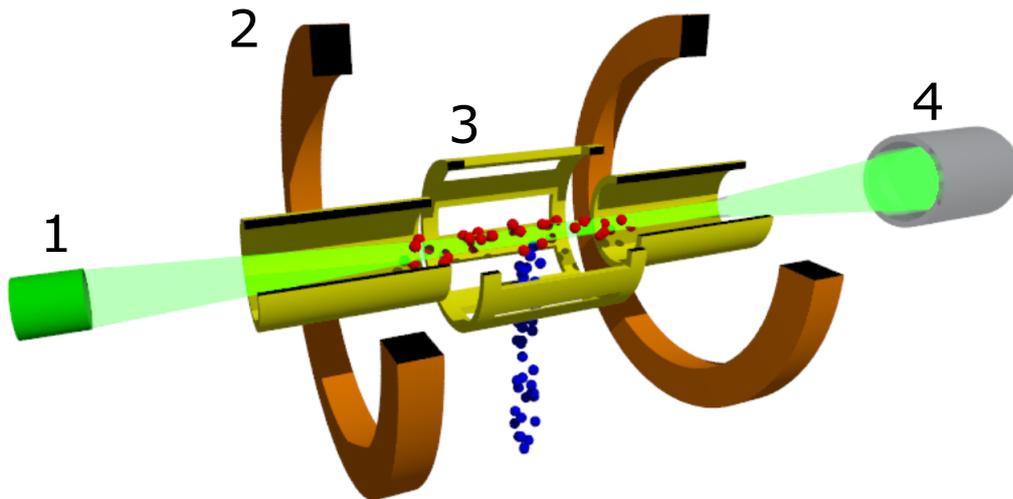


Abbildung 2: Skizze einer EBIT aus [16]. In hellgrün findet sich der Elektronenstrahl, der von der links in grün dargestellten Elektronenkanone (1) emittiert, und von den orange dargestellten Spulen (2) fokussiert wird. In gelb zu sehen sind die Driftröhren (3), in blau die injizierten Atome, in rot die bereits ionisierten Atome, und in grau dargestellt ist der Elektronenkollektor (4). Die mittlere Driftröhre ist wie in der Skizze mit Schlitzen als Öffnungen konstruiert, sodass das in der Falle emittierte Licht die EBIT zum Vermessen verlassen kann. Die in dieser Arbeit verwendete HD-EBIT hat eine Länge von der Elektronenkanone bis zum Kollektor von gut 2 m [11].

die mittlere Driftröhre selbst im Potential deutlich niedriger liegt. Damit entsteht ein elektrisches Feld, das als Falle für Ionen entlang der Achse des Elektronenstrahls wirkt. Der Elektronenstrahl hat eine negative zylindrische Raumladung, die ebenfalls für positiv geladene Ionen als Falle wirkt. Die Kombination dieser beiden Fallen erzeugt die gesamte zylindrische Falle im Inneren der mittleren Driftröhre. Durch das starke Fokussieren des Elektronenstrahls (durch den Magneten) wird der Durchmesser dieser zylindrischen Falle minimiert. Nach dem Passieren der mittleren Driftröhre wird der Elektronenstrahl durch die Magneten und Driftröhren wieder defokussiert. Die Elektronen des Strahls treffen dann auf die Seitenwände des Kollektors und werden dort abgesaugt. Der Kollektorstrom wird ebenfalls gemessen, da er als Indikator genutzt werden kann, um den Elektronenstrahl optimieren zu können. Werden nun Atome in die EBIT wie in der Skizze injiziert, so treffen einige dieser Atome auf den Elektronenstrahl. Der Strahl entreißt den Atomen durch seine hohe Energie dann die Valenzelektronen, sodass diese ionisiert werden. Die ionisierten Atome sind nun durch ihre positive Ladung in der zylindrischen Falle gefangen. Die Effekte in der Falle sind dann die Elektronenstoßionisation, Autoioni-

sation, quantenmechanische Anregungen und Abregungen und Rekombinationen. Diese werden nun alle eingeführt. [16]

3.1.2 Wechselwirkungen in der Falle

Es folgt ein kurzer Einschub der Theorie, der aber nun erst an dieser Stelle Sinn macht, da jetzt das Grundprinzip der Falle klar ist. Es wird schließlich interessant, welche Wechselwirkungen der Ionen in einer EBIT stattfinden. Dabei dominieren zwei Effekte: erstens werden weitere Elektronen aus den vorhandenen, gefangenen Ionen durch Beschuss mit Elektronen des Elektronenstrahls herausgelöst. Zweitens werden bereits ionisierte Atome (ebenfalls durch den Beschuss mit Elektronen des Elektronenstrahls) angeregt, oder in anderen Worten: sie werden in höherenergetische, quantenmechanische Zustände versetzt. Der Vorgang des HerauslöSENS weiterer Elektronen lässt sich für ein Ion A mit Ladung q im quantenmechanischen Zustand a wie folgt beschreiben:



Ein Elektron des Strahls löst also ein weiteres Elektron aus dem Ion heraus, und lässt das Ion (das nun eine Ladung von $q + 1$ trägt) bei ausreichend großer Energie zusätzlich in einen anderen, angeregten, quantenmechanischen Zustand b übergehen. Gleichzeitig tritt das zweitgenannte Phänomen auf: ein Elektron aus dem Elektronenstrahl regt das Ion an, ohne es weiter zu ionisieren:

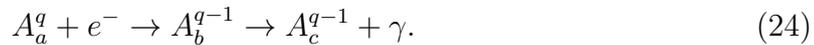


Außerdem treten Autoionisationen auf: Wenn z.B. zwei Elektronen in einem Atom angeregt sind und die Summe der Anregungsenergien höher ist als die Ionisierungsenergie, dann kann eines der beiden Elektronen seine überschüssige Energie an das andere Elektron übertragen, und dieses damit aus dem Atom lösen.

Darüber hinaus gibt es Einfangprozesse, bei denen Ionen mit Elektronen rekombinieren. Es gibt zwei häufig auftretende Rekombinationsprozesse: die Strahlungsrekombination und die dielektrische Rekombination. Bei der Strahlungsrekombination wird ein freies Elektron von einem Ion gebunden, während die überschüssige Energie in Form eines Photons frei wird:



Bei der dielektrischen Rekombination wird die überschüssige Energie nicht frei, sondern regt stattdessen das Ion in einen höherenergetischen, quantenmechanischen Zustand an. Von dort aus kann das Ion wieder auf einen niedrigerenergetischen Zustand c zurückfallen und währenddessen bei jedem Übergang ein Photon aussenden:



Diese daraus resultierenden weniger geladenen Ionen werden bei den jeweiligen Strahlenergien aber wieder in den höher geladenen Zustand ionisiert. Für eine Anregung muss die Strahlenergie E_S immer gleich groß oder größer als die Energiedifferenz E_{ab} zwischen den Zuständen a und b sein. Es stellt sich heraus, dass der Wirkungsquerschnitt am größten ist, wenn $E_S = E_{ab}$ [16]. Die Strahlenergien sind hier jedoch viel höher als die Übergangsenergien für Übergänge in der Nähe des Grundzustands. Daher ist Ionisation der dominierende Prozess. Außerdem folgt aus den hohen Strahlenergien: wenn Anregung stattfindet, dann vor allem zu hohen Hauptquantenzahlen. Von dort fällt das Ion durch seine Elektronen schrittweise bis zum Grundzustand hinab. Diese Schritte erfolgen unter Aussendung von Photonen. Und diese Photonen wurden für diese Arbeit für Xenon im sichtbaren Bereich vermessen. Ionisation und Anregung durch Photonen spielen aufgrund der geringen Intensität des vorhandenen Lichts eine untergeordnete Rolle und werden vernachlässigt. Insgesamt stellt sich in der EBIT zwischen allen genannten Prozessen ein Gleichgewicht ein und man erhält eine elektronenstrahlenergieabhängige Ladungszustandsverteilung.

3.2 Grundlagen des optischen Strahlengangs

Die eben erläuterten Übergänge in der EBIT sollen dann vermessen werden. Dafür muss der Strahlengang der emittierten Photonen aus der EBIT gezielt umgeleitet und letzten Endes ins Spektrometer fokussiert werden. Hier besteht die Möglichkeit, sowohl Linsen, als auch Spiegel zu verwenden. Linsen sind in der Lage Licht aus der EBIT bzw. aus der Kalibrationslampe zu kollimieren sowie es anschließenden auf den Eintrittsspalt des Spektrometers (sodass eine Abbildung der Lichtquelle am Eintrittsspalt entsteht) zu fokussieren. Darüber hinaus kann durch gezieltes Einsetzen der Linsen ein Zwischenbild für Tests des Strahlengangs auf dem Weg der Photonen von der EBIT zum Spektrometer erzeugt werden, was zum Einstellen der Spiegel und Linsen während des Aufbaus des

Strahlengangs genutzt werden kann. Jedoch werden Spiegel benötigt, um den Strahlengang abzulenken und einen praktischeren Aufbau zu ermöglichen. Darüber können auch parabolische Spiegel zur Kollimation und Fokussierung des Lichts eingesetzt werden. Die Vor- und Nachteile von Linsen und parabolischen Spiegeln werden im Folgenden aufgezählt, worauf dann der nachfolgende experimentelle Aufbau in Abschnitt 3.4 basiert. Zur Einfachheit wird im Weiteren das Licht nur über die Strahlentheorie beschrieben.

3.2.1 Linsen

Das erste Ziel ist es nun, die Wirkung der Linsen im Strahlengang von der EBIT zum Spektrometer zu verstehen. Für ein allgemeines Verständnis der Wirkung der Linsen auf Lichtstrahlen in unserem Aufbau reicht es, sich auf die Wirkung der Linsen auf Licht von Punktlichtquellen zu beschränkt.

Fokussierung und Kollimation von Licht

Die Überlegung Linsen einzusetzen kommt daher, dass man das diffuse Licht aus der EBIT bzw. aus der Kalibrationslampe zunächst parallelisieren oder, in anderen Worten, kollimieren will. Diese parallelen Lichtstrahlen können dann durch flache Spiegel bis kurz vor das Spektrometer geleitet werden, wo sie auf den Eingangsspalt des Spektrometers fokussiert werden sollen - dafür besteht die Möglichkeit, Sammellinsen einzusetzen.

Zunächst wird die Fokussierung von Licht durch eine bikonvexe Linse betrachtet. Man nimmt an, dass die Lichtstrahlen parallel auf eine bikonvexe, sphärische, dünne Linse auftreffen, beim Eintreten des Lichts in die Linse das Medium von beispielsweise Luft oder Stickstoff oder Vakuum zu dem Medium der Linse wechseln, und sich damit auch der Brechungsindex ändert. Damit gilt das Snellius'sche Brechungsgesetz:

$$\frac{n_A}{n_B} = \frac{\sin(\beta)}{\sin(\alpha)}. \quad (25)$$

A und B bezeichnen die beiden Medien, n_A und n_B die zugehörigen Brechungsindizes, und α und β jeweils die zugehörigen Winkel des Lichtstrahls in den Medien bezüglich des Lots zur Ebene, welche die beiden Medien trennt. Nach Gleichung 25 werden die parallelen Lichtstrahlen beim Eintreten in die Linse zu besagtem Lot hin gebrochen. Die Strahlen treffen als nächstes beim Verlassen der Linse auf ein optisch dünneres Medium. Dabei werden sie vom zugehörigen Lot zur Brechungsoberfläche weg gebrochen. Da die

Austrittsoberfläche der bikonvexen Linse aus Sicht des Lichts nun aber in Bezug zur Eintrittsfläche umgekehrt gewölbt ist, bedeutet das für den Lichtstrahl, noch stärker zur Mitte des Strahlengangs hin gebrochen zu werden. Nun lässt sich analytisch zeigen, dass die ursprünglich parallelen Strahlen die Mitte des Strahlengangs immer genau im selben Punkt durchqueren, den sogenannten Fokus oder auch Brennpunkt (dies gilt so allgemein gefasst natürlich nur im Falle einer achromatischen und asphärischen Linse). Der Abstand zwischen der Linse und dem Fokus nennt sich Brennweite. [24]

Wie erwähnt besteht der zweite mögliche Einsatz von bikonvexen Linsen in der Kollimierung des diffusen Lichts. Mit der bekannten Brennweite der Linse kann man dann die Punktlichtquelle bzw. das gewünschte Objekt oder ein optisches Abbild des Objektes genau in den daraus resultierenden Fokus setzen. So invertiert man gerade die Wirkung der in der vorangegangenen Erläuterung diskutierten Fokussierung paralleler Lichtstrahlen. Das Resultat sind dann parallele, von der Punktlichtquelle stammende Lichtstrahlen. [24] Als letzter, entscheidender Punkt der Funktionsweise von Linsen sei noch angemerkt, dass Linsen, wenn sie nicht auf spezielle Art und Weise aus zwei Linsenmaterialien hergestellt wurden, nicht achromatisch in ihren Brechungsindizes sind [18]. Das heißt, der Brechungsindex der Linse ist wellenlängenabhängig, was wiederum nach obiger Erklärung aufgrund von Gleichung 25 zu einem wellenlängenabhängigen Brechungswinkel und damit zu einer wellenlängenabhängigen Brennweite führt [24].

UV-Durchlässige Linsen

Die an der EBIT zu vermessenden Wellenlängen liegen zu großen Teilen im UV-Bereich (ultraviolett-Bereich). Daher muss hier mit speziellen aus UV-verstärktem Quarzglas gefertigten Linsen gearbeitet werden. Die Transmission im UV-Bereich lässt sich aus Abbildung 3 entnehmen: unter 300 nm nimmt sie merklich ab, jedoch liegt sie bei 200 nm noch immer über 85 %. Damit liefern entsprechende Linsen eine ausreichende Transmission im UV-Bereich, um genug Licht für eine Analyse in den Spektrometereingang fokussieren zu können. Allerdings muss die sinkende Transmission unter 300 nm beim Betrachten der relativen Intensitäten der Spektrallinien am Ende berücksichtigt werden. [4]

3.2.2 Spiegel

Als zweiter Punkt für den Strahlengang fehlen noch die Grundideen zu Spiegeln beim Einsatz in dieser Arbeit. Im Gegensatz zu Haushaltsspiegeln ist die reflexive Beschichtung bei Spiegeln für optische Anwendungen nicht auf der Rückseite eines anderen,

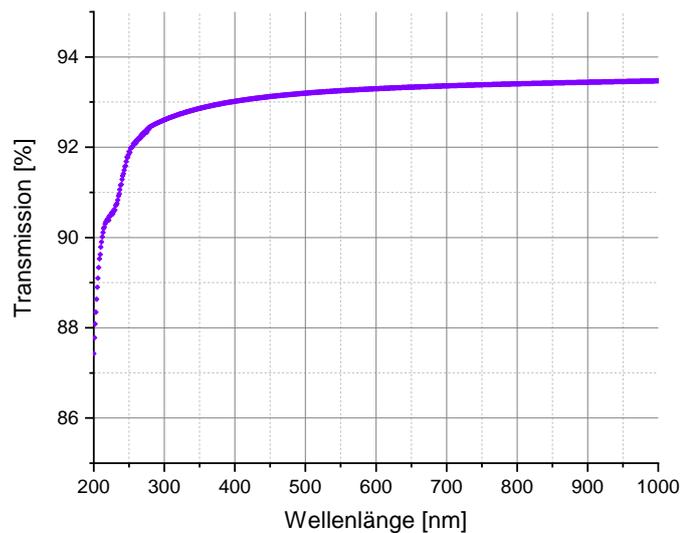


Abbildung 3: Graph zur Veranschaulichung der Transmission verschiedener Wellenlängen durch unbeschichtete Quarzglaslinsen von Thorlabs bei einer Dicke von 10 mm. Graph erstellt nach [4].

transparenten Mediums, sondern auf dessen Vorderseite zu finden. Das führt zu einer hohen Empfindlichkeit gegenüber Schmutz und Sauerstoff. Dementsprechend ist beim Aufbau Vorsicht geboten. Spiegel können in dem Aufbau des Strahlengangs für diese Arbeit eine vielseitige Rolle spielen. Das wird im Folgenden erläutert.

Parabolische Spiegel

Eine Alternative sind parabolische Spiegel. Ein solcher Spiegel kann in seiner Funktionsweise eine bikonvexe Linse, sowohl im Fokussieren als auch in der Kollimation, ersetzen. Eine Skizze, die das zu erläuternde Prinzip veranschaulicht, findet sich in Abbildung 4. Dabei wurde die optische Achse auf die y-Achse, und der Scheitel des Spiegels in den Ursprung des Koordinatensystems gelegt. Die reflektierende Oberfläche wird dann durch

$$y = k \cdot x^2 \tag{26}$$

beschrieben. Hierbei wird ein Spiegel beschrieben, dessen Form nur einen quadratischen Term mit Vorfaktor k hat. Für den Winkel α des Spiegels gegenüber der x-Achse an der Stelle eines senkrecht einfallenden Lichtstrahls gilt nun durch die Ableitung von

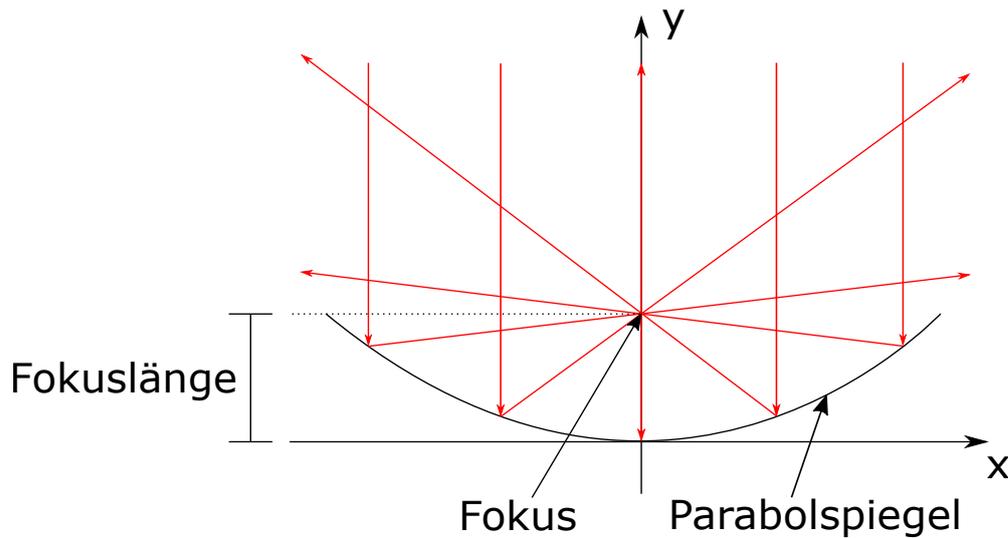


Abbildung 4: Skizze zur Erläuterung der Funktionsweise eines Parabolspiegels (Der Strahlengang ist in rot eingezeichnet, die roten Pfeile zeigen die Richtung des Lichts an, die Darstellung ist so gewählt, dass der Tiefpunkt des Spiegels mit dem Ursprung des Koordinatensystems übereinstimmt.) Skizze erstellt nach [24].

Gleichung 26:

$$\tan(\alpha) = \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x_0} = 2k \cdot x_0. \quad (27)$$

Dabei ist x_0 der x-Wert des senkrecht einfallenden Strahls. Aus trigonometrischen Überlegungen mit Berücksichtigung der Regel, dass bei Reflexion der Einfallswinkel gleich dem Ausfallswinkel ist, folgt für den y-Wert f des Fokus:

$$f = y_0 + \frac{x_0}{\tan(2\alpha)}, \quad (28)$$

wobei:

$$y_0 = y(x_0) = k \cdot x_0^2. \quad (29)$$

Durch Umformungen von Gleichung 28 und unter Benutzung von Gleichung 27 und Gleichung 29 findet man nach länglichen Umformungen für f schließlich:

$$f = \frac{1}{4k}, \quad (30)$$

unabhängig von x_0 . Das bedeutet, dass alle senkrecht einfallenden Lichtstrahlen denselben Punkt $(x,y) = (0,f)$ passieren. Das ist der gesuchte Fokus. Eine solche Herleitung eines von x_0 unabhängigen Schnittpunktes des Strahls mit der optischen Achse lässt sich ohne Näherungen nur für Spiegel mit einer wie in Gleichung 26 gegebenen, parabolischen Krümmung durchführen. [24] Da f in Gleichung 30 einzig von der Konstante k

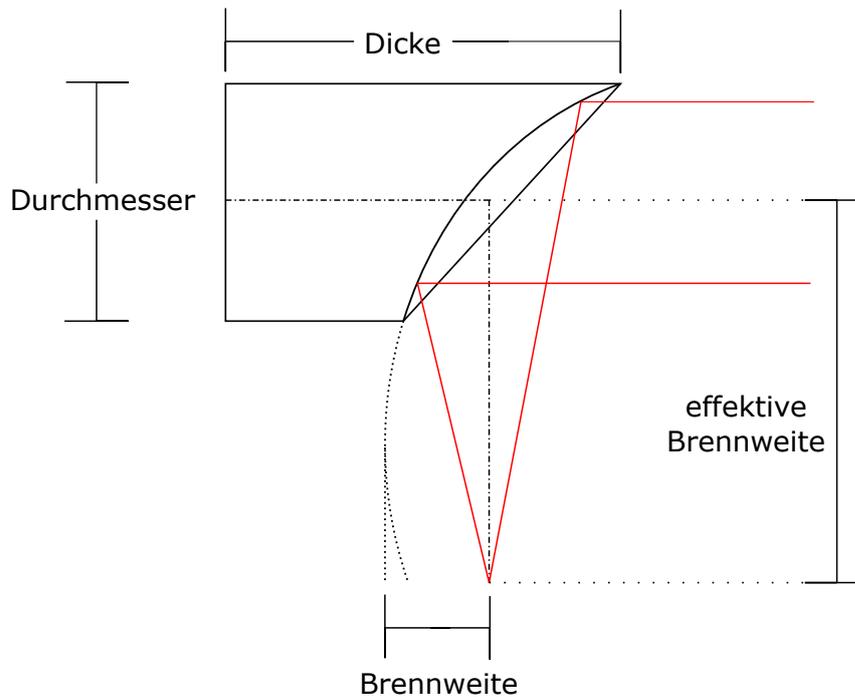
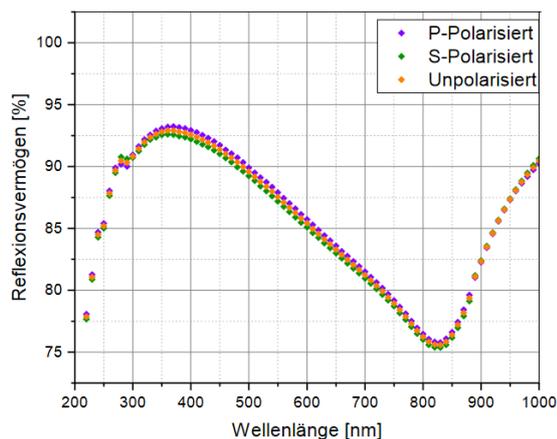


Abbildung 5: Skizze eines 90°-Off-Axis-Parabolspiegels (Der Strahlengang ist in rot eingezeichnet. Hier fehlen Richtungspfeile für die Richtung des Lichts. Beide Richtungen sind möglich sind. Das würde auch für andere Abbildungen zu Linsen und Spiegeln gelten. Damit zeigt die Skizze sowohl die Fokussierung von Licht, als auch die Kollimation von Licht durch einen Parabolspiegel.) Skizze erstellt nach [5].

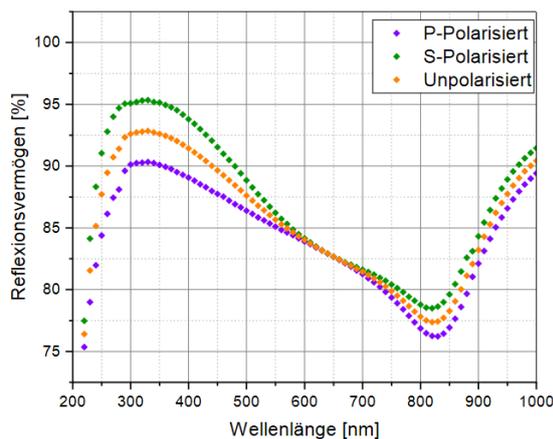
abhängt kann man immer einen beliebigen Parabelabschnitt wählen. Im Aufbau werden Off-Axis-Parabolspiegel eingesetzt, um den Lichtstrahl gleichzeitig um 90° abzulenken und auf den gewünschten Weg von der EBIT zum Spektrometer zu lenken. Die Funktionsweise ändert sich dabei nicht. Eine Skizze dessen, wie man sich den Einsatz der Parabolspiegel vorstellen kann, sowie wie sich hier die Brennweite ergibt, findet sich in Abbildung 5. Kommen die Strahlen nun parallel von rechts, so werden sie auf den Brennpunkt unten im Bild fokussiert. Kommen sie hingegen von einem Objekt oder von dem optischen Abbild eines Objekts aus dem Fokus unten im Bild, so

werden die Strahlen vom Spiegel in der Skizze nach rechts hin kollimiert. Die effektive Brennweite ergibt sich, wie in der Skizze ersichtlich, aus dem Abstand des Fokus zum Schnittpunkt der optischen Achsen vor und nach der Reflexion und weicht damit von der tatsächlichen Brennweite ab. [5]

UV-Optimierung



(a) 12° Einfallswinkel



(b) 45° Einfallswinkel

Abbildung 6: Graph zur Veranschaulichung des Reflexionsvermögens der UV-verstärkten, aluminiumbeschichteten Spiegel von Thorlabs bei 12° und bei 45° Einfallswinkel bei verschiedenen Wellenlängen mit verschiedenen Polarisierungen. Skizze erstellt nach [6].

Parabolische Spiegel haben zwar eine achromatische Brennweite, aber die Reflexivität von sowohl ebenen wie auch parabolischen Spiegeln ist wellenlängenabhängig.

Um eine hohe Reflexivität im UV-Bereich zu erhalten, sind die Spiegel mit UV-verstärktem Aluminium beschichtet. Das Reflexionsvermögen solcher Spiegel findet sich in Abbildung 6. Hier kann zwischen P-, bzw. S-polarisiertem Licht, sowie unpolarisiertem Licht unterschieden werden. S-polarisiert bedeutet, dass das einfallende Licht als Welle parallel zur reflexiven Oberfläche schwingt. P-polarisiert bedeutet, dass das einfallende Licht als Welle beim Einfallen senkrecht zum S-Polarisierten Licht schwingt. Unpolarisiertes Licht schwingt als Welle in keine exklusiv ausgezeichnete Richtung. Ebenso spielt der Einfallswinkel für das Reflexionsvermögen eine Rolle. Die Datenpunkte für das unpolarisierte Licht in Abbildung 6b sind für den Strahlengang zwischen EBIT und Spektrometer am wichtigsten. Warum, wird nun erklärt: Im Aufbau wird vorwiegend

mit 90°-Ablenkungen, also mit 45° Einfallswinkel gearbeitet. Das Reflexionsvermögen bei einem Einfallswinkel von 12° ist dennoch in Abbildung 6a dargestellt, da damit die Tendenzen im Reflexionsvermögen bei unterschiedlichen Einfallswinkeln erahnt werden können (Anwendung findet dies im Spektrometer selbst). Für unpolarisiertes Licht findet man, dass lediglich das Minimum an Reflexionsvermögen bei ungefähr 830 nm für einen Einfallswinkel von 12° noch etwas niedriger liegt als bei 45° Einfallswinkel. Das von der EBIT kommende Licht könnte, aufgrund der dort auftretenden spontanen Emission, als unpolarisiert charakterisiert werden, wenn da nicht die in Abschnitt 2.6 erklärte Zeeman-Aufspaltung wäre. Für die Kalibrationslampen gilt, dass das Licht aufgrund spontaner Emission unpolarisiert ist. Betrachtet man nun die zugehörigen Datenpunkte, so findet man, dass ein Reflexionsvermögen von 75 % im gesamten Wellenlängenbereich von gut 200 nm bis hin zu 1000 nm nicht unterschritten wird. Das maximale Reflexionsvermögen liegt bei 92,5 % und wird bei Wellenlängen im Bereich um 330 nm erreicht. [6]

Damit ist ein ausreichendes Reflexionsvermögen der Spiegel in dem zu untersuchenden Bereich von ca. 200 nm bis ca. 1000 nm sichergestellt. Auch hier müssen aber bei dem Aufbau des Strahlengangs sowie beim Betrachten der Intensitäten der auszuwertenden Linien am Ende die Unterschiede in den Reflexionsvermögen und der Verlust an Photonen pro Spiegel im Hinterkopf behalten werden.

Die Zusammenfassung dieses Kapitels ist damit: Verwendet man nun eine Linse zusammen mit einem flachen Spiegel, so wird die Intensität des Lichts zweimal abgeschwächt. Verwendet man dagegen einen angewinkelten Parabolspiegel, so fällt die Intensität lediglich einmal an dem Parabolspiegel ab.

Damit zeigen sich schließlich alle Vorteile von parabolischen Spiegeln gegenüber Linsen: An einem Paraboloiden geht weniger Intensität verloren, als an der Kombination von einer Linse und einem flachen Spiegel. Und es findet sich, wie erläutert, dass Paraboloiden keine chromatische oder sphärische Abberation aufweisen, im Gegensatz zu Linsen.

3.3 Das Czerny-Turner-Spektrometer

Der Strahlengang führt von der EBIT ins Spektrometer. Im Spektrometer befindet sich ein Blaze-Gitter. Daher ist dessen Funktionsweise für ein Verständnis des Czerny-Turner-Spektrometers (CT-Spektrometer) essentiell und wird nun zunächst erläutert.

3.3.1 Reflexionsgitter

Grundsätzlich existieren zwei Arten von Gittern: Transmissionsgitter und Reflexionsgitter. Bei Fraunhofers Gitter handelte es sich um ein Transmissionsgitter. Beim Blaze-Gitter hingegen handelt es sich um ein Reflexionsgitter, was bedeutet: durch einen Weglängenunterschied des ein- und ausfallenden Lichts gibt es einen Phasenunterschied zwischen den einzelnen Lichtstrahlen. Dieser Phasenunterschied wirkt sich dann, je nach Einfallswinkel und Ausfallswinkel und Wellenlänge des Lichts, konstruktiv, oder destruktiv für das reflektierte Licht aus. Dadurch wird das Licht winkelabhängig in seine Wellenlängen aufgespalten. [24]

Dieser Weglängenunterschied für das ein- und ausfallende Licht wird durch die säge-

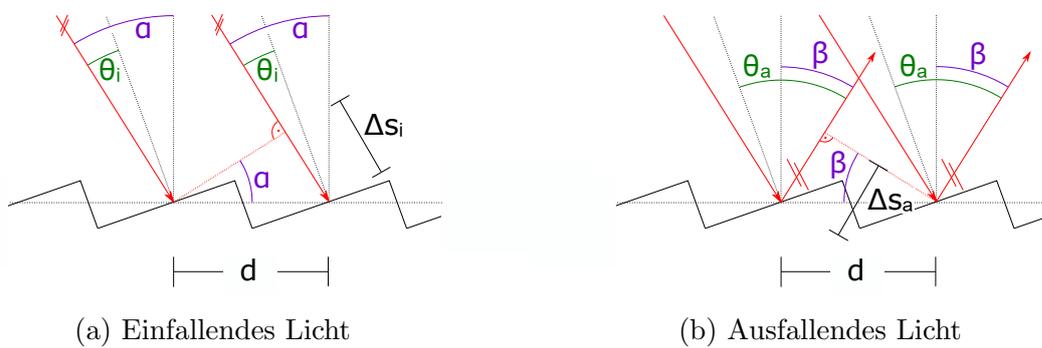


Abbildung 7: Skizze zur Erklärung des von einem Blaze-Gitters erzeugten Wegunterschieds bei der Reflexion von Lichtstrahlen (Das Gitter selbst ist im Querschnitt mit seiner sägezahnförmigen Oberfläche in schwarz dargestellt. Der Strahlengang ist in rot eingezeichnet, die roten Pfeile geben die Richtung des Lichts an. In violett findet sich der Winkel vom Licht zum Lot zum makroskopischen Gitter, in grün der Winkel zum Lot zur reflektierenden Oberfläche.) Skizzen erstellt nach [24].

zahnförmige Oberfläche des Gitters im Querschnitt erzeugt. Veranschaulicht wird dies in Abbildung 7. Dabei wird in Abbildung 7a das auf das Gitter einfallende Licht betrachtet, wohingegen in Abbildung 7b der Fokus auf den reflektierten und ausfallenden Lichtstrahlen liegt. Die im folgenden benutzten Variablen entsprechen denen aus Abbildung 7. α stellt im folgenden den Winkel zwischen dem einfallenden Licht und dem Lot zum makroskopischen Gitter dar, β den Winkel zwischen dem ausfallenden Licht und dem Lot zum Gitter, θ_i den Winkel zwischen den einfallenden Lichtstrahlen und dem Lot zur reflektierenden, sägezahnförmigen Oberfläche, und θ_a den Winkel zwischen den ausfallenden Lichtstrahlen und dem Lot zur reflektierenden Oberfläche. Darüber hinaus beschreibt θ_B , der sogenannte Blaze-Winkel, den Winkel zwischen dem Lot zum

Gitter und dem Lot zur reflektierenden Oberfläche. Als Konvention für die folgenden Rechnungen wird nun angenommen, dass alle Winkel, die vom Lot zum Gitter aus nach rechts (im Sinne von Abbildung 7) zeigen, negativ sind. Damit wird sichergestellt, dass die folgende Herleitung auch für nach der Konvention positive Werte für β noch gilt, bzw. in anderen Worten: die Herleitung gilt auch für nach links oben ausfallende Lichtstrahlen, anstatt nur für nach rechts oben ausfallende Lichtstrahlen. Nun erkennt man in Abbildung 7a den Weglängenunterschied Δs_i der beiden exemplarisch eingezeichneten Lichtstrahlen beim Einfallen auf das Gitter:

$$\Delta s_i = d \cdot \sin(\alpha), \quad (31)$$

wobei d den Abstand zweier benachbarter Sägezahnzacken beschreibt. Für den Weglängenunterschied bei den ausfallenden Strahlen Δs_a ergibt sich analog:

$$\Delta s_a = d \cdot \sin(\beta). \quad (32)$$

Somit ergibt sich der gesamte Wegunterschied der Lichtstrahlen am Gitter Δs als Summe aus Gleichung 31 und Gleichung 32, welcher für eine konstruktive Interferenz der Lichtstrahlen einem ganzzahlig vielfachen der Wellenlänge λ entsprechen muss.

$$n\lambda = \Delta s = d \cdot (\sin(\alpha) + \sin(\beta)). \quad (33)$$

n kann hier ein beliebiges Element aus den ganzen Zahlen sein. Man spricht dann bei gegebenem n von einem Maximum n -ter Ordnung. Die Intensität fällt schnell von Maximum zu Maximum ab, je weiter man sich von $n = 0$ entfernt. Wenn nun auch noch für den durch das Gitter gegebenen Blaze-Winkel θ_B das Reflexionsgesetz erfüllt ist, und damit $\theta_i = \theta_a$ gilt, dann wird der Großteil des einfallenden Lichts in die gewünschte Ordnung für das Interferenzmaximum konzentriert. Für die Winkel gilt:

$$\theta_i = \alpha - \theta_B, \quad \theta_a = \theta_B - \beta, \quad (34)$$

wie in Abbildung 7a und Abbildung 7b erkennbar. [24]

Da hier aufgrund des im Anschluss erklärten Gesamtaufbaus des Spektrometers von nur

parallelen, auf das Gitter einfallenden Lichtstrahlen ausgegangen werden kann, reichen die exemplarisch betrachteten zwei Lichtstrahlen und der exemplarisch betrachtete Ausschnitt des Querschnitts des Gitters, um eine konstruktive Interferenz des Lichts auf der gesamten Breite des Gitters nach Gleichung 33 folgern zu können. Dies führt direkt zu einem der großen Vorteile eines Blaze-Gitters: die Gesamtheit des einfallenden Lichts trägt zur resultierenden Interferenz des ausfallenden Lichts bei [24].

3.3.2 Funktionsweise des CT-Spektrometers

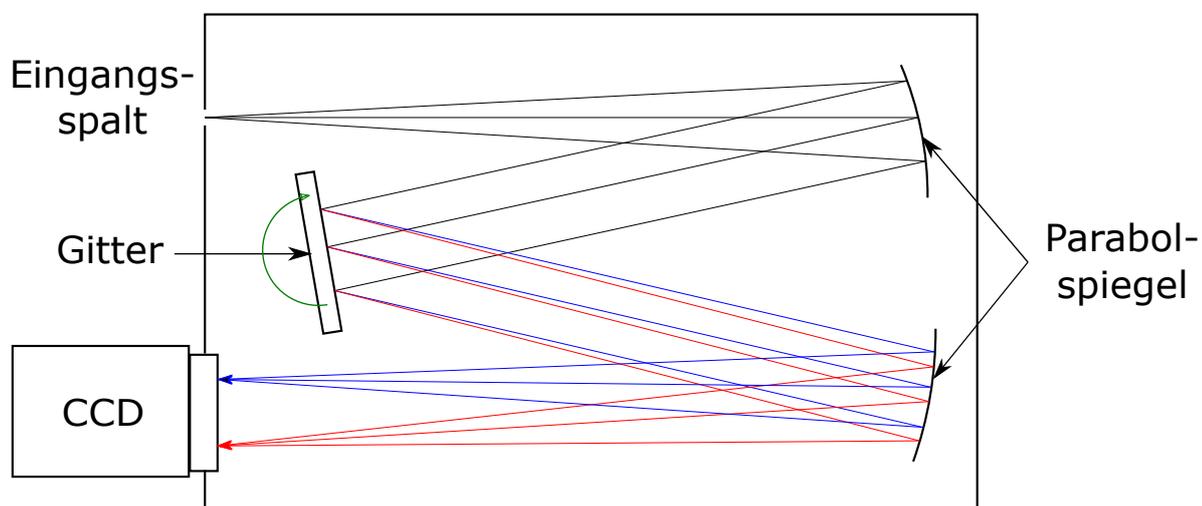


Abbildung 8: Darstellung eines CT-Spektrometers (Dabei ist der Strahlengang des einfallenden weißen Lichts in schwarz eingezeichnet, und die blauen und roten Strahlen stehen für blaues und rotes Licht nach der Brechung des Lichts am Gitter. Die Richtung des Lichts wird durch die blauen und roten Pfeile am Ende des Strahlengangs verdeutlicht. Der grüne Pfeil stellt die mögliche Rotation des Gitters im Spektrometer dar. CCD steht für eine Charge Coupled Device-Kamera. Die schwarze Rand der Skizze stellt das Gehäuse des Spektrometers dar und dient der Abschirmung aller anderen Lichtquellen.) Skizze erstellt nach [24].

Es wurden bereits parabolische Spiegel wie auch das Blaze-Gitter in ihrem Mechanismus erklärt, sodass nun alle Grundlagen für den Aufbau eines CT-Spektrometers gelegt wurden. Dieser Aufbau ist in Abbildung 8 zu finden und lässt sich anknüpfend an die Me-

chanismen von parabolischen Spiegeln und dem Blaze-Gitter ohne große Überraschungen erklären. Für die folgende Erklärung wird einfach dem Strahlengang durch das Spektrometer gefolgt. Das Licht aus der Kalibrationslampe bzw. der EBIT trifft fokussiert auf den Eintrittsspalt des Spektrometers. Dieser wird für möglichst genaue Messungen möglichst weit geschlossen. Somit ist das Licht hier vereinfacht als in einer Linie angeordnete Punktlichtquellen zu betrachten. Der Eintrittsspalt liegt nun im Fokus des ersten Parabolspiegels, der von dem Licht aus dem Eintrittsspalt getroffen wird, und der bzgl. des Eintrittsspalts leicht schräg steht. Damit kollimiert und reflektiert der erste Parabolspiegel das auf ihn einfallende Licht in Richtung des Gitters, das neben dem Eintrittsspalt liegt. Das Gitter wiederum spaltet (nach Wellenlängen) und reflektiert das parallele, einfallende Licht nach Gleichung 33 schräg zurück in Richtung des zweiten Parabolspiegels. Dieser fokussiert dann die bei ihm eintreffenden, immer noch parallelen Lichtstrahlen nach Gleichung 30 zurück auf einen Ausgang des Spektrometers, bei dem im Fall des hier gewählten Aufbaus eine CCD-Kamera angeschlossen ist. Bei den beiden Spiegeln im Spektrometer können für das Reflexionsvermögen weder Abbildung 6a noch Abbildung 6b herangezogen werden, da der Einfallswinkel des Lichts auf die Spiegel im Spektrometer weit mehr als 45° beträgt. Außerdem wurden die Spiegel im Spektrometer, soweit bekannt, auch nicht von Thorlabs hergestellt, deren Herstellerdaten in Abbildung 6 angetragen sind (Die Herstellerdaten vom Hersteller der Spiegel im Spektrometer fehlen. Für die Spiegel im Strahlengang von der EBIT zum Spektrometer ist Edmund Optics der Hersteller). Um nun verschiedene Wellenlängen mit zugehörigem Interferenzmaximum untersuchen zu können, ist das Gitter im Spektrometer drehbar montiert und mit einem Schrittmotor für die zugehörige Rotation verbunden. Damit wird das Gitter verdreht, und somit der Einfallswinkel des Lichts auf das Gitter verstellt. Das führt dazu, dass die auf der CCD-Kamera zentrierte Wellenlänge sich mit der Rotation ändert. Ein solches Gitterspektrometer hat gegenüber einem Prismenspektrometer den Nachteil, dass im Beugungsbild auch Maxima höherer Ordnung auftreten können, und somit das Beugungsbild mit den Maxima erster Ordnung stören können. Als problematisch gilt auch, dass es für zunehmend kleinere Wellenlängen zunehmend schwerer wird, Gitter mit ausreichend kleinen Gitterkonstanten herzustellen, speziell wenn die Gitterkonstanten unter einigen Mikrometern liegen sollen. Dennoch haben Gitterspektrometer wie hier einen großen Vorteil gegenüber Prismenspektrometern: es ist schwer, Materialien für Prismen zu finden, die transparent für große Wellenlängenbereiche sind und sich gleichzeitig gut zu Prismen verarbeiten lassen. Hingegen ist es gut machbar, Materialien zu finden, die ein zu diesem Zwecke ausreichendes Reflexionsvermögen für große Wellenlängenbereiche besitzen und gleichzeitig zu Reflexionsgittern verarbeitet

werden können. Dieser Vorteil ist hier auch sehr entscheidend, da es möglich sein soll, einen Bereich von 200 nm bis hin zu 1000 nm abzudecken. Schließlich ist aber der wichtigste Punkt, dass dadurch auch die Dispersion größer ist, was eine höhere Auflösung und damit genauere Ergebnisse mit sich bringt. [24]

3.3.3 CCD-Kamera

Ebenfalls relevant beim Spektrometer ist noch die sogenannte CCD-Kamera, also der Detektor im Aufbau. Die Funktionsweise ist hier für den Aufbau von geringer Bedeutung. Nichtsdestotrotz muss der Mechanismus der CCD hier kurz erläutert werden, um die notwendigen Korrekturen der erhaltenen Daten aus der CCD zu verstehen. CCD steht hier für Charge Coupled Device. Hinter einer solchen Kamera steht ein von Willard S. Boyle und George E. Smith eingeführtes Konzept, welches sie im Januar 1970 publizierten [23]. Daraufhin gab es für die Idee einen so großen Aufwind und so große Fortschritte in der Optimierung der Herstellung solcher Kameras, dass Boyle und Smith gemeinsam mit Charles K. Kao (der damit für seine Arbeit an Glasfasertechnologien gewürdigt wurde) 2009 den Nobelpreis für Physik erhielten [7]. Dieses Konzept beruht auf dem photoelektrischen Effekt in Halbleitern: wie bei einer Photodiode erzeugen Photonen, wenn sie mit genügend Energie auf die Verarmungszone eines p-n-Übergangs treffen, ein Elektron-Loch-Paar. Diese werden als freie Ladungsträger in den nächstgelegenen Pixeln gespeichert, indem jedes Pixel so gepolt ist, dass es einen Potentialtopf darstellt. Realisiert wird das durch in einen Isolator eingebettete Metallstreifen, mit entgegengesetzter Polung für benachbarte Streifen. Die Pixel werden anschließend zeilenweise ausgelesen, indem sie (durch gezieltes Umpolen der Pixel als Potentialtöpfe) invertiert werden, und die gespeicherten Ladungen Schritt für Schritt zum Auslesen an den Rand der CCD wandern. Dort folgt durch die freien Ladungsträger ein Strom, der verstärkt und in ein digitales Signal gewandelt werden kann. Hier kommt ein Analog-to-Digital Converter zum Einsatz. Das erhaltene Signal ist schließlich proportional zum Strom, welcher wiederum (bis auf den Offset durch die Austrittsarbeit beim photoelektrischen Effekt) proportional zur in der Umgebung des Pixels deponierten Energie ist. [16, 23]

Durch einen solchen Aufbau ergeben sich nun verschiedene Fehlerquellen, deren resultierende Ungenauigkeiten jedoch leicht behoben werden können, wenn man sich ihrer bewusst ist. Die erste Fehlerquelle ist, dass in CCD-Kameras thermisches Rauschen das tatsächliche Signal völlig dominiert, wenn die Kamera nicht entsprechend gekühlt wird. Bei der verwendeten Kamera liegt die Betriebstemperatur bei -70 °C . Je höher die Tem-

peratur wird, umso verrauschter wird das aufgenommene Bild, da die für das Signal produzierten Elektron-Loch-Paare ebenso durch thermische Anregung erzeugt werden können. Damit wird ebenso ein Signal durch diese Anregungen wie durch einfallende Photonen erzeugt. Darüber hinaus ist keine reale CCD-Kamera eine ideale CCD-Kamera. Das bedeutet, dass eine reale CCD-Kamera tote Pixel aufweist, und auch sensiblere Regionen bzw. sensiblere Pixel auftreten. Und genauso treten auch weniger sensible Pixel und weniger sensible Regionen auf. Um dieser Fehlerquelle entgegenzuwirken, wird häufig ein sogenanntes Flat-Field Bild aufgenommen. Dabei nimmt die Kamera ein Bild eines konstant ausgeleuchteten, weißen Schirms auf. Am Ende kann dann das zu untersuchende Bild durch dieses Flat-Field Bild geteilt werden, und tote Pixel können extrahiert werden. Damit wird genau diesem Effekt der Unterschiede in den Pixeln durch eine Art der Normierung entgegengewirkt. Im Falle dieser Arbeit wird jedoch stattdessen mit Dunkelbildern sowie mit anderen Methoden der digitalen Datenauswertung gearbeitet. Darauf wird in Kapitel 4 näher eingegangen. Ganz grob gesagt: Bei Dunkelbildern werden Bilder ohne die zu untersuchenden Lichtquellen aufgenommen (wobei die Kamera dafür meist einfach von allen Lichtquellen abgeschirmt wird) und anschließend werden diese Bilder von den gewünschten Aufnahmen abgezogen. Als letzte relevante Fehlerquelle treten sogenannte Cosmics in Erscheinung. Hierbei sind vor allem kosmische Myonen gemeint, die beim Auftreffen von kosmischer Strahlung auf die Atmosphäre entstehen und (trotz kurzer Lebensdauer aufgrund hoher Geschwindigkeit und relativistischer Effekte) auch auf die CCD-Kamera auf der Erdoberfläche treffen. Die dabei eintreffenden Myonen deponieren sehr hohe Energien in der Verarmungszone der CCD und lösen Elektron-Loch-Paare heraus. Das kann daran gesehen werden, dass bei aufgenommenen Bildern mit CCD-Kameras einzelne Pixel im Vergleich zu ihrer Umgebung völlig überbelichtet sind. Auch dieses Problem wird in der digitalen Datenauswertung in Kapitel 4 behoben. [16, 10]

3.4 Entscheidungen bei der Durchführung des Aufbaus

Auf den letzten Seiten wurde der, dieser Arbeit zugrunde liegende, Aufbau eingeführt. So kann schließlich auf die Durchführung des Aufbaus, mit den entstandenen Komplikationen und den Lösungsideen, eingegangen werden kann. Da die Durchführung des Aufbaus selbst nur wenig mit den erhaltenen Ergebnissen zu tun hat, wird dieser Abschnitt kurz

gehalten. Darüber hinaus soll an dieser Stelle angemerkt sein, dass die HD-EBIT (zum Vermessen der elektronischen Übergänge in Xenon für diese Arbeit) bereits vollständig aufgebaut und in Betrieb ist, sodass sich die folgenden Seiten lediglich mit dem Aufbau von allem um das CT-Spektrometer herum auseinandersetzen werden. Die Inbetriebnahme des Spektrometers bestand aus zwei großen Abschnitten. Zunächst wurde die vorhandene Elektronik ersetzt. Anschließend befasste man sich mit den Optiken für den Strahlengang. Die Maße des Spektrometers können Abbildung 9 entnommen werden.

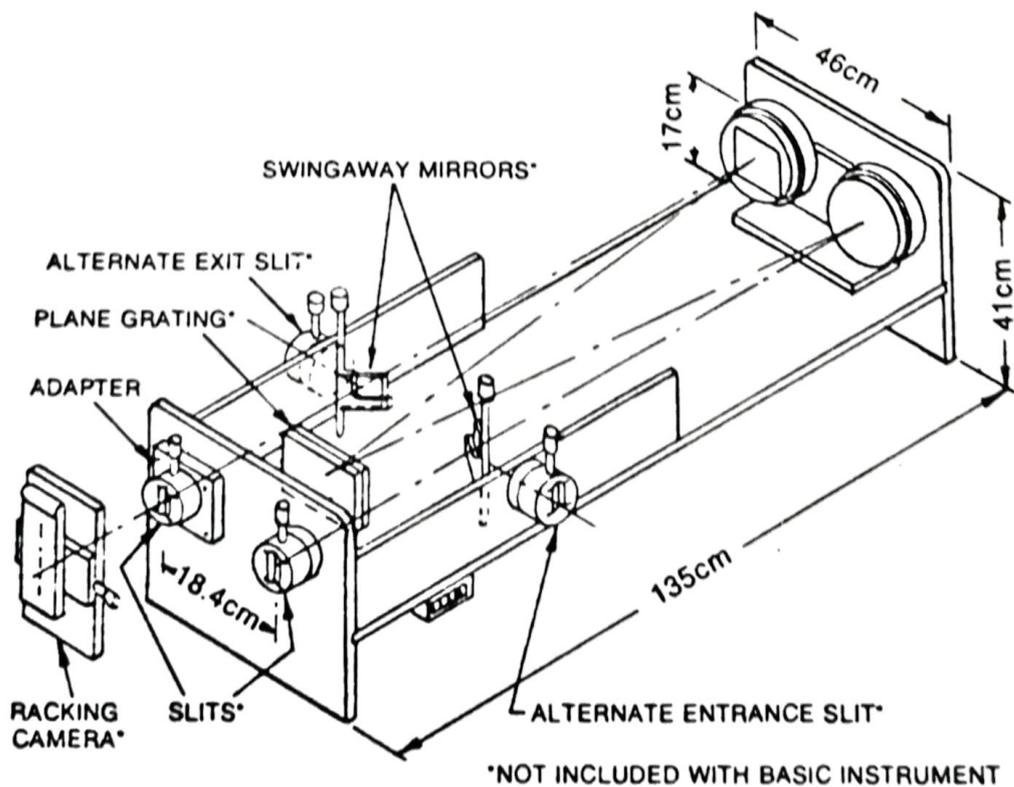


Abbildung 9: Skizze mit Maßen des Spektrometers des Herstellers (Spex Industries, Inc.). Dabei sind Eintritts- und Austrittsspalt als SLITS bezeichnet, das Gitter als PLANE GRATING. Die Hohlspiegel sind rechts oben in der Skizze zu sehen. Die restlichen Bestandteile der Skizze sind für den weiteren Aufbau nicht relevant.

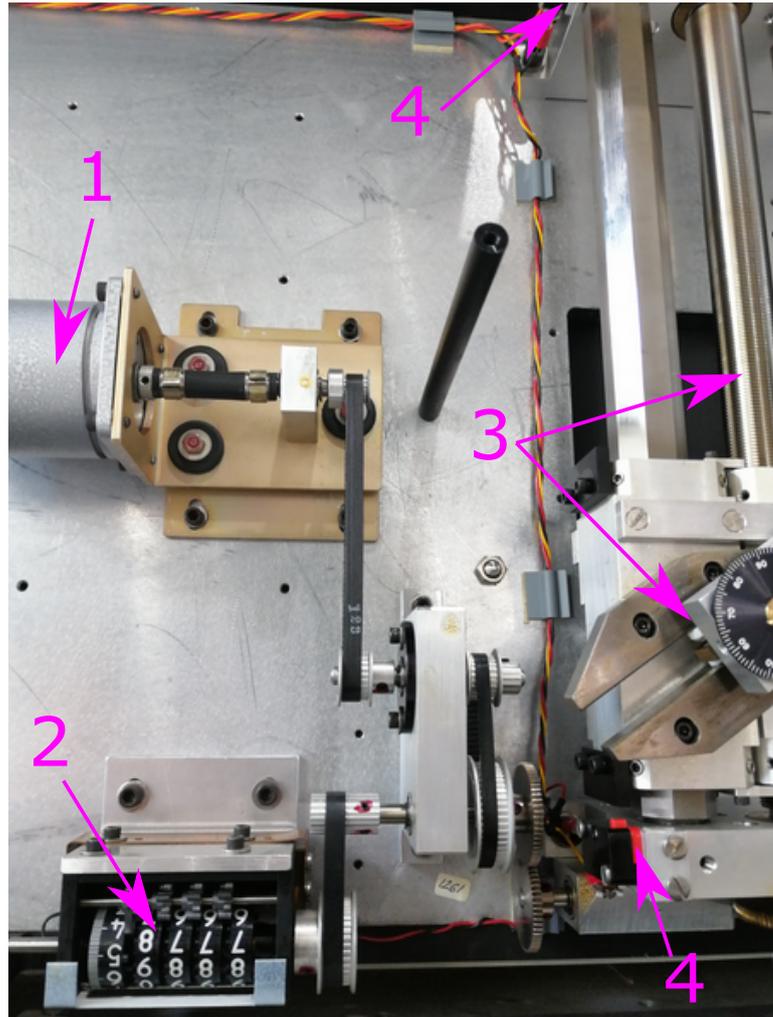


Abbildung 10: Foto der Elektronik und Mechanik zum Ansteuern des Gitters des Spektrometers. Im Bild ist der Schrittmotor (1) zu sehen, der über Zahnräder und Gummiriemen mit der Außenanzeige des Spektrometers (2) und mit der Welle mit Sinusübersetzung (3) verbunden ist. Zudem sind die Kabel zu sehen, die mit den roten Tastern (4) als Endschalter verbunden sind. Die Kabel führen links oben aus dem Bild heraus zu dem Arduino, der über den Treiber indirekt auch mit dem Motor verkabelt ist.

3.4.1 Elektronik

Das Erste, was an dem Spektrometer vor Beginn der Inbetriebnahme auffiel, war die veraltete Steuereinheit, mit der man den Motor zum Rotieren des Gitters im Spektrometer ansteuern konnte. Ziel war es, das Gitter von einem Computer aus ansteuern zu können, um die entstehenden Bilder im Spektrometer und die Gitterposition aufeinander abstimmen zu können. Die Verkabelung des Motors war zwar klar, jedoch war nicht klar,

welche Signale die Steuereinheit durch die Kabel über den Schrittmotortreiber zum Motor schickte. Daher war es nicht möglich, einfach die Steuereinheit durch einen Computer zu ersetzen. Die nächste Überlegung war, Treiber und Steuereinheit durch einen neuen Treiber und einen Computer zu ersetzen. Für das Modell des Schrittmotors war aber kein passender Treiber vorhanden, während Treiber plus Motor für ein anderes Modell schon vorhanden waren. Daher fiel die Entscheidung, auch den Motor durch einen neuen Schrittmotor zu ersetzen. Also wurde der neue Motor mit einem neuen, sehr kompakten Treiber eingebaut, der Treiber mit einem Arduino [8] verbunden (wobei der Arduino den Treiber ansteuert), und der Arduino mit einem Computer verbunden (der Computer schickt dabei die Befehle zum Verfahren des Motors an den Arduino). Bevor die ersten Tests gemacht werden konnten, musste sicher gestellt werden, dass der Motor im Falle eines falschen Kommandos zum Verfahren das Gitter nicht über den Anschlag hinaus verfährt und das Spektrometer beschädigt. Zu diesem Zweck waren bereits Taster in die Mechanik des Spektrometers eingebaut, die ausgelöst werden, wenn der Motor zu nahe zu dem Anschlag der Mechanik hin verfährt. Diese Taster wurden auch an den Arduino angeschlossen, und der Code für den Arduino wurde so geschrieben, dass im Falle des Auslösens der Taster der Motor sofort anhält. Zudem wurde der Code so modifiziert, dass der Motor anhält, wenn die Verbindung zu den Tastern unterbrochen wird. Damit wird sichergestellt, dass im Falle eines losen Kabels der Motor nicht über den Taster hinaus verfahren kann und den Aufbau beschädigt. Das Verfahren des Motors selbst war einfach zu kontrollieren, da der Schrittmotor über eine Welle mit Sinusübersetzung mit der Rotationsachse des Gitters verbunden ist. Damit hat ein lineares Verfahren des Schrittmotors ein lineares Verfahren der Wellenlängen am Ausgang des Spektrometers zur Folge. Nach diesen Schritten konnten erste Tests zu der Geschwindigkeit und Beschleunigung des Schrittmotors sowie zu Vergleichen der Position des Schrittmotors im Programm des Arduinos und der Wellenlänge am Ausgang des Spektrometers gemacht werden. Zudem hat das Spektrometer eine Außenanzeige für die Position des Gitters. Ein Foto der Elektronik zum Drehen des Gitters im Spektrometer findet sich in Abbildung 10. Nun war es das Ziel, zwischen der Außenanzeige des Spektrometers, der Wellenlänge am Ausgang und der digitalen Motorposition umrechnen zu können. Gelingt dies, so kann dem Programm zum Ansteuern des Motors der Wert der Außenanzeige des Spektrometers übergeben werden, das Programm kann daraus schlussfolgern, bei welcher Wellenlänge am Ausgang der Motor gerade steht, und das Programm weiß dann, wie es verfahren muss, um zu einer gewünschten Wellenlänge verfahren zu können. Auf diese Messungen wird in Abschnitt 4.1 eingegangen.

3.4.2 Optik

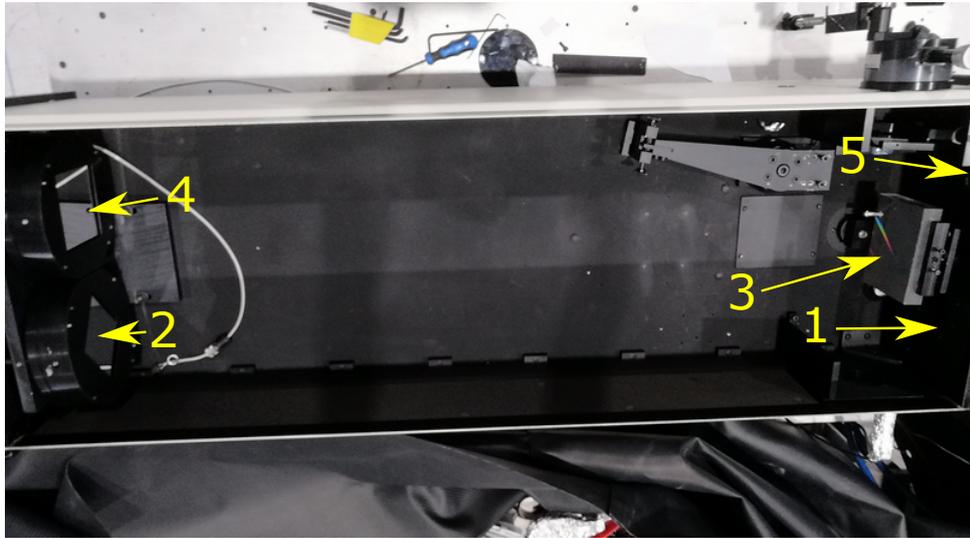


Abbildung 11: Foto des Spektrometers aus Vogelperspektive. Der Strahlengang läuft im Bild von rechts unten (Eintrittsspalt (1)) nach links unten (erster Hohlspiegel (2)) nach rechts Mitte (Gitter (3)) nach links oben (zweiter Hohlspiegel (4)) nach rechts oben (Kamera (5), die nicht im Foto zu sehen ist).

Erst nach der Justage wurden Kalibrationsspektren aufgenommen. Um diese Spektren möglichst präzise aufnehmen zu können, musste der Strahlengang möglichst gut einjustiert sein. Das bedeutet erstens, dass die Spiegel und das Gitter im Spektrometer gut ausgerichtet sein müssen, und zweitens, dass das Licht der Kalibrationslampe möglichst genau auf den Eingangsspalt des Spektrometers fokussiert sein muss. Zunächst wurden die Spiegel und das Gitter in dem CT-Spektrometer ausgerichtet (siehe Abbildung 11). Dafür wurde der Strahlengang rückwärts vom Ausgang zum Eingang des Spektrometers hin mithilfe eines Laserpointers ausgerichtet. Der Laserpointer musste dafür eben in den Ausgang des Spektrometers leuchten. Im Inneren konnte der Strahlengang verfolgt werden. Die Spiegel und das Gitter konnten dann so eingestellt werden, dass der Strahlengang mittig auf die Spiegel und das Gitter trifft, und das Spektrometer insgesamt in einer Ebene passiert. Zum Zwecke der Kalibrationsspektren war das schon ausreichend, wie in Abschnitt 4.1 erläutert werden wird. Schließlich muss das Spektrometer jedoch an eine Mini-EBIT angeschlossen werden. Gleichzeitig soll die Möglichkeit bestehen, einfach von dem Licht der EBIT auf eine Kalibrationslampe umzustellen, so dass beide Lichtquellen, wenn auf sie umgestellt wird, auf den Eintrittsspalt fokussiert sind (und ohne dass sonstige Einstellungen des Strahlengangs sich ändern). Dieser Aufbau

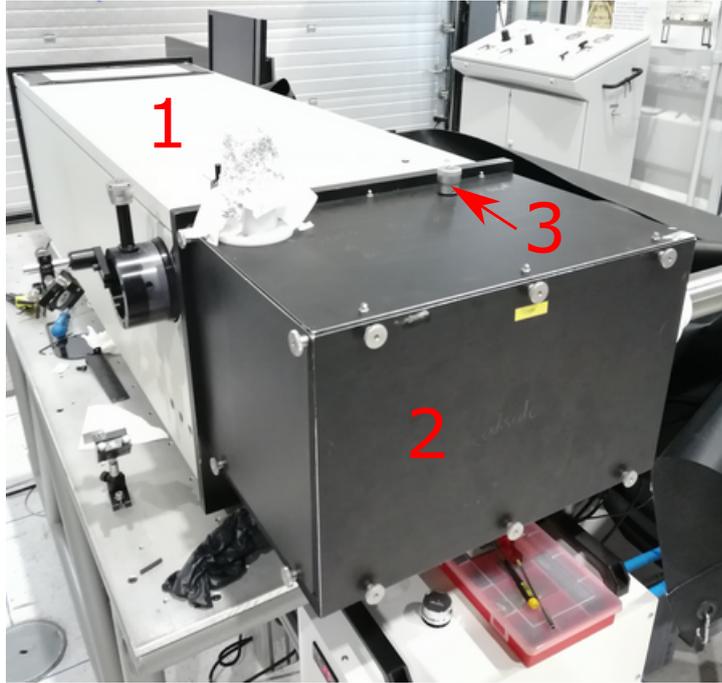


Abbildung 12: Foto der Box (2) zum Abdunkeln um den Eintrittsspalt und die Kamera. Die Box ist am Spektrometer (1) montiert. Das Rad (3) zum Öffnen und Schließen des Eintrittsspalts ist ebenfalls zu sehen.

ist aufgrund von Verzögerungen bei der Lieferung von Spiegeln für den Strahlengang nicht mehr Teil dieser Arbeit. Teile der Konzepte zu dessen Umsetzung wurden dennoch realisiert: An das Spektrometer wurde vor dem Eintrittsspalt und dem Ausgang eine Box aus Blechen angebaut, um Streulicht abzuschirmen (siehe Abbildung 12). In der Box soll die Kalibrationslampe positioniert und von einem parabolischen Spiegel kollimiert werden. Gleichzeitig soll das Licht aus der EBIT durch einen Paraboloiden kollimiert und anschließend durch ein Rohr in die Box geleitet werden. Dort soll dann durch einen Klappspiegel zwischen den beiden Lichtquellen umgeschaltet werden. Der Klappspiegel soll sich durch einen Arduino ebenfalls von außen ansteuern lassen. Das vom Klappspiegel kommende Licht soll dann durch einen weiteren Paraboloiden auf den Eintrittsspalt fokussiert werden. Die Entscheidung fiel für parabolische Spiegel anstatt für Linsen, da, wie im Theorieteil erläutert, bei parabolischen Spiegeln keine chromatischen oder sphärischen Aberrationen auftreten und ein Paraboloid die Intensität des Lichts weniger beeinträchtigt als die Kombination von einer Linse und einem planaren Spiegel. Eine Skizze des geplanten Strahlengangs ist in Abbildung 14 zu sehen. Der komplette Strahlengang, einschließlich der Box und dem Spektrometer, sollen am Ende mit Stickstoff geflutet werden. Das dient den Ergebnissen auf zwei Arten: Erstens werden

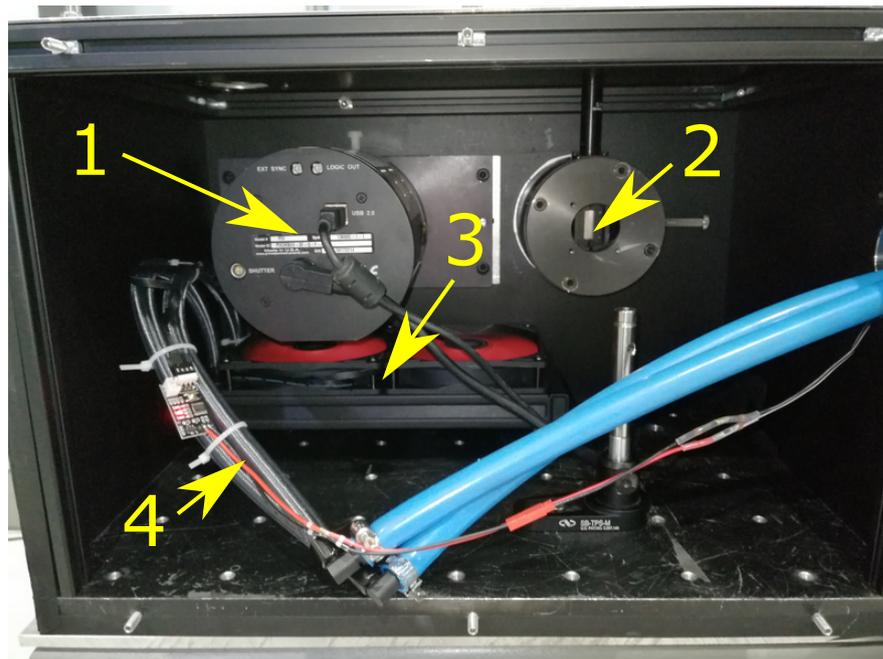


Abbildung 13: Foto des Innenlebens der Box zum Abschirmen von Streulicht. Rechts oben im Bild ist der Eintrittsspalt (2) zu sehen. Links oben ist die Kamera (1) mit ihren Anschlusskabeln zu sehen. Links unten im Bild ist die Kühlung (3) mit ihren elektronischen Anschlüssen und den Kühlwasseranschlüssen (4) zu sehen. Rechts unten ist ein Aufbau zu sehen, an dem Kalibrationslampen vor den Eintrittsspalt fixiert werden können.

die Spiegel und das Gitter damit vor Oxidation und ähnlichen Effekten geschützt. Zweitens absorbiert Sauerstoff in der Luft UV-Licht und schwächt damit die Intensitäten der vorhandenen Linien im UV-Bereich ab. Bei Stickstoff geschieht das nicht. Es sei zu den Ideen und Entscheidungen im Aufbau auch noch angemerkt, dass in der Box zur Streulichtabschirmung ein Kühlsystem integriert werden musste. Die CCD befindet sich ebenfalls in der Box, da auch hier kein Streulicht von der Seite auf den Sensor geraten soll. Um Dunkelstrom zu vermeiden, muss der Sensor in der CCD-Kamera aber konstant auf ca. $-65\text{ }^{\circ}\text{C}$ gekühlt sein. Diese Kühlung funktioniert durch Abgeben von Wärme an das die CCD kühlende Gas. Dadurch heizt sich das Gas in der Box immer weiter auf, und die Kühlung der Kamera wird schlechter und schlechter, sodass der Dunkelstrom zunimmt. Durch ein Kühlsystem wird dieses Problem vermieden. Die Wahl fiel hier auf eine Wasserkühlung (siehe Abbildung 13). Schließlich war trotz all der Bemühungen noch Streulicht auf den Bildern der Kamera erkennbar. Um diesen Rest an Licht abzuschirmen, wurde das Spektrometer von einer Teichplane bedeckt. Damit war auch

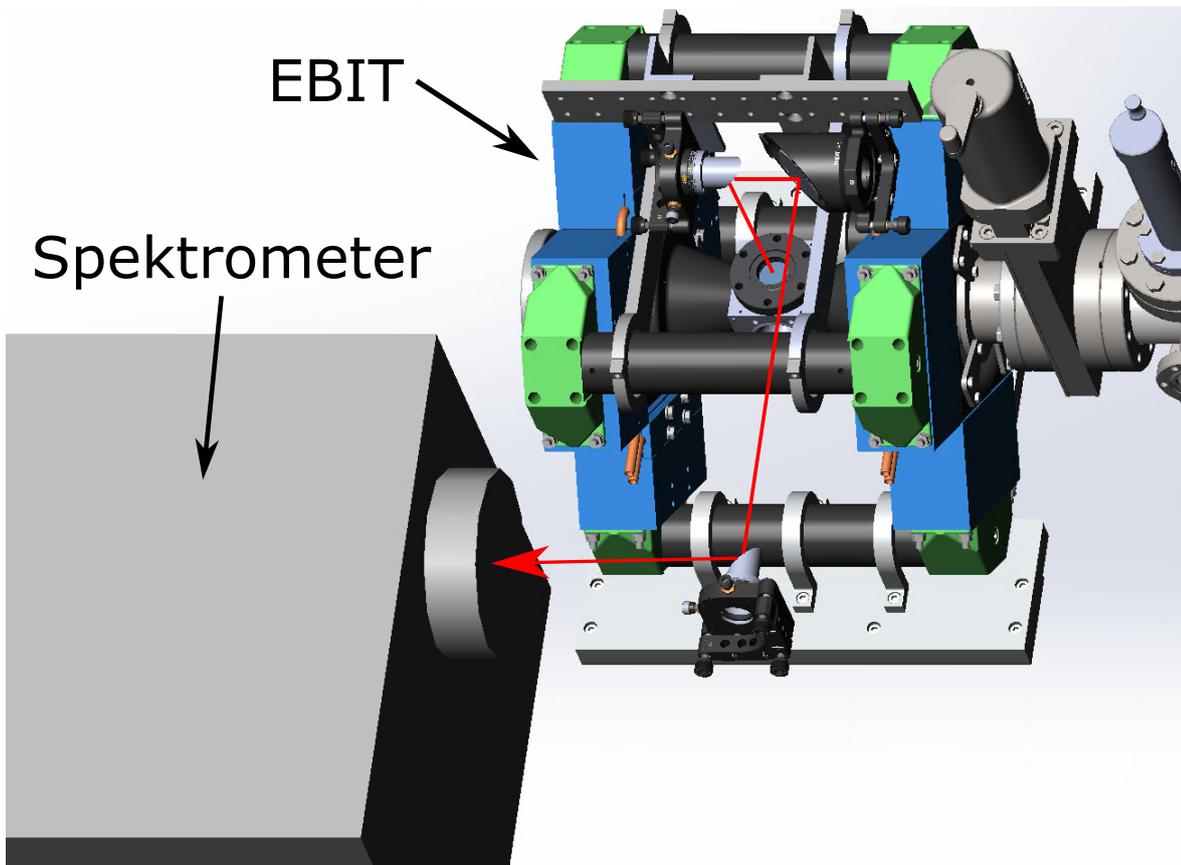


Abbildung 14: Darstellung des geplanten Strahlengangs. Die EBIT ist in grün, blau und schwarz dargestellt. Das Spektrometer ist links unten in grau zu sehen. Der Strahlengang selbst ist in rot eingezeichnet: Das Licht verlässt die EBIT über ein Fenster (blaugrau) und trifft auf den ersten Off-Axis Paraboloiden (hellgrau), der das Licht kollimiert und in der Skizze nach rechts ablenkt. Die parallelen Lichtstrahlen treffen dann auf einen ebenen Spiegel (oval im schwarzen Gehäuse dargestellt), der sie zu dem zweiten Paraboloiden weiter unten im Bild (auch in hellgrau) hin ablenkt. Dieser fokussiert sie dann auf den Eintrittsspalt des Spektrometers. Der zweite Paraboloid wird sich im Aufbau innerhalb der Box zum Abschirmen von Streulicht befinden, die in dieser Skizze zur besseren Übersicht weggelassen wurde.

dieses Problem gelöst, und das Spektrometer bis auf die noch fehlenden Spiegel für den Strahlengang einsatzbereit. Die Kalibrationsdaten und deren Auswertung folgen nun in Abschnitt 4.1.

4 Messungen und Fehler mit Auswertung

Nachdem nun der Versuchsaufbau sowie die theoretischen Grundlagen dieser Arbeit eingeführt wurden, kann sich jetzt der zentralen Frage nach den genommenen Messungen gewidmet werden. Zunächst wird in Abschnitt 4.1 auf die Daten der Kalibration des Spektrometers eingegangen. Anschließend werden in Abschnitt 4.2 die Messungen zu Xenon an der HD-EBIT dargelegt.

4.1 Kalibration des Spektrometers

Es sind zwei verschiedene Gitter für das Spektrometer vorhanden, ein feineres (1200 Linien pro mm) und ein gröberes (600 Linien pro mm) Gitter. Das feinere Gitter wird von nun an als Gitter 1 bezeichnet, das gröbere als Gitter 2. Für die Kalibration des Spektrometers wurde zunächst nach der Grunderneuerung der Elektronik das Gitter 1 eingesetzt und nacheinander eine Neon- und eine Xenon-Kalibrationslampe mit Linsen und planaren Spiegeln auf den Eintrittsspalt fokussiert. Der Einsatz von Linsen anstatt von Paraboloiden war an dieser Stelle vertretbar, da es sich hierbei nur um eine erste grobe Kalibration handelt. Dabei wurden bekannte Linien so verfahren, dass sie nach Augenmaß auf der Mitte der CCD zu sehen waren. Die Motorposition, die Außenanzeige des Spektrometers und die Wellenlänge der Linie wurden notiert. Diese drei Datensätze wurden jeweils paarweise gegeneinander angetragen und linear gefittet. Auf die Ergebnisse wird nun nicht genauer eingegangen, da diese durch eine spätere feine Kalibration völlig überholt wurden, aber diese Ergebnisse dienen dazu, bei der genauen Kalibration die gesehenen Linien durch Referenzpunkte schneller identifizieren zu können.

Dann folgte die genaue Kalibration. Dafür wurde eine Eisen-Kalibrationslampe mit Argon als Trägergas direkt vor dem Eintrittsspalt fixiert. Dadurch musste das Licht nicht erst in den Eintrittsspalt fokussiert werden. Der Eintrittsspalt wurde weitestmöglich geschlossen, sodass gerade noch Linien auf der CCD zu erkennen waren. Dann wurden

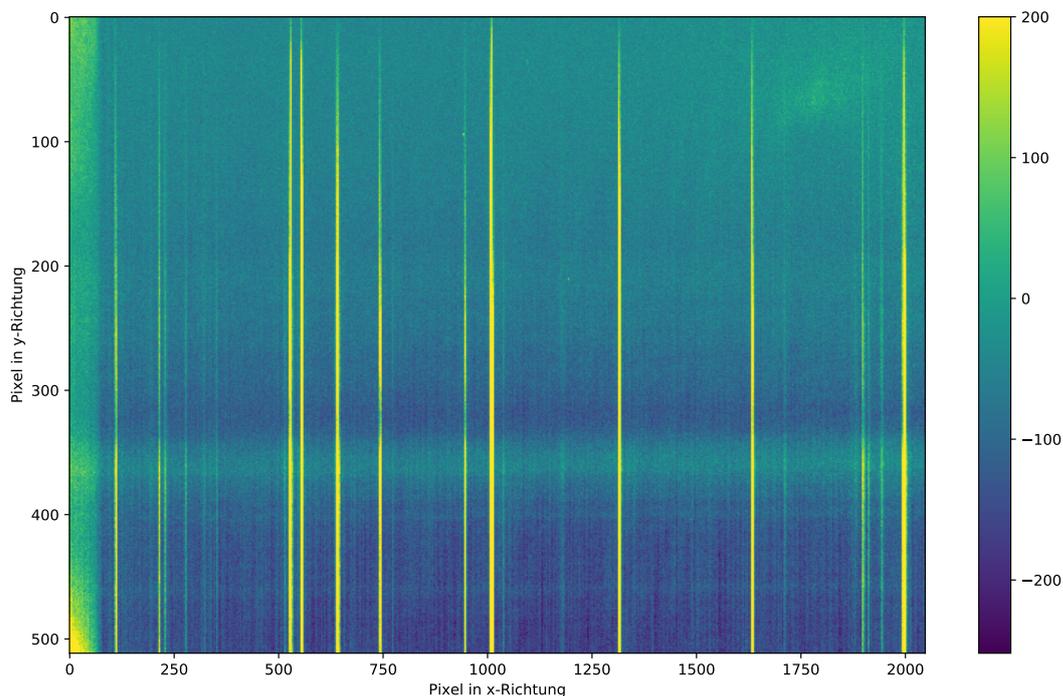


Abbildung 15: Kalibrationsbild (Fe-Ar-Lampe) bei ungefähr 420 nm für das Gitter 1 vor den Korrekturen. Die Farbskalierung stellt die Intensität dar. Aufgenommen wurde das Bild bei einer Spaltbreite von $100 \mu\text{m}$ und einer Belichtungszeit von 2 min.

Kalibrationsbilder im Bereich von 220 nm bis hin zu 970 nm in 50 nm-Schritten bei einer Sensortemperatur von $-65 \text{ }^\circ\text{C}$ und einer Belichtungsdauer von 2 min aufgenommen. Zunächst wurde für jedes Kalibrationsbild auch ein Dunkelbild aufgenommen, bei dem die Kalibrationslampe abgeschaltet wurde. Es stellte sich jedoch schnell heraus, dass andere störende Effekte dominierten: Dadurch, dass die Lampe direkt vor dem Spalt war, wurde das Gitter vom Licht der Lampe zum Teil seitlich getroffen. Dadurch entstand Streulicht innerhalb des Spektrometers. Der Effekt zeigte sich größtenteils wellenlängenunabhängig. Da der Effekt nicht auftritt, wenn die Kalibrationslampe abgeschaltet ist, waren damit Dunkelbilder als Korrektur sinnfrei. Die erste Idee war Hintergrundbilder aufzunehmen, während die Lampe angeschaltet ist und der Motor das Gitter verdreht, sodass die Linien der Kalibrationslampe nicht als Linien auf den Bildern auftreten, sondern durch die Bilder hindurchwischen, und lediglich das Streulicht als Effekt sichtbar wird. Diese Bilder könnten dann gewichtet von den Kalibrations-

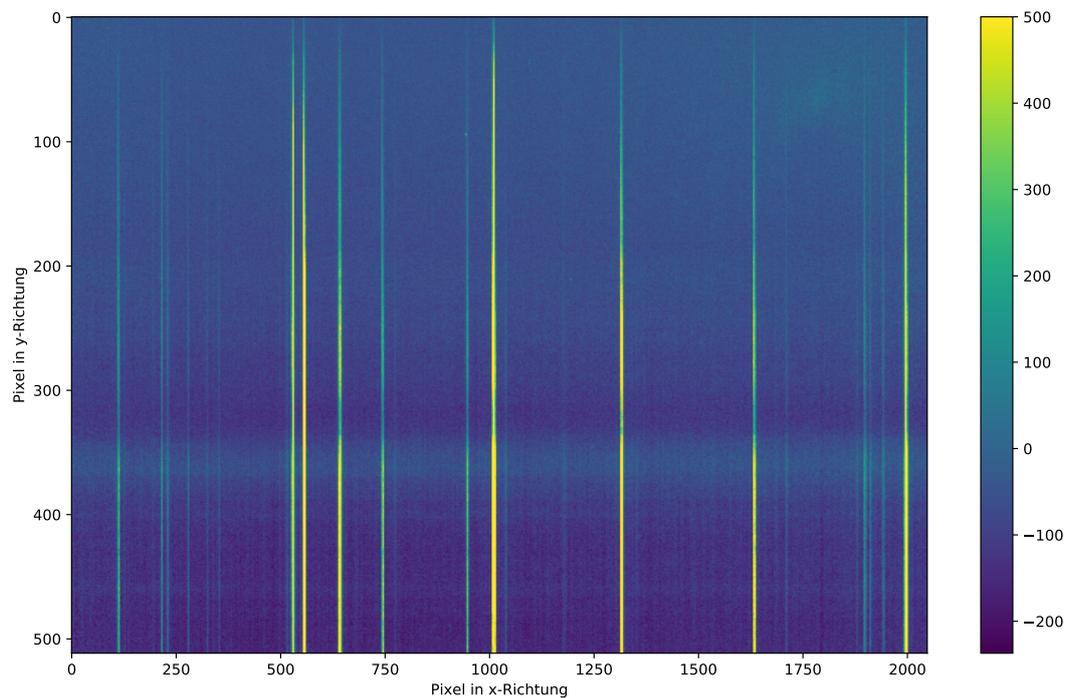


Abbildung 16: Kalibrationsbild (Fe-Ar-Lampe) bei ungefähr 420 nm für das Gitter 1 mit Korrektur durch das abgezogenes Hintergrundbild. Die Farbskalierung stellt die Intensität dar. Aufgenommen wurde das Bild bei einer Spaltbreite von $100 \mu\text{m}$ und einer Belichtungszeit von 2 min.

bildern abgezogen werden. Aber dabei kann am Anfang des Bildes und am Ende des Bildes eine Linie beispielsweise mittig im Bild liegen und dann nur die Hälfte des Bildes durchwischen. Somit würden unerwünschte Unregelmäßigkeiten in den Hintergrundbildern entstehen. Schließlich war die Idee die Folgende: das Spektrometer war noch mit Luft gefüllt. Sauerstoff in der Luft absorbiert UV-Licht. Also kann man das Spektrometer in den UV-Bereich verfahren lassen, und dort Hintergrundbilder aufnehmen, da dort dann keine Linien zu sehen sind und lediglich das Streulicht sichtbar sein kann. Da sich das Streulicht größtenteils wellenlängenunabhängig zeigt, kann das dann als Hintergrund für alle Kalibrationsbilder mit diesem Gitter verwendet werden. Es wurden fünf solcher Hintergrundbilder pro Gitter plus die Kalibrationsbilder aufgenommen. Die Auswertung dieser Daten wird nun erläutert.

Das Vorgehen bei der Auswertung war bei beiden Gittern identisch. Im Folgenden wird exemplarisch von der Auswertung zu einem der beiden Gitter gesprochen. Die Anhalts-

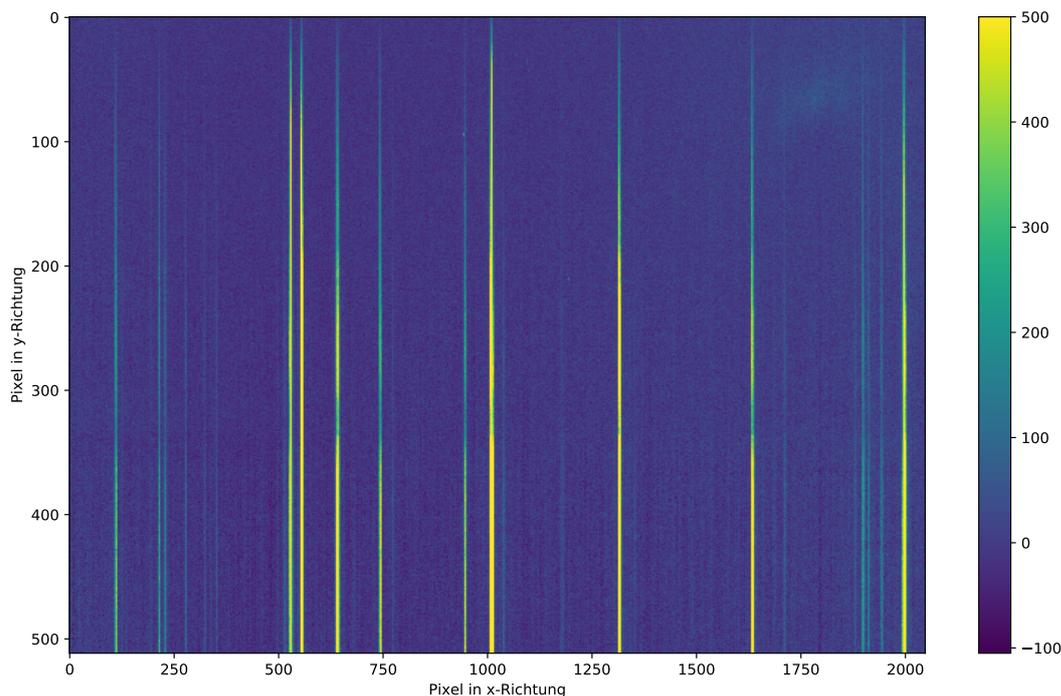


Abbildung 17: Kalibrationsbild (Fe-Ar-Lampe) bei ungefähr 420 nm für das Gitter 1 mit Korrektur durch das abgezogene Hintergrundbild und durch zeilenweise abgezogenen Median. Die Farbskalierung stellt die Intensität dar. Aufgenommen wurde das Bild bei einer Spaltbreite von 100 μm und einer Belichtungszeit von 2 min.

punkte aus der groben Kalibration zum Zuordnen der Linien wurden zwar nur für das Gitter 1 gefunden, können aber leicht auf das Gitter 2 umgerechnet werden. Das Gitter 2 hat 600 Linien pro nm. Somit ist die Umrechnung der Wellenlängen vom Gitter 1 zum Gitter 2 bei einer Motorposition 2:1. Zunächst wurde in der Auswertung eine dreidimensionale Matrix erzeugt, indem die fünf Hintergrundbilder (die mit Pixeln in x- und y-Richtung bereits eine zweidimensionale Matrix darstellen) übereinandergelegt wurden. Dann wurde über die damit entstandene dritte Achse der Median gebildet, und somit die dreidimensionale Matrix wieder zu einer zweidimensionalen Matrix reduziert. Das Resultat ist eine Art Mittel aus den fünf Hintergrundbildern, in dem jedoch keine der ursprünglich vorhandenen Cosmics mehr zu finden sind, da Cosmics sehr lokal eine sehr hohe Intensität auf dem Bild zur Folge haben. Dieser lokal hohe Wert bildet dann natürlich nicht den Median aus fünf Bildern für diesen Bereich. Das entstandene

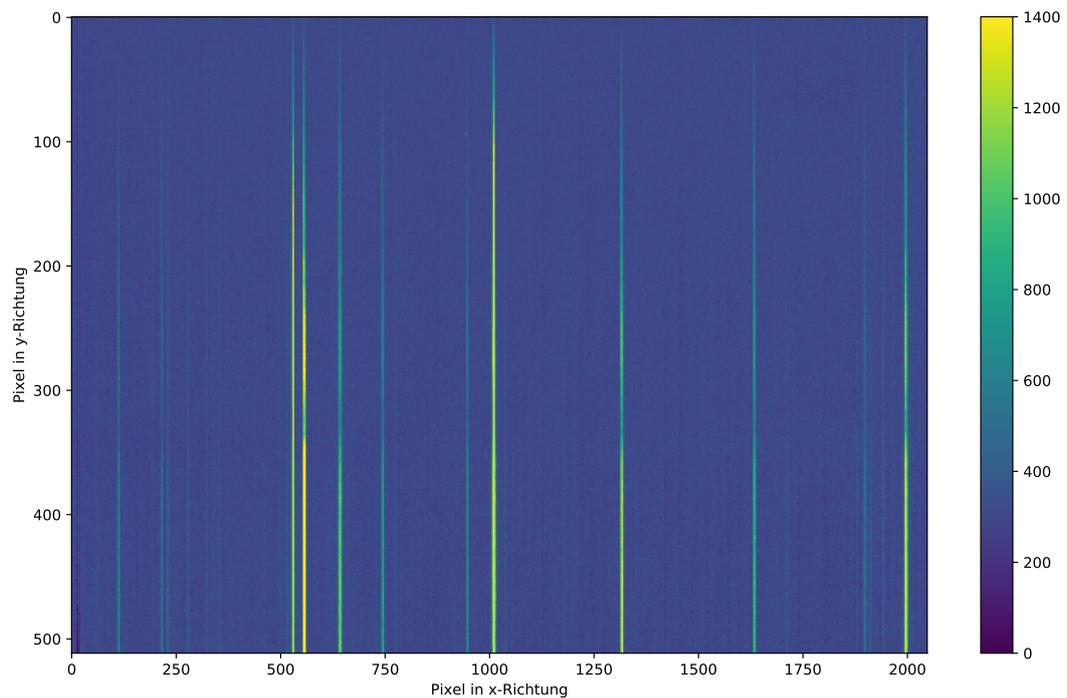


Abbildung 18: Kalibrationsbild (Fe-Ar-Lampe) bei ungefähr 420 nm für das Gitter 1 mit Korrektur durch das abgezogene Hintergrundbild und durch zeilenweise abgezogenen Median und durch Korrektur für den Fleck rechts oben im Originalbild. Die Farbskalierung stellt die Intensität dar. Aufgenommen wurde das Bild bei einer Spaltbreite von 100 μm und einer Belichtungszeit von 2 min.

Hintergrundbild zeigt nun genau die Struktur des Streulichts und wird von allen Kalibrationsbildern abgezogen. Ein Beispiel für ein solches Kalibrationsbild vor und nach dieser Korrektur findet sich in Abbildung 15 (davor) und Abbildung 16 (danach). Im resultierenden Bild erkennt man leicht, dass bei der CCD-Kamera lichtempfindlichere und weniger lichtempfindliche Zeilen auftreten. Bei einer Projektion der Bilder auf die x-Achse würde das zwar nur zu einem höheren Untergrund führen und wäre damit für Gaußfits mit Untergrund egal, allerdings ist besser, die Linien für eine höhere Genauigkeit zweidimensional auf den Bildern zu fitten. Daher soll für diesen Effekt nun eine Korrektur vorgenommen werden. Als Lösung bietet sich an, den Median jeder Zeile von der jeweiligen Zeile abzuziehen. Die Linien bilden in jeder Zeile wieder nur einen lokal hohen Wert. Daher wird der Median über eine Zeile im Bereich des Untergrunds der

Zeile liegen. Der Median steht damit als eine Art Mittel des Untergrunds der Zeile repräsentativ für die Lichtsensibilität der Zeile. Es bestünde auch die Möglichkeit durch den jeweiligen Wert zu teilen um dadurch neu zu skalieren. Da jedoch diese Mediane der Zeilen durch das vorherige Abziehen der Hintergrundbilder im Vergleich zum Originalbild nach unten verschoben sind, wäre eine solche Skalierung falsch. Zudem findet man, dass das Abziehen des Medians über die Zeilen zu einem guten Resultat, bzw. in anderen Worten zu einem weitestgehend glatten Bild führt. Diesen Vergleich sieht man gut zwischen Abbildung 16 und Abbildung 17, wo diese Korrektur durchgeführt wurde. Die meisten Kalibrationsbilder waren danach bereits ausreichend glatt, dass sie für die Fits der Linien verwendet werden konnten. Allerdings war erkennbar, dass sich bei den Bildern im Bereich 420 nm bis 670 nm ein hellerer Fleck (in seiner Intensität wellenlängenabhängig) in der rechten oberen Ecke der Bilder zeigte. Um diesen Fleck aus den Bildern zu entfernen, wurden folgende Annahmen getätigt: die Intensität des Flecks ist wellenlängenabhängig, aber die Position, Form, und relative Intensität des Flecks ist wellenlängenunabhängig. Das bedeutet: wenn man den Median über jedes Pixel über die Bilder mit dem Fleck nimmt, dann fallen die Linien ähnlich wie die Cosmics bei den Hintergrundbildern heraus, und es bleibt ein glattes Bild mit dem Fleck übrig. Dieses Bild kann dann gewichtet (durch Abschätzen der relativen Intensitäten des Flecks auf den verschiedenen Bildern) von den Kalibrationsbildern abgezogen werden, um den Fleck aus den Bildern zu entfernen. Diese Annahme stellte sich als richtig heraus, wie man beim Vergleich von Abbildung 17 und Abbildung 18 erkennen kann. Hier wurde diese Korrektur durchgeführt und der Fleck ist nachher im Bild nicht mehr erkennbar. Beim Vergleich der vier Bilder für die eben erwähnten Korrekturen fällt auch auf, dass die Maxima und Minima der Farbskalierung voneinander abweichen. Diese Skalierung wurde bewusst so verändert, da durch die Korrekturen dieselben Linien in verschiedenen Bildern unterschiedlich stark sichtbar wären. Um einen guten Vergleich für die Hintergründe der Bilder zu ermöglichen, wurde daher (durch setzen des Minimums und Maximums) so reskaliert, dass dieselben Linien auf allen vier Bildern ungefähr gleich stark zu erkennen sind. Die aus den Korrekturen resultierenden Bilder können nun gut zweidimensional gefittet werden.

Für diesen zweidimensionalen Fit werden die Linien in x-Richtung sowie in y-Richtung als Gaußkurven betrachtet, sodass sich eine zweidimensionale Gaußverteilung ergibt. Wäre der Eintrittsspalt weiter geöffnet, könnte in x-Richtung keine Gaußverteilung angenommen werden, aber da der Spalt während der Messung so weit wie möglich geschlossen war (100 μm), gilt diese Annahme nun schon (Beim Vermessen von Xenon war der Spalt phasenweise weiter geöffnet. Daher wird auch an dieser späteren Stelle weiter

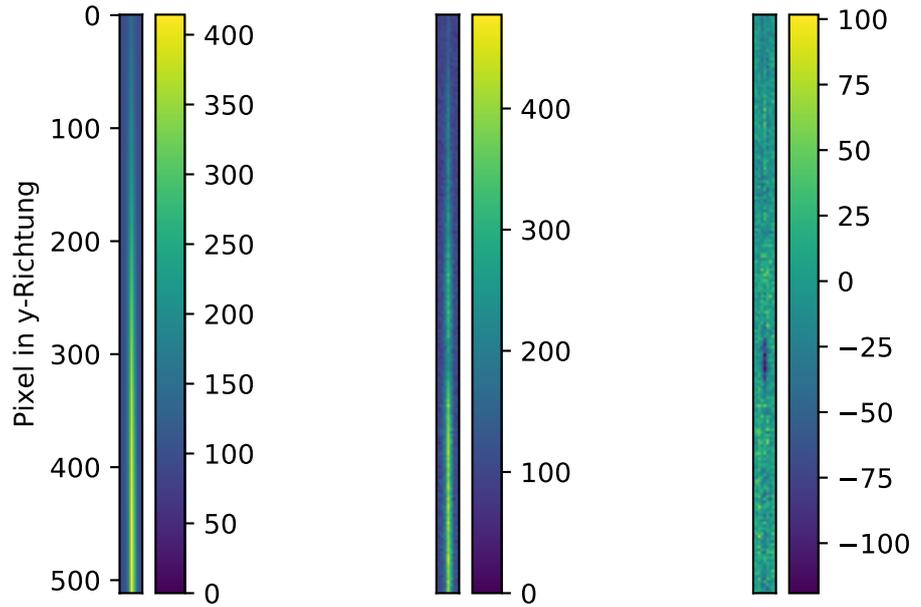


Abbildung 19: Darstellung des Fittens der gefundenen Linien in den Kalibrationsbildern durch eine zweidimensionale Gaußverteilung mit der Korrektur eines Polynoms zweiten Grades am Beispiel einer Argon-I-Linie bei $(621,5938 \pm 0,0010)$ nm. Im mittleren Bild ist die Linie aus dem aufgenommenen Kalibrationsbild zu sehen. Im linken Bild ist der Fit zu sehen. Das rechte Bild ist der Residuenplot zu dem Fit. Die Farbskalierung gibt die Intensität an. Die σ -Breite der Linie des Fits in x-Richtung ist $(2043,4 \pm 7,0) \cdot 10^{-3}$ Pixel.

darauf eingegangen). Zwei andere Korrekturen müssen dennoch vorgenommen werden: erstens kann es sein, dass die Linien leicht schief stehen, da es sein kann, dass die CCD-Kamera im Vergleich zum Eintrittsspalt leicht schief steht. Natürlich wurde dies beim Einjustieren versucht zu minimieren, jedoch kann trotzdem eine leichte Schiefstellung auftreten. Zweitens kann durch Unvollkommenheiten in den Optiken (Spiegel oder Gitter) der Effekt eintreten, dass die Linien auf der CCD leicht gebogen sind. Diese beiden Effekte werden durch ein quadratisches Polynom mit Parametern q und l genähert, das die zweidimensionale Gaußverteilung leicht biegen und schief stellen kann. Die Fitfunktion lautet dann:

$$I = I_0 + I_1 \cdot \exp\left(-\frac{(x + (q \cdot y^2 + l \cdot y) - \mu_1)^2}{2 \cdot \sigma_1^2}\right) \cdot \exp\left(-\frac{(y - \mu_2)^2}{2 \cdot \sigma_2^2}\right). \quad (35)$$

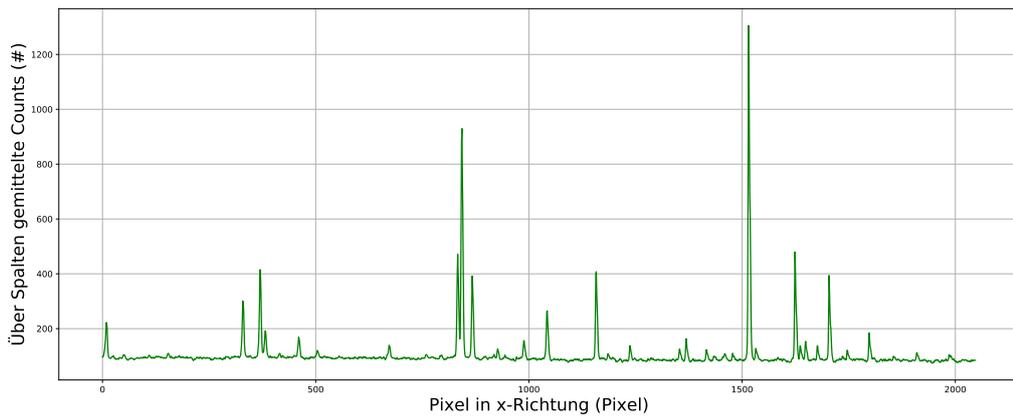
x und y beschreiben die Koordinaten in x-, bzw. y-Richtung in Pixeln. I_0 ist der Offset und I_1 ist die Amplitude. μ_1 und μ_2 geben die Position der Linien in x- und y-Richtung an. σ_1 und σ_2 definieren die Breiten der Linien in x- und y-Richtung. Diese Funktion wird schließlich an die Linien in den Kalibrationsbildern gefittet. Das Ergebnis ist in Abbildung 19 zu sehen. Hier wurde als Beispiel eine der beobachteten Argon-I-Linien gefittet. Die Güte des Fits lässt sich anhand des Residuenplots in der Abbildung abschätzen. Als positiv zeigt sich anhand der Farbskala: Die Residuen schwanken um Null, und größtenteils ist nur ein Rauschen zu erkennen.

Doch negativ ist: in der Mitte des Residuenplots zeigt sich eine Struktur: Die Intensität der Residuen geht in der Mitte des Plots in Form einer Linie deutlich unter Null. Tatsächlich ist das jedoch nicht weiter tragisch. Die Erklärung liegt im mittleren Bild durch einen Dip in der Intensität. Die Kalibrationslinie ist bei ca. 320 Pixeln in y-Richtung schwächer als darum herum. Das wiederum kommt aus Imperfektionen bei der Korrektur, bei der der Median über die Zeilen von den Bildern abgezogen wurde. Diese Korrektur hätte das beheben sollen, was vermutlich durch ungünstig liegende Intensitätsverteilungen in den jeweiligen Zeilen nicht geklappt hat. Für das Ergebnis ist das aber nur von geringer Bedeutung. Als Ergebnis interessiert nur die Position der Linie in x-Richtung.

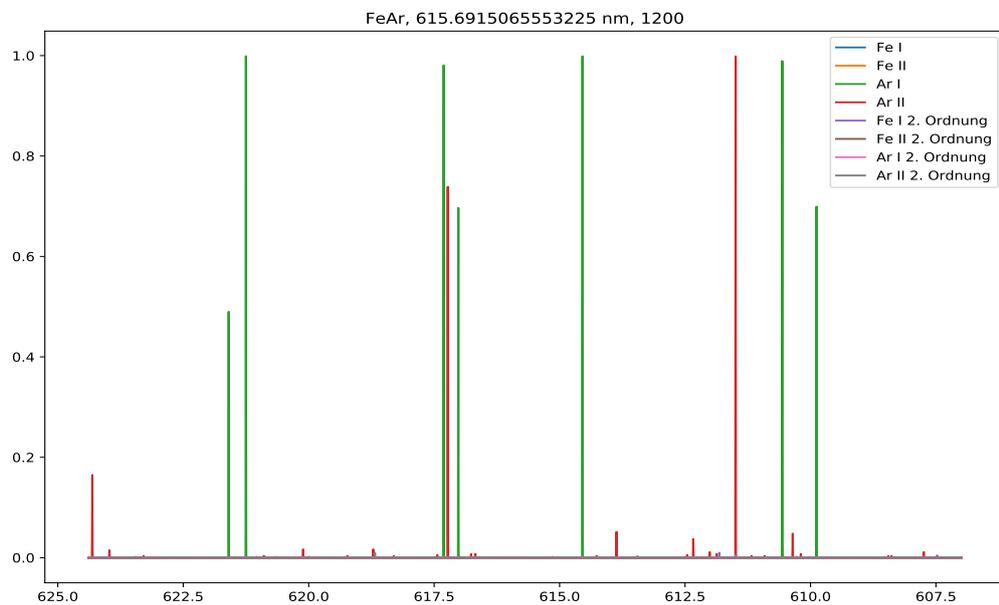
Eine solche Ungenauigkeit in y-Richtung vergrößert zwar den Fehler des Ergebnisses für die Position in x-Richtung etwas, lässt jedoch das Ergebnis selbst beinahe unverändert. Ähnliche Effekte traten hier bei fast allen Fits auf.

Als weitere Fehlerquelle müssen hier die auftretenden Cosmics genannt werden. Der Effekt der Cosmics ist jedoch sehr lokal auf wenige Pixel pro Cosmic beschränkt. Zum Fitten werden Bereiche von 512 Pixeln mal ca. 30 Pixeln (je nach Linie) aus den Bildern extrahiert. Das führt dazu, dass der Einfluss der Cosmics auf den zweidimensionalen Fit extrem gering ist. Außerdem wurden bei den aufgenommenen Bildern sowieso nur bis zu maximal 5 Cosmics pro Bild gesehen, die meistens nicht in den Fitbereichen lagen.

Nachdem die Positionen der Linien in den Kalibrationsbildern mit den zugehörigen Fehlern gefunden waren, mussten sie noch Wellenlängen zugeordnet werden. Für diese Zuordnungen wurden der NIST-Datenbank die Daten zu den Linien im gewünschten Wellenlängenbereich für Argon und Eisen entnommen und geplottet. Nach der Korrektur der 2D Bilder kann man das ganze auf ein 1D Problem reduzieren. Die 2D Daten geben dann keine weiteren relevanten Informationen. Diese beiden Plots wurden dann vergli-



(a) Projektion des Kalibrationsbildes auf die x-Achse. Die x-Achse ist in Pixeln und die y-Achse gibt die Intensität der Projektion an.



(b) Theoretische Linien aus der NIST-Datenbank. Hier ist die x-Achse in nm und gibt die Wellenlänge der erwarteten Linien an. Die y-Achse ist die erwartete relative Intensität.

Abbildung 20: Projektion des Kalibrationsbildes auf die x-Achse zur Zuordnung der gefundenen Linien und Diagramm mit theoretischen Linien aus der NIST-Datenbank zur Zuordnung am Beispiel des aufgenommenen Bildes bei ca. 620 nm für das Gitter 1.

chen, um herauszufinden, welche gemessene Linie welcher Wellenlänge entspricht. Das ist in Abbildung 20 zu sehen. Wie an diesem Beispiel zu erkennen ist, ist die Zuordnung nach diesem Prinzip sehr einfach, wenn erst einmal eine ungefähr richtige Dispersion für den Plot der theoretischen Linien gefunden wurde. Die jeweiligen Linien liegen in den beiden Diagrammen in Abbildung 20 genau übereinander.

Nach der Zuordnung wurden für jedes Kalibrationsbild die gefundenen Wellenlängen

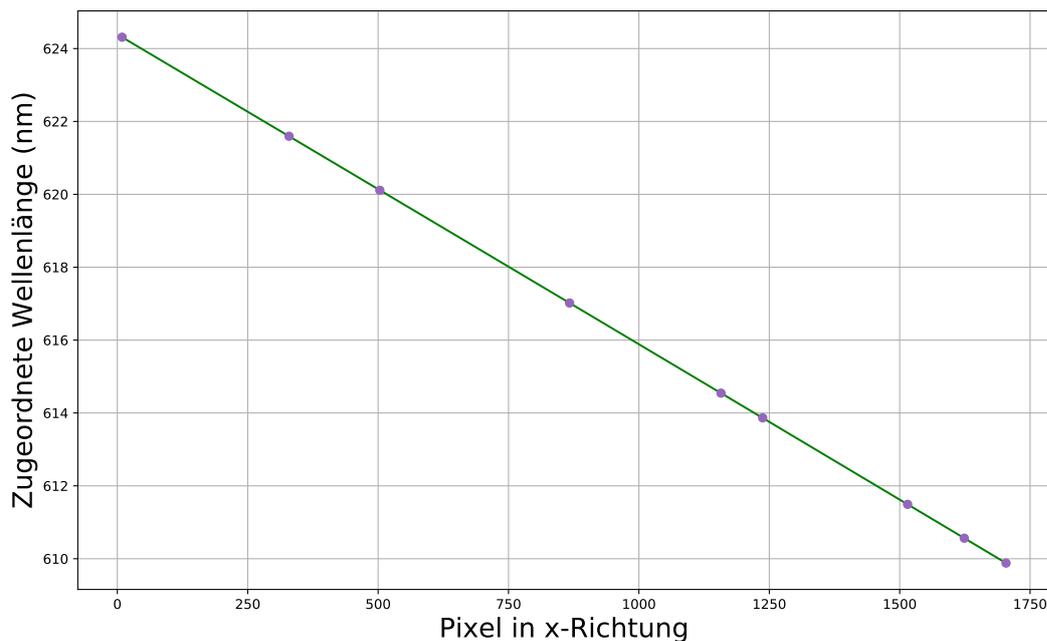
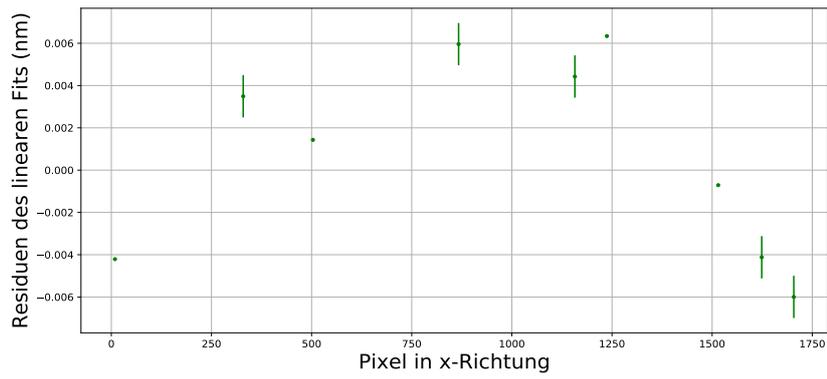


Abbildung 21: Datenpunkte der zugeordneten Wellenlängen über den Positionen der gefundenen Linien mit quadratischem Fit am Beispiel des Kalibrationsbildes bei ca. 620 nm.

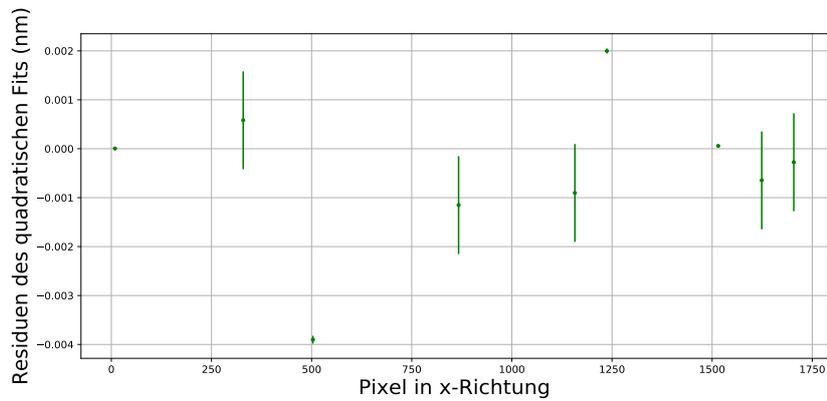
über die Position der Linie auf dem Bild in Pixeln, inklusive der Fehler, angetragen. An diesen Daten wurde ein linearer, ein quadratischer und ein kubischer Fit durchgeführt. In den zugehörigen Residuenplots (Abbildung 22) zeigte sich der quadratische Fit als am besten geeignet. In den Residuen zum linearen Fit lässt sich noch eine Struktur erkennen. In den Residuen zum quadratischen Fit findet sich diese nicht mehr. Im kubischen Fit ist zwar selbstverständlich dann auch keine Struktur mehr zu finden, aber die Residuen werden nur unwesentlich kleiner im Vergleich zum quadratischen Fit. Daher wird der weitere Freiheitsgrad für einen kubischen im Vergleich zum quadratischen Fit vermieden. Daher ist in Abbildung 21 der quadratische Fit an die Daten gezeigt. Zu

jedem der Kalibrationsbilder mit genügend erkennbaren Linien wurde ein solcher quadratischer Fit für die Dispersion durchgeführt. Aus jedem dieser Fits folgen diese Größen mit zugehörigen Fehlern: die im Bild zentrierte Wellenlänge, die drei Fitparameter der quadratischen Dispersion und die Bandbreite (oder auch Range) des Bildes (wie viele Nanometer zwischen den linken und rechten Bildrand liegen). Zudem wurde bei der Messung für jedes Kalibrationsbild die Motorposition und die Außenanzeige des Spektrometers notiert. Zwischen diesen Größen sollen nun aus folgendem Grund Umrechnungen stattfinden können: Das Programm zum Ansteuern der CCD soll den aufgenommenen Bildern möglichst genau Wellenlängen zuordnen können, sodass man direkt beim Messen weiß, was man gemessen hat. Dafür muss es wissen, welche Wellenlänge im Bild zentriert liegt und welche Dispersion bei der jeweiligen Wellenlänge für das jeweilige Gitter bei dieser Wellenlänge gilt. Man will auch, dass man eine gewünschte Wellenlänge übergeben kann, und der Motor auf die entsprechende Position verfährt. Zudem soll es möglich sein, das Programm schnell neu zu kalibrieren, wenn beim Verfahren des Gitters etwas schief gelaufen ist. Deswegen soll auch die Außenanzeige des Spektrometers miteinbezogen werden. Am Ende kann dann manuell die Außenanzeige bei der Ansteuerung eingetragen werden, die in direkter Korrelation mit der zentrierten Wellenlänge und der Dispersion steht. Somit kann dann direkt der aktuelle Wert übergeben werden, falls es einmal einen Ausfall geben sollte und die aktuelle Position des Motors verloren geht.

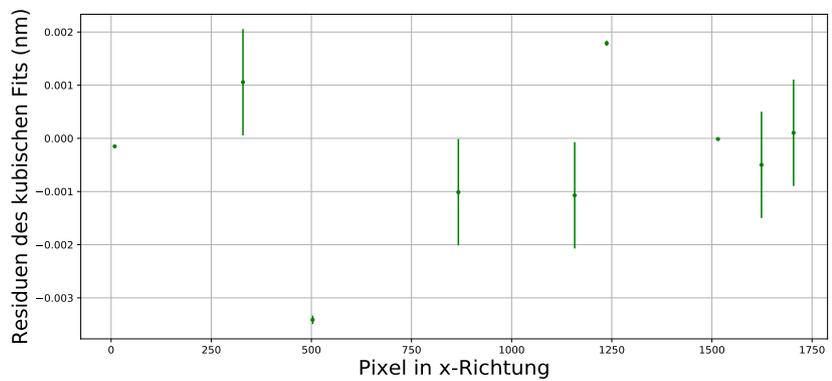
Zudem ist für zukünftige Messungen auch von Interesse, wie groß der Wellenlängenbereich ist, den das Spektrometer bei verschiedenen Gitterpositionen bei den beiden Gittern abbilden kann. Damit kann abgeschätzt werden, wie für das Vermessen von Linien verfahren werden muss, um möglichst alles gewünschte auf den Messungen zu finden. Wie soeben angedeutet, sind diese Größen wie die Dispersionsparameter alle wellenlängenabhängig. Es wurde die Motorposition über der im Bild zentrierten Wellenlänge angetragen, woraus sich ergibt, auf welche Motorposition der Motor verfahren muss, wenn man in dem Programm eine gewünschte Wellenlänge angibt. Um ausgehend von der Außenanzeige neu kalibrieren zu können, wurde die im Bild zentrierte Wellenlänge über der Außenanzeige angetragen. somit kann von der Außenanzeige in die Wellenlänge umgerechnet werden, von der aus wiederum in die Motorposition umgerechnet werden kann (die dann im Falle eines Problems beim Verfahren des Gitters nach dieser Rechnung vom Programm neu gesetzt werden kann). Für das Gitter 1 finden sich diese beiden Plots in Abbildung 23 und Abbildung 24. Das Prinzip der Plots ist für beide Gitter identisch, sodass ein Zeigen jeweils beider Plots an dieser Stelle nicht zielführend wäre und diese Arbeit überladen würde. Da die Plots dennoch wichtige Ergebnisse mit



(a) Residuen zum linearen Fit



(b) Residuen zum quadratischen Fit



(c) Residuen zum kubischen Fit

Abbildung 22: Residuenplots zu den Fits für die Dispersion an die Datenpunkte zu Wellenlängen über Pixelposition der Linien am Beispiel des Kalibrationsbildes bei ca. 620 nm.

Fits enthalten, werden sie im Anhang gezeigt. Die Ergebnisse werden in Abschnitt 5.1 jedoch nochmal erwähnt und erörtert.

In Abbildung 23 wurde linear gefittet, da wie erwähnt die Übersetzung von Motor zum

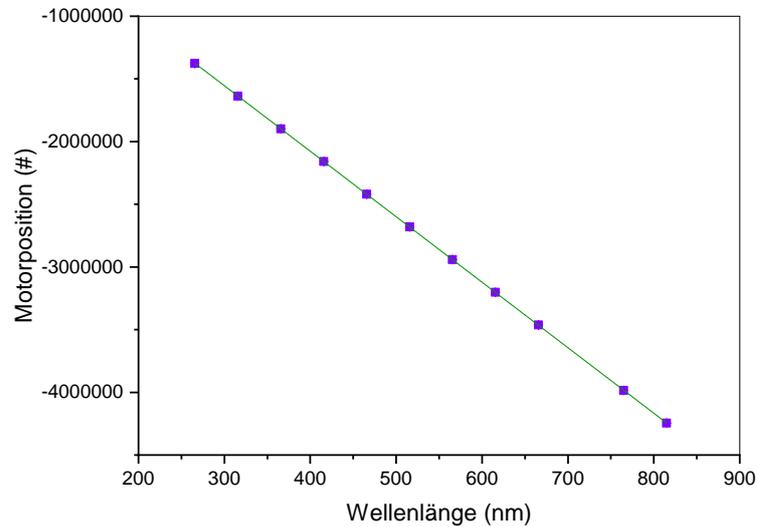


Abbildung 23: Diagramm zur Kalibration des Gitter 1: Die Motorposition des Motors für das Gitter ist über der im jeweils aufgenommenen Bild zentrierten Wellenlänge mit zugehörigen Fehlern angetragen. Zudem findet sich ein Fit, der im Text erläutert ist.

Gitter über eine Welle mit Sinusübersetzung läuft, sodass hier von einem linearen Zusammenhang auszugehen ist. In Abbildung 24 wurde ebenfalls linear gefittet, da die Außenanzeige bei der Herstellung des Spektrometers als Wellenlängenanzeige in Ångström für das Gitter 1 gedacht war. Damit ist ein linearer Zusammenhang zwischen der im Bild zentrierten Wellenlänge und der Außenanzeige zu erwarten (Das ist auch logisch, da die Zahnräder der Anzeige linear zum Motor geschaltet sind). Wie in den Diagrammen sichtbar, sind die adjusted R^2 -Werte (adjustierter Bestimmtheitsgrad-Werte) im Rahmen der Rundung 1, und somit können diese Zusammenhänge als richtig angenommen werden. Die Bandbreite der Bilder, sowie die drei Dispersionsparameter wurden ebenfalls über der zugehörigen im jeweiligen Bild zentrierten Wellenlänge angetragen, sodass es möglich ist, aus der aktuellen Position des Gitters in die Wellenlängen vom linken Rand des Bildes bis zum rechten Rand des Bildes umzurechnen und die x-Achse des Bildes dementsprechend in Wellenlängen statt Pixeln zu beschriften. Diese Plots finden sich in Abbildung 25, Abbildung 26, Abbildung 27 und Abbildung 28. Der Offset der Dispersion in Abbildung 25 wurde ebenfalls linear gefittet. Der Parameter des linearen Anteils in Abbildung 27 der

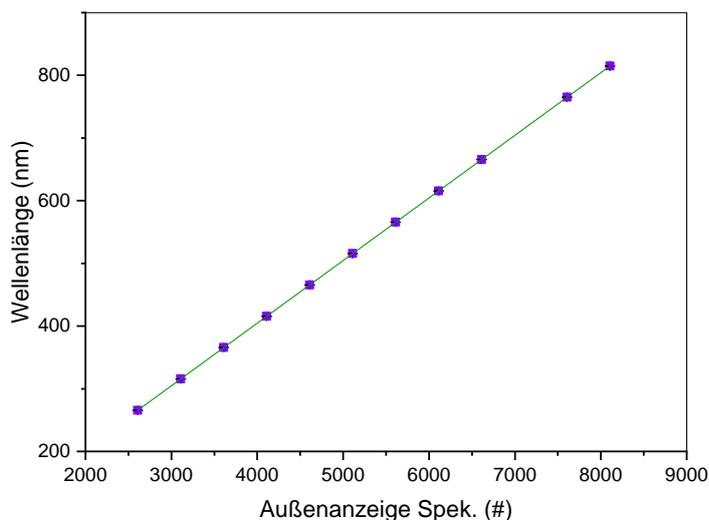


Abbildung 24: Diagramm zur Kalibration des Gitter 1: Die im jeweils aufgenommenen Bild zentrierte Wellenlänge ist über der Außenanzeige des Spektrometers mit zugehörigen Fehlern angetragen. Zudem findet sich ein Fit, der im Text erläutert ist.

Dispersion wurde durch ein Polynom 2. Grades gefittet. Beides ging empirisch aus den Daten hervor und wurde durch den adjusted R^2 bestätigt, der in beiden Fällen im Rahmen der Rundungen entweder 1 oder mit 0,99697 sehr nahe an 1 ist.

Der quadratische Parameter wurde linear gefittet. Der Parameter selbst ist bereits eine Korrektur zur Dispersion, und in den Daten findet sich kein Indiz, eine Korrektur für die Korrektur vorzunehmen, die noch höher als ein Polynom 1. Grades ist. Der lineare Parameter hat offensichtlich den größten Einfluss auf die Dispersion und somit auf die Range. Da er quadratisch gefittet wurde, wurde eben auch der erfasste Bereich quadratisch gefittet. Die Fehler der Daten wurden bei allen Fits berücksichtigt und fortgesetzt.

Die Ergebnisse mit Fehlern sind im Folgenden zusammengefasst. Für die Umrechnung von der im Bild der CCD zentrierten Wellenlänge λ in die Motorposition M gilt:

$$M_{\text{Gitter 1}}(\lambda) = (-5224,4 \pm 2,0) \frac{1}{\text{nm}} \cdot \lambda + (12,9 \pm 1,1) \cdot 10^3, \quad (36)$$

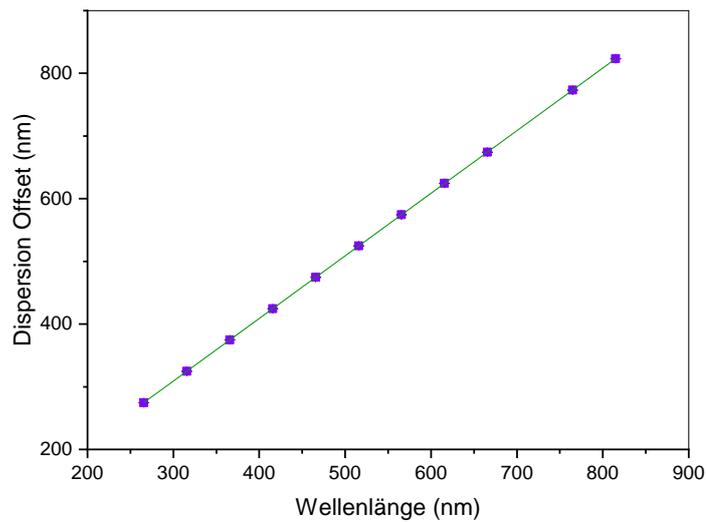


Abbildung 25: Diagramm zur Kalibration des Gitter 1: Der Parameter zum Offset der Dispersion ist über der im jeweils aufgenommenen Bild zentrierten Wellenlänge mit zugehörigen Fehlern angetragen. Zudem findet sich ein Fit, der im Text erläutert ist.

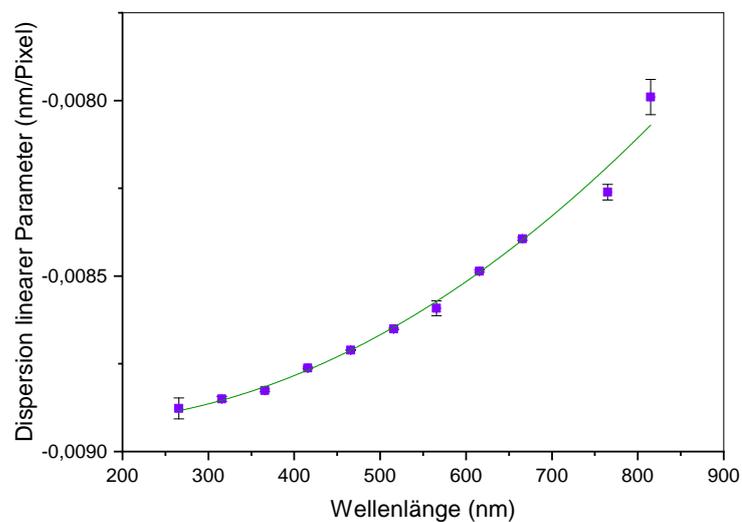


Abbildung 26: Diagramm zur Kalibration des Gitter 1: Der Parameter zum linearen Anteil der Dispersion ist über der im jeweils aufgenommenen Bild zentrierten Wellenlänge mit zugehörigen Fehlern angetragen. Zudem findet sich ein Fit, der im Text erläutert ist.

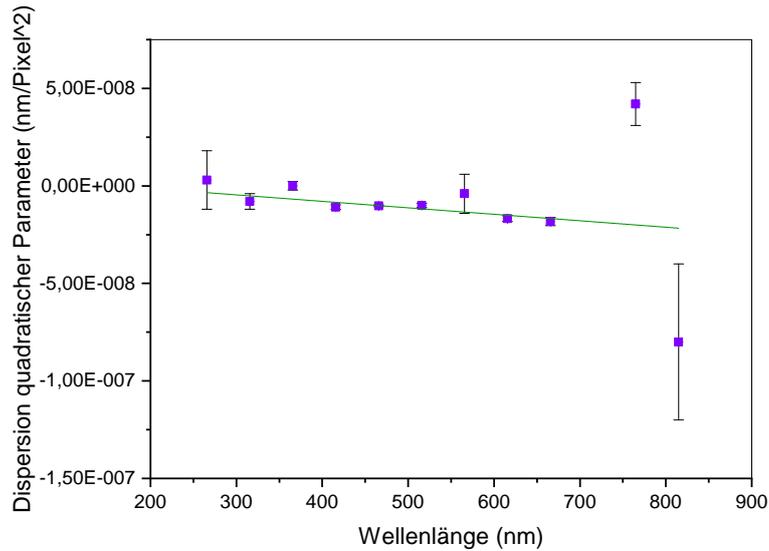


Abbildung 27: Diagramm zur Kalibration des Gitter 1: Der Parameter zum quadratischen Anteil der Dispersion ist über der im jeweils aufgenommenen Bild zentrierten Wellenlänge mit zugehörigen Fehlern angetragen. Zudem findet sich ein Fit, der im Text erläutert ist.

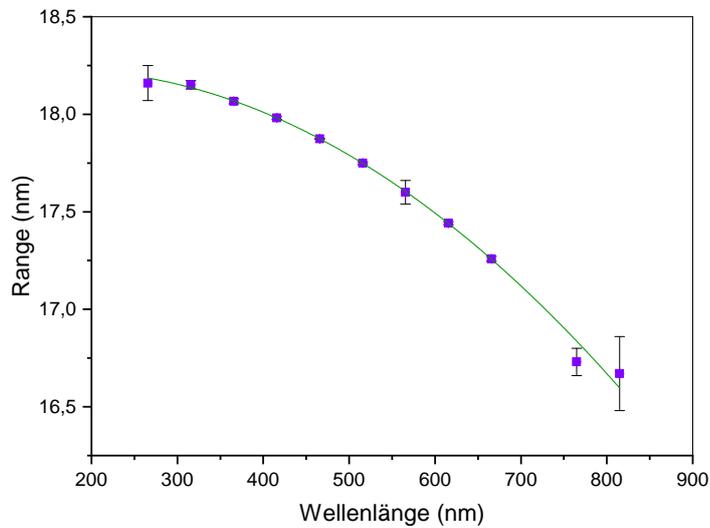


Abbildung 28: Diagramm zur Kalibration des Gitter 1: Der erfasste Bereich der Wellenlängen von der linken bis zur rechten Seite des Bildes ist über der im jeweils aufgenommenen Bild zentrierten Wellenlänge mit zugehörigen Fehlern angetragen. Zudem findet sich ein Fit, der im Text erläutert ist.

und

$$M_{\text{Gitter 2}}(\lambda) = (-2616,9 \pm 2,4) \frac{1}{\text{nm}} \cdot \lambda + (-26,1 \pm 1,3) \cdot 10^3. \quad (37)$$

Das Ergebnis für die Umrechnung der Außenanzeige des Spektrometers A in die auf der CCD zentrierten Wellenlänge λ ist:

$$\lambda_{\text{Gitter 1}}(A) = (-9989,0 \pm 0,6) \cdot 10^{-5} \text{ nm} \cdot A + (508,8 \pm 2,7) \cdot 10^{-2} \text{ nm}, \quad (38)$$

und

$$\lambda_{\text{Gitter 2}}(A) = (-1998,8 \pm 0,5) \cdot 10^{-4} \text{ nm} \cdot A + (-24,4 \pm 1,6) \cdot 10^{-1} \text{ nm}. \quad (39)$$

Für die Dispersionsrelation mit der Wellenlänge λ_{Disp} in Abhängigkeit von der Pixelposition P in x-Richtung auf der Kamera gilt:

$$\lambda_{\text{Disp}}(P) = a \cdot P^2 + b \cdot P + c, \quad (40)$$

mit den Parametern a , b und c in Abhängigkeit der im Bild zentrierten Wellenlänge λ :

$$a_{\text{Gitter 1}}(\lambda) = (-3,3 \pm 1,5) \cdot 10^{-11} \frac{1}{\text{Pixel}^2} \cdot \lambda + (0,5 \pm 0,7) \cdot 10^{-8} \frac{\text{nm}}{\text{Pixel}^2}, \quad (41)$$

$$b_{\text{Gitter 1}}(\lambda) = (17,7 \pm 2,1) \cdot 10^{-10} \frac{1}{\text{nm} \cdot \text{Pixel}} \cdot \lambda^2 + (-4,4 \pm 2,2) \cdot 10^{-7} \frac{1}{\text{Pixel}} \cdot \lambda + (-88,9 \pm 0,6) \cdot 10^{-4} \frac{\text{nm}}{\text{Pixel}}, \quad (42)$$

$$c_{\text{Gitter 1}}(\lambda) = (9986,4 \pm 0,7) \cdot 10^{-4} \cdot \lambda + (95,5 \pm 0,4) \cdot 10^{-1} \text{ nm}, \quad (43)$$

und

$$a_{\text{Gitter 2}}(\lambda) = (0,4 \pm 0,4) \cdot 10^{-9} \frac{1}{\text{Pixel}^2} \cdot \lambda + (-2,3 \pm 2,5) \cdot 10^{-7} \frac{\text{nm}}{\text{Pixel}^2}, \quad (44)$$

$$b_{\text{Gitter } 2}(\lambda) = (-0,7 \pm 0,9) \cdot 10^{-8} \frac{1}{\text{nm} \cdot \text{Pixel}} \cdot \lambda^2 + (0,9 \pm 0,9) \cdot 10^{-5} \frac{1}{\text{Pixel}} \cdot \lambda + (-20,3 \pm 2,4) \cdot 10^{-3} \frac{\text{nm}}{\text{Pixel}}, \quad (45)$$

$$c_{\text{Gitter } 2}(\lambda) = (999,6 \pm 0,3) \cdot 10^{-3} \cdot \lambda + (183,8 \pm 1,7) \cdot 10^{-1} \text{ nm}. \quad (46)$$

Und schließlich als Ergebnis zum erfassten Bereich R findet man in Abhängigkeit der zentrierten Wellenlänge λ :

$$R_{\text{Gitter } 1}(\lambda) = (-38,3 \pm 2,0) \cdot 10^{-7} \frac{1}{\text{nm}} \cdot \lambda^2 + (12,4 \pm 2,1) \cdot 10^{-4} \cdot \lambda + (181,3 \pm 0,5) \cdot 10^{-1} \text{ nm}, \quad (47)$$

und

$$R_{\text{Gitter } 2}(\lambda) = (1,0 \pm 0,6) \cdot 10^{-5} \frac{1}{\text{nm}} \cdot \lambda^2 + (-1,1 \pm 0,6) \cdot 10^{-2} \cdot \lambda + (39,4 \pm 1,7) \text{ nm}. \quad (48)$$

Mit diesen Ergebnissen ist die Kalibration des Spektrometers nun vollständig. So können jetzt die Fehler erörtert werden.

Bei der Umrechnung von der Wellenlänge in die Motorposition ist der relative Fehler der Steigung in der Ordnung 0,1%. Die Steigung wurde damit sehr genau bestimmt. Der Fehler des Offsets ist hier hingegen nur eine Größenordnung kleiner als der Offset selbst. Das liegt daran, dass der Offset die Motorposition zu der theoretischen Wellenlänge 0 nm ist. Die Wellenlänge 0 nm existiert nicht (bzw. existiert nur als Maximum 0. Ordnung), und in der Umgebung der Wellenlänge von 0 nm befinden sich Gammastrahlen, Röntgenstrahlen und hochenergetische UV-Strahlen. Diese können jedoch mit den verwendeten Spiegeln und dem verwendeten Gitter im Spektrometer nicht vermessen werden. Daher fehlen in der Nähe des Punktes zum Offset Daten, um diesen Fehler zu reduzieren. Sollte sich in Zukunft die Kalibration als zu ungenau erweisen, dann wird an dieser Stelle vorgeschlagen, später noch die 0te Ordnung der Reflexion des Gitters als

Ersatz zur Wellenlänge 0 nm in die Kalibration mit einzubinden. Ein ganzes Kalibrationsbild bei der 0. Ordnung mit in die Kalibration einzubinden ist aber nicht möglich, da hier als 0. Ordnung nur eine einzige Linie zu sehen ist (und somit im Bild keine Kalibration durchgeführt werden kann). Zusätzlich kann das Spektrometer später mit Stickstoff geflutet werden, der anders als Sauerstoff UV-Licht nicht absorbiert, sodass man sich auch damit näher an den Offset herantasten kann.

Bei der Umrechnung der Außenanzeige des Spektrometers in die zentrierte Wellenlänge sind die Fehler der beiden Parameter vier bzw. zwei Größenordnungen kleiner als die Werte selbst. Das spricht dafür, dass die Genauigkeit hier mindestens ausreichend ist. Praktisch haben sich die jeweils für beide Gitter errechneten Werte beim Einstellen des Spektrometers als sehr genau erwiesen.

Bevor nun die Werte zur Dispersion erläutert werden werden zunächst kurz Fehler des erfassten Bereichs diskutiert. Die Fehler der Parameter in dem erfassten Bereich sind in beiden Fällen nur geringfügig kleiner als die Werte selbst. Das Ergebnis für die wellenlängenabhängigen Ranges ist damit ein recht ungenaues Unterfangen. Die Schwankungen in den Messungen der Ranges in den Kalibrationsbildern sind jedoch nicht besonders groß, wie in Abbildung 28 und in Abbildung 45 zu sehen. Daher kann für das Gitter 1 einfach durch einen erfassten Bereich von 16,5 nm bis 18,5 nm und für das Gitter 2 von 33 nm bis 38 nm abgeschätzt werden. Eine solche Abschätzung sollte für das Einschätzen zukünftiger Messungen bereits reichen.

Schließlich werden noch die Parameter zu den Dispersionen der beiden Gitter diskutiert. Der Parameter zum quadratischen Term a ist mit Fehlern behaftet, so groß wie die Werte selbst. Das ist jedoch in diesem Fall unerheblich, da der quadratische Term ohnehin nur eine Korrektur darstellen soll, und die Werte selbst dementsprechend auch beinahe 0 sind. Somit sind die Auswirkungen hier nicht relevant. Die Fehler zum Offset c sind bei beiden Gittern wie ersichtlich mehrere Größenordnungen kleiner als die Werte selbst, sodass sich die Fehler zu diesem Parameter als gut beschreiben lassen. Spannender wird hier die Frage nach den Fehlern zu den drei Parametern zum Errechnen des Parameters b , der den linearen Anteil der Dispersion charakterisiert. Dominiert wird die Gleichung für b durch den Offset innerhalb der Gleichung. Dieser weist bei beiden Gittern einen verhältnismäßig geringen Fehler im Vergleich zu den anderen beiden Parametern auf. Die Fehler der anderen beiden Parameter sind auch hier so groß wie die Werte selbst, und damit riesig. Im Vergleich zu dem Offset fallen diese Werte aber

wie erwähnt wenig ins Gewicht. Zudem beschreiben die Fits in Abbildung 26 sowie in Abbildung 43 die Daten im Rahmen der Schwankungen ausreichend genau, sodass man hier von einer ausreichend genauen Beschreibung des Parameters b ausgehen kann.

Nun wird noch die maximal mögliche Auflösung errechnet. Die maximale Auflösung wird bei Einsatz von Gitter 1 erreicht. Als eine der besten Linien wird die Linie in Abbildung 19 betrachtet. Die Breite der Linie von $(204,3 \pm 0,7) \cdot 10^{-2}$ Pixel kann, mithilfe von Gleichung 40 und Gaußscher Fehlerfortpflanzung, in eine Linienbreite in nm umgerechnet werden. Das Ergebnis ist schließlich eine Linienbreite von $(173,6 \pm 0,7) \cdot 10^{-4}$ nm.

Damit ist die Kalibration des Spektrometers schließlich abgeschlossen, und alle Daten ausgewertet. Somit kann nun in Abschnitt 4.2 auf die Ergebnisse des zweiten großen Themas dieser Arbeit eingegangen werden: das Vermessen der Spektrallinien von hochgeladenem Xenon an der HD-EBIT.

4.2 Vermessen von Xenon an der Heidelberg-EBIT

Das Vermessen von hochgeladenem Xenon an der Heidelberg-EBIT war in mehrere Schritte unterteilt. Nachdem der Bereich um den Magneten in der EBIT mit flüssigem Helium gefüllt war, der Magnet damit supraleitend wurde, und der Magnet hochge-rampt war, wurde der Elektronenstrahl mit dem Fokus und der Ausrichtung optimiert (Kollektorströme wurden dabei in der Größenordnung von 70 mA gemessen) und Xenon in die EBIT eingeleitet. Dann wurde das angeschlossene Spektrometer auf eine Wellenlänge eingestellt, und bei dieser Wellenlänge ein Kalibrationsbild mit einer Eisen-Kalibrationslampe mit Argon als Trägergas genommen (An dieser Stelle sollte erwähnt werden, dass bei diesem Spektrometer drei Gitter zur Verfügung stehen: Das größte mit 150 Linien pro mm, das mittlere mit 1800 Linien pro mm und das feinste mit 3600 Linien pro mm. Für die folgenden Übersichtsbilder wurde das größte verwendet). Anschließend wurde am Spektrometer nichts verändert, und es wurden Spektralbilder des Lichts aus der Ionenfalle für diese Wellenlänge für variierende Strahlenergien am Spektrometer aufgenommen. Dabei wurden jeweils Bilder für Strahlenergien von ca. 300 eV bis ca. 2500 eV aufgenommen. Die Energien konnten variiert werden, indem die Kathodenspannung der EBIT sowie die mittlere Driftröhre im Potential verändert wurden. Damit ergab sich

eine Variation in der Beschleunigungsspannung der Elektronen und damit unterschiedliche Strahlenergien. Als kurze Wiederholung zum Theorieteil: Je höher die Strahlenergie ist, umso höhere Ladungszustände werden in der Falle erzeugt. Die erhaltenen Bilder wurden auf die x-Achse projiziert und anschließend von den niedrigen Energien zu den hohen Energien Zeile um Zeile aufeinander gestapelt, um so ein neues Bild zu erzeugen. Dieses Bild hat dann folglich die Strahlenergien auf der y-Achse und die Pixel in x-Richtung auf der Kamera auf der x-Achse. Man beachte jedoch, dass mit Strahlenergien hier die nicht korrigierten Strahlenergien gemeint sind. Diese ergeben sich allein aus der Kathodenspannung und dem Potential an der mittleren Driftröhre. Die negative Raumladung des Strahls, die die Strahlenergie senkt, wird hier nicht berücksichtigt. Eine Farbskalierung gibt dann die projizierten Intensitäten in jeder Zeile des Übersichtsbildes an. Mit den erhaltenen Bildern ist in dieser Form zunächst noch wenig anzufangen. Daher muss die x-Achse zunächst kalibriert werden.

Dafür wird das aufgenommene Kalibrationsbild ähnlich wie bei der Kalibration des

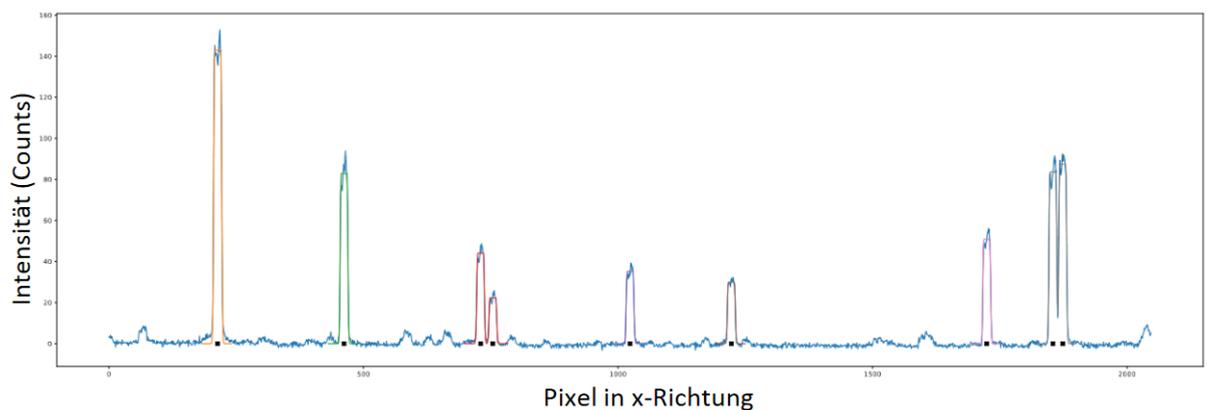


Abbildung 29: Auswertung des auf die x-Achse projizierten Kalibrationsbildes (Kalibrationsbild zum Übersichtsbild der gefundenen Linien für verschiedene Strahlenergien bei Einstellung des Spektrometers auf 770 nm). Die zugeordneten Linien wurden mit am Maximum flachen Gaußkurven zur Berücksichtigung der Öffnung des Spalts ($150 \mu\text{m}$) gefittet. Die resultierende Zuordnung ergibt die Dispersion für das Übersichtsbild bei 770 nm.

Spektrometers im letzten Kapitel ausgewertet. Allerdings ist in diesem Fall der Spalt nicht so weit wie möglich geschlossen (Spaltbreite $150 \mu\text{m}$). Das liegt daran, dass die hier aufgenommenen Bilder lediglich der ersten Übersicht dienen sollen, und sie daher nicht so genau wie möglich sein müssen. Ein weiter geöffneter Spalt spart allerdings Belichtungszeit, was insofern gut ist, dass das flüssige Helium zum Kühlen des Magne-

ten ausdampft, und man daher insgesamt für alle Messungen nur begrenzt Zeit hat. Das muss jetzt aber bei den Fits für die Kalibration berücksichtigt werden. Dementsprechend werden dabei jetzt der Einfachheit halber nur die Projektionen der Kalibrationslinien auf die x-Achse betrachtet, und dann mit speziellen, rechteckigen, eindimensionalen Gaußverteilungen angefitet. Diese Gaußverteilungen beinhalten die Korrektur für den weiter geöffneten Spalt, indem sie das Maximum, nachdem sie es erreichen, erst für einige Pixel halten, bevor die Verteilung wie gewöhnlich fortgesetzt wird und in gewohnter Art und Weise wieder abfällt. Ein solches Kalibrationsbild findet sich, inklusive der Fits der zugeordneten Linien aus den Daten der NIST-Datenbank, am Beispiel des Bildes bei 770 nm in Abbildung 29 wieder. Mithilfe des Kalibrationsbildes konnte das Übersichtsbild, das bis dahin Pixel in x-Richtung als x-Achse hatte, reskaliert werden, sodass nun Wellenlängen auf der x-Achse zu finden waren. In diesen Bildern steht, wie erläutert, jede Zeile für ein Bild. Durch Schwankungen in der EBIT waren die Intensitäten zwischen den Bildern nicht zwingend gut vergleichbar. Deswegen wurde auch hier der Median jeder Zeile von der jeweiligen Zeile abgezogen. Das resultierende Übersichtsbild bei 770 nm findet sich in Abbildung 30.

Im Bild sind mehrere gelbe Linien zu erkennen, die sich vom violetten Hintergrund abheben: Die gesuchten Spektrallinien der verschiedenen Ladungszustände von Xenon. In Richtung der Achse für die Wellenlänge stellen die die Linien (ebenso wie die Kalibrationslinien) spezielle, rechteckige Gaußkurven dar, die ihr Maximum erst kurz halten bevor sie wieder abfallen. Auch hier lässt sich die Öffnung des Spalts von $150 \mu\text{m}$ am Eingang des Spektrometers als Grund nennen. In Richtung der Achse der Strahlenergien ist das Verhalten der Linien ein anderes: Von unten nach oben gehend beginnen sie sehr abrupt, und fallen dann langsam wieder ab. Am besten zu erkennen ist das in Abbildung 30 an der starken Linie rechts oben im Bild. Der abrupte Anstieg kommt daher, dass bei zunehmender Energie auf einmal schlagartig der Punkt erreicht ist, bei dem die Strahlenergie die Ionisierungsenergie eines bestimmten Ladungszustandes übertrifft. Ab dieser Energie findet sich in der Falle der jeweilige Ladungszustand, und die übrigen äußeren Elektronen werden von der Strahlenergie angeregt und fallen dann wieder in den Grundzustand und emittieren dabei Photonen. Diese Photonen sind dann die gefundenen Linien. Damit zeigt sich diese Ionisierungsenergie (als Schwellenenergie) als der Grund für den abrupten Anstieg der Linie. Je höher die Energie wird, umso wahrscheinlicher wird es, den jeweils nächsthöheren Ladungszustand anzuregen und umso unwahrscheinlicher wird es, den bis dahin aktuellen Ladungszustand in der Falle zu finden. Somit nimmt die Intensität der Linien nach oben hin langsam ab. Um diese Ergebnisse noch

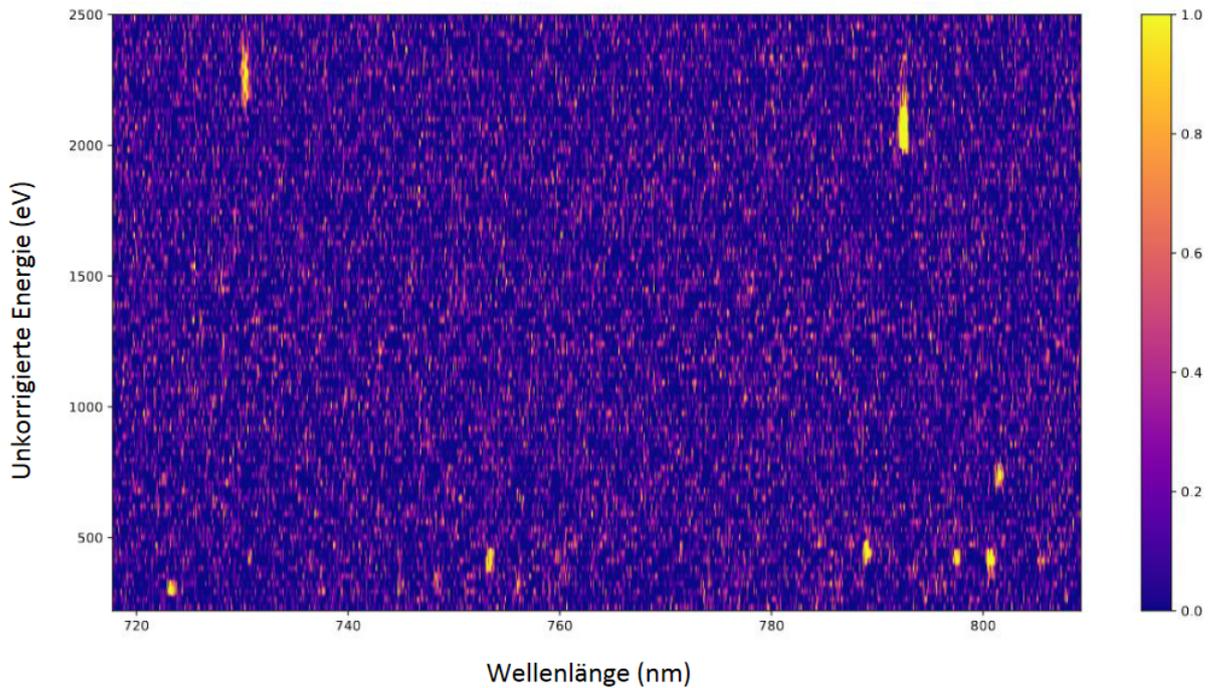


Abbildung 30: Übersichtsbild der gefundenen Linien für hochgeladenes Xenon um 770 nm. Auf der x-Achse ist die aus der Kalibrierung zu dem Bild stammende Wellenlänge angetragen. Die y-Achse zeigt die Strahlenergie, die nicht für die Raumladung in der EBIT korrigiert wurde. Jede Zeile des Bildes entspricht einem Bild, aufgenommen bei einer Spaltbreite von $150 \mu\text{m}$ und einer Belichtungszeit von 10 min. Die gelben Linien sind die gefundenen Spektrallinien.

einmal kurz auf den Punkt zu bringen: Gleiche Ladungszustände finden sich mit den zugehörigen Linien zu den elektronischen Übergängen immer auf der selben Höhe bzgl. der Strahlenergie in den Übersichtsbildern. Niedrige Ladungszustände finden sich weiter unten, höhere Ladungszustände weiter oben in den Übersichtsbildern. Der Sinn und Zweck der Übersichtsbilder ist es, die ungefähre Position der Linien bzgl. Wellenlänge und bzgl. Strahlenergie zu finden, sodass diese Linien dann mit einem feineren Gitter anschließend erneut gezielt angefahren und genauer vermessen werden können, und außerdem auch Abschätzungen zu dem Ladungszustand für die Linien machen zu können. Für das grobe Bestimmen der Position wurden einfache, zweidimensionale Gaußverteilungen an die Linien in den Übersichtsbildern gefittet. Das ist natürlich aufgrund der Asymmetrie in Richtung der Strahlenergie eine schlechte Annahme. Es soll hier jedoch nur eine grobe Abschätzung gemacht werden, sodass diese Annahme völlig ausreicht, wie die folgenden Daten auch zeigen werden.

Solche Übersichtsbilder wurden nicht nur für 770 nm aufgenommen. Weitere solche Aufnahmen wurden bei 348 nm, 436 nm, 524 nm, 612 nm, 700 nm und bei 770 nm durchgeführt. Die hier nicht gezeigten Übersichtsbilder finden sich im Anhang in Kapitel 8. Zudem wurden Übersichtsbilder bei den gleichen Wellenlängen auch noch für niedrigere Energien von 100 eV bis 250 eV Strahlenergie aufgenommen, in der Hoffnung, noch niedrigere Ladungszustände zu finden. Diese Übersichtsbilder zeigten jedoch keine erkennbaren Linien und wurden somit in dieser Arbeit nicht weiter berücksichtigt. Grund hierfür war, dass der Elektronenstrahl vermutlich nicht optimal ausgerichtet war und dann bei niedrigeren Energien die Driftröhren nicht mehr gerade passieren konnte. Das würde bedeuten, dass der Strahl schlecht war (z.B. die Driftröhrenwand trifft, oder die Driftröhren auf einer Spiralbahn passiert) und dementsprechend die Falle schlecht war. Somit konnten keine Ionen für diese Energien erzeugt und gefangen werden. Für ein besseres Ausrichten fehlte dann die Zeit. Dies kann jedoch bei zukünftigen Messungen noch getan werden, um diese Arbeit um niedrigere Ladungszustände zu ergänzen. Die Ergebnisse zu den in den Übersichtsbildern gefundenen Linien sind am Ende dieses Kapitels zusammengetragen.

Anschließend an die Auswertung der Übersichtsbilder wurden die gefundenen Linien mit einem feineren Gitter (1800 Linien pro mm) auf den gefundenen Wellenlängen und Strahlenergien angefahren. Dabei wurde auch wieder pro Bild ein Kalibrationsbild zusätzlich aufgenommen. Außerdem wurde hier mit Dunkelbildern gearbeitet, um das auf der CCD auftretende thermische Rauschen von den Bildern abziehen zu können. Der Spalt wurde hier so weit wie möglich geschlossen (100 μm). Die Auswertung der Bilder lief dann wie folgt: Zunächst wurden die Cosmics in allen Bildern gefunden und die zugehörigen Pixel aus der weiteren Datenanalyse entfernt. Dazu wurde bei sehr hohen Intensitäten in einem Pixel ein Bereich um das Pixel extrahiert und überprüft, ob dieser hohe Wert nur sehr lokal auftritt. War dies der Fall, wurde das zugehörige Pixel als von einem Cosmic beeinflusst identifiziert und aus dem folgenden Fit ausgeschlossen. Anschließend wurden die Kalibrationsbilder untersucht: Die Linien wurden wieder zweidimensional gefittet wie in der Kalibration des CT-Spektrometers. Dabei ergab sich die Schiefstellung und die Krümmung der Linien. Unter Berücksichtigung dieser beiden Effekte wurden anschließend die Bilder (Xenonspektren, Kalibrationsbilder) durch Abziehen der Dunkelbilder korrigiert und auf die x-Achse projiziert. Es folgte die Kalibration: Die Peaks in den projizierten Kalibrationsbildern wurden durch Gaußkurven angefitet und zu Linien aus der NIST-Datenbank zugeordnet. Es ergab sich eine Dispersion für das jeweils zugehörige Xenonspektrum. Auch hier zeigte sich eine quadratische Dispersion als die

beste Dispersion für die Kalibrationsbilder.

Ein Kalibrationsbild ist als Beispiel in Abbildung 31 zu sehen. Die zugehörige Dis-

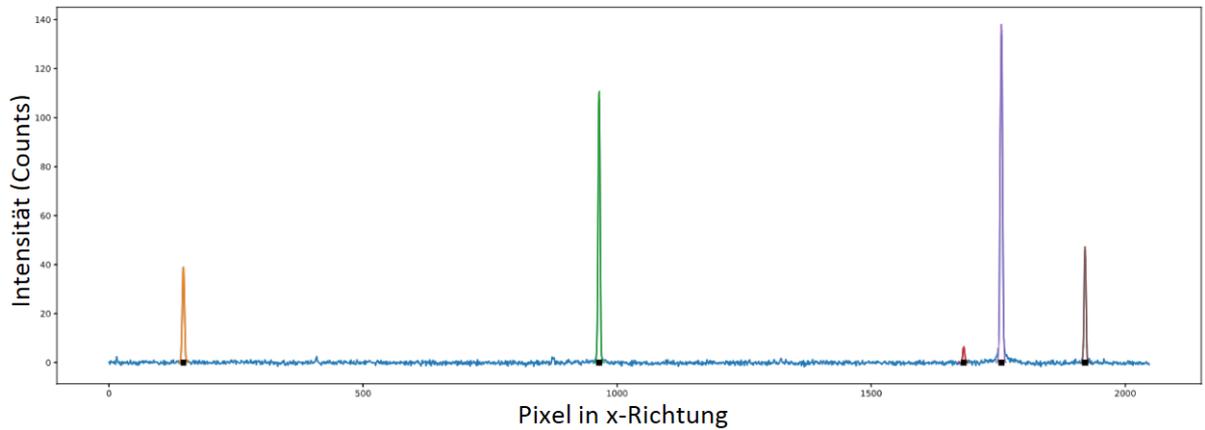


Abbildung 31: Projektion des Kalibrationsbildes zum Xenonspektrum bei einer bei 413,9 nm gefundenen Linie. Auf der x-Achse finden sich die Pixel in x-Richtung auf der Kamera. Auf der y-Achse ist die projizierte Intensität zu sehen. Die sichtbaren Linien wurden mit Gaußkurven angefitzt und Linien aus der NIST-Datenbank zugeordnet. Aus dieser Zuordnung resultiert die Dispersion des Xenonspektrums.

persion und die Residuen der Dispersion sind in Abbildung 32 zu sehen. Die Residuen weisen keine erkennbare Struktur mehr auf. Der grüne Bereich zeigt den $1\text{-}\sigma$ -Bereich der Dispersion an. Es wird daher auch deutlich, dass alle Datenpunkte für die Kalibration innerhalb des Rahmens ihrer Fehler mit dem Fit übereinstimmen. Es sei angemerkt: Fünf Datenpunkte sind für eine gute Kalibration nicht optimal, weil bei einem quadratischen Fit schon drei Freiheitsgrade vorhanden sind (Somit will man eigentlich im Idealfall viel mehr Linien als drei). Da die Linien jedoch sehr genau gefunden wurden (wie in Abbildung 31 sichtbar), stellt das kein größeres Problem dar. Nach diesem Schema wurden alle Bilder für alle angesteuerten Linien kalibriert.

Dann folgte schon der letzte große Schritt der Auswertung: die gefundenen Linien des hochgeladenen Xenons wurden gefittet. Dabei wurden sogenannte Zeeman-Fits durchgeführt. In Abschnitt 2.6 wurde die durch das starke Magnetfeld bedingte Zeeman-Aufspaltung bereits eingeführt. Diese Aufspaltung fand bei den für die Übergänge verantwortlichen Zuständen statt. Dementsprechend ist diese Aufspaltung auch in den gefundenen Linien sichtbar: Man findet keine einzelne eindimensionale Gaußverteilung für die Projektion einer gefundenen Linie. Stattdessen findet man die Kombination mehrerer

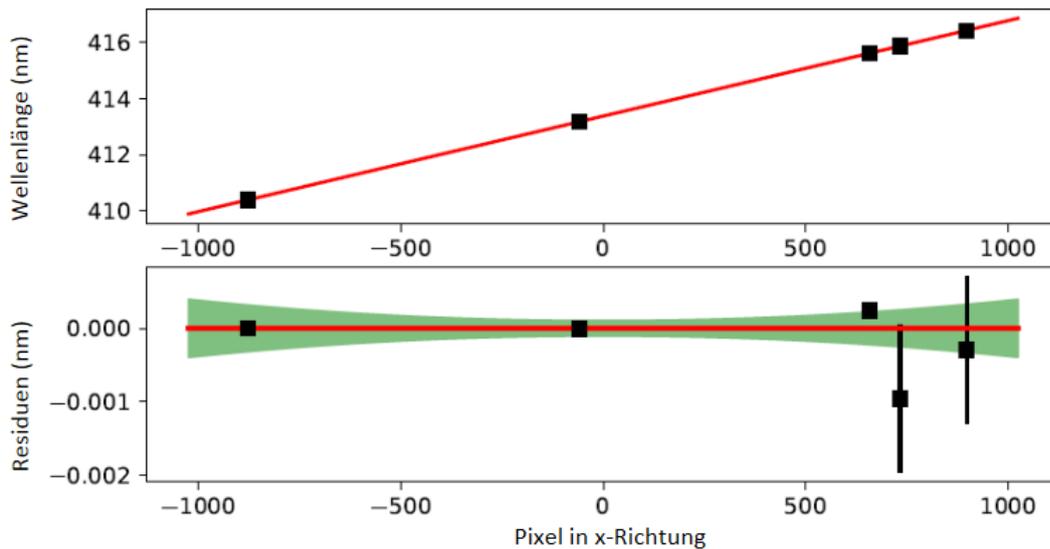


Abbildung 32: Oben in der Abbildung: Fit einer quadratischen Dispersion an die Linien in der Projektion des Kalibrationsbildes zum Xenonspektrum bei einer bei 413,9 nm gefundenen Linie. Unten im Bild: Residuenplot zum Fit der Quadratischen Dispersion an die gefundenen Linien. In beiden Abbildungen sind auf der x-Achse die Pixel in x-Richtung auf der Kamera zu sehen, und auf der y-Achse die den Peaks zugeordneten Wellenlängen in nm. Die unterschiedlichen Fehler entstammen den angegebenen Fehlern der NIST-Datenbank. Der Fehler zu den ersten drei Datenpunkten ist $1,0 \cdot 10^{-5}$ nm und damit in der Abbildung nicht zu sehen. Weitere Erklärungen sind im Text.

Gaußkurven. Ein Beispiel ist in Abbildung 33 zu sehen: Man erkennt die Aufspaltung in drei Gaußkurven. Die mittlere Kurve lässt sich als die π -Linie identifizieren, während die äußeren beiden Linien die σ^+ - und σ^- -Linien sind. Aus dem Fit ergibt sich dann die zu dem quantenmechanischen, elektronischen Übergang gehörige Wellenlänge der ausgesandten Photonen. Die Ergebnisse der Übersichtsbilder (grobe Position der Linien bzgl. Wellenlänge und Ionisierungsenergien), sowie die Ergebnisse des genauen Ansteuerns konkreter Linien (genaue Wellenlänge der Linie) sind in den folgenden beiden Tabellen zusammengetragen. In beiden Tabellen wurde zunächst nach der Elektronenstrahlenergie sortiert, und dann in zweiter Linie nach den Wellenlängen. Diese Entscheidung basiert darauf, dass die Elektronenstrahlenergien ein Indiz für den Ladungszustand sind. Somit wird hier der Versuch gestartet, die gefundenen Linien in erster Linie nach ihren Ladungszuständen zu sortieren.

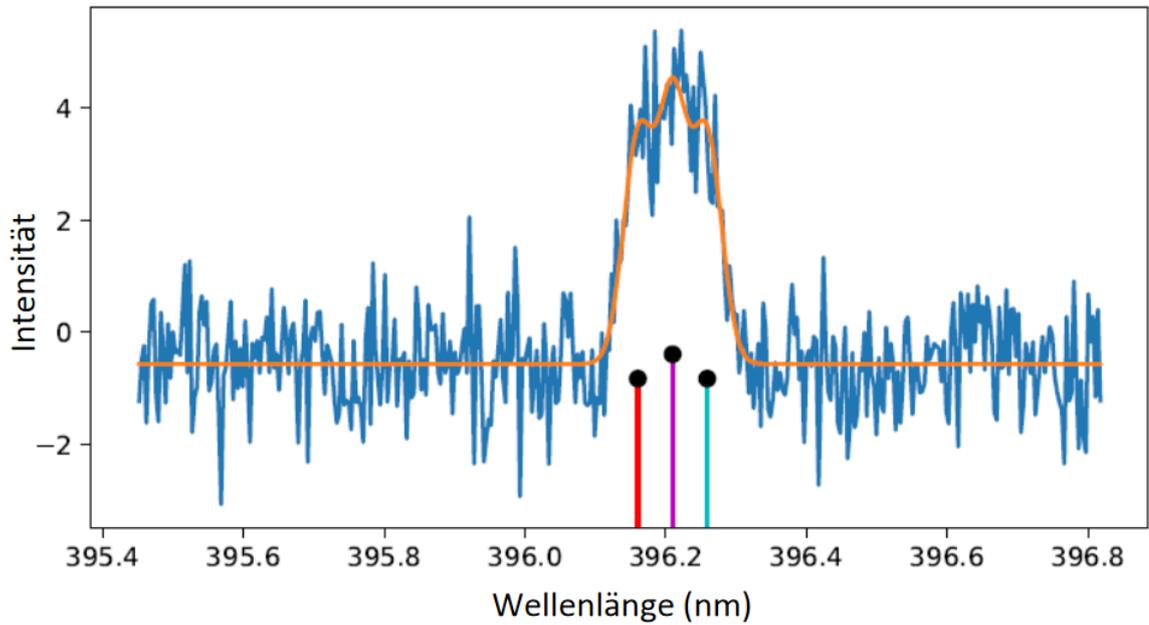


Abbildung 33: Darstellung der gefundenen HCI Xenon-Linie bei 396,2 nm (Xe^{31+} [12]). In blau ist das Histogramm der Projektion des aufgenommenen Xenonspektrums zu sehen. In orange ist der Zeemanfit zu sehen. In diesem Beispiel zeigt sich die Aufspaltung in drei Gaußverteilungen durch den Zeeman-Effekt. Die Intensität ist nicht in Counts angegeben, da vor diesem Fit, wie im Text erläutert, auf verschiedene Arten reskaliert wurde.

Tabelle 1: Gefundene Linien aus den Übersichtsbildern. λ steht für die gemessene Wellenlänge, $\Delta\lambda$ ist der zugehörige Fehler aus dem Fit. Der Fehler aus der Dispersion wurde dabei nur teilweise berücksichtigt, da hier im Allgemeinen der Fehler aus dem Fit dominiert. E ist die nicht korrigierte Strahlenergie der Zeile aus dem Übersichtsbild, bei der die Linie maximal stark zu sehen war.

λ (nm)	$\Delta\lambda$ (nm)	E (eV)	λ (nm)	$\Delta\lambda$ (nm)	E (eV)	λ (nm)	$\Delta\lambda$ (nm)	E (eV)
659,03	0,03	235	800,70	0,07	370	471,1	1,4	520
656,310	0,020	250	615,510	0,020	373	563,68	0,07	536
723,36	0,04	250	380,40	0,20	385	603,85	0,05	536
598,41	0,03	251	706,18	0,06	385	628,09	0,03	536
361,7	0,3	280	398,8	0,4	400	446,8	0,9	580
665,41	0,04	280	400,4	0,4	400	452,8	1,0	580
630,16	0,03	281	405,7	0,4	400	801,50	0,07	700
696,48	0,06	295	433,0	0,7	400	400,9	0,4	730
372,6	0,3	310	711,34	0,07	400	320,3	0,6	745
378,20	0,20	315	788,97	0,06	400	641,180	0,020	748
332,5	0,5	325	623,380	0,020	407	579,93	0,09	963
348,2	0,4	340	579,88	0,05	408	425,9	0,6	970
369	16	340	612,890	0,020	412	465,0	1,3	1405
374,4	0,3	340	353,0	0,4	415	555,99	0,05	1930
713,94	0,07	340	355,8	0,3	415	792,45	0,05	2020
375	18	355	374,4	0,3	415	396,4	0,4	2050
355,8	0,3	370	376,80	0,20	415	598,59	0,04	2080
426,9	0,6	370	394,7	0,4	430	413,9	0,5	2140
438,6	0,8	370	410,1	0,5	430	633,69	0,05	2247
730,68	0,03	370	568,69	0,06	444	730,26	0,03	2260
753,38	0,04	370	436,1	0,8	490	-	-	-
797,44	0,07	370	442,3	0,9	520	-	-	-

Tabelle 2: Genau angesteuerte und vermessene Linien. λ steht für die gemessene Wellenlänge, $\Delta\lambda_{Fit}$ ist der zugehörige Fehler durch die Ungenauigkeit im Fit, $\Delta\lambda_{Disp}$ ist der dominante, aus der Dispersion resultierende Fehler der Wellenlänge. E steht für die nicht korrigierte Strahlenergie, die an der EBIT beim Anfahren der jeweiligen Linie verwendet wurde. Unterschiedliche Elektronenstrahlenergien wurden durch gestrichelte Linien voneinander abgetrennt. Man beachte jedoch, dass auch hier manche Energielevel beinahe identisch sind.

λ (nm)	$\Delta\lambda_{Fit}$ (nm)	$\Delta\lambda_{Disp}$ (nm)	E (eV)
598,344	0,007	0,0014	250
483,643	0,009	0,0004	335
398,697	0,006	0,00018	400
400,3146	0,0018	0,00018	400
402,683	0,005	0,00018	400
405,5898	0,0022	0,00004	400
711,2715	0,0011	0,0004	400
525,016	0,019	0,022	404
353,074	0,005	0,0005	415
355,9017	0,0017	0,0005	415
374,1869	0,0021	0,0003	415
376,6755	0,0019	0,0003	415
542,1306	0,0019	0,0009	440
551,297	0,001	0,0006	440
553,0854	0,0005	0,0006	440
436,1647	0,0022	0,00007	520
442,3481	0,0022	0,00008	580
446,7843	0,0014	0,00012	580
485,012	0,005	0,0004	790
506,8051	0,00010	0,0015	790
464,891	0,003	0,0007	1400
792,4890	0,0015	0,00012	2020
413,8994	0,0029	0,00010	2140
396,2096	0,0016	0,00007	2150

5 Analyse und Diskussion

Woher die erhobenen Daten und Ergebnisse kommen ist an dieser Stelle jetzt klar. Schließlich folgt die Analyse der Daten. Bei der Kalibration des Spektrometers ist die Bedeutung der Ergebnisse klar: Die Bedienung des Spektrometers soll möglichst präzise ablaufen. Daher sind hier vor allem die Fehler der Ergebnisse von großer Wichtigkeit. Beim Vermessen von Xenon ist für eine Analyse vor allem eines wichtig: Da die Ergebnisse aus den in Kapitel 1 genannten Gründen die Datenbank an Spektrallinien von hochgeladenen Ionen ergänzen sollen, müssen hier nun Zuordnungen gemacht werden. Das heißt, dass für die gefundenen Linien die jeweiligen quantenmechanischen Zustände für die elektronischen Übergänge identifiziert werden müssen. Grundsätzlich soll damit aber natürlich nicht zum Ausdruck gebracht werden, dass die Kalibration des Spektrometers von geringerer Bedeutung ist als das Vermessen von Xenon. Durch eine genaue Kalibration des Spektrometers wird eine sehr wichtige Grundlage gelegt, um später beim Vermessen anderer Elemente mit diesem Spektrometer einen reibungslosen Ablauf zu gewährleisten.

5.1 Eigenschaften des Spektrometers

Insgesamt zeigte sich in Abschnitt 4.1 bei den Kalibrationsdaten: Die Genauigkeit ist bei allen errechneten Größen mindestens ausreichend, an vielen Stellen sogar sehr gut. Sollten bei zukünftigen Messungen wider Erwarten Ungenauigkeiten auftreten, können diese mit den vorgeschlagenen Ergänzungen der Daten behoben werden. Auch für die maximal mögliche Auflösung ergab sich ein zufriedenstellendes Ergebnis: Linien können bis auf ca. $0,2 \text{ \AA}$ genau aufgelöst werden. Damit ist die Kalibration des Spektrometers an dieser Stelle nun komplett abgeschlossen, sodass jetzt noch die Ergebnisse zu Xenon analysiert werden können.

5.2 Ergebnisse zu Xenon

Für eine Analyse der Ergebnisse zu Xenon ist vor allem eines wichtig: das Zuordnen der gefundenen Linien bzw. Übergänge. D.h. jedem gefundenen Übergang sollen ein quantenmechanischer Anfangs- und Endzustand zugewiesen werden. Da es im Rahmen dieser Arbeit nicht möglich ist, jeder gefundenen Linie einen Übergang zuzuordnen, wurde dafür ein bestimmter Bereich an Ladungszuständen ausgewählt: Xe^{29+} bis Xe^{35+} . Für die folgende Analyse wird immer wieder auf Übersichtsbilder und auf Grotrian-Diagramme verwiesen. Alle hier nicht gezeigten Diagramme finden sich entweder im vorangegangenen Kapitel (Kapitel 4) oder im Anhang (Kapitel 8). Auch die zur Zuordnung selbst nicht verwendeten Grotrian-Diagramme der zugeordneten Übergänge sind dort zu finden. Anhand von Ihnen kann gesehen werden, dass es möglich scheint die jeweiligen Übergänge tatsächlich zu beobachten. Alle im Folgenden genannten Energien beziehen sich auf die Simulation in FAC.

Im Rahmen der Hauptquantenzahlen ist hier vor allem mit Übergängen innerhalb des Grundzustands und des ersten angeregten Zustands zu rechnen. Höher angeregte Zustände würden sofort wieder in diese beiden Zustände zurückfallen, wobei diese Übergänge energetisch so hoch wären, dass sie nicht im optischen Bereich liegen würden. Deshalb wurden in FAC die Energielevel und Übergangsraten jeweils für die Grundzustände und die ersten angeregten Zustände für alle Ladungszustände von Xe^{29+} bis Xe^{35+} simuliert. Aus der Erfahrung mit den Simulationen aus [15] lässt sich auch abschätzen, dass Linien mit Einsteinkoeffizienten unter einem Wert von 30 nicht mehr zu sehen sind. Daher wurden die vielen, aus FAC erhaltenen Daten direkt eingekürzt auf diejenigen Übergänge, deren Einsteinkoeffizienten größer gleich 30 sind. Zweitens waren beim Abgleich der Simulation mit bereits bekannten Linien Abweichungen von bis zu 30 nm zu finden. Daher wurden dann aus den erhaltenen Übergängen alle Übergänge entfernt, die nicht bis auf ca. 30 nm in dem untersuchten Wellenlängenbereich lagen. Nun war die Liste an möglichen theoretischen Übergängen für die gemessenen Übergänge schon deutlich kürzer. An dieser Stelle sei angemerkt, dass drei der vermessenen Linien in ihren Ladungszuständen bereits bekannt waren: Die Linie bei 436,1647 nm ist ein Übergang im Ladungszustand Xe^{18+} , die Linie bei 396,2096 nm gehört zu Xe^{31+} und die Linie bei 413,8994 nm zu Xe^{32+} [12]. Mit den zweiten beiden Linien sind, bzgl. der Strahlenergien, Anhaltspunkte gegeben, welche Linien im Bereich zwischen Xe^{29+} und Xe^{35+} erwartet werden. Zudem kann untersucht werden, welche Linien in den Übersichtsbildern auf der selben Höhe wie die bekannten Xe^{31+} und Xe^{32+} Linien liegen und somit eindeutig den bei-

den Ladungszuständen zugeordnet werden können. Die beiden Tabellen in Abschnitt 4.2 zeigen mehrere Linien, welche Kandidaten innerhalb des ausgewählten Bereichs sein könnten. Anzuführen sind hier die Linien bei 556 nm, 598,59 nm, 633,69 nm, 730,26 nm und 792,4890 nm (die bekannten beiden Linien ausgenommen). Zudem können noch zwei weitere Linien erahnt und zugeordnet werden, bei denen in den Übersichtsbildern Fits jedoch versagt haben (da die Linien zum Fitten schlicht zu schwach waren): Im Übersichtsbild um 436 nm (Abbildung 47 in Kapitel 8) sind zwischen 440 nm und 460 nm bei Strahlenergien oberhalb von 2000 eV zwei schwache Linien zu erkennen, die rein vom Übersichtsbild strahlenergetisch höher zu liegen scheinen als die bekannte Xe^{32+} Linie im selben Bild. Für alle diese Linien soll nun eine Zuordnung gemacht werden.

5.2.1 Zuordnung der Linie bei 792,4890 nm und Identifizierung der bekannten Linien

Zunächst soll jedoch an dieser Stelle darauf hingewiesen werden, dass die Messungen sowohl in den Strahlenergien als auch in den gemessenen Wellenlängen die Ergebnisse aus [12] zu den drei bekannten Linien bestätigten. Damit kann nun aber schon direkt die erste Linie zugeordnet werden: Im Rahmen der Fehler ergibt sich die Linie bei 792,4890 nm als genau die doppelte Wellenlänge der sehr starken, bekannten Xe^{31+} Linie. Die Lage der Linie bzgl. der Strahlenergie ist ebenfalls identisch. Somit ist diese Linie die 2. Ordnung der bekannten Xe^{31+} Linie und der zugehörige Übergang ist $3d^5 J = 9/2 \rightarrow J = 7/2$ (22,1 eV \rightarrow 19,1 eV). Und die bestätigte Zuordnung der bereits bekannte $32+$ Linie bei 413,8994 nm ist der Übergang $3d^4 J = 3 \rightarrow J = 2$ (18,5 eV \rightarrow 15,4 eV).

5.2.2 Zuordnung der Linie bei 730,26 nm

Als nächstes wurde versucht eine Zuordnung zu der Linie bei 730,26 nm durchzuführen. Aus den Übersichtsbildern geht hervor, dass diese Linie eindeutig höher in der Strahlenergie (und damit in der Ionisierungsenergie) liegt, als die bekannte Xe^{32+} Linie. Somit mussten die Ladungszustände $33+$, $34+$ und $35+$ durchgetestet werden. In der Region ca. 30 nm um diese Linie herum konnte jedoch kein passender Übergang gefunden werden. Somit wird vermutet, dass dieser Übergang dem Ladungszustand $36+$ oder einem

noch höheren Ladungszustand angehört.

5.2.3 Zuordnung der Linie bei 633,69 nm

Es folgte die Zuordnung der Linie bei 633,69 nm. Für eine genaue Zuordnung zu einem Ladungszustand wurde versucht, die Linie, genauso wie die beiden relevanten bekannten Linien, auf die Achse der Strahlenergie zu projizieren, um die resultierenden Ionisierungsenergien vergleichen zu können. Dies scheiterte jedoch daran, dass die Linie im Übersichtsbild so schwach war, dass man sie in der Projektion kaum erkennen konnte. Daher wurde nur aus dem Übersichtsbild die Abschätzung getroffen, dass es sich dabei um eine Linie des Ladungszustandes $32+$ handeln müsste, jedoch auch $31+$ und $33+$ nicht völlig ausgeschlossen werden können. Von dem Übersichtsbild ausgehend wird jedoch an dieser Stelle der Ladungszustand $32+$ angenommen. Um dies endgültig entscheiden zu können, müsste diese Messung jedoch noch einmal mit längeren Belichtungszeiten wiederholt werden. Unter der Annahme, dass es sich tatsächlich um $32+$ handelt, gibt es einen passenden Kandidaten, der hiermit für den Übergang vorgeschlagen wird: $3d^3 4s^1 J = 5 \rightarrow J = 4$ (836,3 eV \rightarrow 834,4 eV).

5.2.4 Zuordnung der beiden unbekannt Linien

Nun folgt die Zuordnung der beiden unbestimmten, oben genannten Linien gewidmet. Beide liegen eindeutig im Bereich zwischen 440 nm und 460 nm. Bei beiden ist die Tendenz in den Übersichtsbildern zu erkennen, dass ihre Ionisierungsenergien höher liegen als die von $32+$. $35+$ hat in diesem Wellenlängenbereich keinen passenden Kandidaten. Nun kann es natürlich sein, dass die beiden Linien zu Ladungszuständen von $36+$ oder höher gehören. Dies kann im Rahmen dieser Arbeit jedoch nicht überprüft werden. Daher wird nun erst einmal angenommen, dass es sich bei den beiden Linien um $33+$ oder $34+$ handeln muss. Beide Ladungszustände haben im zu untersuchenden Wellenlängenbereich jeweils nur genau einen passenden Kandidaten für den Übergang. Bei $33+$ ist das $3d^3 J = 1/2 \rightarrow J = 3/2$ (19,7 eV \rightarrow 16,8 eV). Bei $34+$ handelt es sich um $3d^2 J = 1 \rightarrow J = 2$ (24,7 eV \rightarrow 22,0 eV). Somit werden diese beiden theoretischen Übergänge den beiden Linien zugeordnet. Eine Zuordnung, welche davon welche ist, kann an dieser Stelle mit

der gegebenen Menge an Daten nicht gemacht werden.

5.2.5 Zuordnung der Linie bei 555,99 nm

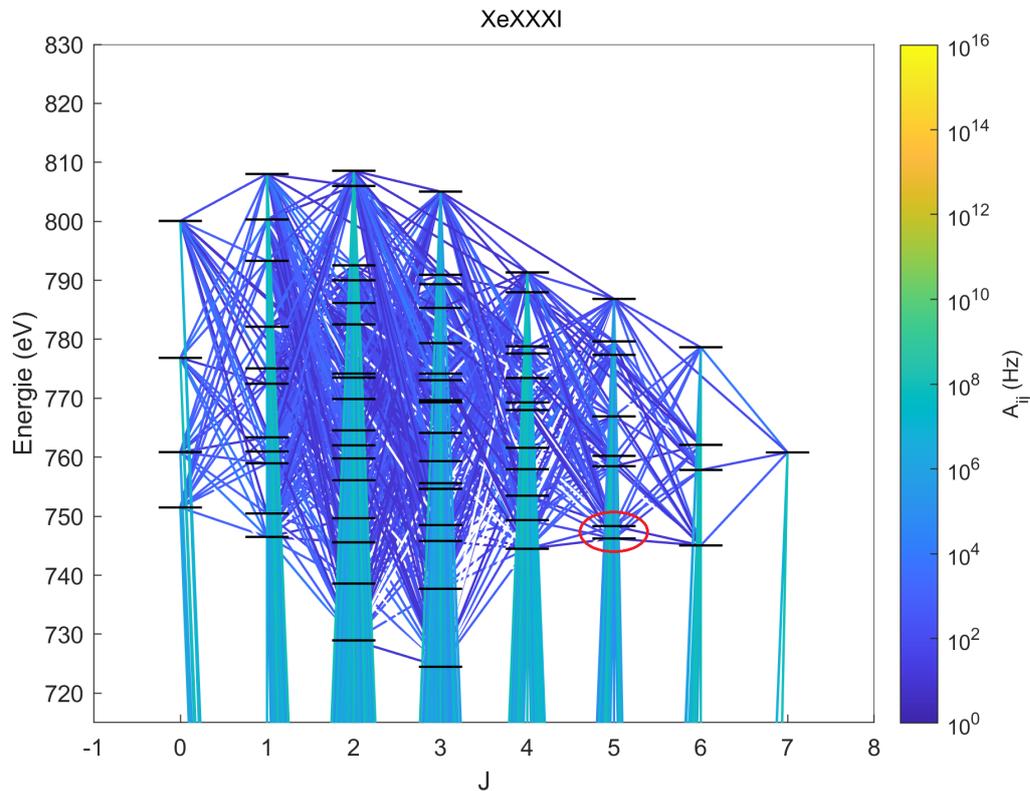


Abbildung 34: Grotrian-Diagramm zur Darstellung der Übergänge innerhalb des $[Ar]3d^5 4s^1$ -Levels (erster angeregter Zustand) in Xe^{30+} .

Nun fehlen nur noch zwei Linien. Davon wird als erstes die Linie bei 555,99 nm untersucht. Diese Linie liegt energetisch im Übersichtsbild eindeutig niedriger als die bekannte 31+ Linie. Es gibt zudem keine 29+ Linie im Wellenlängenbereich von 30 nm um die Linie. Beim Ladungszustand 30+ finden sich zwei Kandidaten. Der eine ist $3d^6 J = 2 \rightarrow J = 2$ (25,1 eV \rightarrow 22,8 eV). Der andere ist $3d^5 4s^1 J = 5 \rightarrow J = 5$ (748,3 eV \rightarrow 746,2 eV). Um hier eine Entscheidung zu treffen, wurden die jeweiligen Grotrian-Diagramm zu Rate gezogen (Abbildung 34 und Abbildung 35). Die beiden Diagramme schließen dabei aneinander an, sodass auch die Übergänge zwischen den Diagrammen angedeutet sind. Nun wird vermutet, dass der gesehene Übergang der innerhalb des $3d^6$

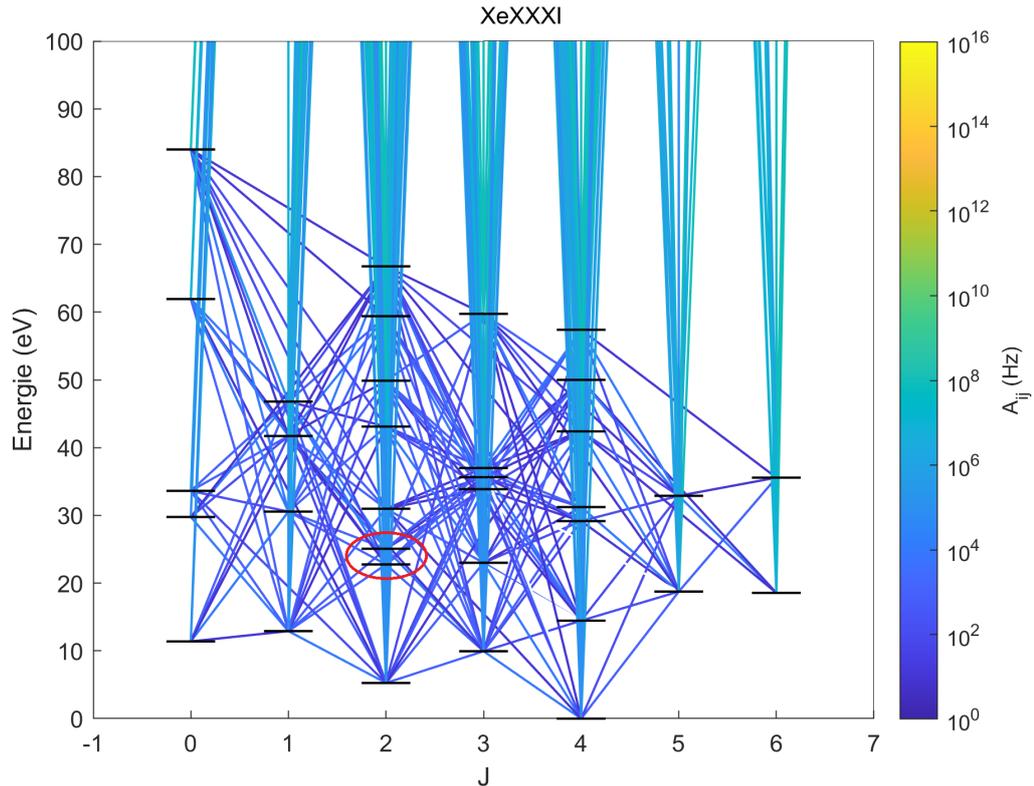


Abbildung 35: Grotrian-Diagramm zur Darstellung der Übergänge innerhalb des $[Ar]3d^6$ -Levels (Grundzustand) in Xe^{30+} .

Zustandes ist. Findet sich ein Elektron in dem für diesen Übergang angeregten Zustand, so gibt es nur drei alternative Zerfallskanäle zu den tiefer liegenden Zuständen bei $J = 1$, $J = 2$ und $J = 3$. Zudem führen viele Zerfallskanäle zu diesem angeregten Zustand. Hingegen besteht für den angeregten Zustand bei dem anderen möglichen Übergang im $3d^5 4s^1$ Zustand die alternative Möglichkeit, in den Grundzustand $3d^6$ zu zerfallen. Wie die Farbskalierung zeigt, ist die Rate für diesen Übergang sehr hoch. Somit ist davon auszugehen, dass der Übergang innerhalb des $3d^5 4s^1$ Zustandes nur sehr unterdrückt stattfinden würde. Damit wird für den gesehenen Übergang der theoretische Übergang $3d^6 J = 2 \rightarrow J = 2$ (25,1 eV \rightarrow 22,8 eV) vorgeschlagen.

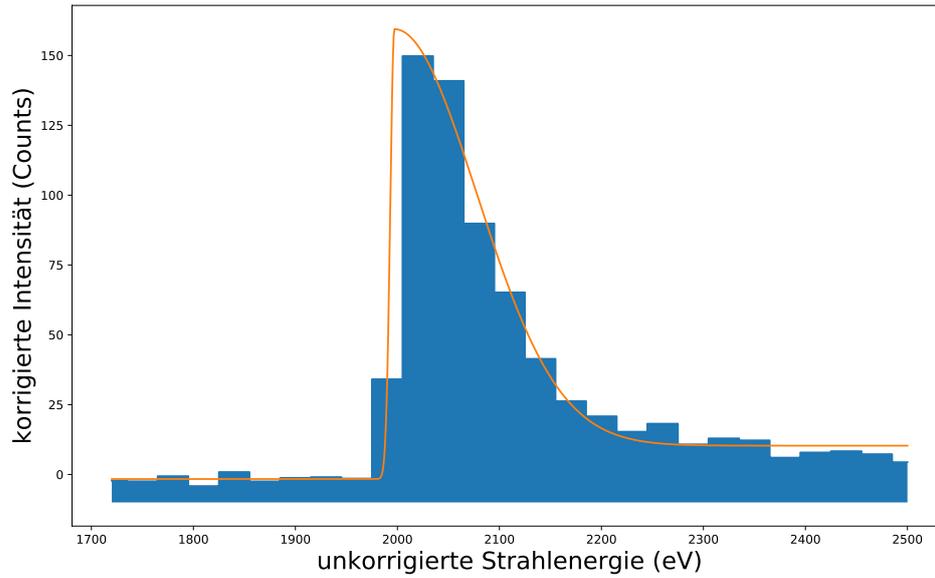


Abbildung 36: Projektion der bekannten 31+ Linie auf die Energieachse in dem zugehörigen Übersichtsbild. Der Fit wird im Text erklärt. Das Maximum liegt bei (1997 ± 13) eV und der σ -Wert der linken Gaußhälfte liegt bei (4 ± 8) eV.

5.2.6 Zuordnung der Linie bei 598,59 nm

Zu guter Letzt wird auf die am schwierigsten zuzuordnende Linie eingegangen: die Linie bei 598,59 nm. In [12] wurde diese Linie dem Ladungszustand 31+ zugewiesen. Diese Zuordnung konnte sich in den hier erhobenen Daten nicht bestätigen. Dafür wurde diese Linie gemeinsam mit der bekannten 31+ Linie und der bekannten 32+ Linie auf die Achse der Strahlenergie projiziert. Anschließend wurden Fits durchgeführt, bei denen vereinfacht zwei in der Spitze aufeinander treffende Gaußkurven angenommen wurden. Das heißt für die Intensität I in Abhängigkeit von der Strahlenergie E gilt:

$$I(E) = I_1 \cdot \exp\left(-\frac{(E - \mu)^2}{2\sigma_1^2}\right) + I_{0,1}, \text{ wenn } E < \mu, \quad (49)$$

und

$$I(E) = (I_1 - |I_{0,2} - I_{0,1}|) \cdot \exp\left(-\frac{(E - \mu)^2}{2\sigma_2^2}\right) + I_{0,2}, \text{ wenn } E \geq \mu. \quad (50)$$

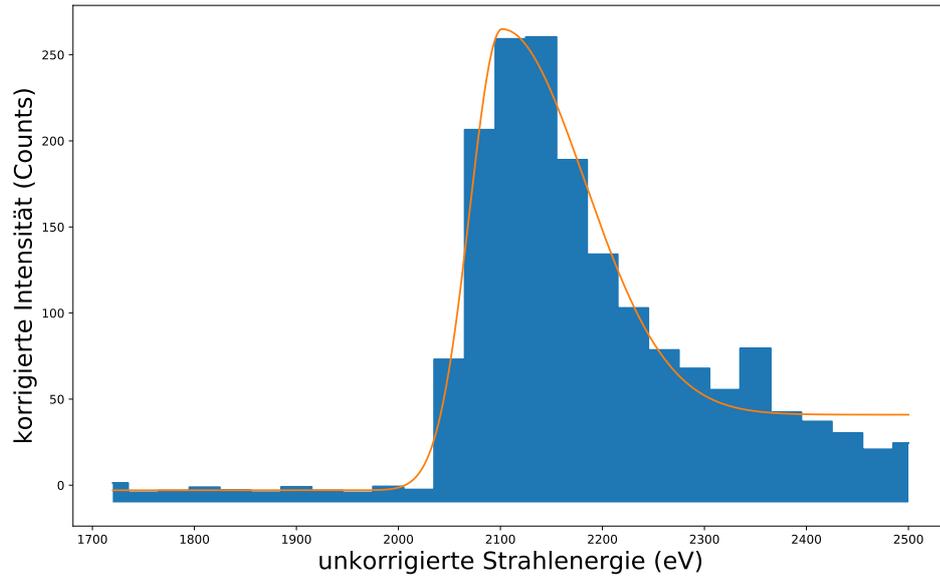


Abbildung 37: Projektion der bekannten 32+ Linie auf die Energieachse in dem zugehörigen Übersichtsbild. Der Fit wird im Text erklärt. Das Maximum liegt bei (2101 ± 5) eV und der σ -Wert der linken Gaußhälfte liegt bei (31 ± 4) eV.

Diese Fits finden sich in Abbildung 36, Abbildung 37 und Abbildung 38. Der von links nach rechts abrupt kommende Anstieg liegt genau bei der Ionisierungsenergie (bis auf den Fakt, dass die Energien hier nach wie vor nicht für die negative Raumladung in der EBIT korrigiert wurden). Daher muss für die Zuordnung der noch unbekanntes Linie genau diese Kante beim Anstieg mit den anderen beiden Diagrammen verglichen werden. Dabei kann hier noch keine eindeutige Zuordnung zu 32+ gemacht werden. Jedoch fällt auf, dass hier mehr Ähnlichkeit mit 32+ als mit 31+ vorhanden ist. Zudem liegt der in [12] zugeordnete Übergang in der aktuellen Simulation des FAC knapp 100 nm von der damaligen Simulation entfernt. Somit wird die in [12] zugeordnete Linie an dieser Stelle als Zuordnung ausgeschlossen. Stattdessen ergeben sich bei 32+ zwei andere Kandidaten für den Übergang, beide innerhalb von $3d^3 4s^1$: Erstens $J = 5 \rightarrow J = 4$ (836,3 eV \rightarrow 834,4 eV), und zweitens $J = 0 \rightarrow J = 1$ (856,0 eV \rightarrow 853,8 eV). Auch hier wird wieder das entsprechende Grotrian-Diagramm hinzugezogen (Abbildung 39). Betrachtet man nun erneut für beide möglichen Übergänge die jeweils angeregten bzw. höheren Niveaus, so fällt auf, dass bei dem Übergang von $J = 0$ aus nur ein alternativer Übergang in den

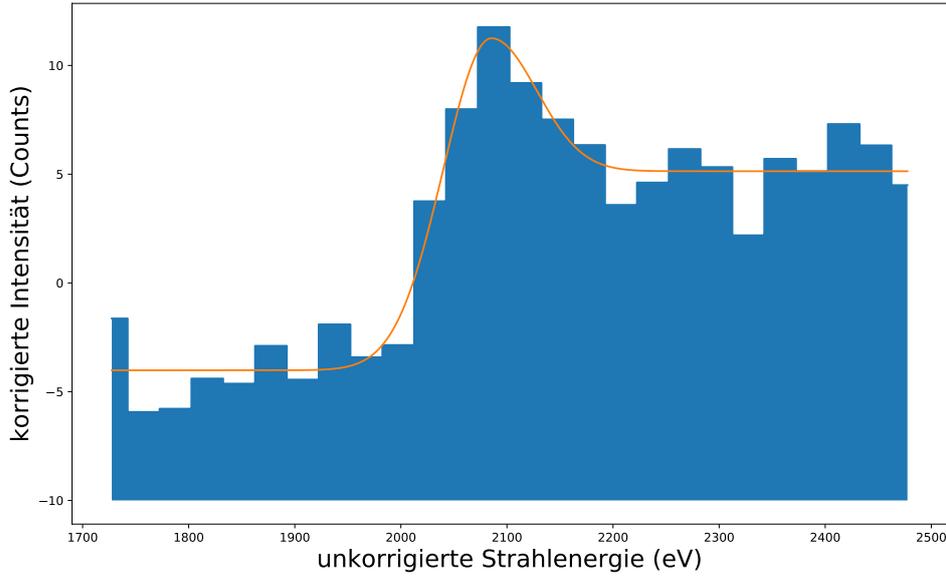


Abbildung 38: Projektion der zu untersuchenden Linie auf die Energieachse in dem zugehörigen Übersichtsbild. Der Fit wird im Text erklärt. Das Maximum liegt bei (2085 ± 13) eV und der σ -Wert der linken Gaußhälfte liegt bei (45 ± 11) eV.

Grundzustand $3d^4$ mit einer hohen Rate existiert. Hingegen sind beim Übergang von $J = 5$ aus drei Übergänge in den Grundzustand $3d^4$ mit einer hohen Rate möglich. Da damit bei dem Übergang von $J = 5$ aus mehr sehr wahrscheinliche Alternativen bestehen, wird hier nun die Zuordnung des Übergangs $3d^3 4s^1 J = 0 \rightarrow J = 1$ (856,0 eV \rightarrow 853,8 eV) vorgeschlagen. Für eine genaue Untersuchung der Übergänge anhand der Grotrian-Diagramme müsste man das Branching-Ratio BR_{ik} für alle möglichen Zerfallskanäle betrachten:

$$BR_{ik} = \frac{A_{ik}}{\sum_j A_{ij}}. \quad (51)$$

Dabei wird das Matrixelement des gewünschten Übergangs A_{ik} ins Verhältnis zur Summe aller Matrixelemente aller möglichen Übergänge A_{ij} gesetzt. Dies war zeitlich im Rahmen dieser Arbeit leider nicht mehr möglich und muss für eine eindeutige Zuordnung der gefundenen Linien noch gemacht werden.

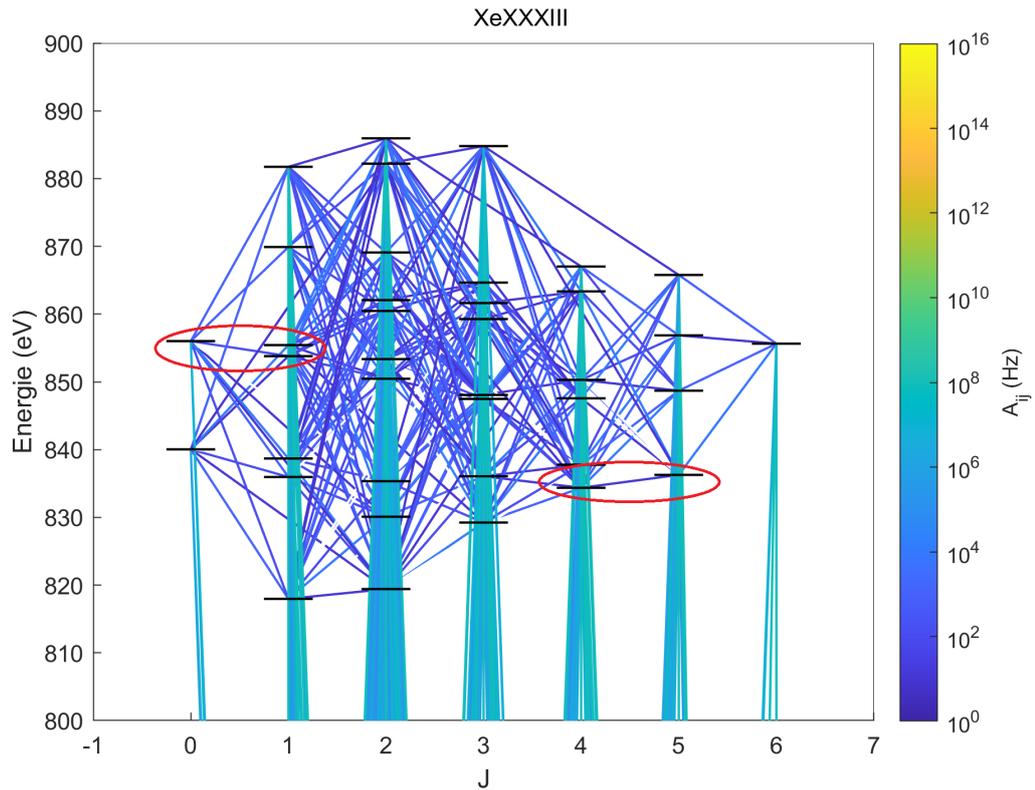


Abbildung 39: Grotrian-Diagramm zur Darstellung der Übergänge innerhalb des $[Ar]3d^34s^1$ -Levels (erster angeregter Zustand) in Xe^{32+} .

5.2.7 Zusammenfassung der Zuordnung der Linien

Die Ergebnisse der Zuordnung der quantenmechanischen Übergänge zu den gefundenen Linien werden hier in der folgenden Tabelle noch einmal zusammengefasst.

Tabelle 3: Zusammenfassung der Zuordnung der gefundenen Linien. Die Tabelle ist nach den Ladungszuständen der möglichen Übergänge sortiert.

λ (nm)	$\Delta\lambda_{Fit}$ (nm)	$\Delta\lambda_{Disp}$ (nm)	mögliche Übergänge	zugehörige Energien FAC (eV)	Ladungszustand
555,99	0,05	-	$3d^6 J = 2 \rightarrow 2$	25,1 \rightarrow 22,8	30+
396,2096	0,0016	0,00007	$3d^5 J = 9/2 \rightarrow 7/2$	22,1 \rightarrow 19,1	31+
792,4890	0,0015	0,00012	$3d^5 J = 9/2 \rightarrow 7/2, 2. \text{ Ö.}$	22,1 \rightarrow 19,1	31+
413,8994	0,0029	0,00010	$3d^4 J = 3 \rightarrow 2$	18,5 \rightarrow 15,4	32+
598,59	0,04	-	$3d^3 4s^1 J = 0 \rightarrow 1$	856,0 \rightarrow 853,8	32+
633,69	0,05	-	$3d^3 4s^1 J = 5 \rightarrow 4$	836,3 \rightarrow 834,4	32+
445	ca. 5	-	$3d^3 J = 1/2 \rightarrow 3/2$	19,7 \rightarrow 16,8	33+
			$3d^2 J = 1 \rightarrow 2$	24,7 \rightarrow 22,0	34+
460	ca. 5	-	$3d^3 J = 1/2 \rightarrow 3/2$	19,7 \rightarrow 16,8	33+
			$3d^2 J = 1 \rightarrow 2$	24,7 \rightarrow 22,0	34+
730,26	0,03	-	?	?	36+ oder höher

6 Zusammenfassung und Ausblick

In der Einleitung wurde erläutert, inwiefern diese Arbeit als Fortsetzung der Arbeit von Fraunhofer zu sehen ist, und welche Ziele damit verfolgt wurden. Dabei wurde zum einen eingeführt, inwiefern das genaue Vermessen von Übergängen in HCIs Tests der Feinstrukturkonstante α und Untersuchungen von Isotopenshifts und Dunkler Materie ermöglicht. Dazu muss an dieser Stelle leider gesagt sein: in vorangegangenen Arbeiten zu ähnlichen Themen wie z.B. [15] oder auch [16] wurden Übergänge an EBITs genauer vermessen, sodass die Genauigkeit hier noch zu optimieren bleibt. Dazu gibt es allerdings gute Möglichkeiten: Man kann in Zukunft die gewünschten Linien bei deutlich längeren Belichtungszeiten vermessen, oder man nimmt am Spektrometer einfach direkt noch mehr Kalibrationsspektren mit anderen Kalibrationslampen an den gewünschten Stellen auf, nimmt gleichzeitig noch an der selben Stelle ein Kalibrationsspektrum mit der bisherigen Lampe auf, legt diese übereinander, verschiebt sie so, dass sie mit der bisherigen Kalibration übereinstimmen, und hat damit schließlich mehr Linien zur Kalibration, um diese zu verfeinern.

Zudem wurde in der Einleitung erläutert, dass es auch ein Ziel dieser Arbeit ist (unter anderem für Analysen in der Astrophysik), die Datenbanken zu Spektrallinien im sichtbaren Bereich für HCIs allgemein zu ergänzen. Dies ist mit dieser Arbeit zum Teil gelungen. Als unglücklich lässt sich der Fakt beschreiben, dass es nicht gelang, niedrig geladene Xenonionen für niedrige Elektronenstrahlenergien in der HD-EBIT zu fangen und zu beobachten. Nichtsdestotrotz wurden viele neue Linien in den Übersichtsbildern gefunden. Zudem war es möglich, einige davon genauer anzusteuern und genauer zu vermessen. Nun gelang es noch nicht, alle dieser Linien zuzuordnen, und speziell im Bereich um Xe^{17+} bleibt es fraglich, wie viele der Linien sich überhaupt in naher Zukunft zuordnen lassen. In diesem Bereich liegen viele Linien sehr kompakt auf wenigen Nanometer beieinander. Gleichzeitig sind die Simulationen von FAC aktuell nur bis auf ca. 30 nm genau. Das wird die Möglichkeiten der Zuordnung in diesem Ladungszustandsbereich in naher Zukunft ungemein einschränken. Grobe Abschätzungen der Ladungszustände der Linien in dem Bereich werden trotzdem gut möglich sein. Trotz solcher Schwierigkeiten

wurden im Bereich 30+ bis 34+ einige Zuordnungen vorgeschlagen. Diese Zuordnungen sind auf keinen Fall als endgültig zu betrachten, wurden jedoch anhand der vorhandenen Daten gut begründet. Davon abgesehen tragen natürlich auch die nicht zugeordneten, gefundenen Linien dazu bei, in Zukunft, z.B. in der Astrophysik, hochgeladenes Xenon besser identifizieren zu können.

Zu der Vermessung von Xenon lässt sich damit abschließend sagen, dass es definitiv noch Spielraum nach oben in den Messungen und auch in den Zuordnungen gibt, die Ergebnisse dieser Arbeit aber trotzdem als voller Erfolg verbucht werden können.

Auch zum Spektrometer bleibt nicht viel zu sagen. Die Kalibration lief sehr gut und die Ergebnisse sind sehr genau. Größere Ungenauigkeiten in manchen bestimmten Parametern fallen nur wenig ins Gewicht. Zudem wird in Zukunft sowieso zu jeder Messung von Ionen in einer EBIT mit dem Spektrometer erneut ein Kalibrationspektrum aufgenommen werden. Die Zuordnung der Linien wird mit der in dieser Arbeit durchgeführten Kalibration eine Leichtigkeit sein. Schade ist, dass es hier aufgrund von Lieferschwierigkeiten zeitlich nicht mehr möglich war, den Strahlengang von der EBIT zu dem Spektrometer aufzubauen. Dies wird nun in naher Zukunft durchgeführt werden, ist jedoch nun nicht mehr Teil dieser Arbeit. Die Grundlagen dafür wurden in dieser Arbeit gelegt, und das Konzept, hier parabolische Spiegel einzusetzen, steht damit jetzt auch schon. Somit lässt sich auch dieser Teil der Arbeit letzten Endes als erfolgreich beschreiben.

7 Danksagung

Am Ende dieser Arbeit will ich ein großes Dankeschön an Karl Michael Rosner und an Nils-Holger Rehbehn aussprechen. Ohne die beiden als Betreuer wären die Ergebnisse dieser Arbeit in dieser Art und Weise niemals möglich gewesen, und ich durfte von beiden jede Menge Neues lernen.

Selbstverständlich geht auch ein großes Dankeschön an apl. Prof. Dr. José R. Crespo López-Urrutia für die Hilfe und Betreuung während der Arbeit, und für das Leitmotto, ich solle nicht verzweifeln.

Als letztes geht auch ein Dankeschön an die gesamte Arbeitsgruppe, die es ermöglicht hat, meinem Wunsch gerecht zu werden, diese Arbeit bis Ende Juni 2021 fertig werden zu lassen, und stets Motivation verbreitet und für ein sehr angenehmen Arbeitsklima gesorgt hat.

Literatur

- [1] National Nuclear Data Center, Nuklidkarte, Letzter Zugriff: 07.06.2021. URL: <https://www.nndc.bnl.gov/nudat2/chartNuc.jsp>.
- [2] NIST Atomic Spectra Database, Ionization Energies Data, Letzter Zugriff: 27.06.2021. URL: <https://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/ionEnergy.html>.
- [3] Uni Wuppertal, Wasserstoff Feinstruktur, Letzter Zugriff: 27.06.2021. URL: <https://www.google.com/url?sa=i&url=http%3A%2F%2Fhydrogen.physik.uni-wuppertal.de%2Fhyperphysics%2Fhyperphysics%2Fhbase%2Fquantum%2Fhydfin.html&psig=A0vVaw1k2GJQeYNQkewMnQL1BIjl&ust=1624880644182000&source=images&cd=vfe&ved=0CAkQ3YkBahcKEwjg0pif3rfxAhUAAAAAHQAAAAQBA>.
- [4] Thorlabs Website, UV Fused Silica Lenses, Letzter Zugriff: 14.04.2021. URL: https://www.thorlabs.com/newgrouppage9.cfm?objectgroup_id=3540.
- [5] Thorlabs Website, Parabolische Spiegel, Letzter Zugriff: 22.04.2021. URL: https://www.thorlabs.com/newgrouppage9.cfm?objectgroup_id=7002.
- [6] Thorlabs Website, UV-Enhanced Coated Mirror, Letzter Zugriff: 14.04.2021. URL: https://www.thorlabs.com/newgrouppage9.cfm?objectgroup_id=12393&pn=PF20-03-F01.
- [7] Welt der Physik, Artikel Nobelpreis CCD, Letzter Zugriff: 02.06.2021. URL: <https://www.weltderphysik.de/gebiet/technik/news/2009/nobelpreis-fuer-physik-2009-an-charles-k-kao-willard-s-boyle-und-george-e-smith/>.
- [8] Arduino Website, Letzter Zugriff: 22.06.2021. URL: <https://www.arduino.cc/>.
- [9] J. M. Laming et. al. „Emission-Line Intensity Ratios in Fe XVII observed with a microcalorimeter on an Electron Beam Ion Trap“. In: *The Astrophysical Journal*, 545: L161–L164 (2000).
- [10] J. Pott et. al. „FP30, CCD photometry in modern astronomy“. URL: https://svn.mpia.de/trac/gulli/king/attachment/wiki/WikiStart/FP30Doc/Anleitung_F30.pdf.

- [11] J. R. Crespo López-Urrutia et. al. „The Freiburg Electron Beam Ion Trap/Source Project FreEBIT“. In: *Physica Scripta. Vol T80, 502-503* (1999).
- [12] J. R. Crespo López-Urrutia et. al. „Visible Spectrum of Highly Charged Ions: the Forbidden Optical Lines of Kr, Xe, and Ba Ions in the Ar I to Ni I Isoelectronic Sequence“. In: *Physica Scripta. Vol T80, 448-449* (1999).
- [13] K. A. Olive et. al. In: *Review of Particle Physics, Chinese Physics, vol. C38, p. 090001* (2014).
- [14] K. P. Raju et. al. „The Excitation Mechanism of [Fe XIV] 5303 Å Line in the Inner Regions of Solar Corona“. In: *Journal of Astrophysics and Astronomy, 12, 311-317* (1991).
- [15] N. Rehbehn et. al. „Sensitivity to new physics of isotope-shift studies using the coronal lines of highly charged calcium ions“. In: *Physical Review A 103, L040801* (2021).
- [16] H. Bekker. „Optical and EUV spectroscopy of highly charged ions near the 4f-5s level crossing“. Dissertation für den Titel Doktor der Naturwissenschaften an der Universität Heidelberg. Diss. 2016.
- [17] W. Demtröder. *Atoms, Molecules and Photons*. Springer, Berlin, 2018. ISBN: 978-3-662-55521-7.
- [18] W. Demtröder. *Electrodynamics and Optics*. Springer, Berlin, Nov. 2019. 449 S. ISBN: 3030022897.
- [19] J. Fraunhofer. *Kurzer Bericht von den Resultaten neuer Versuche über die Gesetze des Lichtes, und die Theorie derselben*. Juni 1823.
- [20] M. F. Gu. „The flexible atomic code“. In: *Canadian Journal of Physics, vol. 86, no. 5, pp. 675-689* (2008).
- [21] I. Newton. „A Letter of Mr. Isaac Newton, Professor of the Mathematicks in the University of Cambridge; Containing his New Theory about Light and Colors“. In: *Philosophical Transactions, Numb.80* (1671/1672).
- [22] E. Schrödinger. „Quantisierung als Eigenwertproblem“. In: *Annalen der Physik, Vierte Folge, Band 80, No. 13* (1926).
- [23] W. S. Boyle; G. E. Smith. „Charge coupled semiconductor devices“. In: *Bell System Technical Journal, vol. 49, no. 4, pp. 587-593* (1970).
- [24] S. Roth; A. Stahl. *Optik*. Springer-Verlag GmbH, Jan. 2020. ISBN: 366259336X.

- [25] A. Windberger. „Identification of optical transitions in complex highly charged ions for applications in metrology and tests of fundamental constants“. Dissertation für den Titel Doktor der Naturwissenschaften an der Universität Heidelberg. Diss. 2015.
- [26] P. Zeeman. „XXXII. On the influence of magnetism on the nature of the light emitted by a substance“. In: *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 43:262, 226-239 (1897).

8 Anhang

Hier finden sich zunächst die Diagramme zu der Kalibration des Gitter 2, die in Analogie zu den Diagrammen des Gitter 1 erstellt wurden (wie in Abschnitt 4.1 erläutert). Dabei waren die zu verwendenden Fitfunktionen teilweise weniger ersichtlich als bei dem Gitter 1. Es wurde daher angenommen, dass die entsprechenden Fitfunktionen dieselben wie die beim Gitter 1 sein müssen.

Zudem finden sich hier nun die in Abschnitt 4.2 nicht gezeigten Übersichtsbilder, aus denen die groben Positionen der Linien extrahiert wurden, und aus denen die Ladungszustände der Linien abgeschätzt wurden. Dabei gilt: Auf der y-Achse ist die nicht korrigierte Elektronenstrahlenergie in eV zu sehen. Mit nicht korrigiert ist gemeint, dass die negative Raumladung in der EBIT durch den Strahl selbst nicht berücksichtigt wurde. Die Farbskala zeigt eine reskalierte Intensität, die so gewählt wurde, dass man die Linien deutlich sieht.

Anschließend an die Übersichtsbilder finden sich hier noch die Grotrian-Diagramme, die in Abschnitt 5.2 zur Zuordnung von Linien verwendet, aber bisher nicht gezeigt wurden. Hier gilt: Auf der y-Achse sind die Energien der quantenmechanischen Zustände in eV dargestellt, auf der x-Achse ist der Gesamtdrehimpuls J der Zustände dargestellt. Die Farbskalierung bei den Übergängen gibt die zugehörige Rate an, sodass damit indirekt die Wahrscheinlichkeit des Übergangs ausgedrückt wird. Es folgt: je höher die Rate, umso höher die Übergangswahrscheinlichkeit.

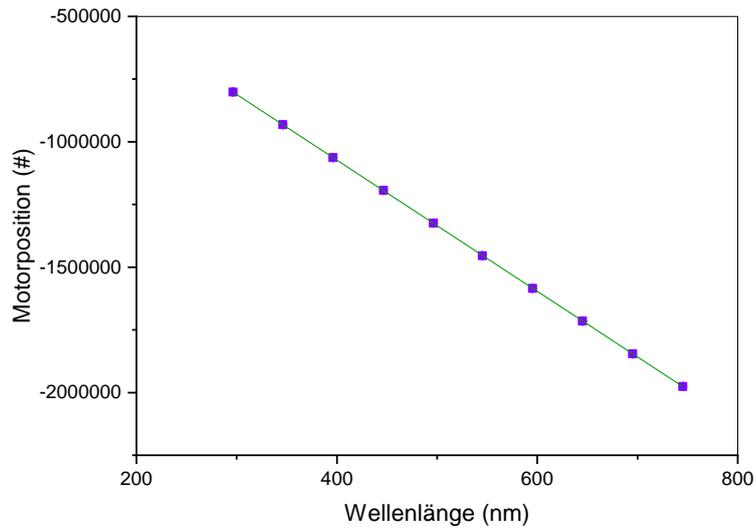


Abbildung 40: Diagramm zur Kalibration des Gitter 2: Die Motorposition des Motors für das Gitter ist über der im jeweils aufgenommenen Bild zentrierten Wellenlänge mit zugehörigen Fehlern angetragen.

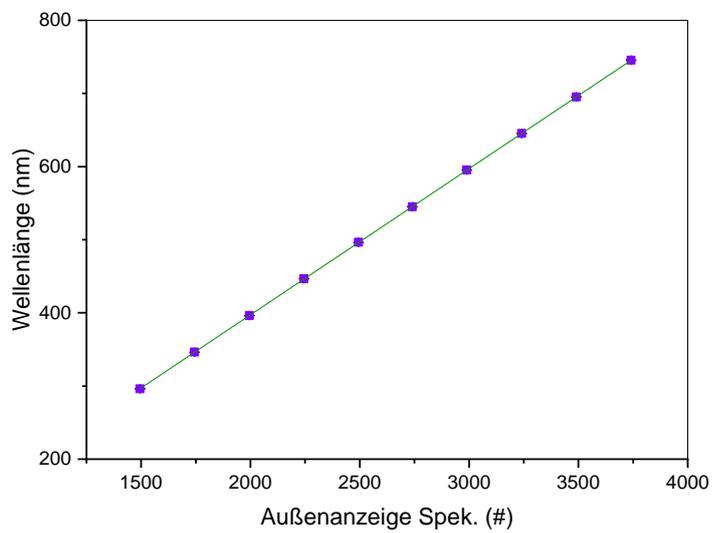


Abbildung 41: Diagramm zur Kalibration des Gitter 2: Die im jeweils aufgenommenen Bild zentrierte Wellenlänge ist über der Außenanzeige des Spektrometers mit zugehörigen Fehlern angetragen.

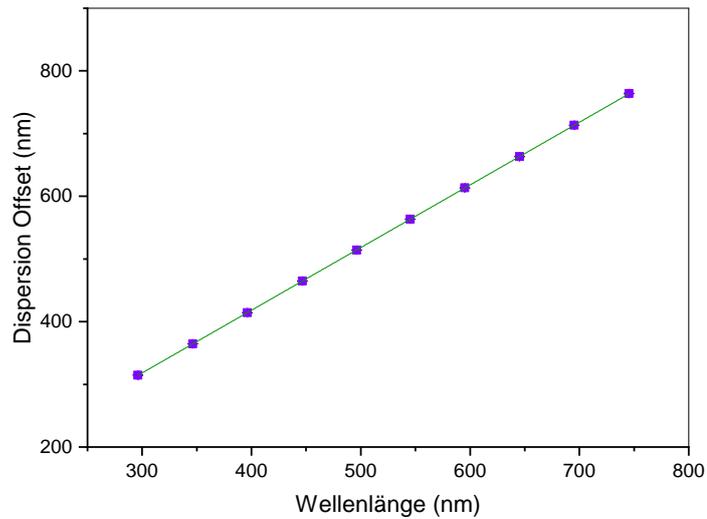


Abbildung 42: Diagramm zur Kalibration des Gitter 2: Der Parameter zum Offset der Dispersion ist über der im jeweils aufgenommenen Bild zentrierten Wellenlänge mit zugehörigen Fehlern angetragen.

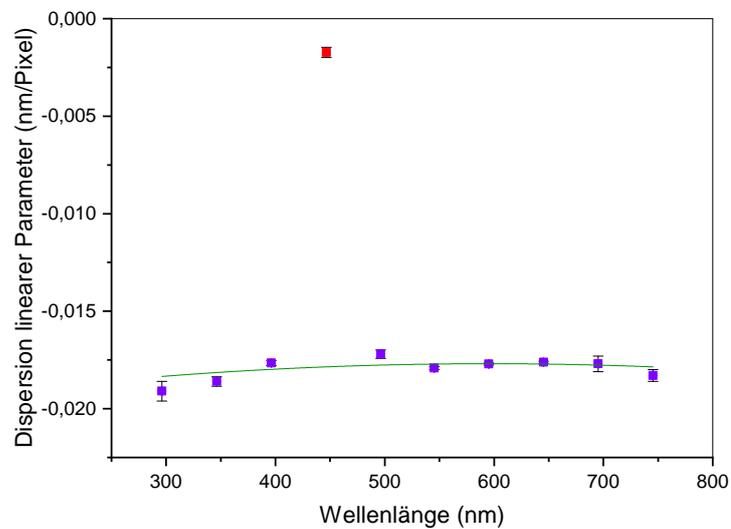


Abbildung 43: Diagramm zur Kalibration des Gitter 2: Der Parameter zum linearen Anteil der Dispersion ist über der im jeweils aufgenommenen Bild zentrierten Wellenlänge mit zugehörigen Fehlern angetragen. Der rote Datenpunkt wurde beim Fit nicht betrachtet, da sich dieser in dem zugehörigen Bild als schlecht ergeben hat.

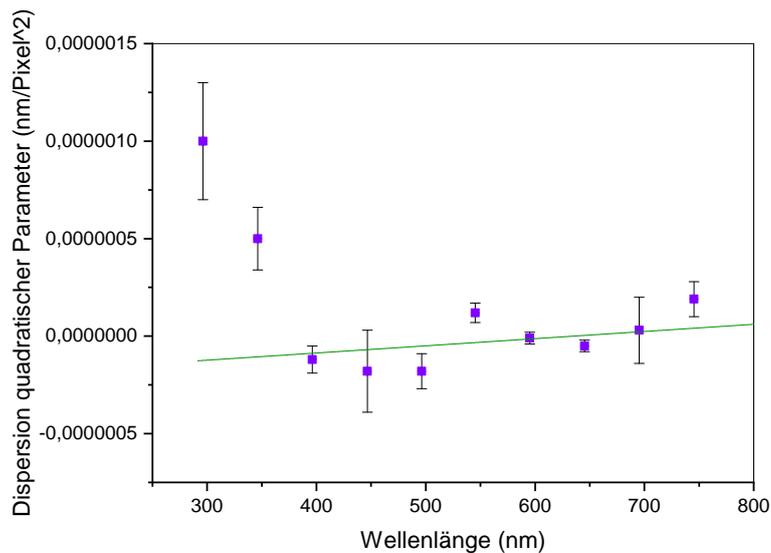


Abbildung 44: Diagramm zur Kalibration des Gitter 2: Der Parameter zum quadratischen Anteil der Dispersion ist über der im jeweils aufgenommenen Bild zentrierten Wellenlänge mit zugehörigen Fehlern angetragen.

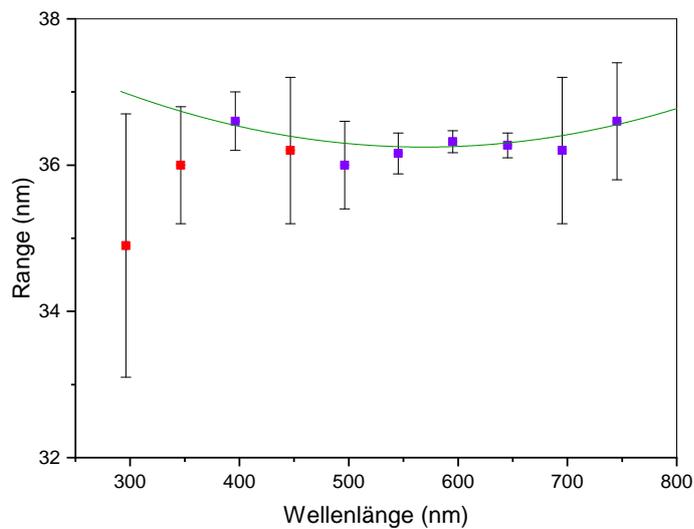


Abbildung 45: Diagramm zur Kalibration des Gitter 2: Der erfasste Bereich der Wellenlängen von der linken bis zur rechten Seite des Bildes ist über der im jeweils aufgenommenen Bild zentrierten Wellenlänge mit zugehörigen Fehlern angetragen. Rote Datenpunkte wurden beim Fit nicht betrachtet, da sich diese Datenpunkte in den zugehörigen Bildern als schlecht ergeben haben.

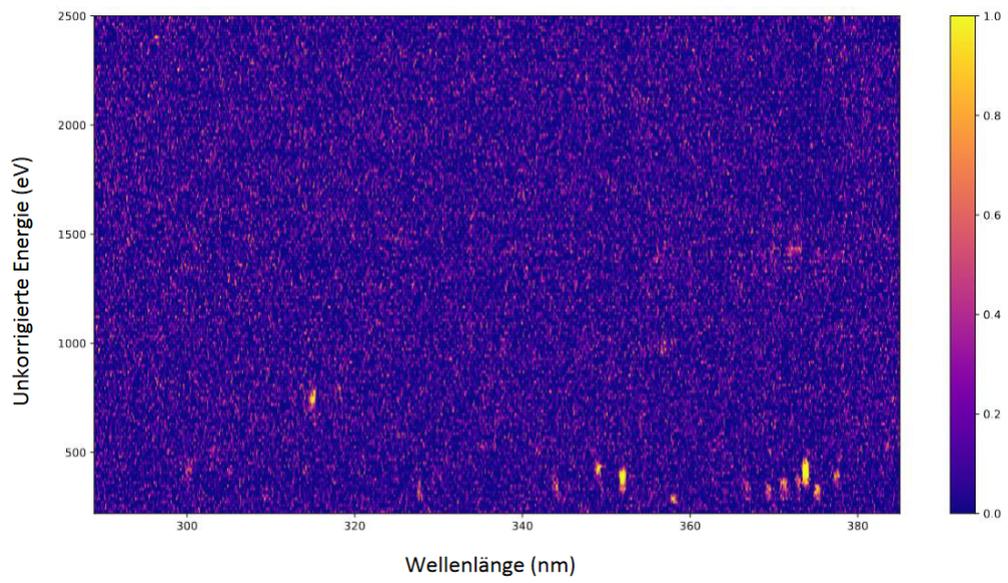


Abbildung 46: Übersichtsbild der gefundenen Linien für hochgeladenes Xenon um 348 nm.

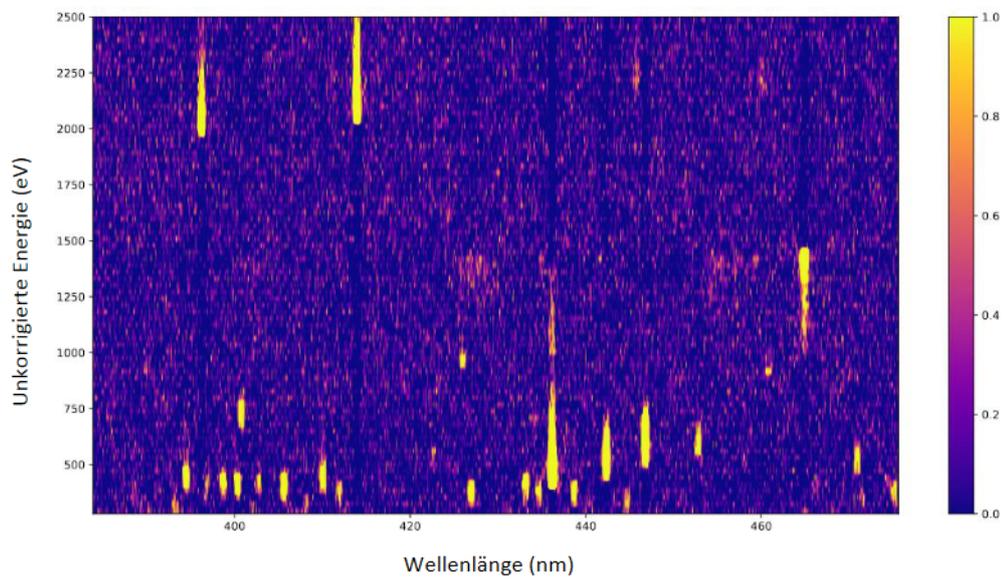


Abbildung 47: Übersichtsbild der gefundenen Linien für hochgeladenes Xenon um 436 nm.

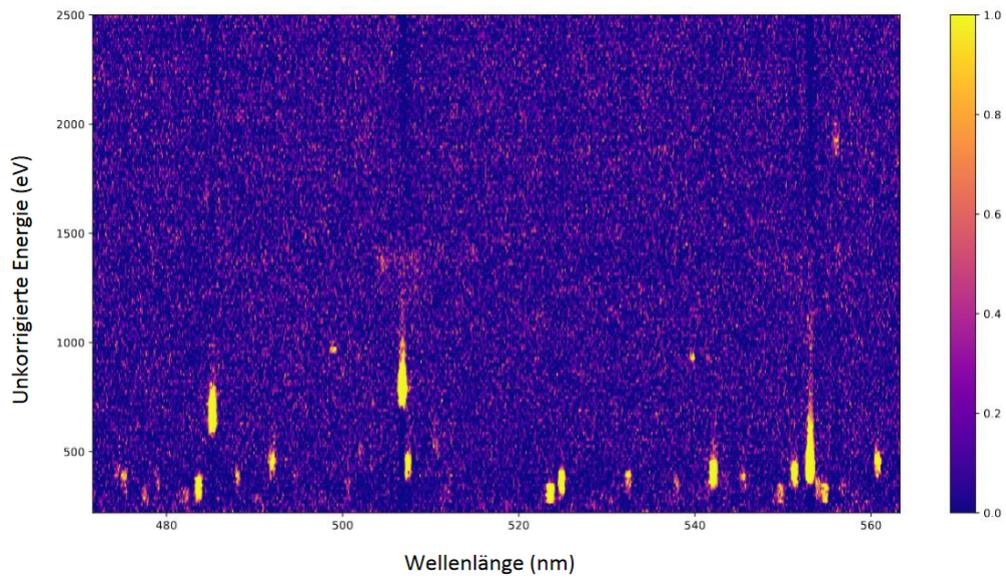


Abbildung 48: Übersichtsbild der gefundenen Linien für hochgeladenes Xenon um 524 nm.

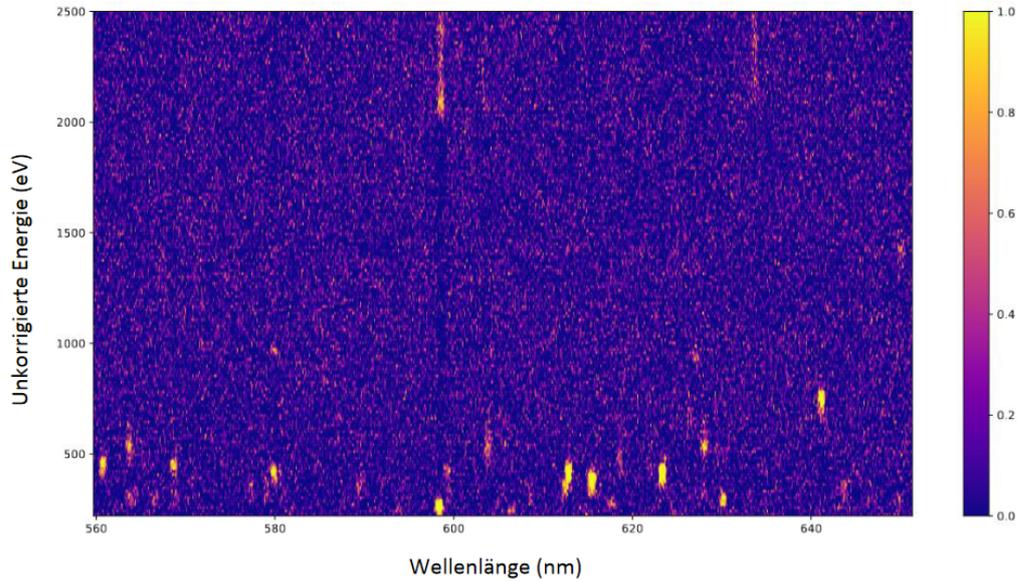


Abbildung 49: Übersichtsbild der gefundenen Linien für hochgeladenes Xenon um 612 nm.

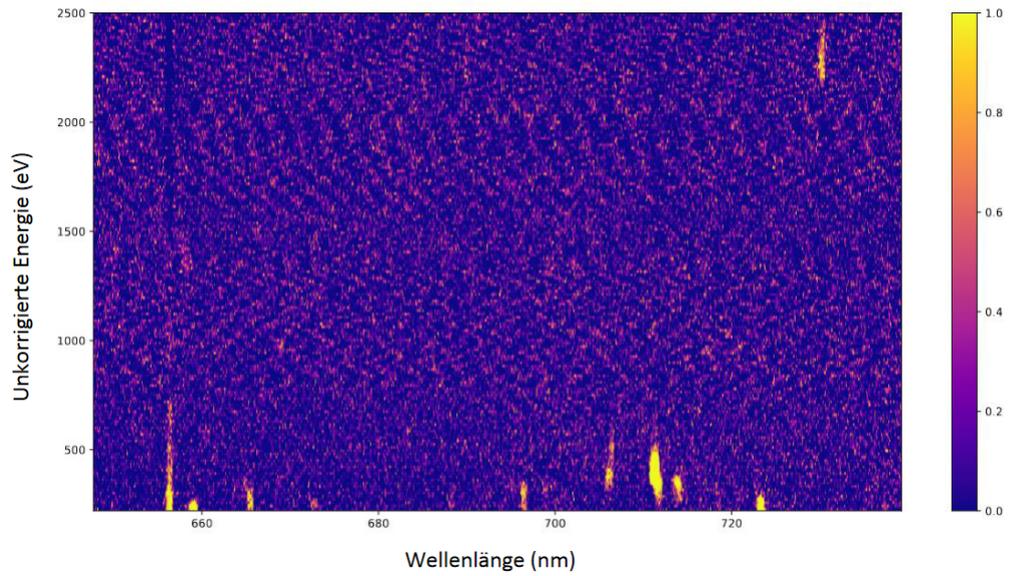


Abbildung 50: Übersichtsbild der gefundenen Linien für hochgeladenes Xenon um 700 nm.

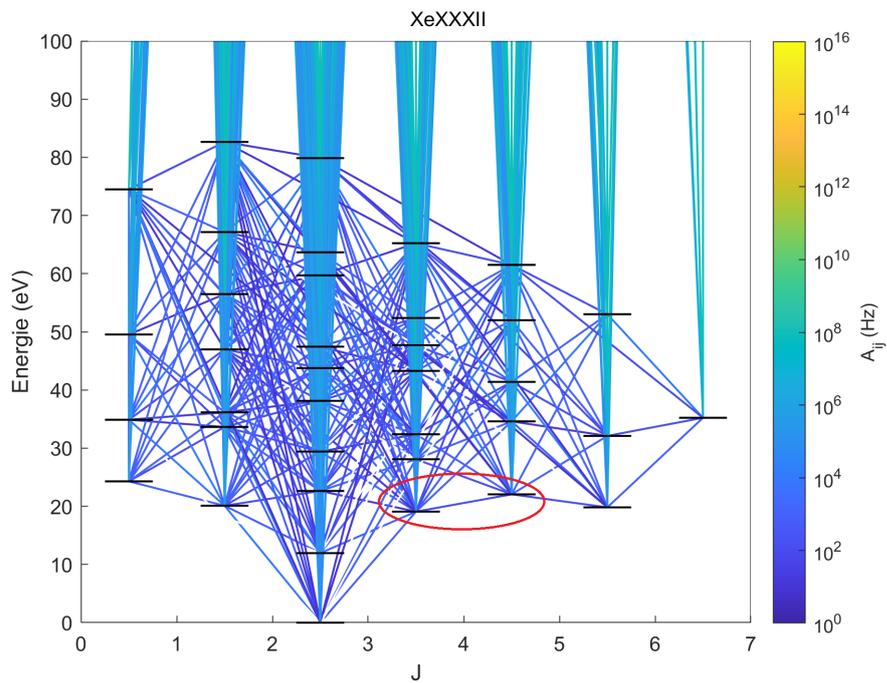


Abbildung 51: Grotrian-Diagramm zur Darstellung der Übergänge innerhalb des $[Ar]3d^5$ -Levels (Grundzustand) in Xe^{31+} .

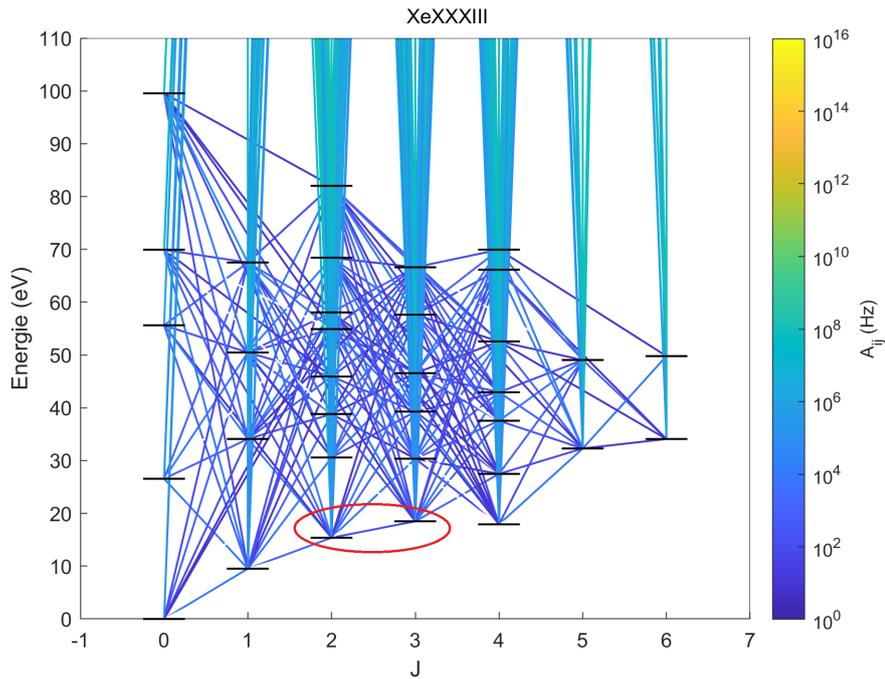


Abbildung 52: Grotrian-Diagramm zur Darstellung der Übergänge innerhalb des $[Ar]3d^4$ -Levels (Grundzustand) in Xe^{32+} .

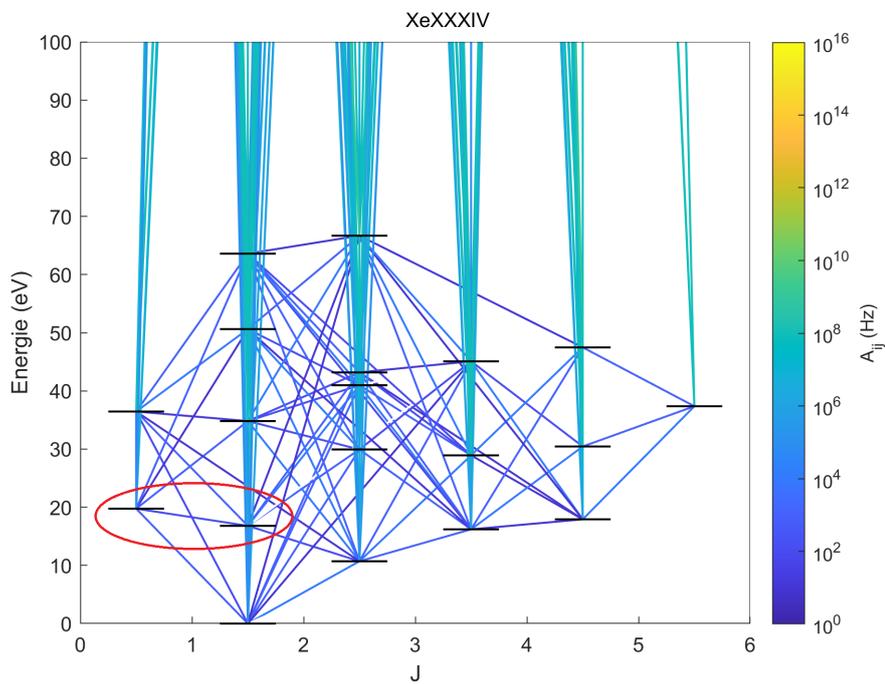


Abbildung 53: Grotrian-Diagramm zur Darstellung der Übergänge innerhalb des $[Ar]3d^3$ -Levels (Grundzustand) in Xe^{33+} .

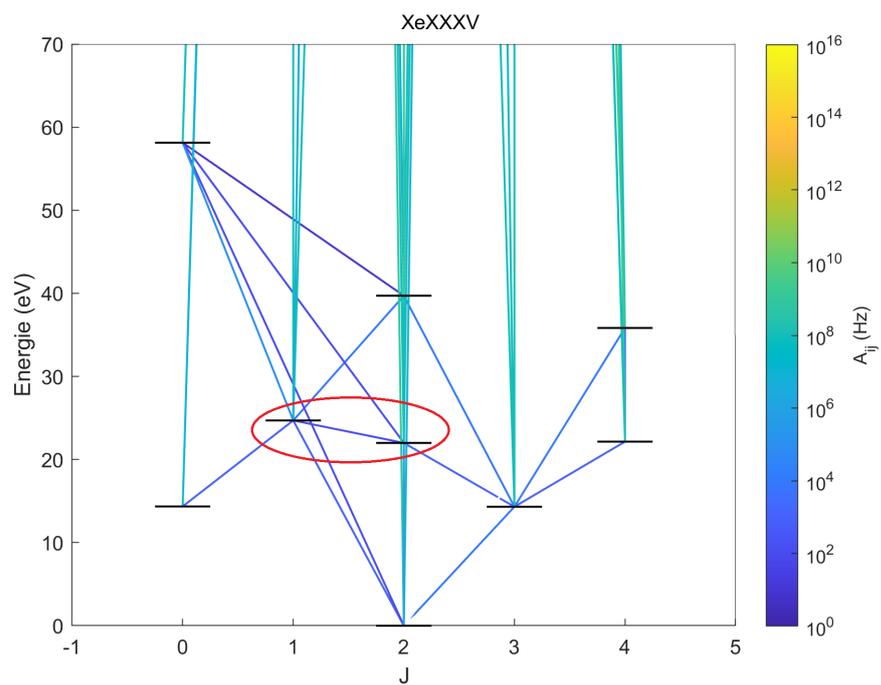


Abbildung 54: Grotrian-Diagramm zur Darstellung der Übergänge innerhalb des $[Ar]3d^2$ -Levels (Grundzustand) in Xe^{34+} .

Akronyme

adjusted R^2 adjustierter Bestimmtheitsgrad. 56, 57

CCD Charge Coupled Device. 33–36, 42, 44, 48, 50, 54, 57, 60, 67

CT-Spektrometer Czerny-Turner-Spektrometer. 8, 30, 33, 37, 40, 67

EBIT Elektronenstrahlionenfalle. 10, 20–25, 28–30, 34, 40, 41, 43, 63, 65, 66, 72, 80, 84, 85, 90

FAC Flexible Atomic Code. 19, 74, 80, 83, 84

HCI hochgeladene Ionen. 8, 9, 12–14, 18, 20, 70, 84

HD-EBIT Heidelberg-EBIT. 10, 20, 21, 37, 44, 63, 84

NIST National Institute of Standards and Technology. 8, 51, 52, 65, 67–69

UV ultraviolett. 25, 29, 42, 46, 61, 62

Erklärung

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

Heidelberg, den 30.06.2021,

A handwritten signature in blue ink, reading "Maximilian Michael Winterer". The signature is written in a cursive style with a large initial 'M'.

Maximilian Michael Winterer