

Indirekte Prozesse bei der Elektronenstoßionisation von Kohlenstoff- und Barium-Ionen

**Inaugural-Dissertation
zur
Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Justus-Liebig-Universität Gießen**

**Fachbereich
Mathematik und Informatik,
Physik, Geographie**

Fachgebiet Physik

**vorgelegt von
Holger Knopp
aus Ulrichstein**

**Institut für Kernphysik
Strahlencentrum der Justus-Liebig-Universität Gießen**

2001

D 26

Dekan: Prof. Dr. A. Beutelspacher

I. Berichterstatter: Prof. Dr. A. Müller

II. Berichterstatter: Prof. Dr. E. Salzborn

Tag der mündlichen Prüfung: 29. Juni 2001

Zusammenfassung

Ziel dieser Arbeit ist die Untersuchung von indirekten Prozessen bei der Elektronenstoßionisation von Ionen. Für Ionen mit wenig Elektronen sind die indirekten Prozesse am Beispiel der Einfachionisation von C^{3+} - und C^{4+} -Ionen durch die Messung der Wirkungsquerschnitte bestimmt worden. Anhand der Vielelektronensysteme Ba^{n+} mit $n = 1, \dots, 13$ wurden beispielhaft die Ionisationsbeiträge systematisch untersucht, die durch einen resonanten Einfang des freien Elektrons bei gleichzeitiger Innerschalenanregung verursacht werden.

Die Bestimmung der Wirkungsquerschnitte erfolgte mit der Methode gekreuzter Elektronen- und Ionenstrahlen. Die verwendete Apparatur erlaubt neben der Bestimmung von absoluten Wirkungsquerschnitten auch eine genaue Bestimmung des relativen Verlaufs des Wirkungsquerschnittes als Funktion der Elektronenenergie mit sehr guter statistischer Genauigkeit. Durch Kombination beider Ergebnisse ist für die oben genannten Ionisationsprozesse sowohl die Energieabhängigkeit als auch die absolute Größe des Wirkungsquerschnittes bestimmt worden.

Für lithiumähnliche C^{3+} -Ionen wurde im Energiebereich von der Ionisationsschwelle bei 64,5 eV bis 1000 eV der absolute Wirkungsquerschnitt für die Einfachionisation bestimmt. Die im Rahmen dieser Arbeit gemessenen Werte liegen in ihrer Größe über älteren Messungen, bestätigen jedoch neueste quantenmechanische Rechnungen. Durch Messungen des relativen Wirkungsquerschnittes für den Energiebereich von 220 bis 360 eV mit einer statistischen Punkt-zu-Punkt-Genauigkeit von 0,04% war es möglich, Interferenzeffekte zwischen verschiedenen Ionisationsprozessen nachzuweisen. Erstmals konnte Interferenz zwischen direkter Ionisation und einem speziellen resonanten Ionisationskanal, dem so genannten READI-Prozess¹, nachgewiesen werden. Dies umfasst eine Anregung eines gebundenen Elektrons (hier aus der K-Schale) mit gleichzeitigem Einfang des stoßenden Elektrons und eine aus einer Dreielektronenwechselwirkung resultierende anschließende Autodoppelionisation. Neben diesem Interferenzeffekt ergibt sich aus einem Vergleich mit verschiedenen theoretischen Beschreibungen ein klarer Hinweis auf Interferenz zwischen dem Beitrag durch Anregung eines K-Schalen Elektrons mit nachfolgender Autoionisation (EA^2) und dem Beitrag durch Anregung mit gleichzeitigem Einfang des Elektrons mit zwei sukzessiven Autoionisationen ($REDA^3$).

¹engl. **RESONANT-EXCITATION-AUTO-DOUBLE-IONIZATION**

²engl. **EXCITATION-AUTOIONIZATION**

Metastabile heliumähnliche Ionen sind über die einfache Anregung der K-Schale die einfachsten Systeme, bei denen indirekte Ionisationsprozesse stattfinden können. Im Rahmen dieser Arbeit wurde mit metastabilen C^{4+} -Ionen erstmals die Elektronenstoßionisation eines derartigen Systems untersucht. Dabei konnten die indirekten Beiträge über die Anregung eines K-Schalen Elektrons zur Ionisation des metastabilen $1s2s\ ^3S$ -Zustandes bestimmt werden. Die experimentellen Ergebnisse weisen im Bereich der EA und REDA-Prozesse große Unterschiede zu theoretischen Rechnungen auf.

Die Beiträge zur Ein- und Mehrfachionisation von Ba^{n+} -Ionen durch die resonante Anregung eines $3d$ -Elektrons mit nachfolgenden sukzessiven Autoionisationen sind systematisch untersucht worden. Dazu sind alle experimentell zugänglichen Wirkungsquerschnitte für $n = 1, \dots, 13$ in dem Energiebereich, der eine Ionisation durch die resonante Anregung erwarten lässt, bestimmt worden. Es zeigt sich, dass mit zunehmendem Primärladungszustand n des Ba^{n+} -Ions die Wahrscheinlichkeit für den resonanten Einfang anwächst. Innerhalb eines Ladungszustandes n nimmt der Anteil der resonanten Prozesse am Wirkungsquerschnitt mit steigender Mehrfachionisation zu. Für sehr hohe Ionisationsstufen dominiert der resonante Anteil sogar über den direkten Beitrag zum Wirkungsquerschnitt, so z. B. bei der Sechsfachionisation von Ba^{4+} .

Zur Beschreibung des Verlaufs der Resonanzstärken innerhalb eines Ladungszustandes entlang der verschiedenen Ionisationsstufen wurde ein statistisches Modell entwickelt. Unter der Annahme, dass die beim dielektronischen Einfang übertragene Energie sich statistisch auf äußere Elektronen verteilt, können die experimentell beobachteten Ladungszustandsverteilungen durch das Modell ohne Vorliegen detaillierter Informationen über die auf die Innerschalenanregung folgenden komplexen Abregungsmechanismen reproduziert werden.

³engl. **RESONANT-EXCITATION-DOUBLE-AUTOIONIZATION**

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Physikalische Grundlagen	5
2.1. Ionisationsmechanismen	5
2.2. Theoretische Methoden	12
2.3. Semiempirische Methoden	17
3. Experimenteller Aufbau	19
3.1. Die Elektronenkanone	21
3.1.1. Elektronenstrommessung	22
3.2. Ionenstrommessung	24
3.3. Der Einzelteilchendetektor	24
4. Messverfahren, Messdatenerfassung und Auswertung	27
4.1. Dynamisches Messverfahren	29
4.1.1. Fehlerbetrachtung	31
4.2. Energie-Scan-Messverfahren	34
5. Einfachionisation von C³⁺-Ionen	39
6. Einfachionisation von C⁴⁺-Ionen	49
7. Ein- und Mehrfachionisation von Baⁿ⁺-Ionen	61
7.1. Diskussion der resonanten Beiträge	78
7.2. Statistisches Modell	84
Abbildungsverzeichnis	93
Tabellenverzeichnis	95
Literaturverzeichnis	97

1. Einleitung

Schon die ersten menschlichen Kulturen waren vom Licht der Sterne am nächtlichen Himmel fasziniert. Aber erst die Entwicklung der modernen Naturwissenschaften insbesondere der Physik erlaubte es, die Leuchtphänomene und ihre Ursachen zu verstehen. Dieses Licht ist die primäre, oft sogar die einzige Quelle, zur Information über solch weit entfernte Objekte. Dieses Licht wird von angeregten Ionen bzw. Atomen ausgesendet. Nach heutigem Erkenntnisstand geht man davon aus, dass sich die für uns sichtbare Materie fast vollständig im 4. Aggregatzustand befindet, dem so genannten Plasmazustand.

Ein Plasma besteht aus elektrisch neutralen Teilchen (Atomen, Molekülen) sowie geladenen Teilchen, Ionen in verschiedenen Ladungszuständen sowie freien Elektronen. Materie im Plasmazustand findet sich sowohl im Weltraum als auch auf der Erde. Neben den natürlich auftretenden Plasmen wie z. B. dem Blitz haben künstlich erzeugte Plasmen eine ständig wachsende Bedeutung für die Technik. Angefangen vom leuchtenden Gas in der Neonröhre, dem Funken in der Zündkerze, dem Lichtbogen eines Schweißbrenners werden ständig neue Anwendungen von Plasmen entwickelt (Plasmabildschirme, Plasmareinigungsanlagen usw.). Auch für die Energieerzeugung durch kontrollierte Kernfusion bildet die Plasmaphysik eine entscheidende Grundlage. In einer hierbei untersuchten Option verwendet man ein magnetisch eingeschlossenes Plasma. Durch Aufheizen des eingeschlossenen Plasmas werden so hohe kinetische Energien für die Ionen erreicht, dass Fusionsreaktionen möglich werden.

Zum Verständnis eines Plasmas ist es erforderlich, die elementaren Prozesse zwischen den einzelnen Bestandteilen zu verstehen. Durch ihre thermische Bewegung stoßen die Elektronen, Ionen und Atome ständig zusammen. Die Vielzahl der durch Stöße verursachten Prozesse, sowie die Emission und Absorption von Photonen, führen zu einem stetigen Austausch zwischen kinetischer, potentieller und Strahlungsenergie im Plasma. Ziel der Plasmaphysik ist es, diese Vorgänge zu modellieren. Eine wesentliche charakteristische Größe ist dabei die Ladungszustandsverteilung der im Plasma befindlichen Ionen. Daher sind Prozesse, bei denen die Ionen ihren Ladungszustand ändern, von fundamentaler Bedeutung für die Entwicklung von theoretischen Modellen zur Beschreibung von Plasmen. Neben der Rekombination und der Photoionisation trägt auch die Ionisation durch Elektronenstoß zur Ladungsänderung bei. Die Kenntnis der Wirkungsquerschnitte für die Elektronenstoßionisation ist also notwendig, um das Verhalten von Plasmen zu verstehen. Die genauere Untersuchung von astrophysikalischen Plasmen in den 50er Jahren zeigte die große Relevanz von Elektron-Ion-Stößen,

1. Einleitung

die auch in der Fusionsforschung von grundlegender Bedeutung sind.

Die Wechselwirkung von Elektronen mit Atomen wurde in ersten Laborexperimenten an einer Kathodenstrahlröhre schon vor über hundert Jahren von Lenard untersucht [Len03, Len94]. Im Verlauf der weiteren Entwicklung sind dann verschiedene Techniken zur Bestimmung von Wirkungsquerschnitten für die Elektronenstoßionisation von Ionen entwickelt worden :

1. Durch die Beobachtung des von den Ionen im Plasma emittierten Spektrums kann die dynamische Entwicklung der Ladungszustände ermittelt werden. Die Beschreibung der Dynamik erfolgt mittels einer Modellrechnung, in die im wesentlichen die Wirkungsquerschnitte für ladungsändernde Stöße eingehen. Durch Vergleich mit der Beobachtung lassen sich so Wirkungsquerschnitte bestimmen, unter anderem auch diejenigen für die Elektronenstoßionisation. Da in heißen Plasmen leicht hochgeladene Ionen produziert werden, findet dieses Verfahren insbesondere zur Bestimmung von Wirkungsquerschnitten für hochgeladene Ionen Anwendung. Jedoch wird die Genauigkeit neben den bei allen Experimenten üblichen Messfehlern auch durch die Zuverlässigkeit der zugrunde liegenden Modellrechnungen eingeschränkt. Da die Elektronen in einem Plasma nicht monoenergetisch, sondern gemäß einer Energieverteilung verteilt sind, geht durch die notwendige Mittelung über diese Verteilung auch die Information über Strukturen im Wirkungsquerschnittsverlauf verloren. Daher lassen Beobachtungen an heißen Plasmen kaum Rückschlüsse über einzelne Ionisationsmechanismen zu.
2. Bei der Bestimmung von Wirkungsquerschnitten an Ionenfallen werden in einer Falle gespeicherte Ionen mit Elektronen einer bekannten Energie beschossen. Durch Bestimmung der Ladungsverteilung nach einer vorgewählten Einschlusszeit kann durch Vergleich mit Modellrechnungen der Wirkungsquerschnitt für die Elektronenstoßionisation bestimmt werden. Auch hier sind die Genauigkeiten durch die verwendeten Modellrechnungen limitiert. Während des Einschlusses können durch sukzessive Ein- bzw. Mehrfachionisationen sehr hoch geladene Ionen erzeugt werden. Auf diese Weise konnte der Wirkungsquerschnitt für die Einfachionisation von wasserstoffähnlichem Uran an einer Ionenfalle ermittelt werden [Mar94].
3. Eine direkte Untersuchung der Elektronenstoßionisation erfolgt durch Überlagerung eines wohl definierten Ionenstrahls mit einem monoenergetischen Elektronenstrahl. Durch Nachweis der bei Reaktionen zwischen Elektronen und Ionen höher ionisierten Ionen kann der Wirkungsquerschnitt bestimmt werden. Je nach Realisierung unterscheidet man zwischen Verfahren, bei denen sich die Ionenstrahlen unter einem Winkel verschieden von Null kreuzen¹[Dol61] und

¹engl. crossed-beams

dem Verfahren, bei dem beide Strahlen parallel überlagert werden²[Lin95]. Beide Verfahren ermöglichen eine genaue Absolutbestimmung des Wirkungsquerschnittes.

Durch die gegenseitige Stimulation von Theorie und Experiment hat sich das Verständnis für die Elektronenstoßionisation ständig weiterentwickelt. Neben der direkten Ionisation, also dem Herausschlagen eines Elektrons aus dem Ion durch das stoßende Elektron, sind weitere Mechanismen postuliert und gemessen worden. Man unterscheidet dabei zwischen resonanten und nicht-resonanten Prozessen. Im resonanten Fall wird das stoßende Elektron vom Ion bei einer gleichzeitigen Anregung eingefangen, beim nicht-resonanten Fall gibt das stoßende Elektron nur einen Teil seiner kinetischen Energie an das Ion ab. Für Ionen mit relativ wenig Elektronen gibt es neueste theoretische Modelle, die all diese Prozesse in einer „*ab initio*“ Rechnung berücksichtigen. Die theoretischen Vorhersagen weisen Signaturen für die Interferenz der verschiedenen Prozesse auf. Im Rahmen dieser Arbeit sind experimentelle Daten für die Einfachionisation von C^{3+} - und C^{4+} -Ionen zum Vergleich mit diesen aktuellen Rechnungen in Kapitel 5 bzw. 6 vorgestellt. Die Vorhersagen von Interferenzeffekten konnten bei der Messung an C^{3+} -Ionen und teilweise auch an C^{4+} -Ionen experimentell bestätigt werden.

Resonanzphänomene spielen nicht nur bei der Einfachionisation eine Rolle. In Kapitel 7 dieser Arbeit wird z. B. gezeigt, dass die Sechsfachionisation von Ba^{4+} -Ionen durch einen resonanten Prozess dominiert wird, der durch die Anregung eines $3d$ -Elektrons charakterisiert ist. Die Bedeutung dieser resonanten Prozesse für die Ein- und Mehrfachionisation von Ba^{n+} -Ionen mit $n = 1, 2, \dots, 13$ wird in Kapitel 7 systematisch untersucht. Bei den beobachteten resonanten Prozessen befinden sich nach der Mehrfachionisation bis zu acht Elektronen im Kontinuum. Für diese Vorgänge an dem Vielelektronensystem Ba^{n+} gibt es keine theoretischen Vorhersagen. Daher ist zur Beschreibung der Elektronenemission nach einer resonanten Anregung ein statistisches Modell entwickelt worden. Es zeigt sich, dass die Vorhersagen dieses Modells in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen sind.

²engl. merged-beams

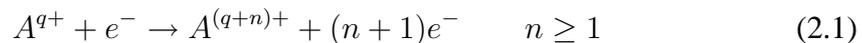
1. *Einleitung*

2. Physikalische Grundlagen

Bei der Streuung eines freien Elektrons an einem Ion kann eine Vielzahl von Prozessen ablaufen. Man unterteilt diese in Prozesse mit Ladungsänderung und solche ohne. Bei der Ladungsänderung unterscheidet man weiter in Ionisation und Rekombination. Die folgenden Abschnitte beschreiben die bei der Ionisation zu beobachtenden Mechanismen.

2.1. Ionisationsmechanismen

Ein Targetion A^{q+} kann durch den Stoß mit einem Elektron gemäß der Reaktion



n-fach ionisiert werden. Tabelle 2.1 gibt eine Übersicht über die bei der Reaktion auftretenden Ionisationsmechanismen.

Der einfachste Prozess ist die direkte Ionisation, die sehr oft auch den größten Beitrag zum Wirkungsquerschnitt liefert. Dabei führt das einlaufende Elektron durch einen inelastischen Stoß dem Ion Energie zu. Ist die übertragene Energie größer als die Ionisierungsenergie, so kann es zur Einfachionisation bzw. bei genügend großem Energieübertrag auch zur Mehrfachionisation kommen (s. Abb. 2.1).

Bei allen weiteren Ionisationsmechanismen tritt ein angeregter Zwischenzustand auf. Diese mehrstufigen Prozesse unterteilt man in resonante und nicht-resonante Prozesse. Bei den nicht-resonanten Prozessen überträgt das einlaufende Elektron einen Teil seiner Energie an das Ion und hat nach der Reaktion eine um die charakteristische Anregungsenergie des Ions verminderte Energie. Das Ion bleibt in einem angeregten Zustand zurück, der radiativ oder durch Auger-Prozesse zerfallen kann. Der Zerfall über Auger-Prozesse ist ein ein- oder mehrstufiger Prozess und trägt dementsprechend zur Ein- oder Mehrfachionisation bei (s. Abb. 2.1). Je nach Art der Bildung des angeregten Zwischenzustandes spricht man von *Anregung-Autoionisation*¹ (EA) bzw. *Ionisation-Autoionisation* (IA) (s. Tab. 2.1).

Bei der *Ionisation-Autoionisation* wird zunächst ein Innerschalenelektron durch Elektronenstoß direkt ionisiert (s. Abb. 2.1). Durch das so entstandene Innerschalenloch befindet sich das neu erzeugte Ion in einem angeregten Zustand. Zerfällt dieser

¹in der Literatur mit EA für **Excitation-Autoionization** (EA) bezeichnet

2. Physikalische Grundlagen

	Ionisationsmechanismen $e + A^{q+} \rightarrow \dots$	
	Einfachionisation	(n-fache) Mehrfachionisation
direkte Ionisation	$\rightarrow A^{(q+1)+} + 2e$	$\rightarrow A^{(q+n)+} + (n+1)e$
Ionisation- Autoionisation		$\rightarrow [A^{(q+1)+}]^* + 2e$ $\quad \hookrightarrow A^{(q+n)+} + (n-1)e$ <small>Autoionisation</small> $\rightarrow A^{(q+n)+} + (n+1)e$
Anregung- Autoionisation (EA)	$\rightarrow [A^{q+}]^* + e$ $\quad \hookrightarrow A^{(q+1)+} + e$ <small>Autoionisation</small> $\rightarrow A^{(q+1)+} + 2e$	$\rightarrow [A^{q+}]^* + e$ $\quad \hookrightarrow A^{(q+n)+} + ne$ <small>mehrfache Autoionisation</small> $\rightarrow A^{(q+n)+} + (n+1)e$
resonante Innerschalen- anregung	$\rightarrow [A^{(q-1)+}]^{**}$ $\quad \hookrightarrow A^{(q+1)+} + 2e$ <small>doppelte Autoionisation</small>	$\rightarrow [A^{(q-1)+}]^{**}$ $\quad \hookrightarrow A^{(q+n)+} + (n+1)e$ <small>mehrfache Autoionisation</small>

Tabelle 2.1.: Zusammenstellung der verschiedenen Ionisationsmechanismen

Zustand über eine oder mehrere Autoionisationen, werden bei diesem Prozess insgesamt mindestens zwei oder mehr Elektronen aus dem Ion entfernt. IA ist somit nur bei der Doppel- oder Mehrfachionisation zu beobachten, dort bildet die *Ionisation-Autoionisation* oft den wesentlichen Beitrag zum Wirkungsquerschnitt [Pha86].

Die *Anregung-Autoionisation* (EA) hingegen kann schon bei der Einfachionisation beobachtet werden. Hier wird durch den Stoß mit dem freien Elektron ein im Ion gebundenes Elektron in einen angeregten Zustand gebracht. Zerfällt dieser nicht durch Emission eines Photons sondern durch Autoionisation, so trägt dies zur Einfachionisation bei. Im Gegensatz zur Anregung bei Atomen ist der Wirkungsquerschnitt für die Elektronenstoßanregung bei Ionen im Bereich der Schwellenenergie für diesen Prozess maximal [Kim83]. Der Beitrag durch EA zum Gesamtwirkungsquerschnitt kann den Anteil der direkten Ionisation um bis zu eine Größenordnung übersteigen.

Die bisher beschriebenen Prozesse können auftreten, sobald die Elektronenenergie eine bestimmte Schwelle überschreitet. Bei den im folgenden beschriebenen Prozessen läuft die Bildung des autoionisierenden Zustandes über den strahlungslosen Einfang des stoßenden Elektrons bei gleichzeitiger Anregung eines bereits am Targetion vorhandenen Elektrons ab. Durch den Einfang des Elektrons verringert sich der Ladungszustand des Ions zunächst um eine Einheit. Dieser Vorgang wird als dielektronischer Einfang bezeichnet und ist wegen der Energieerhaltung nur für eine ganz

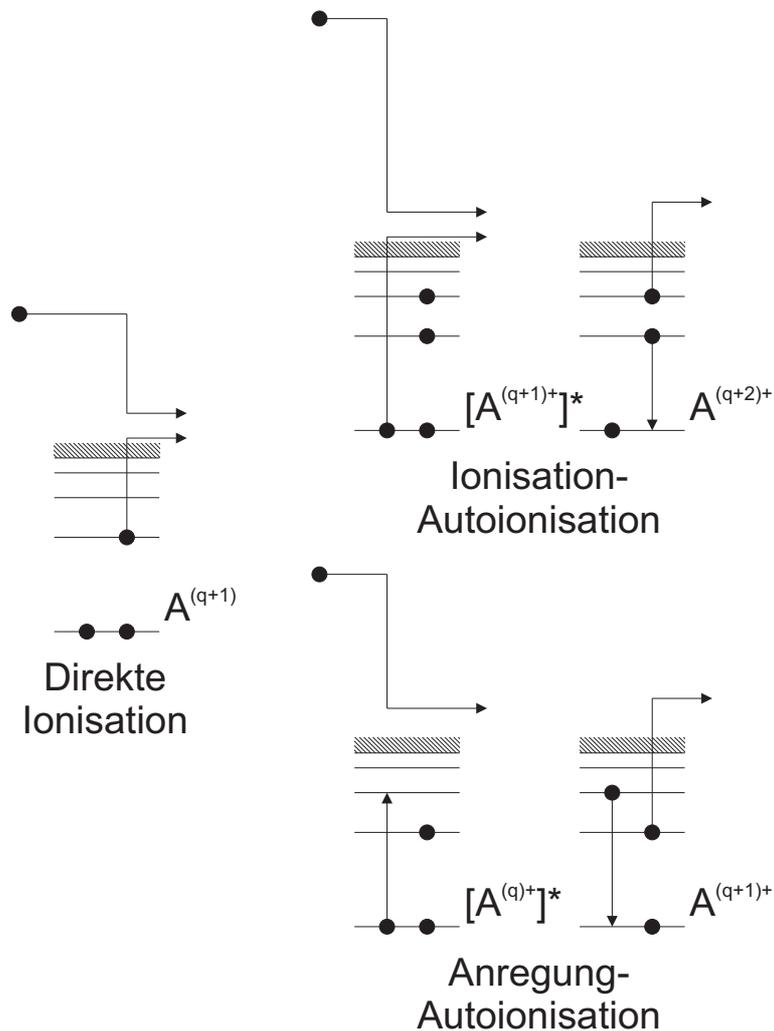


Abbildung 2.1.: Veranschaulichung der nicht-resonanten Elektronenstoßionisationsprozesse

bestimmte Elektronenenergie möglich. Für die Anregung des am Targetion vorhandenen Elektrons wird die Energie ΔE benötigt, durch den Einfang des Elektrons wird ein Energiebeitrag ε frei. Daher liegt die Elektronenenergie für den resonanten Einfang eines Elektrons mit Anregung eines Targetelektrons von nl nach $n'l'$ um die Energie ε unterhalb der Anregungsschwelle für die entsprechende Anregung des Targetelektrons. Für die Abregung des entstandenen angeregten Zustandes gibt es mehrere Möglichkeiten. Neben dem Umkehrprozess des dielektronischen Einfangs und der dielektronischen Rekombination, dem radiativen Zerfall des angeregten Zustandes, die nicht zur Ionisation beitragen, sind auch resonante Ionisationsprozesse möglich (s. Abb. 2.2). Für die Einfachionisation unterscheidet man zwei Fälle:

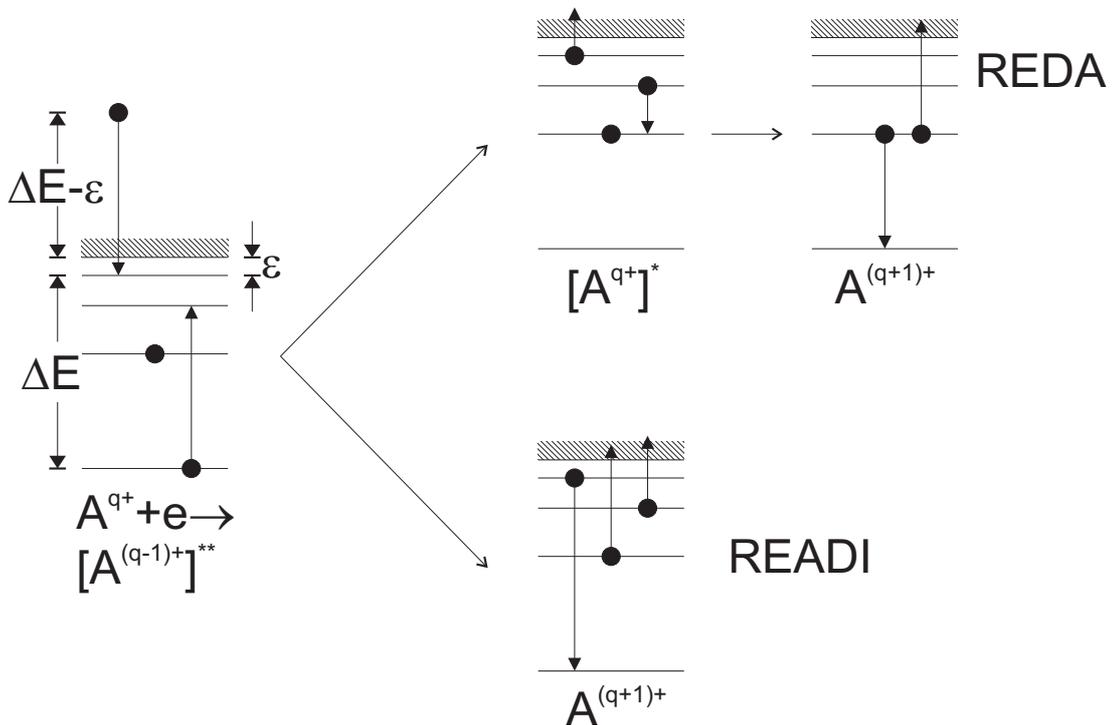


Abbildung 2.2.: Veranschaulichung der resonanten Prozesse bei der Elektronenstoßionisation

- Bei der *resonanten Anregung Doppelautoionisation*² (REDA) werden nach dem dielektronischen Einfang durch zwei sukzessive Autoionisationen Elektronen aus dem Ion emittiert, dies bewirkt eine Netto-Einfachionisation. Dieser Vorgang wurde erstmals von LaGattuta und Hahn [LaG81] postuliert.
- Bei der *resonanten Anregung Autodoppelionisation*³ (READI) hingegen werden nach dem dielektronischen Einfang zwei Elektronen in *einer* Autodoppelionisation gleichzeitig emittiert [Hen82].

Bei beiden Prozessen sind im Ausgangskanal zwei Elektronen und ein einfach höher ionisiertes Ion vorhanden. Im Fall der *resonanten Anregung Autodoppelionisation* ist die kinetische Energie kontinuierlich auf beide Elektronen verteilt, da sie simultan emittiert werden. Nur die Summe aus beiden Energien ist durch die Energieerhaltung vorgegeben. Da auch bei der direkten Ionisation im Ausgangskanal zwei Elektronen mit kontinuierlicher Energieverteilung vorliegen, ist es auch bei einem vollständig bestimmten Experiment, also Erfassung aller Impulse bzw. Energien, nicht möglich beide Prozesse zu unterscheiden. Diese Ununterscheidbarkeit von direkter und indirekter Ionisation durch READI führt zu Interferenzen zwischen den beiden Ionisationsmecha-

²in der Literatur mit REDA für **R**esonant-**E**xcitation-**D**ouble-**A**utoionization bezeichnet

³in der Literatur mit READI für **R**esonant-**E**xcitation-**A**uto-**D**ouble-**I**onization bezeichnet

nismen. Diese äußern sich durch asymmetrische Form der durch den READI-Prozess beobachteten Resonanzen im Wirkungsquerschnitt [Mül89] (s. auch Kap. 5).

Bei der *resonanten Anregung Doppelautoionisation* hingegen werden die Elektronen durch sukzessive Autoionisation emittiert. Bei einer Autoionisation ist die Elektronenenergie durch die Energieerhaltung unter Berücksichtigung der jeweiligen Lebensdauern bzw. Breiten des autoionisierenden Zustandes und des Endzustandes nach der Autoionisation festgelegt. Im Ausgangskanal der Doppelautoionisation gibt es daher zwei Elektronen mit jeweils einer bestimmten Energie E_1 bzw. E_2 . Somit ist es gegebenenfalls möglich, durch Spektroskopie zwischen der direkten Ionisation und dem REDA-Prozess zu unterscheiden⁴. Allerdings kann der bei REDA-Prozessen nach der ersten Autoionisation vorliegende angeregte Zustand auch durch Elektronenstoßanregung bevölkert werden. Aus diesem Zustand wird dann bei beiden Prozessen ein Elektron mit der Energie E_2 emittiert, da die Elektronenenergie unabhängig davon ist, ob der Zustand durch Stoßanregung oder durch eine Autoionisation aus einem höheren Zustand bevölkert wird. Betrachtet man für beide Ionisationsbeiträge im Ausgangskanal ein Ion mit identischer Konfiguration, so folgt aus der Energieerhaltung in Gleichung 2.2, dass die Energie E_1 des auslaufenden Elektrons nach der Anregung gleich der Energie E_1 des beim REDA-Prozess emittierten Elektrons ist. E_{IP} bezeichnet dabei das Ionisationspotential und E_{el} die Energie des stoßenden Elektrons.

$$E_1 + E_2 = E_{el} - E_{IP} \Leftrightarrow E_1 = E_{el} - \underbrace{E_A}_{E_{IP} + E_2} \quad (2.2)$$

Bei gleicher Relativenergie des stoßenden Elektrons und des Ions befinden sich nach der Ionisation sowohl für den EA als auch für den REDA-Prozess zwei Elektronen im Endzustand mit für beide Mechanismen gleichen Energien. Zwischen REDA und EA kann in der Nähe von REDA-Resonanzen somit auch durch eine vollständig bestimmte Messung nicht unterschieden werden und daher können diese Prozesse miteinander interferieren.

Für die einzelnen Beiträge zur Einfachionisation sind die Signaturen im Wirkungsquerschnitt für den jeweiligen Mechanismus in Abbildung 2.3 dargestellt. Betrachtet man den Wirkungsquerschnitt entlang der Energieachse, so setzt mit dem Überschreiten des Ionisationspotentials für die Einfachionisation als erster Prozess die direkte Ionisation ein, die durch eine glatte Kurve beschrieben werden kann. Auf dieser glatten Kurve sitzen die stufenförmigen Beiträge durch die EA-Prozesse. Der Wirkungsquerschnitt für diesen Mechanismus ist an der Einsatzschwelle maximal. Dies kann sich, je nach relativem Beitrag des EA-Prozesses zum Wirkungsquerschnitt, in sichtbaren Stufen an den jeweiligen Einsatzschwellen äußern. Insbesondere bei Ionen mit schwach besetzten Valenzschalen, die energetisch dicht über abgeschlossenen Inner-schalen liegen, ist dieser Effekt deutlich beobachtbar. Der Beitrag der EA-Prozesse

⁴Außer für den vergleichsweise unwahrscheinlichen Fall, wenn die Energien beider Elektronen nach dem READI-Prozess oder der direkten Ionisation innerhalb der kontinuierlichen Verteilung zufällig mit den charakteristischen Energien nach dem REDA Prozess übereinstimmen.

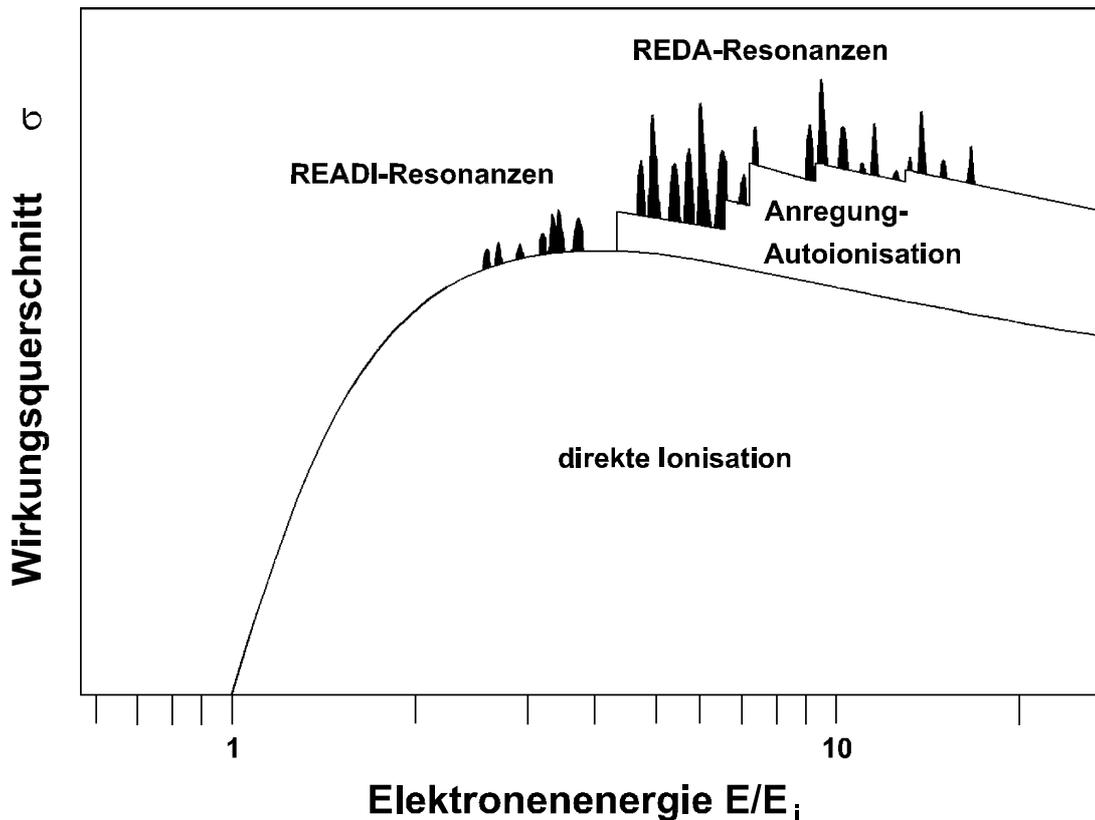


Abbildung 2.3.: Signaturen für die einzelnen Ionisationsprozesse im Gesamtwirkungsquerschnitt für die Einfachionisation (E =Elektronenenergie, E_i = Ionisationsenergie)

zum Gesamtwirkungsquerschnitt kann den Anteil der direkten Ionisation um bis zu eine Größenordnung übersteigen [You85a].

Als Signatur für die resonanten Mechanismen sind im Wirkungsquerschnitt peakartige Strukturen zu erkennen. Bei der Messung des Ionisationsquerschnitts werden die Energien der Elektronen im Ausgangskanal nicht mit erfasst, so dass zunächst zwischen REDA und READI-Prozessen nicht unterschieden werden kann. Unterhalb der ersten EA-Stufe kann jedoch die sukzessive Autoionisation (REDA) nicht zum Wirkungsquerschnitt beitragen (s. Abb. 2.4). Daher sind die peakartigen Strukturen unterhalb der ersten Stufe im Wirkungsquerschnitt eine eindeutige Signatur für den READI-Prozess. Oberhalb der ersten EA-Stufe können diese Strukturen sowohl durch REDA- als auch durch READI-Prozesse verursacht werden. Kann man von Interferenzphänomenen absehen, so wird der Beitrag dieser resonanten Prozesse zum Gesamtwirkungsquerschnitt durch das Produkt aus der Wahrscheinlichkeit für den dielektronischen Einfang und den Auger-Ausbeuten für die jeweiligen Auger-Prozesse bestimmt. In gewissen Fällen kann der Beitrag durch REDA-Prozesse den Wirkungsquerschnitt im jeweiligen Energiebereich dominieren [LaG81, Lin95].

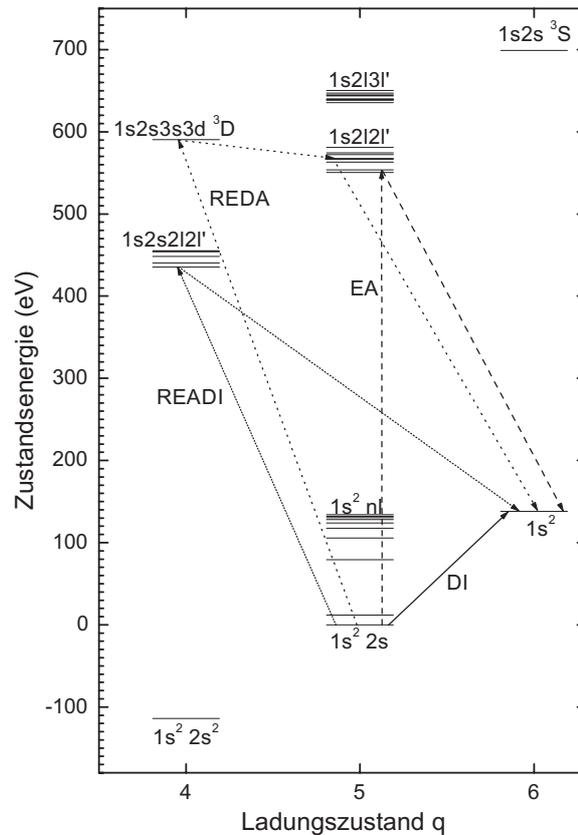


Abbildung 2.4.: Termschema für lithiumähnliche Ionen am Beispiel von O^{5+} [Mül00]. Beispielhaft sind die Reaktionswege für direkte Ionisation (DI), Anregung Autoionisation (EA) sowie die REDA und READI Prozesse eingezeichnet. Unterhalb der Anregungsschwelle für $1s 2s 2l$ Anregung kann nur der READI-Prozess beobachtet werden, da für den REDA Prozess kein Zwischenzustand für die sukzessive Autoionisation vorhanden ist.

Bei der Mehrfachionisation laufen analoge Vorgänge ab. Zusätzlich kann jedoch hier der nicht-resonante Prozess der Ionisation-Autoionisation beobachtet werden. Übersteigt die Energie des Projektilektrons die Bindungsenergie des Innerschalen-elektrons, dessen Herausschlagen den autoionisierenden „Loch“-Zustand bedingt, so tritt ein zusätzlicher Beitrag im Ionisationsquerschnitt auf [Mül80].

Ein solcher Lochzustand kann auch durch Emission von mehr als einem Elektron zerfallen und damit Beiträge zur n -fachen Ionisation ($n \geq 3$) liefern. Wird durch den dielektronischen Einfang des Projektilektrons ein Zwischenzustand mit hoher Anregungsenergie gebildet, so können auch hier mehrere Elektronen durch sukzessive Autoionisation emittiert werden. Die Emission von $(k + 1)$ Elektronen nach dem Einfang führt dann zu einer k -fachen Ionisation (s. Tab. 2.1). Für die Ein-, Zwei- und Dreifachionisation wurden solche Prozesse erstmals durch Müller *et al.* beobachtet

[Mül88b, Tin89]. Im Rahmen dieser Arbeit wurden resonante Prozesse für die k -fach Ionisationen bis zu $k = 7$ beobachtet (siehe Kap. 7).

2.2. Theoretische Methoden

Die theoretische Behandlung der (Einfach-)Ionisation eines Ions durch Elektronenstoß ist sehr schwierig, da sich im Ausgangskanal der Reaktion mindestens drei geladene Teilchen befinden. Für dieses Dreikörperproblem mit der Coulomb-Wechselwirkung gibt es sowohl klassisch als auch quantenmechanisch keine geschlossene Lösung. Ausgehend von der ersten klassischen Beschreibung der Elektronenstoßionisation durch Thomson [Tho12] sind daher verschiedene quantenmechanische Näherungsmethoden entwickelt worden, die jeweils für bestimmte Energiebereiche zur Anwendung kommen. Im folgenden wird ein kurzer Überblick über einige theoretische Methoden gegeben.

Für Relativenergien ($E_{rel} \geq 2 \cdot IP$) deutlich oberhalb des Ionisationspotentials IP haben sich störungstheoretische Methoden bewährt. Diese Verfahren basieren auf der Born'schen Näherung. In den nichtrelativistischen Verfahren geht man von der Schrödinger-Gleichung für ein System mit $(N+1)$ Elektronen ,

$$H(Z, N + 1)\Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi \quad (2.3)$$

für das Streuproblem aus. Dabei ist N die Zahl der Elektronen und Z die Kernladungszahl des Ions. Der Hamilton-Operator in Gl. 2.3 setzt sich aus drei Teilen zusammen

$$H = H_I + H_e + H_{int}. \quad (2.4)$$

H_I ist der Hamilton-Operator für das ungestörte Ion , H_e der Hamilton-Operator für das freie Elektron und H_{int} der Hamilton-Operator für die Wechselwirkung. Je nach Zerlegung des Hamilton-Operators in eine Störung H' und einen ungestörten Anteil H_0 unterscheidet man die verschiedenen Verfahren. Zunächst berechnet man die Wellenfunktionen des Anfangszustandes Φ_a und des Endzustandes Φ_e mit dem ungestörten Hamilton-Operator. Aus dem Matrixelement M_{ea}

$$M_{ea} = \langle \phi_e | H' | \phi_a \rangle \quad (2.5)$$

kann dann der Wirkungsquerschnitt bestimmt werden. Im wesentlichen wurden folgende Verfahren [Kim83, You85a] eingesetzt:

Plane Wave Born Approximation PWBA Hier wird als ungestörter Hamilton-Operator die Summe aus H_I und H_e gewählt, die Störung H' enthält dann sowohl die Wechselwirkung mit dem Kern als auch mit den am Ion befindlichen Elektronen. Da hier der Einfluss des Coulomb-Feldes des Ions auf das freie Elektron vernachlässigt wird, eignet sich dieser Ansatz besonders für niedrig

geladene Ionen und Atome. Rechnungen mit diesem Ansatz zeigen für Elektronenenergien oberhalb von ungefähr dem 10-fachen Ionisationspotential eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment.

Coulomb Born Approximation (CBA) Hier wird das effektiv vom freien Elektron wahrgenommene Coulomb-Feld des Ions in den ungestörten Hamilton-Operator übernommen, die Störung besteht nun nur noch aus der Wechselwirkung des stoßenden Elektrons mit den am Ion verbleibenden Elektronen. Insbesondere für höher geladene Ionen stimmen die Ergebnisse der CBA besser als die PWBA mit den Experimenten überein, da hier das vom freien Elektron wahrgenommene Potential des Ions mit dem idealisiert angesetzten Coulomb-Potential gut übereinstimmt.

Distorted Wave Born Approximation (DWBA) Bei diesem Ansatz wird das vom freien Elektron wahrgenommene Potential des Ions durch ein mit einem geeignet gewählten Potential modifiziertes Coulomb-Potential im ungestörten Hamiltonoperator berücksichtigt. Als Störung verbleibt wieder die Wechselwirkung des freien Elektrons mit den am Ion vorhandenen Elektronen. Die Berechnung der Matrix-Elemente bei diesem Ansatz erfolgt durch die Verwendung von Partialwellen, so dass für höhere Elektronenenergien ein sehr großer Rechenaufwand entsteht. Die DWBA-Rechnungen stimmen im Gegensatz zu den CBA und PWBA-Rechnungen noch für kleinere Energien bis zum 2 bis 3-fachen des Ionisationspotentials gut mit experimentellen Ergebnissen überein.

Die aufgeführten Verfahren sind durch verschiedene Ansätze erweitert worden. So wird bei den $DWBX^5$ -Rechnungen die Ununterscheidbarkeit der Elektronen durch die Einführung von Austauschwechselwirkungen berücksichtigt. Allerdings sind diese Ansätze nur in der Lage, den Wirkungsquerschnitt für den Übergang von einem Anfangszustand in einen Endzustand zu berechnen. Alle in Kapitel 2.1 vorgestellten Ionisationsmechanismen werden als unabhängige Prozesse mit den vorgestellten Verfahren getrennt berechnet und die sich ergebenden Wirkungsquerschnitte inkohärent addiert. Dadurch werden Interferenzeffekte zwischen den Mechanismen nicht berücksichtigt.

Wie schon in Kapitel 2.1 beschrieben, treten Interferenzeffekte zwischen den verschiedenen Ionisationsmechanismen auf. Für eine isolierte, autoionisierende Resonanz ist die Linienform des Peaks von Fano [Fan61, Fan65] berechnet worden. Der Wirkungsquerschnittsverlauf im Falle von Interferenz eines autoionisierenden Zustandes wird durch das so genannte Fano-Profil beschrieben.

$$\sigma^{\text{Fano}}(E) = \sigma_{res} \frac{(q + \epsilon_d)^2}{1 + \epsilon_d^2} + \sigma_d \quad \text{mit} \quad \epsilon_d = 2 \frac{E - E_{res}}{\Gamma} \quad (2.6)$$

Darin sind σ_{res} und σ_d der resonante bzw. direkte Beitrag zum Wirkungsquerschnitt, E_{res} die Resonanzenergie und Γ die natürliche Breite des Übergangs. Den Parameter

⁵Distorted Wave Born Exchange

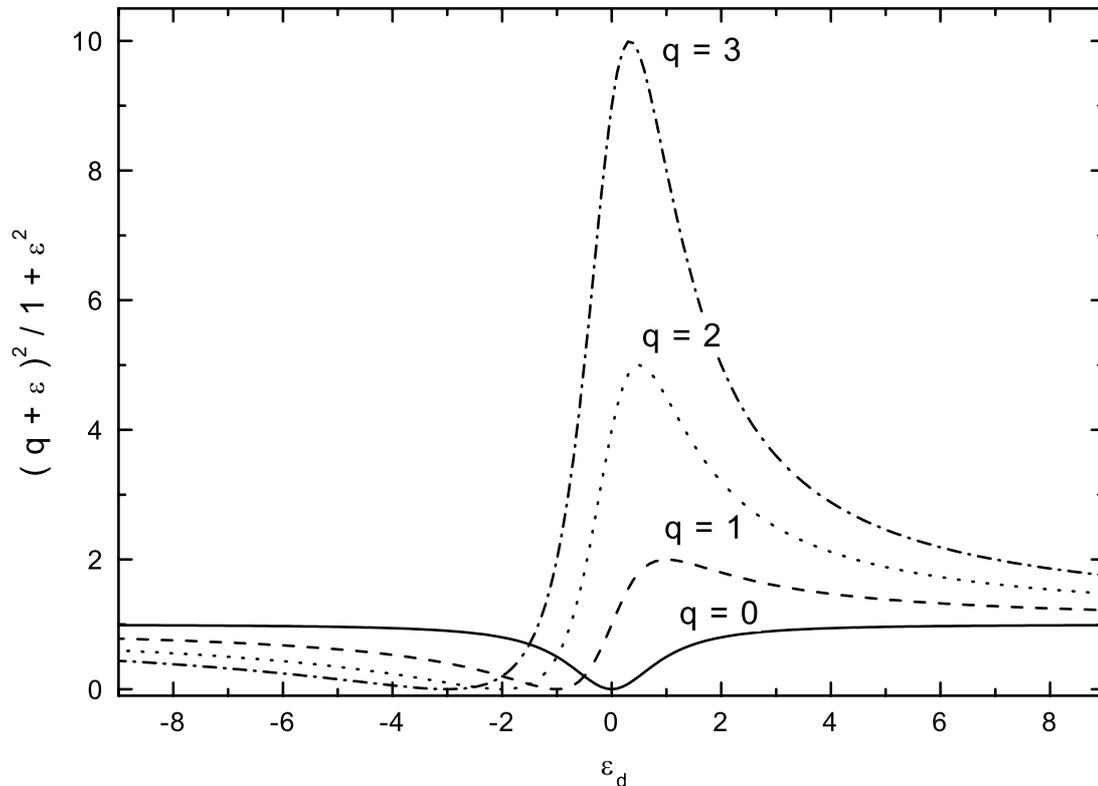


Abbildung 2.5.: Linienform einer autoionisierenden Resonanz in Abhängigkeit vom Fano-Parameter q . Für $q \rightarrow -q$ ergibt sich eine an $\epsilon_d = 0$ gespiegelte Linienform.

q bezeichnet man als Fano-Parameter, er ist ein Maß für die Stärke der Interferenz. Für $q = 0$ ist die Interferenz am stärksten ausgeprägt, mit steigendem q verschwindet die Interferenz. Abbildung 2.5 zeigt Fano-Profile für verschiedene q -Werte. In der Abbildung sieht man, dass für $\epsilon_d = -q$ der Verlauf ein Minimum annimmt. Für die zu ϵ_d gehörende Energie tritt also maximale destruktive Interferenz auf.

Bei den störungstheoretischen Rechnungen werden die Interferenzeffekte meist nicht berücksichtigt, außerdem sind sie nur für höhere Energien geeignet. Für Energien knapp oberhalb des Ionisationspotentials sind diese Methoden nicht geeignet, da bei kleineren Energien das stoßende Elektron wesentlich stärker durch das Target-Ion bzw. durch die Elektronen an diesem Ion beeinflusst wird. Zur Berechnung von Wirkungsquerschnitten müssen im Falle kleiner Relativenergien daher Anregungsprozesse und Austauschprozesse mit den Elektronen am Target berücksichtigt werden. Eine Möglichkeit besteht darin, die Schrödinger-Gleichung 2.3 ohne Näherungen zu lösen. Entwickelt man diese Lösung nach einem System, das sich aus den Wellenfunktionen Φ_n für die Grund- und Anregungszustände des Target-Ions sowie Wellenfunktionen ϕ_n

für das stoßende Elektron zusammensetzt, mit Hilfe des folgenden Ansatzes

$$\Psi(1, 2, \dots, N, N + 1) = \mathcal{A} \sum_n \Phi_n(1, \dots, N) \phi_n(N + 1). \quad (2.7)$$

$1, 2, \dots, N, N + 1$ kennzeichnen die Variablen und Quantenzahlen für die gebundenen und das stoßende Elektron. \mathcal{A} ist ein Antisymmetrisierungsoperator der sicher stellt, dass die sich ergebende Funktion das Pauli-Prinzip erfüllt. Mit diesem Ansatz ergibt sich aus der Gl. 2.3 ein System gekoppelter Differentialgleichungen, das prinzipiell die gesamte Information über den Streuprozess liefert. Aus praktischen Gründen muss die im Prinzip unendliche Summe in Gl. 2.7 nach endlich vielen Gliedern abgebrochen werden. Ein weiteres Problem besteht darin, dass es für die Kontinuumszustände der beiden freien Elektronen nach dem Stoß unendlich viele Zustände gibt. Auch hier müssen also Approximationen vorgenommen werden.

Unter anderem wird versucht, das Kontinuum im Ausgangskanal durch die Einführung von Pseudo-Zuständen zu approximieren [Cal93]. Bei der *convergent close-coupling (CCC)* Methode [Bra92, Bra94, Bra95] wird das Kontinuum durch eine Entwicklung nach geeigneten Funktionen approximiert.

Eine weitere Methode zur Berechnung von Ionisationsquerschnitten ist die *R-Matrix*-Methode, die 1947 in der Kernphysik durch Wigner und Eisenbud [Wig47] eingeführt wurde. In der Kernphysik ist es wegen der geringen Reichweite der starken Wechselwirkung sinnvoll anzunehmen, dass eine Wechselwirkung nur in einem lokalen Bereich von Null verschieden ist. Für diesen Bereich nimmt man nun eine Kugel mit einem Radius a an und löst dort die gekoppelten Kanalgleichungen unter Berücksichtigung des Wechselwirkungspotentials. Im Ansatz (s. Gl. 2.7) wählt man ein Funktionensystem, für das auf der Grenzfläche die logarithmische Ableitung verschwindet bzw. einen konstanten Wert annimmt. Der Wirkungsquerschnitt wird durch Integrale, die dann die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen zwei Zuständen beschreiben, bestimmt. Die Integrale über das Volumen werden mit Hilfe von Integral-sätzen auf das Verhalten der Funktionen auf dem Rand der Kugel abgebildet; dieses ist durch die Wahl der Randbedingungen leicht möglich. Für die Kugeloberfläche erhält man so eine Matrix, die die Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen den Eingangs- und Ausgangszuständen enthält. Diese wird als die *R-Matrix* bezeichnet. Für den Bereich außerhalb der Kugel kann das Wechselwirkungspotential durch die Atom- bzw. Ionenstruktur vernachlässigt werden, so dass hier die gekoppelten Kanalgleichungen für eine andere Schrödinger-Gleichung gelöst werden. Mit der Forderung, dass sich die Lösung für den inneren Bereich stetig an die Lösungen für den äußeren Bereich anschließt, erhält man schließlich die Übergangswahrscheinlichkeiten für das Streuproblem und somit die Wirkungsquerschnitte.

Bei der Anwendung des R-Matrix-Formalismus zur Beschreibung von Elektronenstößen verschwindet das Wechselwirkungspotential für den äußeren Bereich nicht, da hier alle Wechselwirkungen durch die Coulomb-Kraft bedingt sind. Dennoch kann man bei Stößen zwischen Elektronen und Ionen bzw. Atomen zwei Bereiche unterscheiden. Befinden sich die ein- bzw. auslaufenden Elektronen weit vom Ion entfernt,

2. Physikalische Grundlagen

so ist die Wahrscheinlichkeit für Austauschprozesse zwischen Target-Elektronen und gestreuten Elektronen gering, auch wirkt sich die innere Struktur des Ions kaum noch auf die Elektronen aus. Die Wechselwirkung der Elektronen mit dem Ion wird dort durch ein lokales Potential beschrieben. Die Lösung der gekoppelten Kanalgleichungen ist leichter möglich als mit der vollen Berücksichtigung der inneren Struktur des Ions sowie der Austauscheffekte. Die Aufteilung in zwei Bereiche ermöglicht auch hier die Verwendung der R-Matrix-Methode. Als inneren Bereich betrachtet man einen Bereich von wenigen Bohr'schen Radien um das Ion, in dem das stoßende Elektron mit den Konfigurationen des Ions wechselwirkt sowie Austauscheffekte auftreten. Eine Darstellung der Methodik sowie Beispiele für die Anwendung in der Atomphysik ist in [Bur93] sowie den darin enthaltenen Zitaten zu finden. Der Vorteil der Lösung der gekoppelten Kanalgleichungen mit Hilfe der R-Matrix-Methode gegenüber der direkten Lösung der Gleichungen besteht darin, dass durch die Wahl einer geeigneten Basis (s. Gl. 2.9) die R-Matrix für alle Energien nur einmal bestimmt werden muss. Bei der Berechnung von resonanten Prozessen werden Informationen für möglichst dicht benachbarte Energien benötigt, so dass hier die Verwendung der R-Matrix Vorteile gegenüber der direkten Lösung durch andere Verfahren hat.

Insbesondere bei der Anwendung des R-Matrix-Formalismus auf die Elektronenstoßionisation besteht im inneren Bereich das Problem der Behandlung von mehr als einem Elektron im Kontinuum. Eine Möglichkeit der Beschreibung ist die Verwendung von Pseudozuständen im inneren der durch die R-Matrix betrachteten Oberfläche. Dazu betrachtet man die Lösung Ψ der stationären Schrödinger-Gleichung für diesen Bereich

$$(H_{N+1} - E)\Psi = 0. \quad (2.8)$$

In der Entwicklung der Lösung nach einer von der Energie unabhängigen Basis ψ_k

$$\psi_k = \mathcal{A} \sum_{ij} \Phi_i(1, \dots, N) u_{ij}(N+1) a_{ijk} + \sum_i \chi_i(1, \dots, N+1) b_{ik}. \quad (2.9)$$

die sich aus den Zuständen $\Phi_i(1, \dots, N)$ des Targetions, den Wellenfunktion des stoßenden Elektrons $u_{ij}(N+1)$, mit folgenden Randbedingungen

$$\begin{aligned} u_{ij}(0) &= 0 \\ \frac{a}{u_{ij}(a)} \frac{du_{ij}}{dr} \Big|_{r=a} &= b \end{aligned} \quad (2.10)$$

und den Zuständen $\chi_i(1, \dots, N+1)$ für das Ion mit (N+1) Elektronen zusammensetzt [Bar96, Bar98]. Die Targetzustände werden aus einer Kombination von Ein-Elektron-Wellenfunktionen aufgebaut

$$\Phi_i = \sum_{j=1}^m a_{ij} \phi_j. \quad (2.11)$$

Neben den physikalischen Ein-Elektronen-Zuständen, die durch P_{nl} gekennzeichnet werden, werden auch noch nicht-physikalische Pseudo-Orbitale (im allgemeinen durch

P_{nl}^-) gekennzeichnet, verwendet. Dadurch wird einerseits die Darstellung der Targetzustände Φ_i verbessert und andererseits werden so Pseudo-Targetzustände in der Basis erzeugt, die entweder stellvertretend die unendlich große Zahl an hoch angeregten physikalischen Zuständen repräsentieren oder für ein vom Target-Ion ionisiertes Elektron im Kontinuum stehen. Man bezeichnet diesen Formalismus auch als *R-Matrix with Pseudo-States (RMPS)*. Mittels dieser Pseudo-Zustände ist es erstmals möglich in einer *ab initio* Rechnung einen Wirkungsquerschnitt, der alle in Kapitel 2.1 beschriebenen Prozesse interferenzfähig berücksichtigt, zu bestimmen. Ein Beispiel für die Wahl der Pseudo-Orbitale zur Beschreibung der Einfachionisation unter Berücksichtigung von REDA, READI und EA-Prozessen wird in [Ber97] gegeben. Zum Vergleich von Ergebnissen der RMPS-Rechnungen mit experimentellen Daten siehe [Mül00, Aic00] sowie Kapitel 5 und 6.

2.3. Semiempirische Methoden

Da die in Kapitel 2.2 beschriebenen Methoden numerisch teilweise sehr aufwendig sind, sind nicht für alle möglichen Ionisationsprozesse die Wirkungsquerschnitte berechnet. Auch liegen nicht für alle Ionisationsprozesse Messergebnisse vor. Daher besteht zur Abschätzung und Vorhersage von Wirkungsquerschnitten ein Bedarf an einfachen Skalierungsgesetzen und semiempirischen Formeln, die sich auf bereits bestehende Daten stützen. Eine Zusammenfassung dieser Methoden findet sich in [You85b].

Für die Beschreibung der direkten Einfachionisation von Atomen und Ionen wird häufig die semiempirische Näherung von Lotz verwendet [Lot67, Lot68, Lot69, Lot70]:

$$\sigma(E) = \sum_k a_k N_k \frac{\ln(E/E_k)}{E \cdot E_k} \left\{ 1 - b_k \cdot e^{-c_k \left(\frac{E}{E_k} - 1 \right)} \right\} ; E \geq E_k. \quad (2.12)$$

Die Summe läuft dabei über die Zahl der zur Ionisation beitragenden Unterschalen, E ist die Energie des stoßenden Elektrons, E_k die Bindungsenergie der k -ten Unterschale und N_k die Zahl der Elektronen in der jeweiligen Unterschale. Die Konstanten a_k, b_k und c_k werden an experimentell bzw. theoretisch bekannte Wirkungsquerschnitte angepasst. In [Lot67, Lot68, Lot69, Lot70] sind diese Konstanten für Atome und Ionen in niedrigen Ladungszuständen tabelliert. Für nicht tabellierte Atome bzw. Ionen werden $a_k = 4,5 \cdot 10^{-14} \text{cm}^2$ und $b_k = c_k = 0$ empfohlen. Als Fehler für die so abgeschätzten Wirkungsquerschnitte wird von Lotz $\begin{matrix} +40\% \\ -30\% \end{matrix}$ angegeben.

Für die Mehrfachionisation sind quantenmechanische Rechnungen sehr aufwendig, so dass auch hier Näherungsformeln und Abschätzungen eine große Bedeutung haben [Gry65, Fis95, She95, Bé197].

2. *Physikalische Grundlagen*

3. Experimenteller Aufbau

Zur Bestimmung der in dieser Arbeit präsentierten Wirkungsquerschnitte wurde der in Abbildung 3.1 dargestellte Versuchsaufbau verwendet. Neben der Bestimmung von Ionisationsquerschnitten ist die Anlage auch zur Untersuchung der an Ionen gestreuten Elektronen konzipiert [Fra97].

Eine 10 GHz Elektron-Zyklotron-Resonanz (EZR) Ionenquelle erzeugt die zu untersuchenden Ionen. Die EZR-Ionenquelle kann auf einem Potential von bis zu 20 kV betrieben werden. Zwei Gaseinlassventile sowie ein Verdampferofen ermöglichen die Erzeugung von Ionen fast aller Elemente. Eine Beschreibung der Ionenquelle sowie des Verdampferofens gibt [Böh97]. Die mit typischerweise 12 kV gegen Erdpotential beschleunigten Ionen werden mittels einer beweglichen Ziehelektrode extrahiert. Eine Anordnung aus einer Einzellinse, Ablenkplatten und eines Quadrupol-Triplett transportiert den Ionenstrahl zum Eintrittsschlitz des ersten Analysiermagneten.

Dieser transportiert aus dem Ionenstrahl nur Ionen mit einem wohldefinierten Ladungs- zu Masseverhältnis in eine Gaszelle. Dort können die Ionen durch Stöße mit einem eingelassenen Gas ihren Ladungszustand ändern. Für die hier vorliegenden Bedingungen findet bei diesen Stößen fast ausschließlich Elektroneneinfang statt. Die Rekombination kann in metastabile Zustände der Ionen führen, so dass der Anteil an metastabilen Ionen in einem Ionenstrahl beeinflusst werden kann. Zum Aufbau sowie ersten Messungen mit der Gaszelle sei auf [Böh97] verwiesen.

Die Ionen werden hinter der Gaszelle mittels eines weiteren Quadrupol-Triplett sowie magnetischen Ablenkern in einen doppelt-fokussierenden Kugelkondensator transportiert. Dieser drehbar montierte Kugelkondensator mit einem Krümmungsradius von 15 cm lenkt die Ionen mit gewünschtem Ladungs- zu Masseverhältnis durch zwei Schlitzblenden in die Streukammer. Dort wird der durch die Schlitzblenden kollimierte Ionenstrahl mit einem bandförmigen Elektronenstrahl zur Wechselwirkung gebracht. Ein weiterer Analysiermagnet trennt den Primärionenstrahl von den höher ionisierten Ionen ab. Die Ionisationsprodukte werden in der Detektorkammer durch einen Einzelteilchendetektor nachgewiesen (s. Kap. 3.3). Der Primärionenstrahl wird in einem von zwei beweglichen Faraday-Bechern aufgefangen. Zur Kontrolle des Ionenstrahls sind vier weitere in den Strahlgang einfahrbare Faraday-Becher entlang der Strahlführung vorhanden.

3. Experimenteller Aufbau

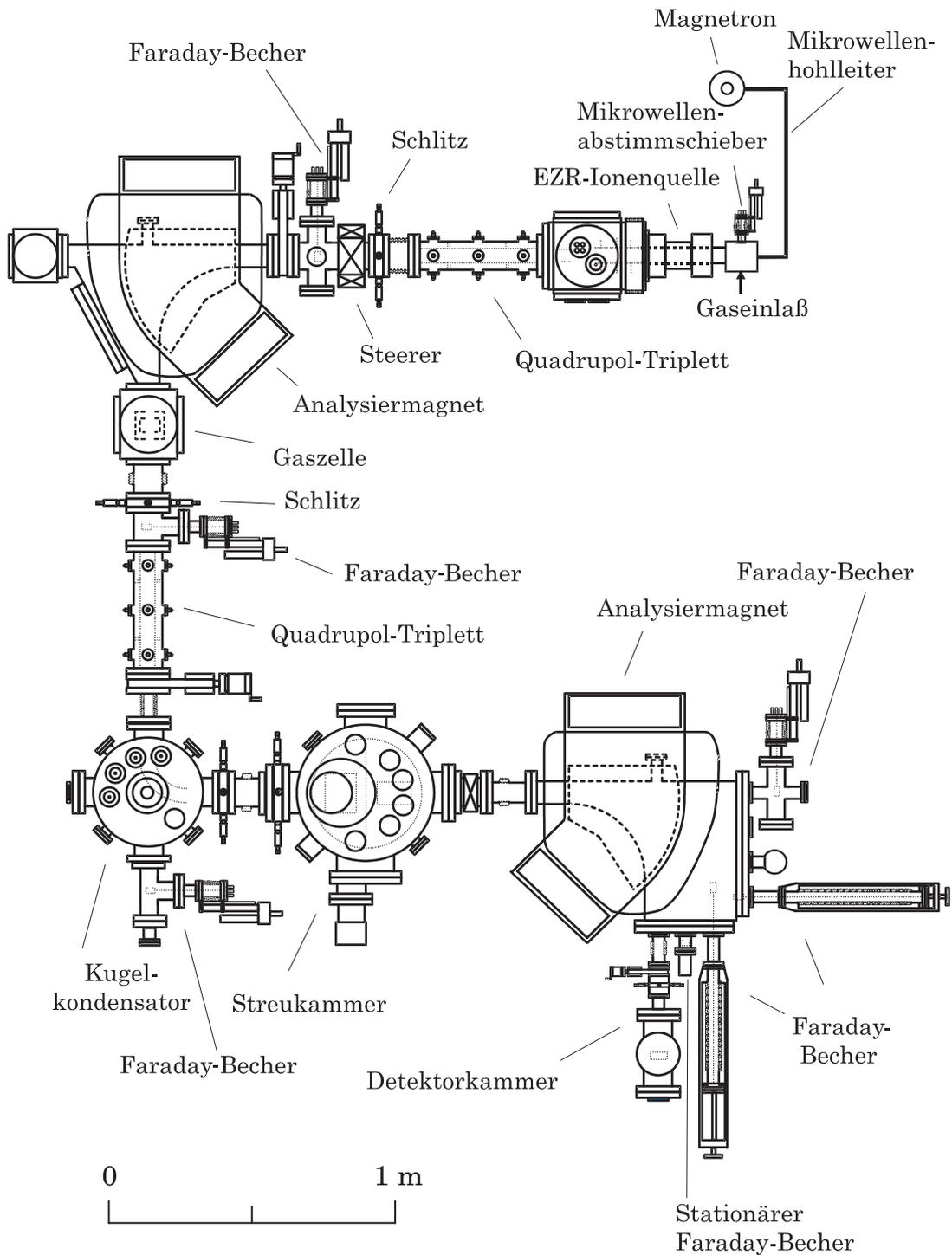


Abbildung 3.1.: Schematische Darstellung des Gesamtaufbaus des Elektron-Ion-Streuexperimentes

Wie in Kapitel 4 dargestellt, werden für die Bestimmung des Wirkungsquerschnittes folgende Größen benötigt:

- Elektronenstrom
- Ionenstrom
- Reaktionsrate

Im folgenden werden die verwendeten Geräte und Aufbauten zur Bestimmung dieser Größen vorgestellt.

3.1. Die Elektronenkanone

Für die Messung wird ein in sich möglichst paralleler Elektronenstrahl benötigt. Neben dieser Forderung sollte die Strahlintensität möglichst groß sein, um ausreichende Signalraten zu erreichen. Mit dieser Zielsetzung wurde die in Abbildung 3.2 dargestellte Elektronenkanone entwickelt [Bec85]. Aus einer indirekt geheizten Kathode (Firma

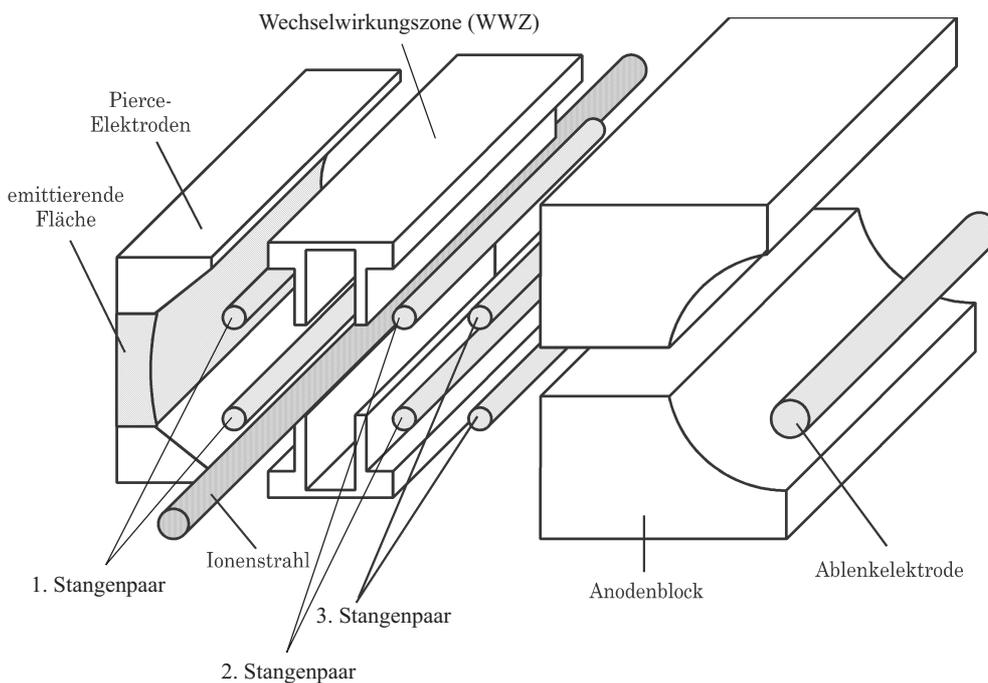


Abbildung 3.2.: Darstellung der Elektronenkanone. Die Ausdehnung in Richtung des Ionenstrahls beträgt 6 cm.

Spectra-Mat N-799) werden Elektronen emittiert. Aus diesen Elektronen wird mit einer Elektrode in Pierce-Geometrie und drei Stangenpaaren ein bandförmiger Elektronenstrahl formiert. Die Elektronenenergie ist dabei durch das Kathodenpotential

$-U$ festgelegt. Das erste und zweite Stangenpaar befinden sich auf einem Potential von $0,3 \cdot U$, das dritte Stangenpaar wird auf Kathodenpotential betrieben. Bei dem Energie-Scan-Verfahren müssen die Potentiale in kleinen Schritten sehr schnell variiert werden. Dazu wird eine in [Hof91a] beschriebene Regelung verwendet. Der Bereich, in dem sich Elektronen- und Ionenstrahl kreuzen, wird von auf Erdpotential befindlichen Mittelelektroden eingefasst. Der Elektronenstrahl hat eine von der Energie abhängige Höhe von etwa 5 mm und eine Breite von 6 cm. Ein wassergekühlter Anodenblock aus Kupfer auf Erdpotential fängt den Elektronenstrom auf. Durch eine exzentrisch angebrachte Elektrode wird die Strahlleistung, die bis zu 440 W betragen kann, gleichmäßig auf den zylindrischen Innenraum der Anode verteilt. Durch diese Anordnung werden zudem die beim Auftreffen der Elektronen gebildete Sekundärelektronen im Anodenbereich gehalten. Die Kanone kann in einem Elektronenenergiebereich von 0 bis 1000 eV betrieben werden.

Die gesamte Elektronenkanone ist vertikal beweglich montiert, damit der Elektronenstrahl durch den Ionenstrahl hindurch bewegt werden kann. Die Eigenschaften der Elektronenkanone sind eingehend untersucht worden [Bec85, Hof87, Mül87]. Bei diesen Messungen zeigte sich eine systematische Erhöhung des gemessenen Wirkungsquerschnittes für sehr niedrige Restgasdrucke in der Streukammer ($\approx 10^{-9}$ mbar) [Hof87, Mül87]. Der sehr intensive Elektronenstrahl bildet durch seine Raumladung im Wechselwirkungsbereich eine Potentialmulde aus. Durch Einfang von Restgasionen kann diese Mulde aufgefüllt werden. Daher wird zur Raumladungskompensation der Restgasdruck durch kontrollierten Gaseinlass erhöht. Durch diese Maßnahme tritt keine systematische Erhöhung des gemessenen Wirkungsquerschnittes mehr auf. Das verwendete Kathodenmaterial sowie die Verwendung einer Kryopumpe in der Streukammer schränken die Wahl für das zur Erhöhung des Restgasdruckes verwendete Gas ein. Bei den Messungen wird zur Zeit Krypton verwendet. Der für die vollständige Raumladungskompensation notwendige Gasdruck hängt von der zu messenden Ionensorte ab [Fra97, Böh97, Tim98].

3.1.1. Elektronenstrommessung

Zur Berechnung des Wirkungsquerschnittes ist es notwendig, den Elektronenstrom möglichst genau zu kennen. Die Elektronenkanone ermöglicht durch ihren Aufbau eine genaue Messung nur für den von der Kathode emittierten und den auf die Anode auftreffenden Elektronenstrom. In die Berechnung des Wirkungsquerschnittes geht aber der Elektronenstrom ein, der im Wechselwirkungsbereich den Ionenstrom kreuzt. Daher werden in einer Vorbereitungsmessung die Elektronenströme an den einzelnen Teilen der Elektronenkanone gemessen. In Abbildung 3.3 sind die an der Elektronenkanone gemessenen Ströme dargestellt. Der für die Bestimmung des Wirkungsquerschnittes relevante Elektronenstrom kann aus diesen Größen abgeschätzt werden. Wie aus Abbildung 3.3 ersichtlich ist, steigen die Ströme, die von der Kathode emittiert werden bzw. auf die Anode auftreffen, sehr viel stärker an als die Ströme auf die Stangen und den Wechselwirkungsbereich. Für Elektronenenergien oberhalb von

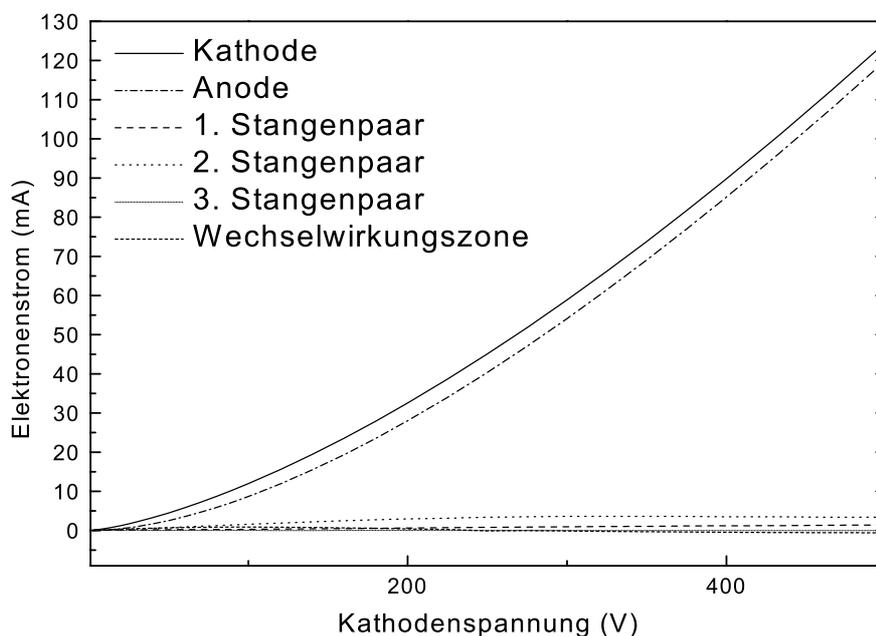


Abbildung 3.3.: Gemessene Ströme an der Elektronenkanone bei einer Heizleistung von 107 Watt (Bezeichnungen s. Abb. 3.2)

400 eV erreichen mehr als 95% des emittierten Stromes den Anodenblock. Insbesondere für kleinere Energien ist die Anzahl der an der Wechselwirkung beteiligten Elektronen deutlich kleiner als die von der Kathode emittierten. Eine obere Grenze für diese Zahl ergibt sich aus dem von der Kathode emittierten Strom vermindert um den auf das erste Stangenpaar treffenden Strom. Als untere Abschätzung dient der auf alle nach der Wechselwirkungszone folgenden Elektroden, also das zweite und dritte Stangenpaar sowie den Anodenblock, treffende Strom. Für die Bestimmung des Wirkungsquerschnittes wird der Mittelwert von diesen beiden Grenzen gewählt. Während der eigentlichen Messungen wird lediglich der emittierte Kathodenstrom registriert. Zur Bestimmung des Wirkungsquerschnittes muss dieser mit einem Korrekturfaktor C multipliziert werden. Die Energieabhängigkeit dieses Korrekturfaktors ist in Abbildung 3.4 dargestellt. Für kleine Energien ergeben sich deutliche Korrekturen. Dies wird in der Fehlerbetrachtung (Kapitel 4.1.1) berücksichtigt. Zur Erleichterung der Auswertung wird an die Messpunkte eine geeignete Funktion angepasst. Für die hier vorgestellten Messungen gilt:

$$C(E_e) = 0,989 \cdot \left(1 - 0,327 \cdot e^{-\frac{E_e}{8,020}} - 0,311 \cdot e^{\frac{E_e}{69,819}} \right) \quad (3.1)$$

Diese Korrekturfunktion muss nach Änderungen an der Elektronenkanone, insbesondere nach einem Wechsel der Kathode, überprüft und gegebenenfalls neu bestimmt werden.

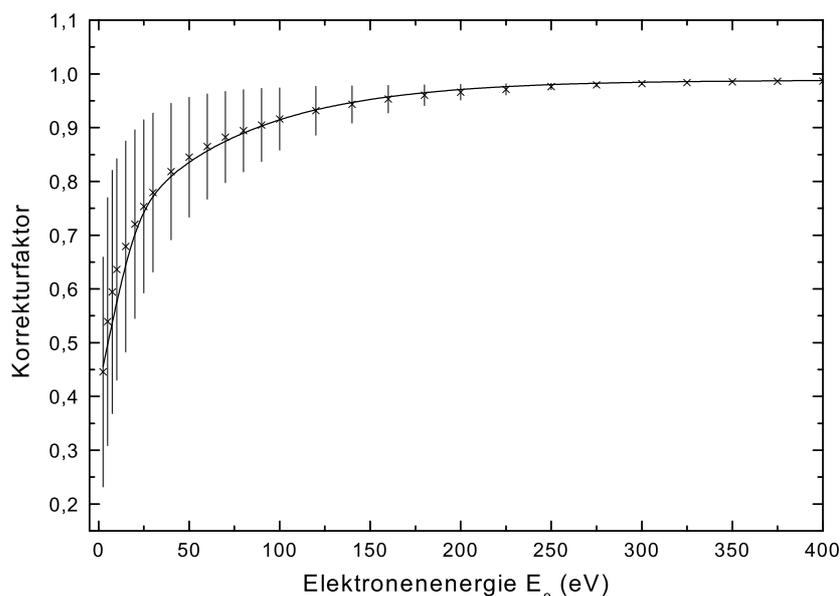


Abbildung 3.4.: Korrekturfunktion für den Elektronenstrom: die Fehlerbalken ergeben sich durch die im Text beschriebenen Ober- bzw. Untergrenzen.

3.2. Ionenstrommessung

Nach der Ionisation in der Wechselwirkungszone werden die ionisierten Ionen vom Primärionenstrahl durch den zweiten Analysiermagneten getrennt. Wegen der geringen Intensität wird der Produktionsstrahl mittels eines Einzelteilchendetektors erfasst. Der nicht umgeladene Anteil des Ionenstrahles wird je nach Lage in der Magnetkammer des zweiten Analysiermagneten in einem von zwei fahrbaren Faraday-Bechern aufgefangen. Da diese Messung in einem Magnetfeld stattfindet und an den Faraday-Bechern eine Repellerblende auf einem negativen Potential (-200 V) angebracht ist, kann eine Verfälschung des gemessenen Stromes durch die Emission von Elektronen durch das Auftreffen der Ionen auf die Oberfläche der Becher weitgehend ausgeschlossen werden.

3.3. Der Einzelteilchendetektor

Zum Nachweis der Ionisationsprodukte wird ein Einzelteilchendetektor verwendet. Bei diesem Detektor treffen die Ionen auf eine Kupfer-Beryllium-Folie und lösen dort Sekundärelektronen aus. Diese werden auf den Eingang eines Sekundärelektronenvervielfachers¹ fokussiert und damit nachgewiesen. Das Konzept dieses Detektors wird seit vielen Jahren in verschiedenen Aufbauten im Institut für Kernphysik verwendet und basiert auf [Rin82]. Eine detaillierte Untersuchung der Eigenschaften des hier

¹ „Channel Electron Multiplier“ der Firma Philips (Typ X 719 BL)

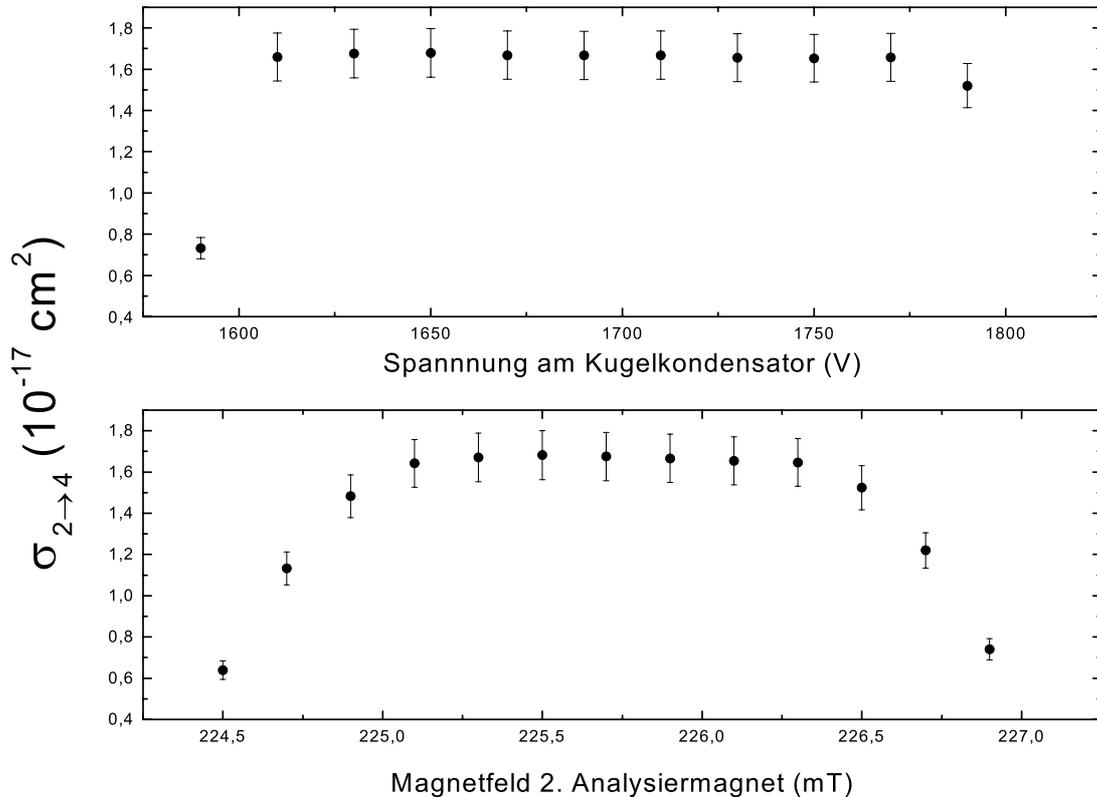


Abbildung 3.5.: Gemessener scheinbarer Wirkungsquerschnitt für die Doppelionisation von Ba^{2+} -Ionen bei 800 eV Elektronenenergie in Abhängigkeit vom elektrischen Feld des Kugelkondensators vor dem Einzelteilchendetektor (oben), bzw. des Magnetfeldes des 2. Analysiermagneten (unten)

verwendeten Detektors findet sich in [Tim98]. Diese Untersuchungen ergeben eine Nachweiswahrscheinlichkeit $(97 \pm 3)\%$, für die hier untersuchten Ionen.

Die Produktionen werden aus der Streuebene um 180° durch einen Kugelkondensator auf den Detektor abgelenkt, dies soll sicher stellen, dass möglichst nur Produktionen im Einzelteilchendetektor nachgewiesen werden. Eine genaue Bestimmung des Wirkungsquerschnittes setzt voraus, dass alle gebildeten Produktionen nachgewiesen werden. Nach der Wechselwirkung werden die Produktionen aktiv nur durch das Magnetfeld des 2. Analysiermagneten sowie durch den Kugelkondensator beeinflusst. Daher wird zur Verifizierung der Wirkungsquerschnitt in Abhängigkeit von beiden Einflüssen gemessen. In Abbildung 3.5 ist dies für das Magnetfeld und das elektrische Feld des Kugelkondensators vor dem Detektor dargestellt. In beiden Fällen zeigt sich ein weiter Bereich, in dem der Wirkungsquerschnitt praktisch konstant ist. Dies verifiziert, dass die Produktionen nicht durch Blenden oder zu schmale Aperturen aufgehalten werden. Neben diesen Abhängigkeiten wird auch der Einfluss der Position des Kugelkondensators, der beweglich montiert ist, bezüglich der Streuebene beobachtet.

3. Experimenteller Aufbau

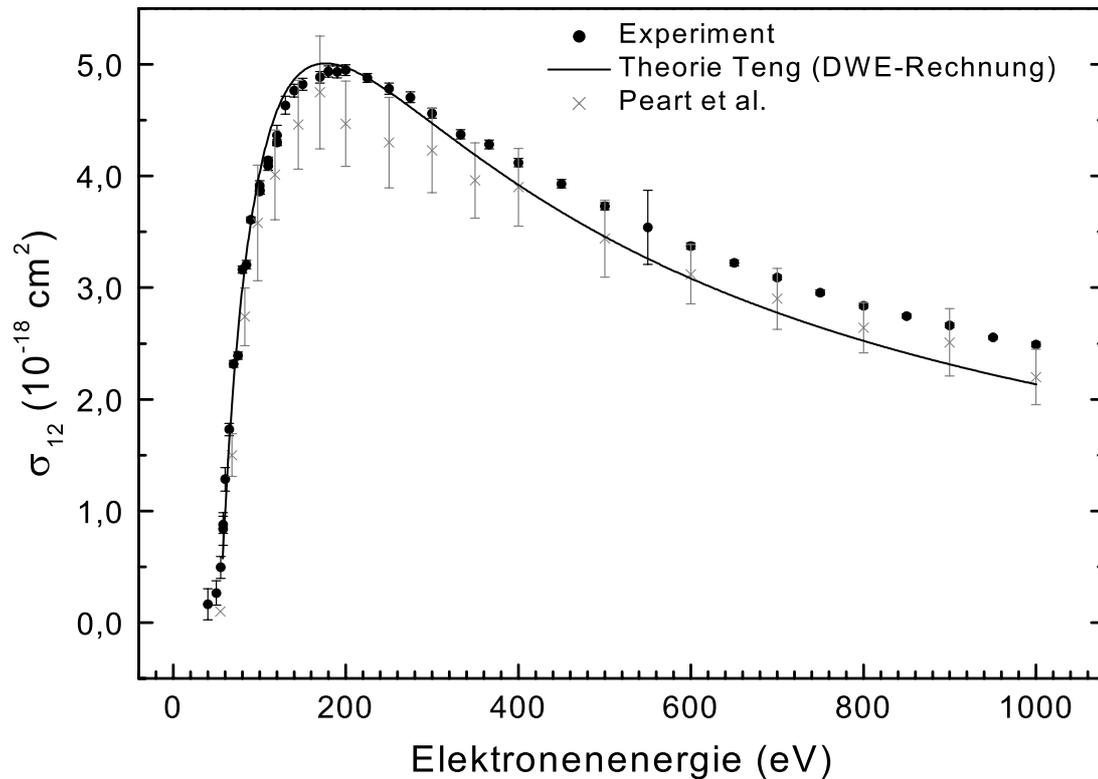


Abbildung 3.6.: Wirkungsquerschnitt für die Einfachionisation von He^+ -Ionen, zum Vergleich sind frühere Messungen von Peart *et al.* [Pea69] und theoretische Berechnungen mit einer Distorted-Wave-Exchange Methode [Ten00] angegeben.

Auch dort zeigt sich ein solches Plateau.

Zur weiteren Bestätigung für die Erfassung aller Produktionen sowie die korrekte Funktion aller Bauteile wird als Referenzmessung der absolute Wirkungsquerschnitt für die Reaktion $e + \text{He}^+ \rightarrow 2e + \text{He}^{2+}$ routinemäßig gemessen. Abbildung 3.6 zeigt die Ergebnisse dieser Tests vor den in dieser Arbeit durchgeführten Messungen. Bei den dargestellten Daten ist jeweils nur der statische Fehler angegeben, der gesamte Fehler ist exemplarisch für den Messpunkt bei 550 eV angegeben. Berücksichtigt man, dass der Fehlerbalken bei den früheren Messung [Pea69] nur den statistischen Fehler darstellt, so stimmen die mit dem hier vorgestellten Aufbau erhaltenen Daten sehr gut mit diesen Messungen überein. Auch die theoretischen Berechnungen liegen noch innerhalb der Unsicherheiten der hier vorgestellten Messungen. Zusammen mit den oben vorgestellten Testmessungen belegt dies die Zuverlässigkeit der mit diesem Aufbau gemessenen Wirkungsquerschnitte.

4. Messverfahren, Messdatenerfassung und Auswertung

Im Rahmen dieser Arbeit sind basierend auf der Methode gekreuzter Strahlen zwei Messverfahren verwendet. Diese sind das *dynamische Messverfahren* zur Bestimmung von Absolutwirkungsquerschnitten und das *Energie-Scan-Messverfahren* zur Bestimmung von relativen Wirkungsquerschnitten mit sehr guter Energieauflösung und statistischer Punkt-zu-Punkt Genauigkeit.

Letzteres basiert auf dem Verfahren von Dolder und Mitarbeitern [Dol61], die erstmalig einen Wirkungsquerschnitt mit Hilfe von gekreuzten Elektronen- und Ionenstrahlen bestimmt haben. Bei diesem Verfahren wird die Reaktionsrate bei konstantem Überlapp beider Teilchenstrahlen¹ in Abhängigkeit von den Strahlströmen gemessen. Als Bestimmungsgleichung für den Wirkungsquerschnitt ergibt sich unter der Voraussetzung von in sich parallelen, monoenergetischen Strahlen, die sich unter 90° kreuzen [Dun85, Har66]

$$\sigma = \frac{RF}{MI_1I_2}. \quad (4.1)$$

Diese Gleichung enthält neben den folgenden experimentell leicht zugänglichen Größen

- der Reaktionsrate R
- den integralen elektrischen Strömen I_1, I_2 für die jeweiligen Teilchen
- und dem kinematischen Faktor

$$M = \frac{v_{rel}}{v_1v_2q_1q_2e^2} \quad (4.2)$$

mit $v_{1,2}$ Geschwindigkeit der Elektronen bzw. Ionen, $v_{rel} = \sqrt{v_1^2 + v_2^2}$ und e =Elementarladung.

¹Diese müssen eine hinreichend niedrige Teilchendichten aufweisen, so dass die Einzelstoßbedingung erfüllt ist.

noch den so genannten Formfaktor F . Dieser Formfaktor beschreibt den Strahlüberlapp im Kreuzungsbereich beider Strahlen. Für eine absolute Bestimmung des Wirkungsquerschnittes muss dieser in zusätzlichen Messungen bestimmt werden. Ein weiteres Problem dieses Verfahrens ist die Verfälschung der gemessenen Reaktionsrate durch Ionisationsereignisse, die nicht durch Elektronenstoß bedingt sind, sondern durch Stöße mit dem Restgas oder durch Ionisation an Kanten von Blenden und andere Prozesse verursacht werden. Im Rahmen dieser Arbeit werden mit diesem Verfahren nur relative Wirkungsquerschnitte bestimmt, für eine Diskussion zur Untergrund- sowie Formfaktorbestimmung sei daher auf [Dun85, Har66] verwiesen. Beim *Energie-Scan-Messverfahren* wird die Elektronenenergie in kleinen Schritten schnell variiert². Anschaulich tastet man den Verlauf des Wirkungsquerschnittes entlang der Energieachse in kleinen Schritten ab. Durch Wiederholen dieses *Scans* kann eine sehr hohe statistische Genauigkeit erreicht werden. Schwankungen der Strahlintensität und -lagen auf einer Zeitskala von mehr als einigen Sekunden³ mitteln sich heraus. Somit kann mit diesem Verfahren eine sehr hohe Punkt-zu-Punkt Genauigkeit erreicht werden.

Dieses Messverfahren sowie das im folgenden beschriebene *dynamische Messverfahren* sind am Institut für Kernphysik etablierte Techniken, detaillierte Beschreibungen finden sich beispielsweise in [Mül85, Mül87, Hof91a, Tin89].

Das *dynamische Messverfahren* gestattet die Bestimmung von absoluten Werten für den Wirkungsquerschnitt ohne eine explizite Formfaktormessung. Dazu wird im Gegensatz zu dem obigen Verfahren der Strahlüberlapp zwischen den beiden Teilchenstrahlen während der Messung variiert, auf diese Weise dient ein Teilchenstrahl als Sonde für das Strahlprofil des anderen und umgekehrt. Die Variation des Strahlüberlapps erfolgt bei der in Kapitel 3 vorgestellten Apparatur durch eine mechanische Bewegung der Elektronenkanone und somit des Elektronenstrahls. Der Elektronenstrahl bewegt sich ausgehend von einer Position ohne Strahlüberlapp durch den Ionenstrahl bis erneut kein Strahlüberlapp mehr vorliegt. Durch Beobachtung der Signalrate in Abhängigkeit von der relativen Strahlposition sowie den Strömen ergibt sich eine normierte Signalrate S (s. Abb. 4.3), mittels dieser sich der Wirkungsquerschnitt zu

$$\sigma = \frac{S\Delta z}{M}. \quad (4.3)$$

berechnen lässt [Mül85]. Δz ist dabei die Fahrtstrecke pro Kanal (s. Kap. 4.1) und M der kinematische Faktor aus Gl. 4.2. Die bei diesem Verfahren in Bereichen ohne Strahlüberlapp erfasste Signalrate ermöglicht sofort die Bestimmung von Untergrundereignissen.

Die Kombination beider Verfahren ermöglicht die genaue Bestimmung sowohl des Verlaufs des Wirkungsquerschnittes über der Energie mit sehr guter statistischer Genauigkeit als auch der absoluten Größe des Wirkungsquerschnittes. In den folgenden

²Der Strahlüberlapp ist dabei konstant so gewählt, dass sich die Elektronenkanone auf einer Position mit maximaler Signalrate befindet.

³Nur für die Dauer eines *Scans* beeinflussen Schwankungen den Verlauf des Wirkungsquerschnittes.

Abschnitten werden die zur Realisierung der Verfahren verwendete Datenerfassung sowie die zur Auswertung genutzten Rechenmethoden und die sich daraus ergebenden Fehlergrenzen für beide Verfahren vorgestellt.

4.1. Dynamisches Messverfahren

Bei diesem Verfahren werden die Ionisationsereignisse, die akkumulierten Ladungen des Elektronen- bzw. Ionenstroms sowie die Zeit in Abhängigkeit von der Position

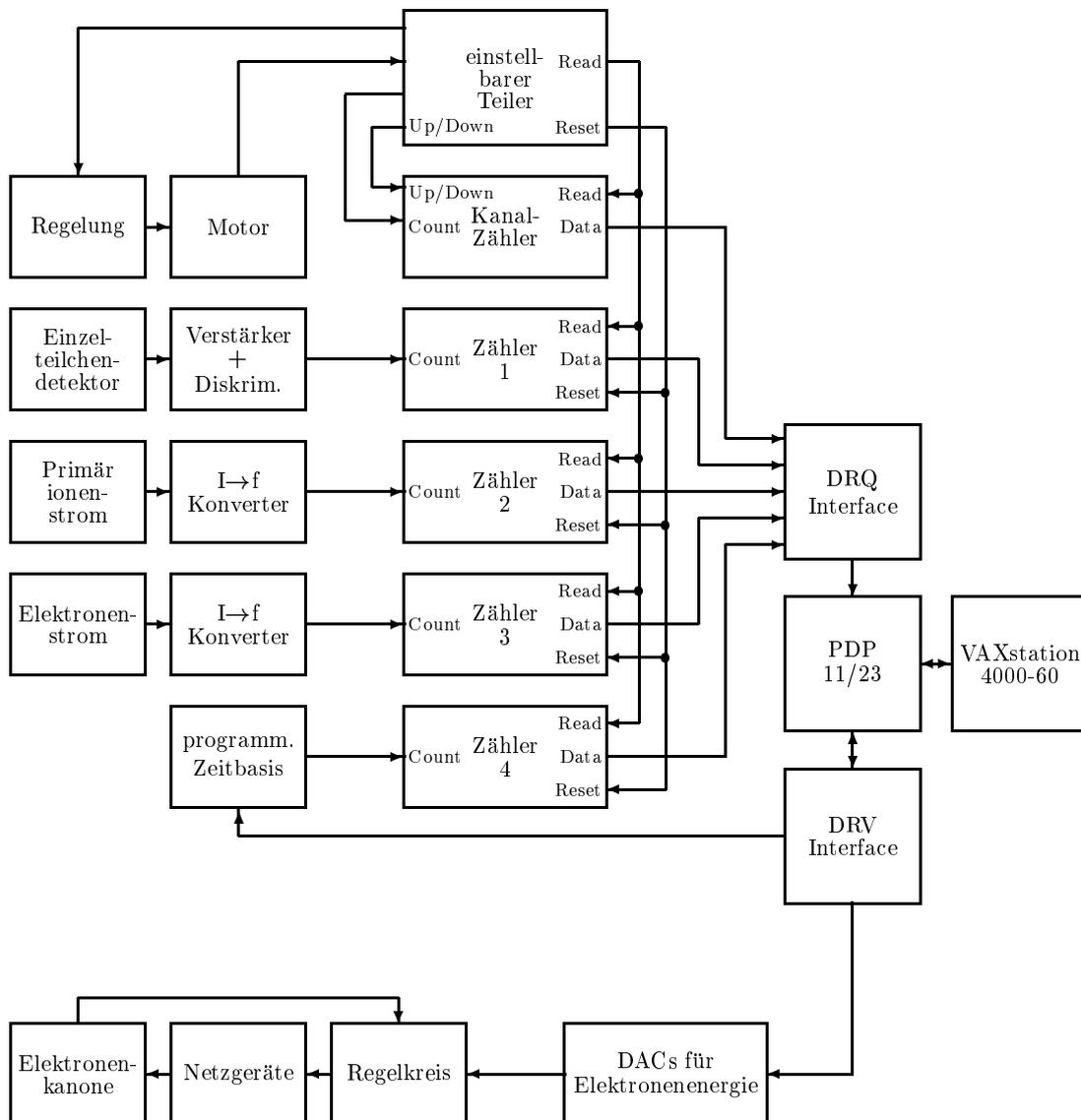


Abbildung 4.1.: Blockschaltbild der Messdatenerfassung beim dynamischen Messverfahren

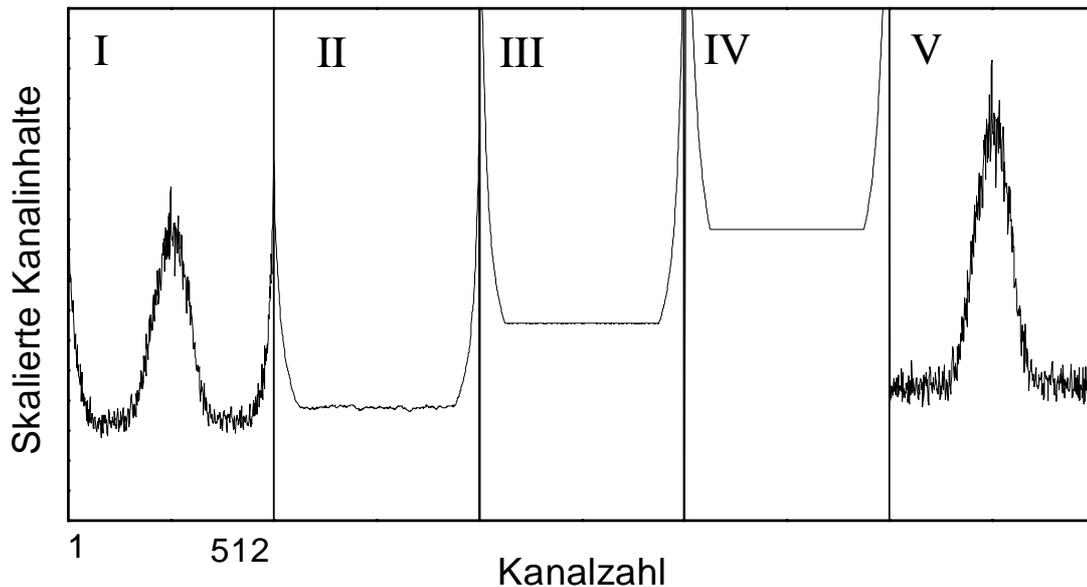
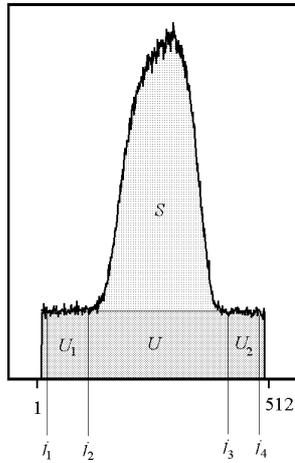


Abbildung 4.2.: Darstellung der Teilspektren beim dynamischen Messverfahren. Die Spektren sind im einzelnen: I: Ionisationssignal, II: akkumulierter Ionenstrom, III: akkumulierter Elektronenstrom, IV: Messzeit, V: Auf Ionen- und Elektronenstrom normiertes Ionisationssignal. Am Umkehrpunkt der Elektronenkanone verringert sich deren Geschwindigkeit und die Messzeit pro Kanal steigt an. Deshalb steigen die Kanalinhalt der Spektren I-IV am Rand an.

der Elektronenkanone relativ zum Ionenstrom erfasst. Abbildung 4.1 zeigt ein Blockschaltbild der Datenaufnahme. Die apparativen Details zu der am Institut für Kernphysik entwickelten Steuerung finden sich in [Hof87, Hof91a]. Die Elektronenkanone bewegt sich zwischen zwei vorgegebenen Positionen. Mittels eines einstellbaren Teilers wird aus n Impulsen eines Winkelschrittteilers ein Signal zur Kanalfortschaltung erzeugt, je nach Fahrtrichtung der Kanone wird die Kanalzahl erhöht oder erniedrigt. Für jeden der Kanäle i , welcher einem Intervall Δz entspricht, werden vier Zähler ausgelesen:

- die Zahl der Impulse des Einzelteilchendetektors $N(i)$
- die Zahl der Impulse des Strom-Frequenzwandlers für den Elektronenstrom $Q_e(i)$
- die Zahl der Impulse des Strom-Frequenzwandlers für den Ionenstrom $Q_i(i)$
- die Zahl der Impulse einer extern erzeugten Frequenz für die Zeitmessung $T(i)$

Bei jeder Kanalfortschaltung werden diese Zählerstände an den Messrechner übertragen, der diese für den jeweiligen Kanal aufsummiert und speichert. Der Messrechner stellt die so entstehenden Spektren zeitnah dar und ermöglicht eine vorläufige Auswertung. In Abbildung 4.2 sind die während der Messung zu beobachtenden Spektren



$$S(i) = \frac{N(i)T(i)}{Q_e(i)Q_i(i)} \quad (4.5)$$

$$U = \frac{j_3 - j_2}{(j_2 - j_1) + (j_4 - j_3)} \left(\sum_{j=j_1}^{j_2-1} S(j) + \sum_{j=j_3}^{j_4-1} S(j) \right)$$

$$= a(U_1 + U_2)$$

$$S = \sum_{j=j_2}^{j_3-1} S(j) - U \quad (4.6)$$

Abbildung 4.3.: Bestimmung der normierten Signalrate

dargestellt. Z. B. beträgt bei der Einfachionisation von Ba^{4+} -Ionen mit einer kinetischen Energie von 48,8 keV ($I_{\text{ion}} = 2,6$ nA) durch Elektronen mit einer Energie von 300 eV ($I_{e^-} = 61,2$ mA) die Signalrate bei maximalem Strahlüberlapp 10,6 kHz.

Die normierte Signalrate (s. Gl. 4.5) wird nach Abschluss der Messung in dem Bereich der Spektren bestimmt, für den die Messzeit pro Kanal und damit die Fahr- geschwindigkeit der Kanone konstant war. Dadurch sind die Integrationsgrenzen j_1 und j_4 festgelegt. In den Intervallen $[j_1, j_2)$ und $[j_3, j_4)$ (s. Abb. 4.3) überlappen sich die beiden Strahlen nicht. Das dort nachgewiesene Ionisationssignal ist daher ein Maß für den Untergrund der Messung. Mit dieser Information lässt sich das eigentliche Ionisationssignal S (s. Gl. 4.6) und damit der Wirkungsquerschnitt

$$\sigma = \frac{S \Delta z K}{M \varepsilon C(E_e)}. \quad (4.4)$$

exakt bestimmen (Gl. 4.3). Dabei ist M der kinematische Faktor aus Gl. 4.2, ε die Ansprechwahrscheinlichkeit des Detektors. K ist der Konversionsfaktor für die Umrechnung der gezählten Ereignisse in physikalische Größen und $C(E_E)$ ist die in Gleichung 3.1 angegebene von der Elektronenenergie abhängige Korrektur für die Elektronenstrommessung. Δz ist die Fahrtstrecke pro Kanal, sie wird aus der Zahl der Impulse des Winkelschrittgebers (601400 Impulse für 10 mm Hub) und der gewählten Untersetzung für die Kanalfortschaltung bestimmt.

4.1.1. Fehlerbetrachtung

Zum experimentellen Gesamtfehler tragen die einzelnen Fehler der in Gleichung 4.4 auftretenden Größen bei. Nur bei der Bestimmung der normierten Signalrate wird eine

statistische Größe gemessen, so dass sich der wahrscheinliche Fehler des Wirkungsquerschnittes σ aus der quadratischen Addition der instrumentellen Fehler und des statistischen Fehlers der Signalrate ergibt. Der statistische Fehler kann im Gegensatz zu den instrumentellen Fehlern durch mehrmaliges Wiederholen der Bewegung der Elektronenkanone reduziert werden.

Instrumentelle Fehler

Die instrumentellen Fehler können aus den verwendeten Messverfahren und den Ungenauigkeiten der dabei verwendeten Messinstrumente abgeschätzt werden.

Zur Bestimmung des kinematischen Faktors wird die Spannungsanzeige des Hochspannungsnetzgerätes für das Potential der Ionenquelle und die gemessene Spannung an der Kathode der Elektronenkanone verwendet. Die Ungenauigkeit für die Ionengeschwindigkeit ist größer als die für die Elektronengeschwindigkeit. Da die Elektronen jedoch auf Grund ihrer kleinen Masse eine höhere Geschwindigkeit haben, wird der Gesamtfehler für den kinematischen Faktor wesentlich durch die Unsicherheit für die Elektronengeschwindigkeit bestimmt und kann mit $\pm 1\%$ abgeschätzt werden. Die Kanalbreite wird durch Messung der gesamten Fahrtstrecke und der Zahl der dabei gezählten Impulse des Winkelschritttebers bestimmt, die maximale Unsicherheit liegt hierfür bei $\pm 1\%$. Der Fehler für die Ansprechwahrscheinlichkeit ist in [Tim98] bestimmt worden und beträgt für die hier beobachteten Zählraten und verwendeten Ionenarten $\pm 3\%$.

Für die Bestimmung des Ionenstromes wird ein Faraday-Cup im 2. Analysiermagnet zum Auffangen des Ionenstrahls benutzt. Die Möglichkeit des Entweichens von Sekundärelektronen aus dem Cup trägt im wesentlichen zum Fehler des Ionenstromes bei. Zusammen mit den Ungenauigkeiten der verwendeten Messinstrumente kann der Fehler zu $\pm 5\%$ abgeschätzt werden.

Wie in Kapitel 3.1 dargestellt, ist der Elektronenstrom nicht direkt messbar. Die verwendete Messelektronik zur Bestimmung des emittierten Kathodenstromes I_K ist sehr genau ($\frac{\Delta I_K}{I_K} \leq 10^{-4}$), so dass dies für alle Elektronenenergien keinen entscheidenden Beitrag zum Fehler liefert. Die Transmission des Stromes durch die Kanone ist daher die größte Unsicherheit bei der Bestimmung des Elektronenstromes. Die apparativen Fehler und die Ungewissheit über die Transmission wird für alle Elektronenenergien durch eine Unsicherheit von $\pm 2\%$ berücksichtigt. Der größeren Unsicherheit bei kleinen Energien wird durch einen von der Elektronenenergie abhängigen Fehler für die Elektronenstromkorrektur Rechnung getragen. Berechnet man aus den Fehlern in Abbildung 3.4 diesen Fehler und passt zur leichteren Anwendung eine geeignete energieabhängige Funktion an so erhält man:

$$\left| \frac{\Delta C(E_e)}{C(E_e)} \right| = \left| 0,538 * (1 + E_e)^{-0,542} - 0,017 + 0,249 * e^{\frac{-E_e}{47,682}} \right| \quad (4.7)$$

Diese Formel gilt nur für die hier vorgestellten Messungen und muss bei einem Wechsel der Kathode oder anderen Änderungen an der Elektronenkanone neu bestimmt wer-

den.

In Tabelle 4.1.1 sind die instrumentellen Fehler zusammengestellt. Die einzelnen Fehler sind voneinander unabhängig und können daher quadratisch addiert werden. Zusammen mit dem statistischen Fehler aus Gl. 4.9 ergibt sich dann der Gesamtfehler.

Größe	relativer Fehler
kinematischer Faktor M	1 %
Ansprechwahrscheinlichkeit ε	3 %
Fahrtstrecke Δz	1 %
Ionenstrom I_i	5 %
Elektronenstrom I_e	2 %
Elektronenstromkorrektur $C(E_E)$	(s. Gl. 4.7)

Tabelle 4.1.: Instrumentelle Fehler

Statistischer Fehler

Das Zählen der ionisierten Ionen ist die einzige Größe, die mit einem statistischen Fehler behaftet ist. Die Anzahl der Ionisationsereignisse geht nur in die Bestimmung der normierten Signalrate S ein. Mit den Gleichungen aus Abbildung 4.3 gilt:

$$S = \sum_{j=j_2}^{j_3-1} S(j) - U = \sum_{j_S} b(j)N(j) - a \sum_{j_U} b(j)N(j)$$

mit
$$b(j) = \frac{T(j)}{Q_e(j)Q_i(j)} \quad (4.8)$$

j_S und j_U stehen für die Kanäle des Signal- bzw. des Untergrundbereiches. Für den Fehler von $N(j)$ gilt $\Delta N(j) = \sqrt{N(j)}$ bei einem Konfidenzintervall von 68,3 %. Mittels der Gesetze für die Fehlerfortpflanzung [Bev69] ergibt sich für ein Konfidenzintervall von 95 % der statistische Fehler zu:

$$\frac{\Delta \sigma}{\sigma} = \frac{\Delta S}{S} = 1,96 \frac{\sqrt{\sum_{j_S} b(j)^2 N(j) + a^2 \sum_{j_U} b(j)^2 N(j)}}{\sum_{j_S} b(j)N(j) - a \sum_{j_U} b(j)N(j)} \quad (4.9)$$

4.2. Energie-Scan-Messverfahren

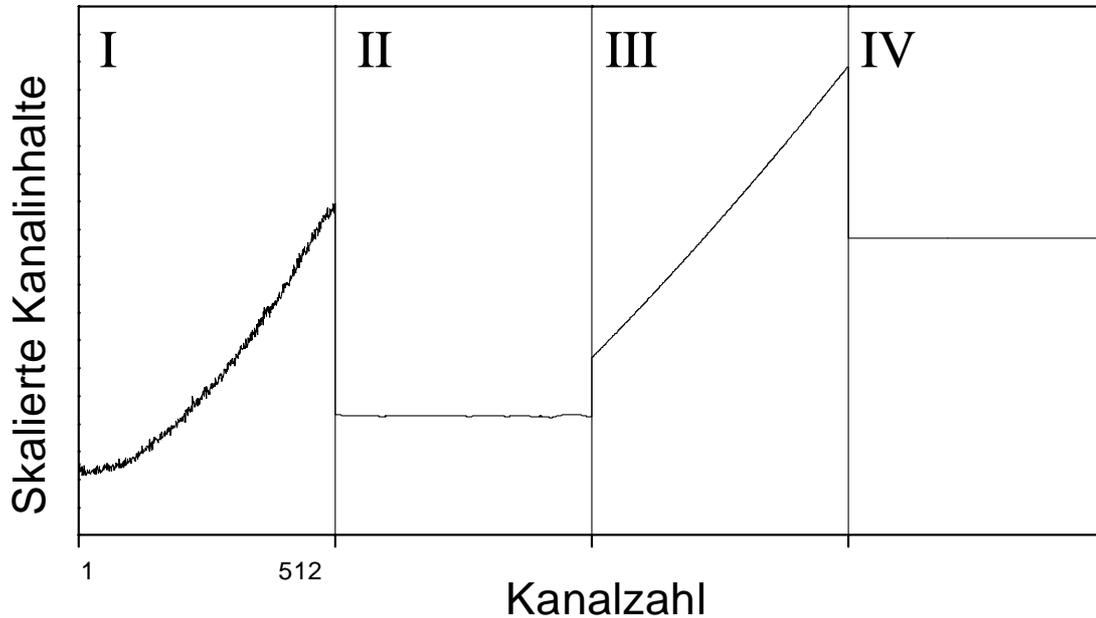


Abbildung 4.4.: Darstellung der Teilspektren beim Energie-Scan-Messverfahren. Die Spektren sind im einzelnen: I: Ionisationssignal, II: Ionenstrom, III: Elektronenstrom, IV: Messzeit.

Beim Energie-Scan-Messverfahren bleibt die Position der Elektronenkanone während der Messung unverändert. Bei maximalem Strahlüberlapp zwischen Ionen- und Elektronenstrom wird die Elektronenenergie in diskreten Stufen variiert. Für jede Energiestufe werden analog zu dem dynamischen Messverfahren vier Messgrößen erfasst (siehe Aufstellung in Kapitel 4.1). Es können dabei Elektronenenergien im Bereich von 0 eV bis 200 eV in bis zu 4096 Schritten erfasst werden. Bei den hier vorgestellten Messungen ist der Abstand zwischen zwei Energien überwiegend zu 0,2 eV gewählt worden.

Mittels der Gate-Eingänge werden die Zähler für die Messgrößen nach dem Einstellen einer neuen Energie für eine wählbare Zeit gestoppt. Bei allen hier vorgestellten Messungen ist diese Gate-Zeit $300 \mu\text{s}$. Nach einem Reset werden in der Messzeit, hier 3 ms, die Messgrößen in den Zählern akkumuliert. Die Endstände der Zähler nach dem Messintervall werden zu dem zur jeweiligen Energiestufe gehörenden Kanal hinzuaddiert, in Abbildung 4.5 ist der dabei verwendete Aufbau dargestellt. Während der Messung lassen sich die akkumulierten Spektren zeitnah kontrollieren, ein Beispiel ist in Abbildung 4.4 dargestellt.

Wie schon in der Einleitung zu diesem Kapitel dargestellt, ist es mit diesem Verfahren nicht möglich, den Untergrund in einer Messung mit zu erfassen. Daher werden zur Bestimmung des Untergrundes bei dieser Methode im wesentlichen zwei Verfah-

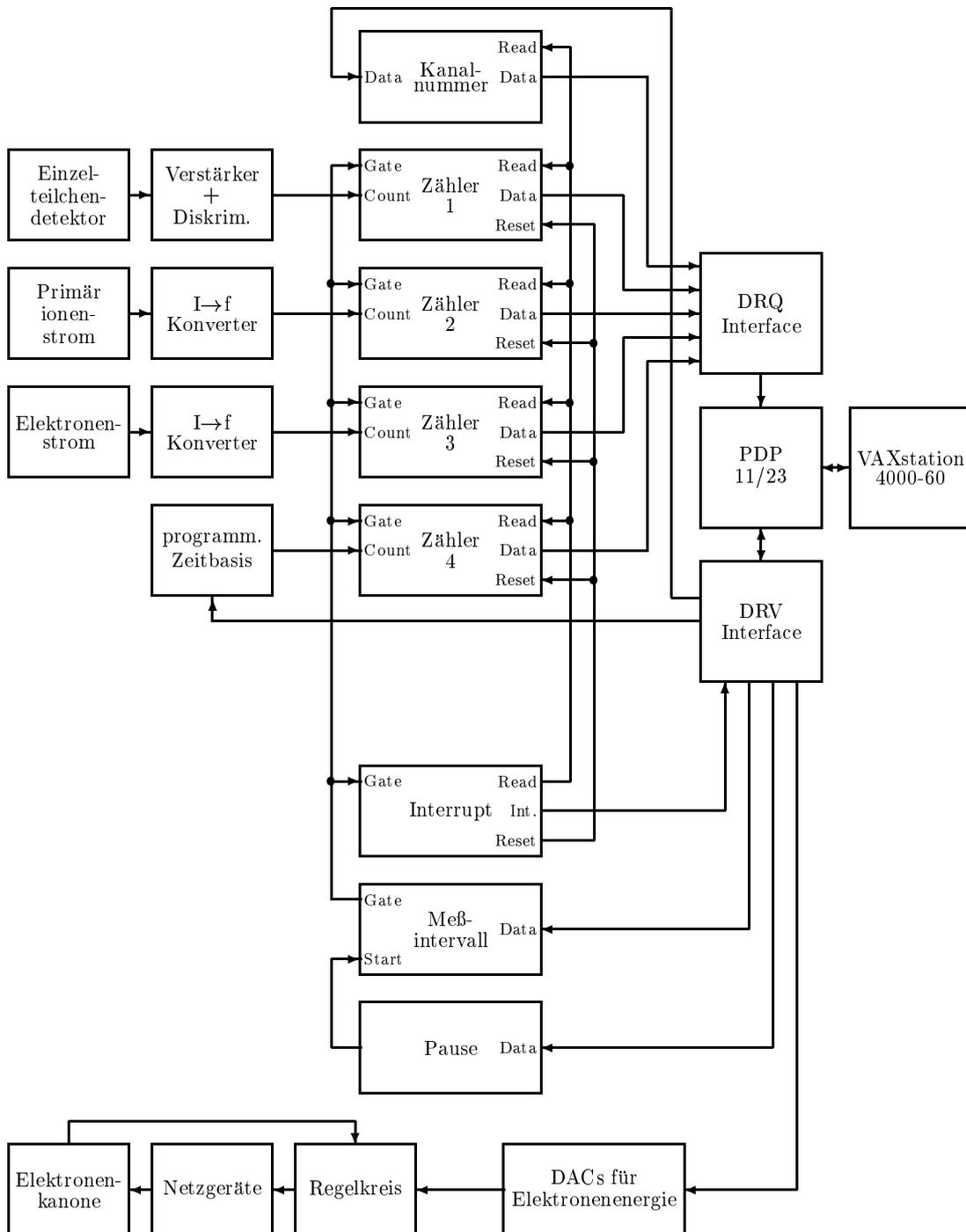


Abbildung 4.5.: Blockschaltbild der Datenaufnahme und der Elektronenenergiesteuerung beim Energie-Scan-Messverfahren

ren verwendet:

1. Messung bei einer Kanonenposition ohne Strahlüberlapp.
2. Messung in einem Energiebereich, in dem keine Ionisationsereignisse auftreten können, also unterhalb der Ionisationsschwelle.

Bei beiden Verfahren zeigt sich, dass der Untergrund nicht von der Elektronenenergie abhängt. Die Summe der Ionisationsereignisse in den für die Bestimmung des Untergrundes gewählten Kanälen⁴ normiert auf die in den gleichen Kanälen akkumulierte Ladung wird daher für den Abzug eines Untergrundes benutzt.

$$\bar{U} = \frac{\sum_j N(j)}{\sum_j Q_i(j)} \quad (4.10)$$

Durch die Summenbildung ergibt sich schon nach kurzer Messzeit ein \bar{U} mit kleinem statistischem Fehler. Denn für den statistischen Fehler von \bar{U} gilt

$$\frac{\Delta\bar{U}}{\bar{U}} = \frac{\sqrt{\sum_j N(j)}}{\sum_j N(j)} = \frac{1}{\sqrt{\sum_j N(j)}}. \quad (4.11)$$

Mit diesem \bar{U} wird dann eine untergrundkorrigierte Signalrate berechnet

$$R(j) = N(j) - Q_i(j) \cdot \bar{U}. \quad (4.12)$$

Eine korrekte Bestimmung des Untergrundes mit diesem Verfahren ist nur eingeschränkt möglich. Durch den zeitlichen Abstand zwischen der eigentlichen Messung und der Untergrundmessung ist nicht sichergestellt, dass der jeweils korrekte Untergrund subtrahiert wird. Alle bisherigen Messungen zeigen allerdings, dass die oben angegebene normierte Untergrundrate sich nicht wesentlich mit der Zeit ändert.

Mit der Gleichung 4.1 ergibt sich dann der Wirkungsquerschnitt zu

$$\sigma(E(j)) = \frac{R(j)T(j)}{Q_i(j)Q_e(j)} \cdot \frac{K \cdot F(e(j))}{M(E(j))\varepsilon C(E_j)}. \quad (4.13)$$

K ist ein Konversionsfaktor, der die summierten Zählerstände in physikalische Größen umrechnet, $F(E(j))$ ist der Formfaktor (s. Gl. 4.1), $C(E_E)$ ist die in Gleichung 3.1 angegebene von der Elektronenenergie abhängige Korrektur für die Elektronenstrommessung und ε ist die Detektoreffizienz.

⁴Dies meint alle Kanäle im Falle einer Messung ohne Strahlüberlapp sonst die Kanäle, deren Elektronenenergie unterhalb der Ionisationsschwelle liegt.

Mit der Energie-Scan-Methode bestimmt man zunächst nur den relativen Verlauf des Wirkungsquerschnittes. Die Unsicherheit des Verlaufs ist durch die Unkenntnis des Formfaktors bestimmt. Innerhalb eines Energiebereiches von weniger als ungefähr 10 eV ist der Formfaktor allerdings annähernd konstant. Daher können einzelne Strukturen im Verlauf des Wirkungsquerschnittes mit diesem Verfahren sehr gut bestimmt werden. Als erste Abschätzung für den Formfaktor kann

$$F(E(j)) = \left(1,39 \log \left(\frac{E(j)}{1\text{eV}} \right) - 0,44 \right)^{-1} \text{ cm} \quad (4.14)$$

verwendet werden, diese durch Nachmessen bekannter Wirkungsquerschnitte empirisch ermittelte Formel liefert bis auf Abweichungen von 50% genaue Wirkungsquerschnitte. Eine genauere Bestimmung des Wirkungsquerschnittes kann erst durch die Anpassung an Messergebnisse, die in unabhängigen Messungen mit dem dynamischen Verfahren gemessen wurden, erfolgen. Diese Anpassung gleicht Fehler aus, die z. B. durch die Abschätzung des Formfaktors (Gl. 4.14) und durch die Ungenauigkeit der Untergrundbestimmung verursacht werden. Durch die Anpassung ist die absolute Genauigkeit der Messungen mit dem Energie-Scan-Verfahren durch den absoluten Fehler für die Ergebnisse des dynamischen-Messverfahrens bestimmt. Zur Bestimmung von Strukturen in den Wirkungsquerschnitten ist jedoch die Unsicherheit zwischen benachbarten Messpunkten von entscheidender Bedeutung, diese wird beim Energie-Scan-Verfahren nur von der statistischen Unsicherheit eines Messpunktes bestimmt. Der statistische Fehler für ein Konfidenzintervall von einer Standardabweichung ergibt sich direkt aus den Fehlern für die untergrundkorrigierte Signalrate:

$$(\Delta R(j))^2 = (\Delta N(j))^2 + (Q_i(j))^2 (\Delta \bar{U})^2 \quad (4.15)$$

Mit $\Delta N(j) = \sqrt{N(j)}$ ergibt sich

$$\frac{\Delta \sigma(E_j)}{\sigma(E_j)} = \frac{\Delta R(j)}{R(j)} = \frac{\sqrt{N(j) + Q_i^2(j)(\Delta \bar{U})^2}}{N(j) - Q_i(j)\bar{U}}. \quad (4.16)$$

Fasst man mehrere Kanäle zu einem zusammen, so kann der statistische Fehler weiter gesenkt werden. Allerdings verliert man dabei Information über die Struktur des Wirkungsquerschnittes.

4. *Messverfahren, Messdatenerfassung und Auswertung*

5. Einfachionisation von C^{3+} -Ionen

Bei wasserstoffähnlichen Ionen liegt eine gute Übereinstimmung zwischen experimentellen und theoretischen Wirkungsquerschnitten vor [Bra94, Aic98], neuere Rechnungen für lithium- und natriumähnliche Ionen weisen allerdings Abweichungen zwischen Experiment und Theorie auf [Pin97, Bra95, Bad98]. Insbesondere bei der Einfachionisation von C^{3+} -Ionen liegen aktuelle Rechnungen um 20-30% [Mit99, Sco00] über den experimentellen Ergebnissen [Cra79, Mül88a, Ban99].

Der Wirkungsquerschnitt für die Einfachionisation von C^{3+} -Ionen wird durch die direkte Ionisation (DI) des äußeren $2s$ Elektrons dominiert. Dessen direkte Ionisation

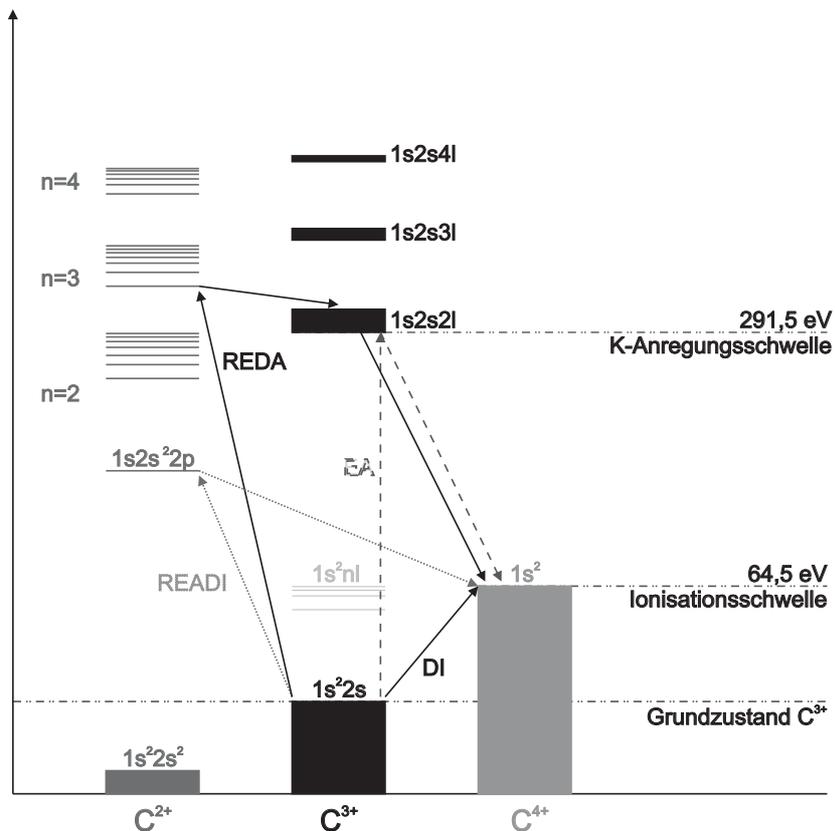


Abbildung 5.1.: Energieschema für die Einfachionisation von C^{3+} -Ionen. Die einzelnen Ionisationsmechanismen sind durch Pfeile verdeutlicht.

5. Einfachionisation von C^{3+} -Ionen

ist ab einer Elektronenenergie von 64,5 eV möglich (s. Abb. 5.1). Neben der direkten Ionisation trägt ab der Anregungsschwelle von 291,5 eV die Autoionisation in Folge einer Anregung eines $1s$ Elektrons in einen nl -Zustand mit $n \geq 2$ bei. Der zusätzliche Beitrag oberhalb der Schwellenenergie für die K-Schalenanregung beträgt ungefähr 5 bis 10% des direkten Wirkungsquerschnittes. Neben dem EA-Prozess sind auch die in Kapitel 2.1 vorgestellten weiteren indirekten Mechanismen bei der Elektronenstoßionisation von C^{3+} -Ionen gut beobachtbar. Der Beitrag durch den READI-Prozess ist groß genug, um auf dem direkten Ionisationsbeitrag als Resonanzstruktur erkennbar zu sein. Neben dem READI Prozess können oberhalb der Schwellenenergie für die K-Schalenanregung REDA-Prozesse durch resonanten Einfang mit zwei sukzessiven Autoionisationen zur Einfachionisation beitragen.

Ziel der hier vorgestellten Messungen ist es, einmal die bisherigen Messungen zu überprüfen, da alle Rechnungen einen höheren Wirkungsquerschnitt liefern, als die bisherigen Messungen. Außerdem ist durch eine R-Matrix-Rechnung von Teng [Ten00], die in unserer Arbeitsgruppe durchgeführt wurde, erstmals der Wirkungsquerschnitt für die Ionisation unter Berücksichtigung aller oben aufgeführten indirekten Ionisationsmechanismen inklusive Interferenzeffekten bestimmt worden. Zur Überprüfung dieser Rechnungen sind Energie-Scan-Messungen mit sehr hoher statistischer Genauigkeit durchgeführt worden.

In Abbildung 5.2 sind neben den Absolutwerten¹ auch die auf diese Werte normierten Messungen mit dem Energie-Scan-Verfahren eingezeichnet. Bei den Messwerten ist aus Gründen der Übersichtlichkeit jeweils nur der statistische Fehler lt. Gl. 4.9 bzw. Gl. 4.16 dargestellt. Zur Orientierung ist der Gesamtfehler für einen Messwert bei 212 eV angegeben. Frühere Messungen von Crandall *et al.* [Cra79] sowie von Bannister [Ban99] liegen deutlich unter den hier bestimmten Werten. Bei der Bestimmung von Absolutwerten für die Ionisation von Kohlenstoff-Ionen ist eine mögliche Fehlerquelle ein Strahlanteil von O^{4+} -Ionen. Durch Ionisation des Restgases in der Ionenquelle können solche Ionen in den Strahl gelangen. Da $^{12}C^{3+}$ -Ionen und O^{4+} -Ionen² ein gleiches Verhältnis von Ladung und Masse aufweisen, ist eine Trennung dieser Ionen durch die Analysiermagnete dieses Experiments nicht möglich. Die Verwendung von Kohlenstoffionen des Kohlenstoff-Isotops ^{13}C schließt für die hier vorgestellten Messungen diese Fehlerquelle aus. Außerdem ist die Messapparatur, wie in Kapitel 3 beschrieben, sorgfältig auf eine korrekte Funktionsweise hin überprüft worden. Daher lassen sich die vorhandenen Diskrepanzen zu früheren Messungen nach gründlicher Untersuchung nicht durch Fehler in den hier vorgestellten Messungen erklären und bedürfen weiterer Klärung.

Zum Vergleich mit theoretischen Rechnungen sind die Rechnungen für direkte Ionisation von Bray [Bra95], Mitnik *et al.* [Mit99], Scott *et al.* [Sco00] sowie eine DWE Rechnung von Younger [You81], die neben der direkten Ionisation der $2s$ und $1s$ Elek-

¹Bestimmung durch Messungen mit dem *dynamischen Messverfahren*.

²Dies trifft nur auf Sauerstoff-Ionen des Isotops ^{16}O zu, welches allerdings 99,762% des natürlichen Sauerstoffs darstellt

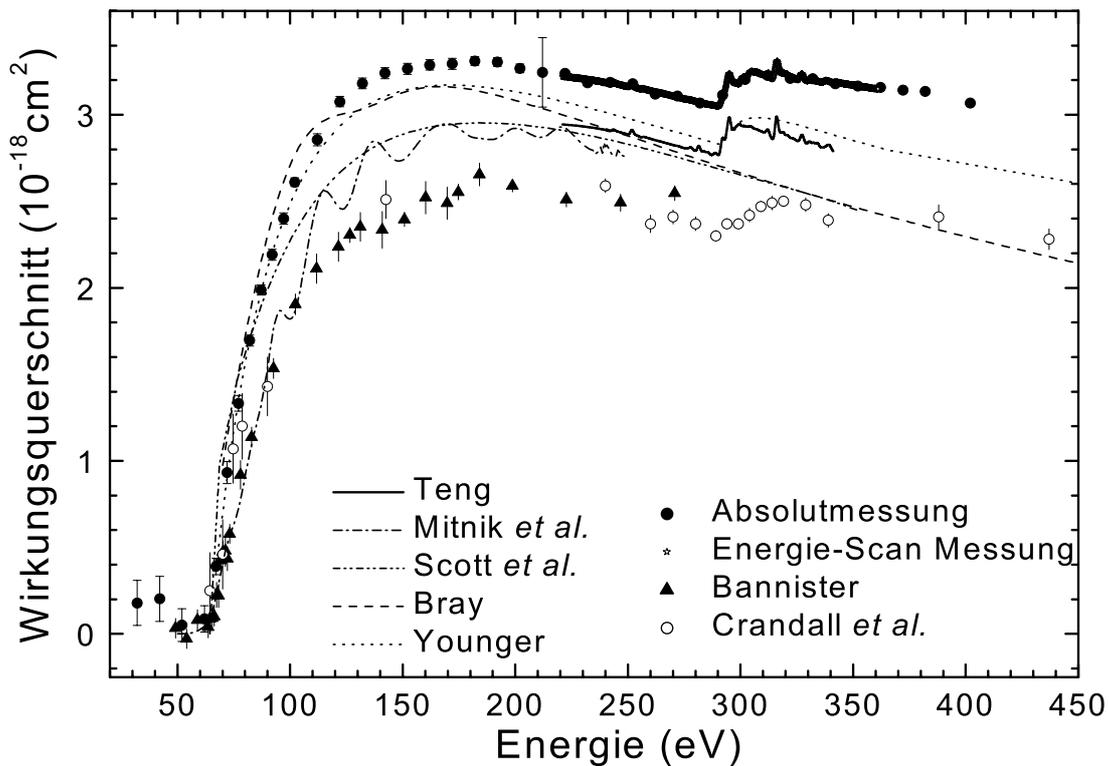


Abbildung 5.2.: Wirkungsquerschnitt für die Einfachionisation von C^{3+} -Ionen. Neben den Absolutmessungen und den Energie-Scan-Messungen sind noch die experimentellen Daten von Crandall *et al.* [Cra79] und Bannister [Ban99] dargestellt. Außerdem sind als Linien noch die theoretischen Ergebnisse von Teng [Ten00], Bray [Bra95], Mitnik *et al.* [Mit99], Scott *et al.* [Sco00] und Younger [You81] eingezeichnet.

tronen noch EA berücksichtigen als Linien dargestellt. Die R-Matrix-Rechnung von Teng ist als durchgezogene Linie eingezeichnet. Unterhalb der Anregungsschwelle von 291,5 eV ist der Wirkungsquerschnitt fast vollständig durch die direkte Ionisation bestimmt. In diesem Energiebereich liegen die gemessenen Daten leicht über den Rechnungen für die direkte Ionisation und der Rechnung von Teng. Die Rechnung von Mitnik *et al.* weist Strukturen auf, die durch Pseudo-Resonanzen in der Rechnung verursacht und nicht durch physikalische Prozesse bedingt werden. Die hier vorgestellten experimentellen Absolutdaten werden durch die Rechnungen von Bray bzw. Teng besser wiedergegeben als die früheren experimentellen Daten. Bis auf die R-Matrix-Resultate von Teng beschreiben die Rechnungen nicht alle indirekten Ionisationsmechanismen. Die R-Matrix-Rechnung ist nur für den Energiebereich von 220-360 eV durchgeführt worden, da dort Beiträge durch READI, REDA und EA-Prozesse erwartet werden. Neben dem großen numerischen Aufwand für die Berechnung wird auch durch die Wahl der in der Rechnung verwendeten Pseudozustände der berechenbare Energiebereich eingeschränkt, denn deren Auswahl und Lage ist für den jeweilig zu

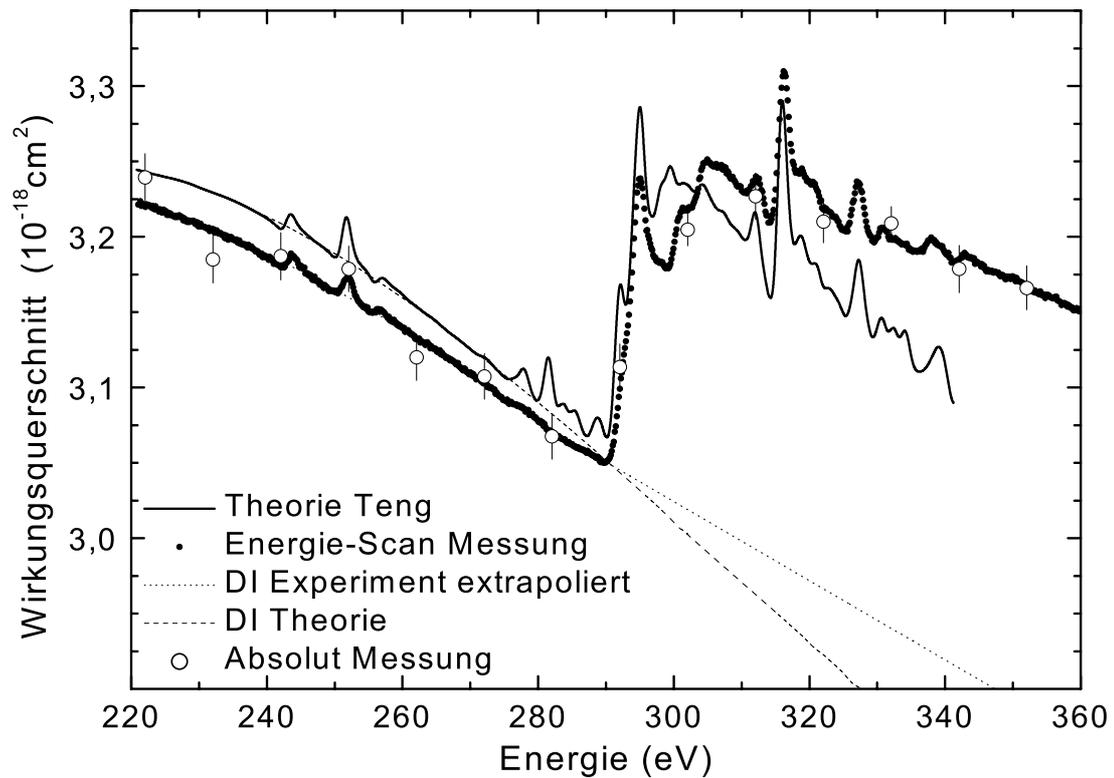


Abbildung 5.3.: Wirkungsquerschnitt für den Energiebereich der indirekten Beiträge zur Einfachionisation. Dargestellt ist neben den Absolutmessungen und Energie-Scan-Messungen auch das Ergebnis der R-Matrix-Rechnung von Teng. Letztere wurde auf der Querschnittsachse um $0,3 \cdot 10^{-18} \text{cm}^2$ verschoben, dies ermöglicht einen direkteren Vergleich zwischen gemessenen und berechneten Resonanzstrukturen.

berechnenden Energiebereich angepasst. Die Rechnungen weisen deutlich sichtbare Strukturen auf, die Signaturen für die indirekten Prozesse sind. Für diesen Energiebereich ist der Verlauf des Wirkungsquerschnittes durch eine Energie-Scan-Messung bestimmt worden.

In Abb. 5.3 ist das Ergebnis dieser Energie-Scan-Messung zusammen mit den für die Normierung dieser Messung verwendeten Absolutmessungen mit den R-Matrix-Rechnungen dargestellt. Zum Vergleich zwischen den experimentellen und theoretischen Daten ist die Energieachse des Experiments an die Lage des Resonanzpeaks für den Einfang in den Zustand $1s2s^22p^3P$ bei 243,05 eV angepasst. Aus der Auger-Spektroskopie ergibt sich für diesen Zustand eine Anregungsenergie von $243,4 \pm 0,5$ eV [Rød79]. Dies erfordert eine Reduzierung der experimentellen Energie um 1,05 eV, was noch im Rahmen der experimentellen Genauigkeit für die Elektronenenergien liegt. Neben der Anpassung der Energieachsen muss auch berücksichtigt werden, dass bei der Messung die Elektronen nicht scharf monoenergetisch sind, son-

dern eine Energieverteilung aufweisen. Daher wurden zum Vergleich die theoretischen Resultate mit einer gaußförmigen Verteilung der Breite von 1,8 eV (FWHM) gefaltet. In Abb. 5.2 liegen die theoretischen Werte tiefer als die experimentellen. Zum Vergleich der Strukturen sind die Ergebnisse der R-Matrix-Rechnung durch Addition von $0,3 \cdot 10^{-18} \text{cm}^2$ angehoben worden. Die einzelnen Strukturen des gemessenen Wirkungsquerschnittes werden durch die Theorie sehr gut wiedergegeben. Der Verlauf über den gesamten Energiebereich zeigt für die experimentellen Daten einen flacheren Abfall mit steigender Energie als für die Rechnung. Betrachtet man die unterschiedlichen Rechnungen für die direkte Ionisation (DI) in Abb.5.2, so weisen auch diese verschiedene Steigungen in diesem Energiebereich auf. Daher ist die Ursache für diesen Unterschied vermutlich die unterschiedliche Energieabhängigkeit für den Anteil der direkten Ionisation am Wirkungsquerschnitt. Schätzt man den Anteil sowohl für die direkte Ionisation bei der R-Matrix-Rechnung als auch bei der Energie-Scan-Messung ab, der abgeschätzte Verlauf für die direkte Ionisation ist als gestrichelte bzw. gepunktete Linie in Abb. 5.3 eingezeichnet, so sieht man einen steileren Abfall für die theoretische Kurve. Auf der experimentellen Seite muss beachtet werden, dass die Messpunkte für die Absolutwerte, die mit dem dynamischen Verfahren gemessen werden, innerhalb von $\pm 2\%$ reproduzierbar sind. Da die Energie-Scan-Messungen an diese angepasst werden, ergibt sich eine Unsicherheit für die Energieabhängigkeit über den gesamten Energiebereich (s. Kap. 4.2). Für einzelne Strukturen in einem schmalen Energiebereich ist jedoch die Unsicherheit zwischen zwei benachbarten Punkten signifikant. Die statistische Genauigkeit der Energie-Scan-Daten ist für diese Messungen kleiner als 0,04%. Diese hohe Punkt-zu-Punkt-Genauigkeit ist notwendig, da die Resonanzen der indirekten Beiträge sich auf einem sehr hohen direkten Anteil des Wirkungsquerschnittes befinden. Erst dieser kleine statistische Fehler ermöglicht die Betrachtung der Linienformen der Resonanzstrukturen. Wie aus der Darstellung 5.3 ersichtlich ist, unterscheiden sich die Steigungen für den Anteil der direkten Ionisation zwischen Theorie und Experiment nicht drastisch. Durch Subtraktion der abgeschätzten direkten Ionisation wird dieser Unterschied in der Steigung ausgeglichen. Für den weiteren Vergleich zwischen Experiment und Theorie wird nun der durch die Subtraktion der direkten Ionisation erhaltene „indirekte“ Wirkungsquerschnitt $\Delta\sigma$ betrachtet.

In Abbildung 5.3 sind die ersten Abweichungen des Wirkungsquerschnittes von der direkten Ionisation bei einer Energie von ≈ 240 eV zu beobachten. Der indirekte Beitrag der Rechnung sowie des Experimentes zum Wirkungsquerschnitt für diesen Energiebereich ist in Abb. 5.4 dargestellt. In diesem Energiebereich kann als Ionisationsmechanismus nur der READI-Prozess beitragen (s. Abb. 5.1), da die Elektronenenergie noch unterhalb der Energie für die Anregung in einen autoionisierenden Zustand von C^{3+} liegt. Energetisch ist als erster READI-Beitrag der dielektronische Einfang in einen $1s2s^22p^3P$ -Zustand des C^{2+} -Ions bei einer Energie von 243,05 eV³ möglich. Der Beitrag dieses Zustandes ist in Abb. 5.4 deutlich zu erkennen, die theore-

³Die Identifikation und Energiebestimmung von Resonanzzuständen bei der R-Matrix-Methode sind in [Qui96] beschrieben

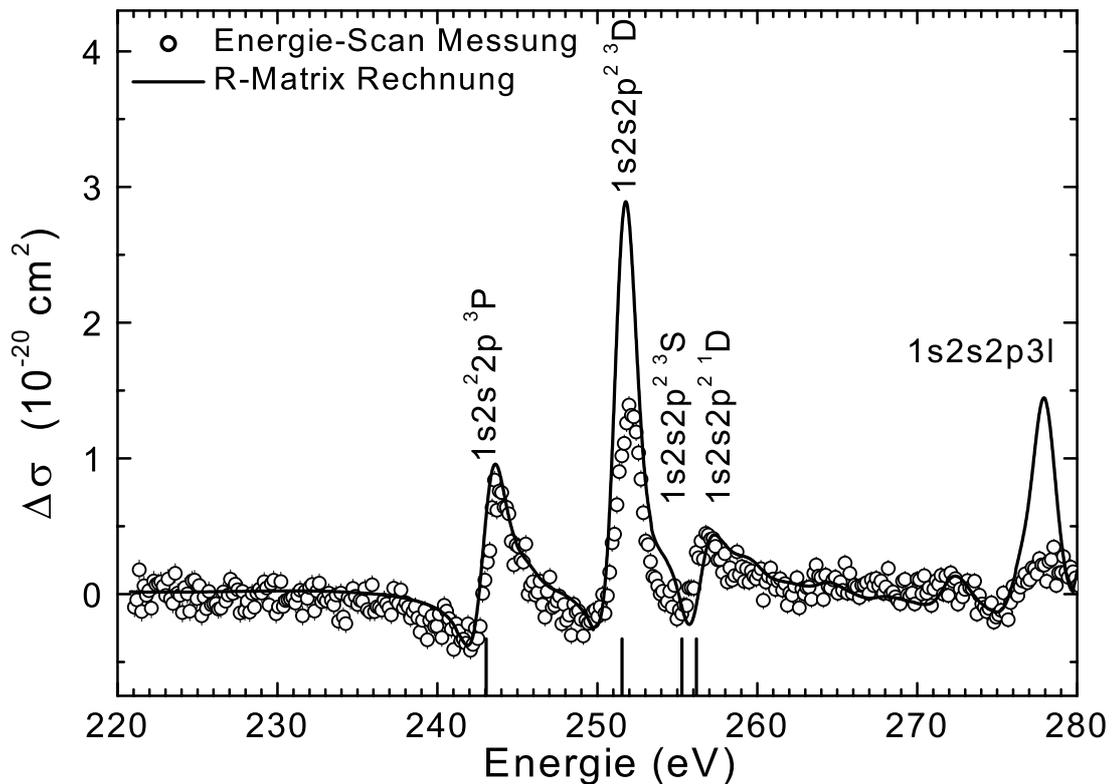


Abbildung 5.4.: Durch Subtraktion der direkten Ionisation erhaltener „indirekter“ Wirkungsquerschnitt für die Einfachionisation. Die Fehlerbalken bei den Energie-Scan-Messungen geben den statistischen Fehler an. Die senkrechten Linien an der Energieachse zeigen die berechnete Energie der entsprechenden Resonanz an.

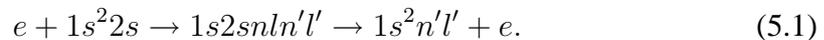
tischen und experimentellen Daten stimmen (bis auf die oben erwähnte Verschiebung) im Bereich dieser Resonanz sehr gut überein. Von den möglichen folgenden READI-Resonanzen sind die Beiträge der Zustände $1s2s2p^2\ ^3D$ bei 251,54 eV, $1s2s2p^2\ ^3S$ bei 255,29 eV und $1s2s2p^2\ ^1D$ bei 256,19 eV als sichtbare Resonanzen im Verlauf des Wirkungsquerschnittes sowohl in der Theorie als auch im Experiment zu erkennen. Im Vergleich zu den experimentellen Ergebnissen wird die Höhe des Beitrags durch den resonanten Einfang in den $1s2s2p^2\ ^3D$ -Zustand von der R-Matrix-Rechnung deutlich überschätzt. Alle anderen Strukturen im Bereich von 240 bis 260 eV zeigen eine hervorragende Übereinstimmung zwischen Messergebnissen und der Rechnung. Alle Peaks in diesem Bereich weisen eine asymmetrische Linienform auf. Zusammen mit dem Abfall des Wirkungsquerschnittes vor dem Anstieg zum Peak weist dies deutlich auf Interferenzeffekte hin. Die Linienform der autoionisierenden Resonanz (s. Abb. 2.5) entspricht dem in Kapitel 2.2 dargestellten Fano-Profil, wenn man berücksichtigt, dass dies ebenfalls mit einer gaußförmigen Verteilung zur Berücksichtigung der experimentellen Energieauflösung gefaltet werden muss. Sowohl Rechnung

als auch die Messergebnisse zeigen somit deutlich, dass die Bildung und der Zerfall des autodoppelsonisierenden Zustandes mit dem Prozess der direkten Ionisation interferiert.

Die theoretischen Rechnungen zeigen Strukturen für Energien dicht unterhalb der EA-Schwelle, die nicht durch die Energie-Scan-Daten belegt werden. Einmal sind diese in Abbildung 5.4 bei 280 eV und in Abbildung 5.5 unterhalb der Schwelle von 291,5 eV zu erkennen. In diesem Energiebereich ist eine Abregung des angeregten Zustandes durch sukzessive Autoionisationen (REDA) energetisch nicht möglich (siehe auch Kap. 2.1). Die von der Theorie vorhergesagten Peaks lassen sich somit dem READI-Prozess, also der Abregung durch Doppel-Autoionisation zuordnen. Bei dem benutzten R-Matrix-Verfahren werden neben den berücksichtigten Autoionisationen über die EA, REDA und READI-Prozesse zwei mögliche Reaktionskanäle zur Abregung des angeregten Zustandes vernachlässigt. Damit wird eine Klasse von alternativen Zerfallskanälen nicht erfasst.

Diese Zerfallsprozesse sind einmal der radiative Zerfall des gebildeten angeregten Zustandes. Durch den radiativen Zerfall erfahren die Ionisationskanäle durch EA, REDA und READI einen Verlust an Resonanzstärke. Für höher geladene lithiumähnliche Ionen werden diese Verluste immer bedeutender, für C^{3+} -Ionen sollte allerdings die Vernachlässigung keine deutliche Auswirkung haben. Insbesondere für die resonanten Prozesse REDA und READI ist die Korrektur durch Berücksichtigung des radiativen Zerfalls zu vernachlässigen. In Rechnungen von Reed und Chen [Ree92] betragen diese Korrekturen für REDA-Prozesse bei O^{5+} -Ionen nur 1%. Nimmt man dies auch für den READI-Prozess an und berücksichtigt, dass für C^{3+} -Ionen die Korrekturen kleiner sein sollten, so können die berechneten Strukturen unterhalb der EA-Schwelle nicht durch Vernachlässigung der radiativen Abregung erklärt werden.

Der zweite Zerfallsprozess ist die unvollständige Berücksichtigung der resonanten Streuung. Betrachtet man die möglichen Zerfallskanäle nach dem Einfang des stoßenden Elektrons in den angeregten Zwischenzustand des C^{2+} -Ions mit der Konfiguration $1s2snln'l'$, so kann dieser je nach Energie neben der sukzessiven Emission zweier Elektronen (REDA) oder der gleichzeitigen Emission zweier Elektronen (READI) auch durch einen Auger-Übergang in einen gebundenen Zustand des C^{3+} -Ions zerfallen:



In den hier vorgestellten R-Matrix-Rechnungen sind die in Gl. 5.1 aufgeführten Prozesse für $n' \geq 4$ nicht berücksichtigt. Daher überschätzen die R-Matrix-Rechnungen den Ionisationsbeitrag dieser Resonanzen. Die Verlustprozesse sowie mögliche Korrekturen sind für O^{5+} -Ionen mit analogen R-Matrix-Rechnungen in [Mül00] ausführlich diskutiert. Die Vernachlässigung der resonanten inelastischen Streuung (Gl. 5.1) mit Anregung von Rydbergzuständen in der R-Matrix-Rechnung verursacht also die in der Messung nicht vorhandenen Strukturen direkt unterhalb der EA-Schwelle.

Der indirekte Wirkungsquerschnitt im Energiebereich an und oberhalb der Schwelle für die Anregung mit nachfolgender Autoionisation eines $1s$ Elektrons ist in Abb. 5.5

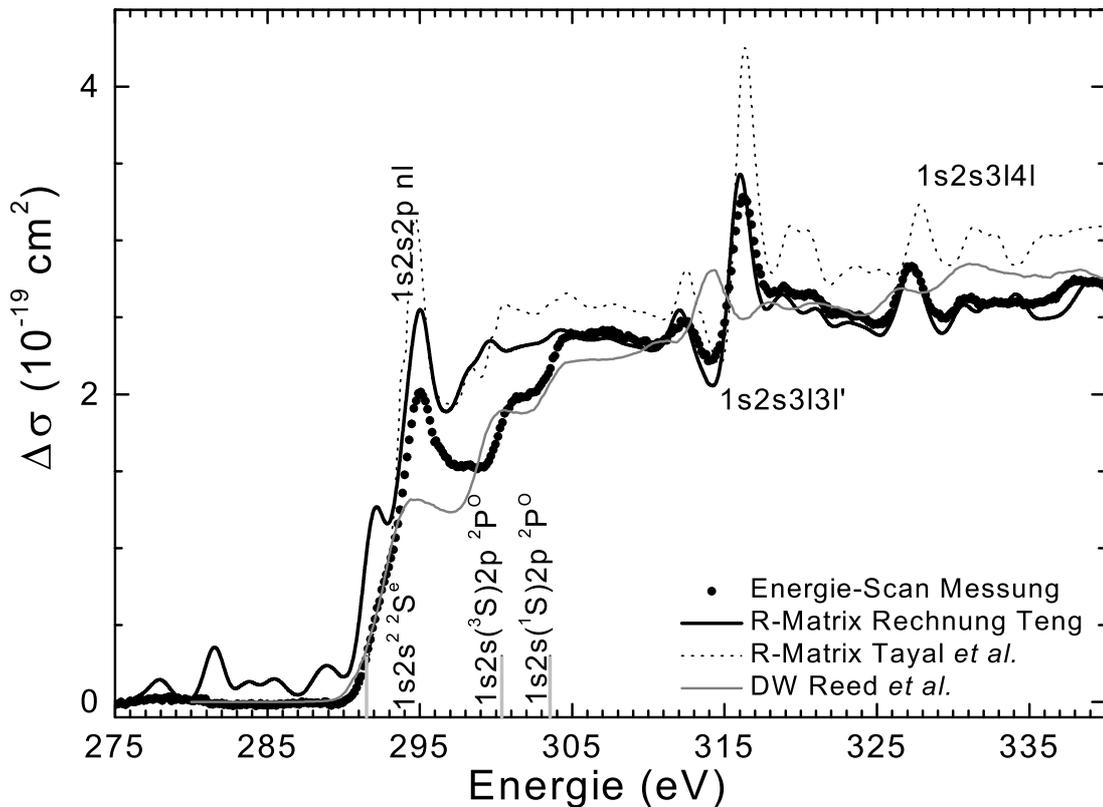


Abbildung 5.5.: „Indirekter“ Wirkungsquerschnitt für den Bereich ab der Schwelle für die Anregung eines $1s$ -Elektrons. Neben der R-Matrix-Rechnung von Teng sind auch die Ergebnisse von Distorted-Wave Rechnungen von Reed *et al.* [Ree92] sowie R-Matrix-Rechnungen von Tayal *et al.* [Tay90] eingezeichnet. Die senkrechten Linien an der Energieachse geben die berechnete Energie des entsprechenden angeregten Zustandes an.

dargestellt. Neben der R-Matrix-Rechnung von Teng, ist eine weitere R-Matrix-Rechnung von Tayal und Henry dargestellt [Tay90] (gepunktete Linie). Diese R-Matrix-Rechnung berücksichtigt nicht die direkte Ionisation, sondern es ist nur der Wirkungsquerschnitt für die EA bzw. REDA-Prozesse berechnet worden. Die Ergebnisse dieser Rechnung sind zum Vergleich mit den experimentellen Daten mit einer gaußförmigen Verteilung gefaltet und durch eine Verschiebung um $1,1$ eV an die experimentelle Energie des Anstieges der EA-Schwelle für die Anregung in den $1s2s^2\ ^2S^e$ -Zustand angepasst worden. Beide R-Matrix-Rechnungen weisen die gleichen deutlichen Strukturen wie die experimentellen Ergebnisse auf. In beiden Rechnungen ist die EA-Schwellenregion für den $1s2s^2\ ^2S^e$ -Autoionisationszustand in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Daten zu erkennen. Da die R-Matrix-Rechnung von Tayal *et al.* keine READI-Beiträge berücksichtigt, sind für diese Rechnung kei-

ne Überschätzungen des Wirkungsquerschnittes durch Vernachlässigung der oben diskutierten Verlustprozesse zu beobachten. In der Rechnung von Teng ist bei 292 eV noch ein Peak im Anstieg der EA-Schwelle zu beobachten, der vermutlich zu einer überschätzten READI-Resonanz gehört. Bei 300 eV ist eine weitere EA-Schwelle für die Anregung in den $1s2s(^3S)2p^2P^o$ -Zustand in den R-Matrix-Rechnungen und in den experimentellen Daten zu beobachten. Die Schwelle für die Anregung in den $1s2s(^1S)2p^2P^o$ -Zustand bei 303 eV ist dagegen nur in den experimentellen Daten so wie in der Distorted-Wave Rechnung von Reed *et al.* deutlich erkennbar. Auch die übrigen Anregungsschwellen werden durch die Distorted-Wave Rechnung von Reed und Chen [Ree92] sehr gut reproduziert. Bei dieser Rechnung, die zur Darstellung ebenfalls mit einer gaußförmigen Verteilung gefaltet ist, werden die einzelnen Ionisationsprozesse – DI, EA, REDA – getrennt berechnet, auch hier sind keine READI-Prozesse berücksichtigt. Durch Addition ergibt sich dann der Gesamtwirkungsquerschnitt. Dabei können Interferenzeffekte nicht berücksichtigt werden.

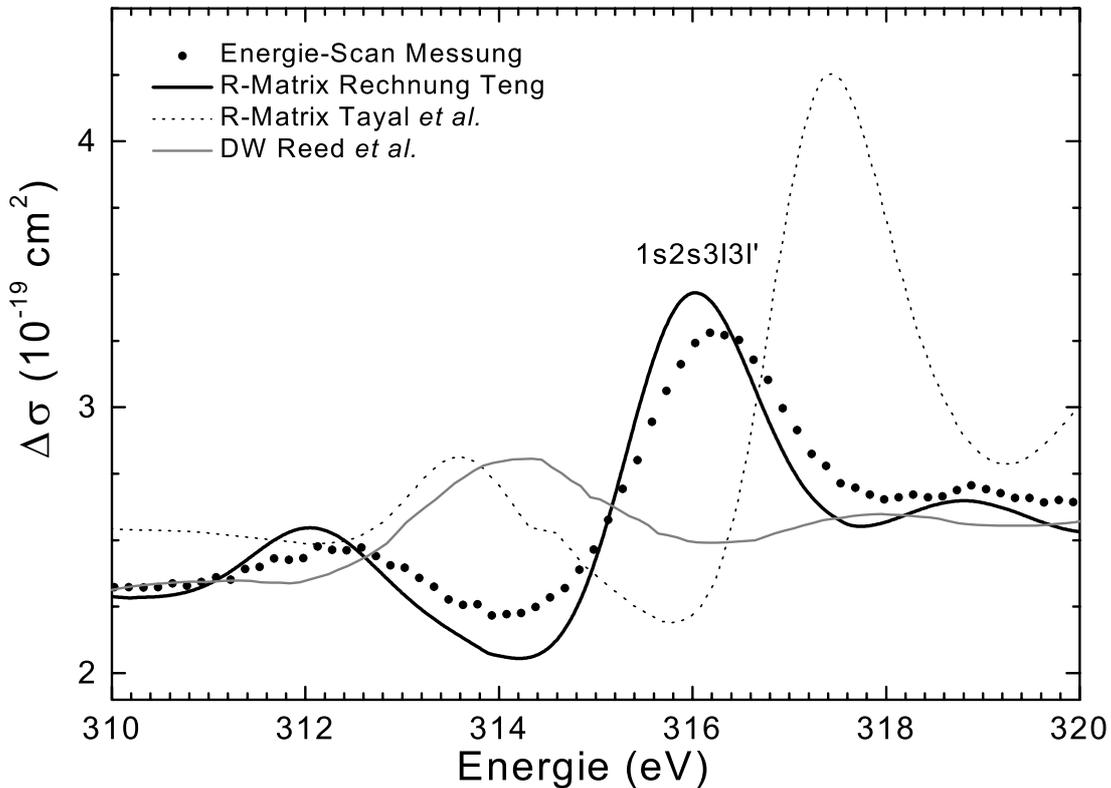


Abbildung 5.6.: Beiträge zur Ionisation durch resonanten Einfang in $1s2s3l3l'$ -Zustände (REDA). Der wesentlichen Beitrag zu diesen Resonanzen beruht auf dem resonanten Einfang in den $1s2s3s3d^3D^e$ -Zustand.

Neben den Stufen, die durch die EA-Prozesse verursacht werden, sind auch Peaks im Verlauf des Wirkungsquerschnittes zu erkennen, die dem REDA-Prozess entsprechen. Am deutlichsten sind die REDA-Beiträge durch den Einfang in die $1s2s2pnl$

5. Einfachionisation von C^{3+} -Ionen

Zustände bei ungefähr 295 eV. Ebenfalls deutlich ist der Einfang in die $1s2s3l3l'$ Zustände bei ungefähr 316 eV zu erkennen. Analog zu Messungen an lithiumähnlichen O^{5+} -Ionen [Mül00] ist der wesentliche Beitrag zu dieser Peak-Struktur vermutlich durch den resonanten Einfang in den $1s2s3s3d^3D^e$ -Zustand bedingt. Die REDA-Prozesse, die bei 326 eV über die $1s2s3l4l'$ -Zustände ablaufen, sind auch noch als Beitrag zum Wirkungsquerschnitt zu erkennen. Diese REDA-Strukturen werden durch die R-Matrix-Rechnungen gut reproduziert. In der Distorted-Wave Rechnung ist für die $1s2s2pnl$ -Zustände keine REDA-Struktur zu erkennen. Die beiden anderen REDA-Strukturen (bei 295 eV und 316 eV) werden durch diese Rechnung nicht so deutlich wie in den experimentellen bzw. R-Matrix-Daten ausgewiesen.

Die Form der REDA-Resonanz bei 316 eV, die im wesentlichen dem angeregten $1s2s3s3d^3D^e$ -Zustand zuzuordnen ist, zeigt einen Abfall des Wirkungsquerschnittes vor dem Peak. In Abbildung 5.6 sind die verschiedenen Rechnungen und die experimentellen Daten nochmals für den Energiebereich dieser Resonanz (310-320 eV) dargestellt. Analog wie bei den READI-Peaks könnte dies auf Interferenzeffekte hinweisen. Wie in Kapitel 2.1 dargestellt, sind EA-Prozess und REDA-Prozess im Endzustand ununterscheidbar, falls die Anregung für den EA-Beitrag in einen Zustand erfolgt, der beim REDA-Prozess als Zwischenzustand nach der ersten Autoionisation vorliegt. Unterhalb der Energie für diesen REDA-Prozess befinden sich mehrere autoionisierende Zustände des C^{3+} -Ions, so dass hier die erste Autoionisation aus dem $1s2s3s3d^3D^e$ -Zustand in einen dieser Zustände führen kann. Die REDA-Resonanz kann also mit einem der EA-Prozesse interferieren, und diese Interferenz bedingt die asymmetrische Linienform des Peaks. Ein Beleg dafür ist der Vergleich mit den theoretischen Rechnungen. Der R-Matrix-Formalismus berücksichtigt Interferenzeffekte, beide R-Matrix Rechnungen geben für diesen Peak den experimentellen Verlauf mit dem Abfall vor dem Peak und der leicht asymmetrischen Linienform wieder. Die Distorted-Wave-Rechnung dagegen berechnet die einzelnen Ionisationsmechanismen als unabhängige Prozesse und ist daher nicht in der Lage Interferenz zu beschreiben. In Abb. 5.6 ist für die Distorted-Wave-Rechnung kein Abfall vor dem Peak zu erkennen. Der Vergleich mit den Rechnungen und die Linienform sind also Signaturen für Interferenz zwischen EA und REDA-Prozessen bei der Elektronenstoßionisation.

6. Einfachionisation von C^{4+} -Ionen

Bei der Einfachionisation von heliumähnlichen Ionen im Grundzustand können Prozesse, die nur eines der beiden K-Schalen Elektronen anregen, nicht zur Ionisation beitragen. Der Beitrag zur Einfachionisation durch gleichzeitige Anregung beider K-Schalen Elektronen ist sehr klein, kann aber dennoch experimentell mit den hier verwendeten Methoden beobachtet werden [Mül89, Hof91a]. Im Gegensatz dazu ist bei der Einfachionisation von heliumähnlichen Ionen, die sich in einem metastabilen Zustand befinden, eine Ionisation über die schon bei C^{3+} -Ionen beobachteten Mechanismen, also durch Anregung eines K-Schalen Elektrons möglich (s. Abb. 6.1). Im folgenden Kapitel ist die Bestimmung der indirekten Beiträge (in Abb. 6.1 als Pfeile dargestellt) zur Elektronenstoßionisation von metastabilen C^{4+} -Ionen im $1s2s\ ^3S_1$ Zustand dargestellt.

Bei heliumähnlichen Ionen gibt es zwei metastabile Zustände unterschiedlicher Lebensdauer. Für C^{4+} ist dies neben dem $1s2s\ ^3S_1$ -Zustand mit einer Lebensdauer von 20,59 *ms* [Sch94] der $1s2s\ ^1S_0$ Zustand mit einer Lebensdauer von 3 μs [Dra86, Der97].

Erzeugt man C^{4+} -Ionen in einer EZR-Ionenquelle, also in einem Plasma mit relativ hoher Elektronentemperatur, so entstehen neben Ionen im Grundzustand auch Ionen in metastabilen Zuständen. Nur metastabile Ionen, die die Wechselwirkungszone erreichen, können zum gemessenen Wirkungsquerschnitt beitragen. Bei einer Flugstrecke von der Ionenquelle bis zum Wechselwirkungsbereich von ca. 4,3 *m* ergibt sich mit einer kinetischen Energie der C^{4+} -Ionen von 48 keV eine Flugzeit von 4,9 μs . Aus dem Verhältnis der Flugzeit zur Lebensdauer ergibt sich, dass von den in der Ionenquelle erzeugten metastabilen Ionen 99,97% derjenigen im 3S_1 -Zustand und 19,9% derjenigen im 1S_0 -Zustand den Wechselwirkungsbereich erreichen. Unter der Annahme, dass beide Zustände gemäß ihres statistischen Gewichts (3:1) bevölkert werden, befinden sich bei der Untersuchung von Ionen, die direkt von der Ionenquelle in den Wechselwirkungsbereich gelangen, 94% der metastabilen Ionen im 3S_1 -Zustand und 6% im 1S_0 -Zustand.

Mit dem in Abbildung 3.1 dargestellten experimentellen Aufbau können auch C^{4+} -Ionen untersucht werden, die durch Umladung von C^{5+} -Ionen in der Gaszelle erzeugt werden. Bei diesem Umladungsprozess erfolgt der Elektroneneinfang und die evtl. nachfolgende Abregung nicht nur in den Grundzustand von C^{4+} sondern auch in die metastabilen Zustände. Die C^{5+} -Ionen haben vor der Umladung an Krypton eine kinetische Energie von 60 keV. Die durch die Umladung entstandenen metastabilen

6. Einfachionisation von C^{4+} -Ionen

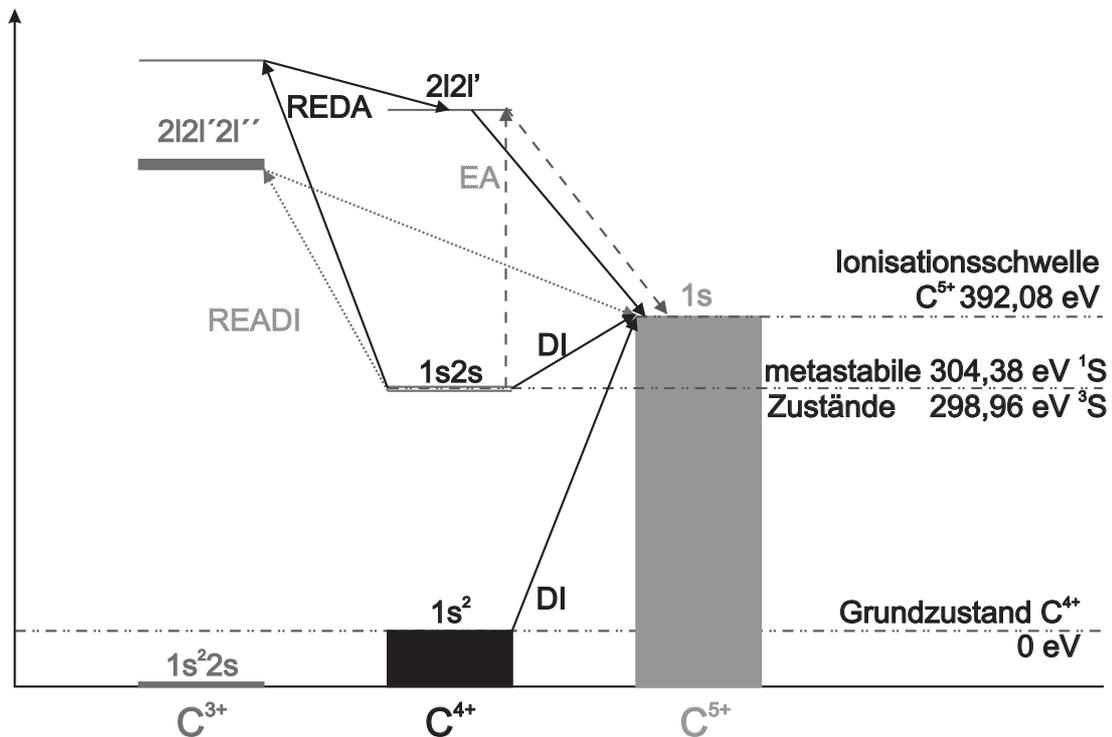


Abbildung 6.1.: Energieschema für die Einfachionisation von C^{4+} -Ionen. Die Energien für die Zustände sind der NIST-Datenbank [Mar] entnommen.

C^{4+} -Ionen haben dann die gleiche kinetische Energie. Die Flugstrecke von der Gaszelle bis in den Wechselwirkungsbereich ist kürzer als von der Ionenquelle und beträgt ungefähr 2,1 m. Damit erreichen 99,98 % der Ionen im 3S_1 -Zustand und 49,3 % der Ionen im 1S_0 -Zustand den Wechselwirkungsbereich. Setzt man auch hier eine Bevölkerung gemäß des statistischen Gewichts der beiden Zustände voraus, so befinden sich von den in der Gaszelle erzeugte metastabilen Ionen 86% im 3S_1 -Zustand und 14% im 1S_0 -Zustand.

Abb. 6.2 zeigt die experimentell ermittelten (scheinbaren) Wirkungsquerschnitte für die Einfachionisation von C^{4+} -Ionen, die aus der EZR-Ionenquelle extrahiert werden bzw. durch Umladung an Krypton in der Gaszelle erzeugt werden. Beide Messungen zeigen ein Anwachsen des Wirkungsquerschnittes ab der Ionisationsschwelle für den $1s2s\ ^3S_1$ -Zustand. Dies belegt das Vorhandensein metastabiler Ionen in den jeweiligen Ionenstrahlen. Im weiteren Verlauf unterscheiden sich die beiden Messungen, da der jeweilige Anteil der metastabilen Ionen im Strahl unterschiedlich ist. Jedoch ist für beide Messungen das Einsetzen der Ionisation von Ionen aus dem Grundzustand ab der Schwelle von 392 eV zu erkennen. Unterhalb dieser Schwelle tragen nur die Ionen im metastabilen Zustand zum Ionisationsquerschnitt bei. Da bei der Berechnung des Wirkungsquerschnittes (s. Gl. 4.3 und Gl. 4.1) auf den gemessenen Ionenstrom, der die Summe aus den Strömen der metastabilen Ionen und der Grundzustandsionen

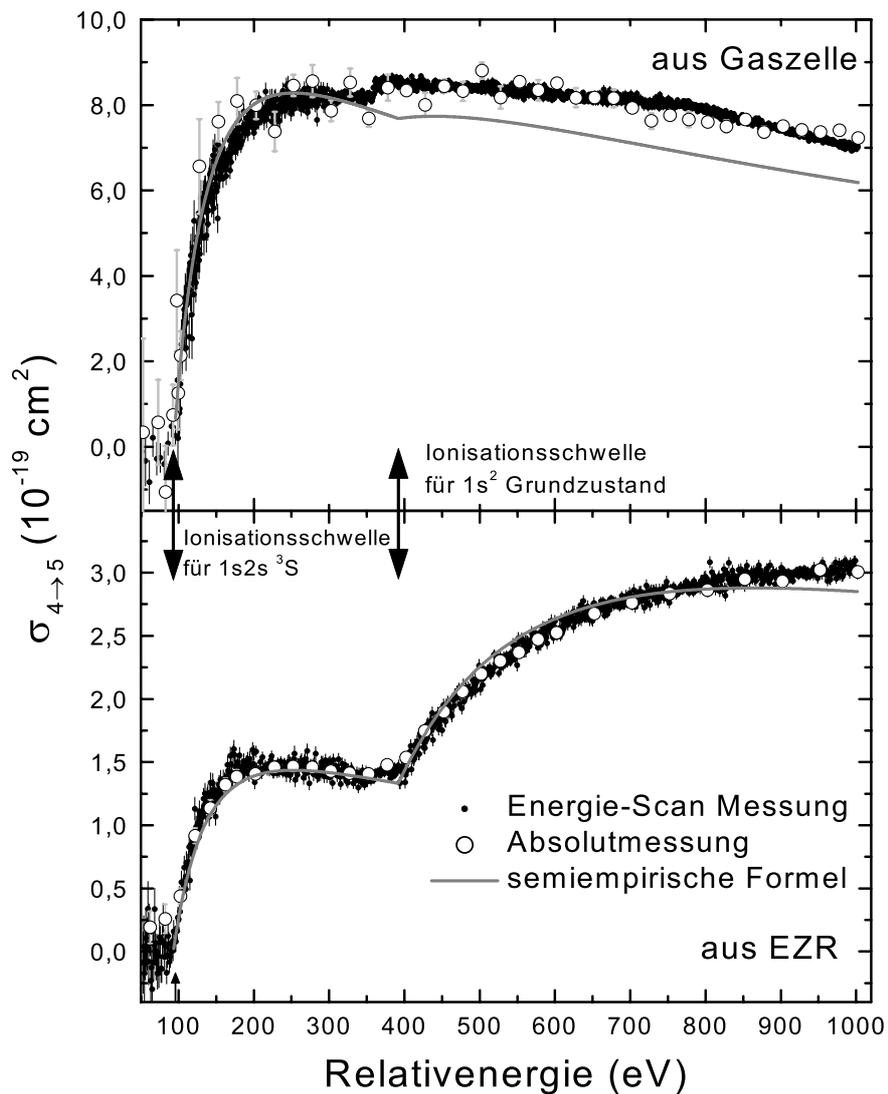


Abbildung 6.2.: Ionisationsquerschnitt für C^{4+} -Ionen mit unterschiedlichem Anteil an metastabilen Ionen. Die Absolutwerte sind mit ihrem Gesamtfehler und die Energie-Scan-Messungen mit ihrem statistischen Fehler eingezeichnet. Die durchgezogene Linie ist ein mit der semiempirischen Lotz-Formel (Gl. 2.12) berechneter Wirkungsquerschnitt. Für die durch Umladung erzeugten Ionen ist ein Anteil von 44% metastabilen Ionen und für die Ionen direkt aus der Ionenquelle ein Anteil von 7,5% metastabilen Ionen angenommen worden.

ist, normiert wird, kann aus dem Verhältnis der Ionisationsquerschnitte unterhalb der Schwelle direkt das Verhältnis der Anteile von metastabilen Ionen zwischen beiden Ionenstrahlen bestimmt werden. Es sind bei den Ionen aus der Gaszelle 5,8 mal soviel Ionen in einem metastabilen Zustand wie direkt aus der Ionenquelle. Dieses Verhältnis

6. Einfachionisation von C^{4+} -Ionen

gibt jedoch keine Information darüber, wieviel Prozent des gesamten Ionenstroms sich in metastabilen Zuständen befinden. Zur Abschätzung dieses Strahlanteils wird der Wirkungsquerschnitt für die Ionisation mittels der semiempirischen Formel von Lotz (s. Gl.2.12) für unterschiedliche Strahlanteile berechnet. Die beste Übereinstimmung ergibt sich für die Messung an Ionen direkt aus der EZR-Quelle für einen metastabilen Anteil von 7,5%, und für die Ionen die durch Umladung in der Gaszelle erzeugt werden zu 44%. Bildet man mit diesen Werten das Verhältnis der Anteile an metastabilen Ionen, so erhält man auch hier, dass sich 5,8 mal soviel Ionen des Ionenstrahls aus der Gaszelle im metastabilen Zustand befinden als Ionen direkt aus der Ionenquelle.

Wie bereits bereits eingangs des Kapitels erwähnt, können für die metastabilen Zustände – im Gegensatz zum Grundzustand – größere indirekte Beiträge zur Ionisation auftreten. Zur genaueren Betrachtung der in Abb. 6.1 dargestellten Prozesse wurden mit dem Energie-Scan-Messverfahren für den entsprechenden Energiebereich de-

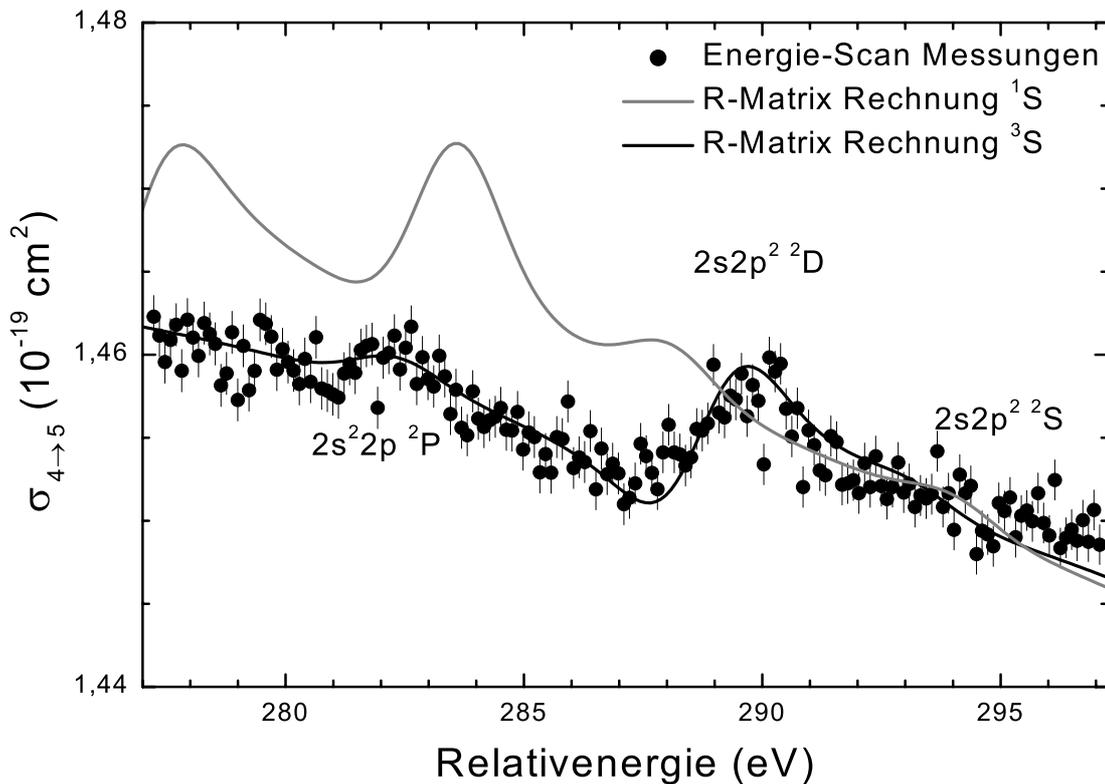


Abbildung 6.3.: READI-Resonanzen für C^{4+} -Ionen im $1s2s\ ^3S_1$ -Zustand. Neben den Ergebnissen der Energie-Scan-Messung ist das Ergebnis einer R-Matrix-Rechnung von Berrington *et al.* [Nas99, Ber99] dargestellt. Als Strahlanteil der metastabilen Ionen wurde hierbei 7,8% angenommen. Die hier bevölkerten READI-Resonanzen sind Hohlzustände des dreifach geladenen Kohlenstoffs.

taillierte Messungen vorgenommen. Die Resonanzstrukturen für den READI-Prozess liegen noch unterhalb der Ionisationsschwelle für den Grundzustand. Die beobachteten Resonanzstrukturen sind also definitiv durch Ionisationsprozesse von metastabilen Ionen verursacht. Obwohl der metastabile Anteil bei durch Umladung erzeugten Ionen größer ist, ist die Signalrate in diesem Energiebereich für den Ionenstrahl direkt aus der EZR-Quelle aufgrund des größeren Gesamtstroms höher. Daher sind die Energie-Scan-Messungen für die READI-Resonanzen nur an Ionen direkt aus der EZR-Ionenquelle vorgenommen worden. In Abb. 6.3 sind die Ergebnisse der Messung sowie einer R-Matrix-Rechnung [Nas99, Ber99] für die Ionisation der beiden metastabilen Zustände $1s2s\ ^3S_1$ und $1s2s\ ^1S_0$ im Energiebereich von 277 eV bis 297 eV, also dem Bereich in dem READI-Resonanzen erwartet werden, dargestellt. Zum Vergleich mit den experimentellen Daten sind die theoretischen Ergebnisse mit einer gaußförmigen Verteilung der Breite von 2 eV (FWHM) gefaltet worden. Die Energieachse der Rechnung ist um 1,3 eV zu kleineren Energien verschoben, um einen besseren Vergleich mit den experimentellen Daten zu ermöglichen¹. Die Berechnung des Wirkungsquerschnittes geht von einem Strahl mit allen Ionen im jeweiligen Zustand aus, die theoretischen Daten werden daher durch Multiplikation mit einem Faktor, der dem Anteil für metastabile Ionen entspricht, an die experimentellen Daten angepasst. Die Anpassung ergibt einen Anteil von $\approx 7,8\%$ im metastabilen Zustand, dies bestätigt die Abschätzung durch die semiempirische Formel. In Abbildung 6.3 zeigen nur die Rechnungen für den $1s2s\ ^3S$ -Zustand eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Der Ionenstrahl aus der EZR-Quelle sollte laut Abschätzung einen maximalen Beitrag von 6% Ionen im 1S -Zustand haben. Daher ist auch von diesem Zustand kein sichtbarer Beitrag zum Wirkungsquerschnitt zu erwarten. Sowohl Theorie als auch Experiment zeigen deutlich den Beitrag durch die Autodoppelionisation nach dem resonanten Einfang in den $2s2p^2\ ^2D$ -Zustand. Neben dieser Resonanz ist bei kleinerer Energie auch die dem angeregten $2s^22p^2\ ^2P^o$ -Zustand zuzuordnende READI-Resonanz zu beobachten.

Analog zur Ionisation der C^{3+} -Ionen in Kapitel 5 sind auch bei der Ionisation von metastabilen C^{4+} -Ionen EA- und REDA-Prozesse im Verlauf des Wirkungsquerschnittes sichtbar. Abbildung 6.4 zeigt diese für die Ionisation von Ionen direkt aus der EZR-Ionenquelle. Im Gegensatz zu den READI-Resonanzen liegen die Signaturen für den EA-Prozess und die REDA-Prozesse in einem Energiebereich, in dem schon die direkte Ionisation des Grundzustandes möglich ist. Die sehr gut erkennbare Stufe bei 359 eV im Verlauf der Energie-Scan-Messung wird durch die Anregung des bei dem metastabilen Zustand noch in der K-Schale verbliebenen $1s$ -Elektrons mit anschließender Autoionisation verursacht. Die Energien für die Anregung aus den beiden metastabilen Zuständen unterscheiden sich. Falls beide Zustände sichtbare Beiträge zur Ionisation lieferten, müsste man im Verlauf zwei Anregungsstufen sehen. Die Stufe für den $1s2s\ ^1S$ -Zustand würde dabei ca. 5,4 eV unterhalb der für den $1s2s\ ^3S$ -Zustand

¹Die Energielage der experimentell beobachteten Strukturen sind für die EA-Beiträge (s. Abb. 6.6) in guter Übereinstimmung mit Messwerten aus der Auger-Spektroskopie.

6. Einfachionisation von C^{4+} -Ionen

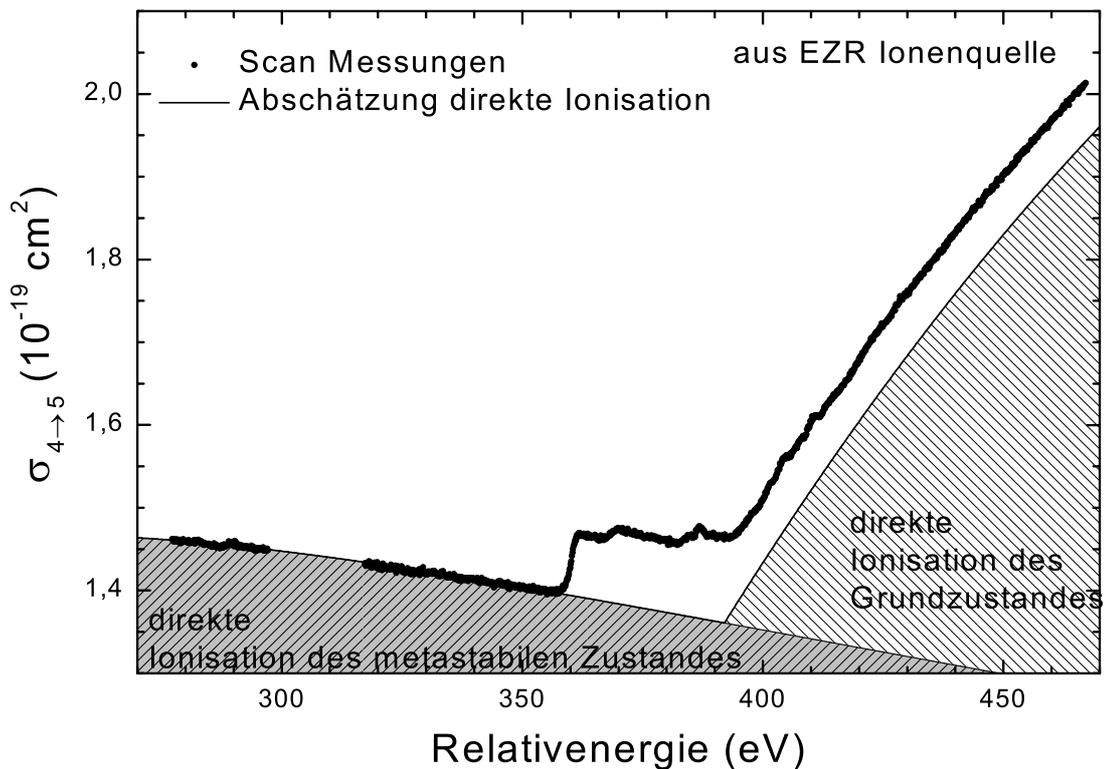


Abbildung 6.4.: Indirekte Prozesse bei der Elektronenstoßionisation von C^{4+} -Ionen. Neben den Ergebnissen der Energie-Scan-Messungen ist eine Abschätzung für die direkte Ionisation des jeweiligen Ionenzustandes dargestellt.

erwartet. Sowohl in Abb. 6.4 als auch in Abb. 6.5 ist kein Hinweis auf die Anregung aus dem 1S -Zustand zu erkennen. Insbesondere in Abb. 6.5 sollte für die Messungen an durch Umladung in der Gaszelle erzeugten metastabilen Ionen aufgrund des prozentual höheren Anteils an Ionen im 1S -Zustand eine zweite Stufe erkennbar sein. Dies, zusammen mit den Ergebnissen für die READI-Prozesse, belegt, dass die metastabilen Ionen sich fast vollständig im $1s2s\ ^3S$ -Zustand befinden.

Für Elektronenenergien oberhalb der EA-Schwelle sind Peaks zu erkennen, die durch REDA- bzw. READI-Prozesse verursacht werden. Das Anwachsen des Wirkungsquerschnittes ab ungefähr 390 eV entsteht durch die direkte Ionisation von Ionen aus dem Grundzustand (die Ionisationsschwelle ist 392,09 eV (s. Abb. 6.1)). Der Beitrag durch die direkte Ionisation des Grundzustandes macht eine genauere Betrachtung der indirekten Prozesse im Verlauf des Wirkungsquerschnittes unmöglich. Zur besseren Untersuchung der indirekten Prozesse betrachtet man die direkte Ionisation sowohl des metastabilen als auch des Grundzustandes als eine Art „Untergrund“, der durch eine geeignete Funktion beschrieben und dann vom Wirkungsquerschnitt subtrahiert werden kann. In Abb. 6.4 ist dies für den Ionenstrahl direkt aus der EZR-

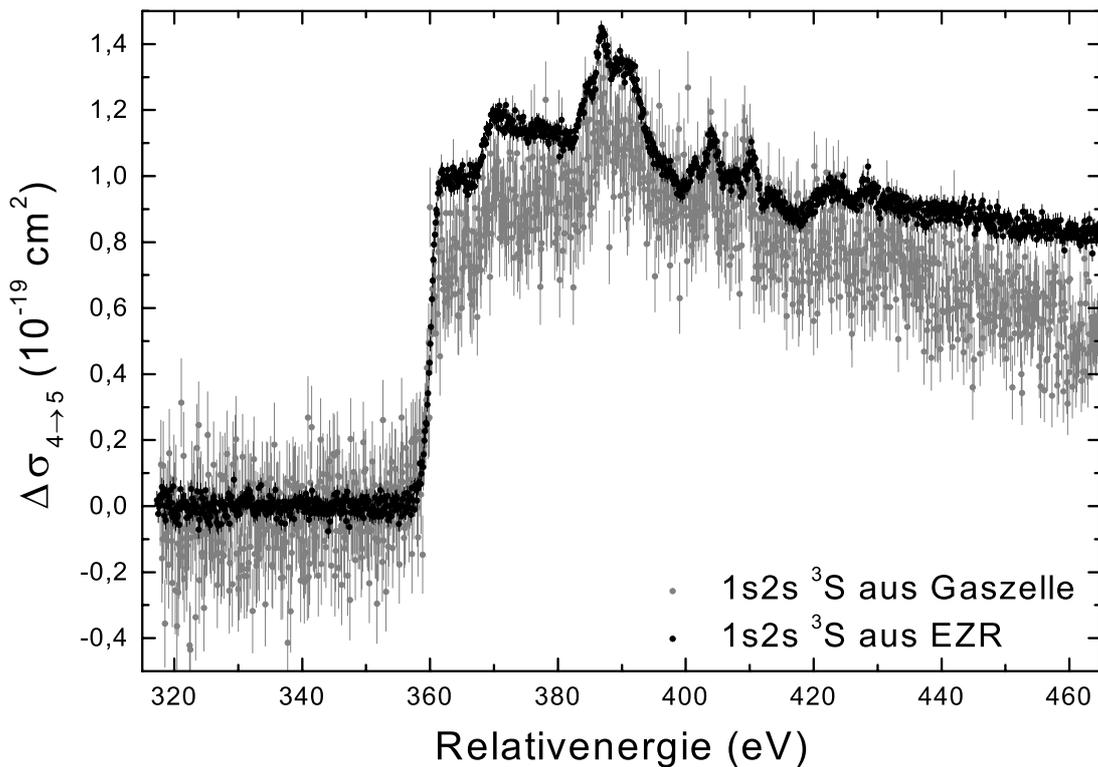


Abbildung 6.5.: Vergleich der indirekten Beiträge zur Einfachionisation von C^{4+} -Ionen im $1s2s\ ^3S$ -Zustand (auf 100% metastabilen Ionen skaliert).

Ionenquelle dargestellt. Für die direkte Ionisation des metastabilen 3S -Zustandes wird als Anpassung die semiempirische Lotz-Formel verwendet. Die direkte Ionisation des Grundzustandes ist schwieriger abzuschätzen, da hier der zusätzliche Beitrag durch die Anregung-Autoionisation beachtet werden muss. Für Elektronenenergien, die nicht deutlich über der Schwellenenergie für den Anregungsprozess liegen, hat der Verlauf des Beitrags durch Anregung-Autoionisation zum Wirkungsquerschnitt annähernd folgende Energieabhängigkeit [Sea62, VR62]

$$\sigma \propto \frac{C}{E}. \quad (6.1)$$

Betrachtet man nun idealisiert für den Beitrag durch EA-Prozesse zum Wirkungsquerschnitt nur einen EA-Prozess, so kann aus der Höhe der Stufe der Beitrag durch EA im Bereich der Ionisationsschwelle für die direkte Ionisation aus dem Grundzustand abgeschätzt werden. Mit dieser Abschätzung wird für die direkte Ionisation des Grundzustandes ein Polynom 2. Grades an die Daten angepasst. Die Abschätzungen für die direkte Ionisation des Grundzustandes und des metastabilen Zustandes werden addiert. Die Summe weist an der Einsatzschwelle für den Grundzustand ein „scharfes“ Einsetzen der direkten Ionisation auf. Wegen der endlichen Energieauflösung im Experiment ist dies unrealistisch, daher wird die Summe mit einer gaußförmigen Verteilung

von 2.0 eV Breite (FWHM) gefaltet. Ein analoges Vorgehen für die Messung am Ionenstrahl aus der Gaszelle ergibt für beide Messungen den in Abb. 6.5 dargestellten Beitrag der indirekten Prozesse für die Ionisation von Ionen im $1s2s\ ^3S$ -Zustand. Beide Messungen weisen einen stark unterschiedlichen Anteil an metastabilen Ionen auf. Zum besseren Vergleich sind daher in Abb. 6.5 die Beiträge auf einen Strahl mit 100% metastabilen Ionen skaliert. Dazu werden die Ergebnisse nach der Subtraktion durch den Wert für den Anteil an metastabilen Ionen, der sich aus der semiempirischen Lotz-Formel ergibt (s. Abb. 6.2), dividiert. Nach dieser Skalierung auf einen metastabilen Anteil von 100% stimmen die aus dem Experiment extrahierten Beiträge für die indirekten Mechanismen innerhalb von ca. 14% überein. Beachtet man, dass die Bestimmung von Wirkungsquerschnitten über die Lotz-Formel eine große Unsicherheit aufweist, so ist die Übereinstimmung der skalierten Beiträge im Rahmen dieser Abschätzung sehr gut.

Beide Messungen stimmen bezüglich der Strukturen sehr gut überein, dies belegt erneut, dass im wesentlichen nur die Ionisation von metastabilen Ionen im $1s2s\ ^3S$ -Zustand beobachtet wird. Der Ionenstrahl nach der Umladung, sollte einen höheren Anteil an Ionen im $1s2s\ ^1S$ -Zustand aufweisen. Allerdings sind für die indirekten Prozesse bei der Ionisation von Ionen aus der Gaszelle keine zusätzlichen oder andere Strukturen als für die Ionen direkt aus der Ionenquelle im Verlauf des Wirkungsquerschnittes zu beobachten. Der metastabile $1s2s\ ^1S$ -Zustand hat eine um 5,4 eV höhere Energie als der $1s2s\ ^3S$ -Zustand. Dies sollte dazu führen, dass für Ionen des 1S -Zustandes die Schwellenenergie für den EA-Beitrag um diesen Betrag kleiner ist (siehe auch Abb. 6.6). Der Vergleich für die beiden Ionenstrahlen, die unterschiedliche Anteile der beiden metastabilen Ionen aufweisen sollten, zeigt für die Ionen aus der Gaszelle keine Abweichung bei den erwarteten 5,4 eV unterhalb der ersten EA-Schwelle von den Messungen für den EZR-Ionenstrahl. Durch die Höhe der EA-Stufe und den statistischen Fehler der Messung kann man den maximalen Anteil für den 1S -Zustand abschätzen, beträgt die Höhe der EA-Schwelle für den 1S -Zustand mehr als der statistische Fehler der Messung so ist die EA-Stufe für den 1S -Zustand im Verlauf des Wirkungsquerschnittes definitiv erkennbar. Unter der Voraussetzung, dass die EA-Stufe für beide Zustände eine annähernd gleiche Höhe hat, ergibt sich als Obergrenze für den Anteil an metastabilen C^{4+} -Ionen im 1S -Zustand 2,2% für Ionen direkt aus der EZR-Quelle und 11% für die durch Umladung in der Gaszelle erzeugten Ionen. Daher ist anzunehmen, dass in beiden Strahlen fast ausschließlich Ionen im 3S -Zustand vorliegen.

Für einen Vergleich der R-Matrix-Rechnungen mit den indirekten Beiträgen der experimentellen Daten ist eine analoge Bestimmung des „Untergrundes“ durch die direkte Ionisation für die theoretischen Daten nötig. Für die Ergebnisse der R-Matrix-Rechnung, die die gleiche Energieachse wie beim Vergleich der READI-Messungen haben und wie dort mit einer gaußförmigen Verteilung der Breite von 2.0 eV gefaltet sind, wird die direkte Ionisation durch ein Polynom 2. Grades approximiert. Dieser „Untergrund“ wird von dem berechneten Wirkungsquerschnitt subtrahiert. In Abbildung 6.6 ist der so erhaltene indirekte Wirkungsquerschnitt der R-Matrix-Rechnung

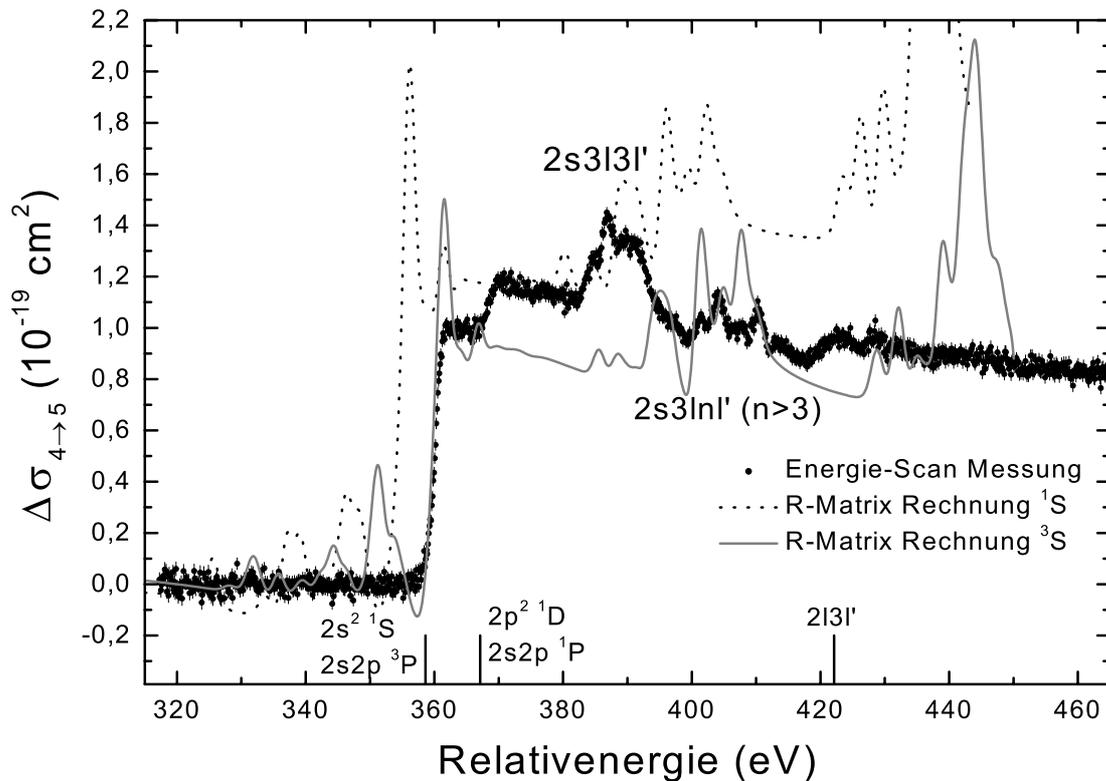


Abbildung 6.6.: Vergleich zwischen Experiment und einer R-Matrix-Rechnung von Berrington *et al.* [Ber99] für die indirekten Beiträge zur Ionisation. Die senkrechten Linien an der Energieachse geben die Anregungsenergie für den jeweiligen Zustand an, die sich aus Messungen der Auger-Spektroskopie ergeben [Sch77].

und der Messung am Ionenstrahl aus dem EZR-Quelle² zum Vergleich dargestellt. Beim Vergleich der indirekten Anteile zwischen dem Ionenstrahl aus der EZR-Quelle und dem aus der Gaszelle in Abb. 6.5, sind diese auf einen Anteil von 100% Ionen im metastabilen Zustand skaliert worden, eine Anpassung der Höhe des indirekten Wirkungsquerschnittes der R-Matrix-Rechnung ist somit nicht erforderlich.

Um die beobachteten Strukturen in den experimentellen Daten identifizieren zu können, sind in Abb. 6.6 durch senkrechte Linien an der Energieachse die Anregungsenergien in die autoionisierenden Zuständen eingezeichnet. Diese Energien ergeben sich aus Messung der Energie der emittierten Auger-Elektronen bei hochangeregten C^{4+} -Ionen [Sch77]. Bei dieser Messung ist die Energie für den Übergang aus dem jeweiligen Zustand in den Grundzustand des C^{5+} -Ions bestimmt worden. Da hier die Anregung aus dem $1s2s\ ^3S$ -Zustand beobachtet wird, muss zu den Auger-Energien

²Die Messungen am Ionenstrahl aus der EZR-Quelle haben eine bessere statistische Genauigkeit, daher werden diese Messung zum Vergleich benutzt

6. Einfachionisation von C^{4+} -Ionen

Zustand	Dieses Experiment	Auger-Spektroskopie [Sch77]
$2s^2\ ^1S$ $2s2p\ ^3P$	$358 \pm 1\ \text{eV}$	$358,6 \pm 1\ \text{eV}$
$2p^2\ ^1D$ $2s2p\ ^1P$	$367,5 \pm 1\ \text{eV}$	$367,1 \pm 1\ \text{eV}$
$2l3l'$	$419,5 \pm 1\ \text{eV}$	$422 \pm 1\ \text{eV}$

Tabelle 6.1.: Anregungsenergie aus dem $1s2s\ ^3S_1$ -Zustand in einige autoionisierenden Zustände.

noch die Ionisierungsenergie von 93,1 eV [Mar] des metastabilen Zustandes addiert werden. Die sich aus den Auger-Messungen ergebenden Energien für die autoionisierenden Zustände sind zusammen mit den aus dem Experiment bestimmten Anregungsenergien³ in Tabelle 6.1 angegeben.

Zur Identifikation der REDA- bzw. READI-Resonanzen in diesem Energiebereich sind die Energien verschiedener Elektronenkonfigurationen des durch den resonanten Einfang entstehenden Hohlzustandes im C^{3+} -Ion mittels des Atomstrukturprogramms GRASP [Dya89] berechnet worden⁴.

Im Verlauf des Wirkungsquerschnittes ist bei 358 eV ein Anstieg, der vermutlich durch die Anregung des K-Schalen Elektrons in den autoionisierenden $2s^2$ bzw. $2s2p\ ^3P$ -Zustand verursacht wird, zu beobachten. Die R-Matrix Resultate für den $1s2s\ ^3S$ -Zustand zeigen ebenfalls deutlich diese Stufe, sowie Resonanzstrukturen unterhalb dieser Stufe. Vermutlich werden diese im Experiment nicht beobachteten Resonanzen durch die Vernachlässigung des radiativen Zerfalls sowie der inelastischen resonanten Streuung in höhere Rydbergzustände in der Rechnung bedingt, ähnlich wie schon bei den C^{3+} -Ionen in Kapitel 5.

Bei 367 eV zeigt sich eine weitere EA-Stufe, deren Anregungsenergie den in der Auger-Spektroskopie beobachteten Autoionisationen aus den $2p^2\ ^1D$ - bzw. $2s2p\ ^3P$ -Zuständen entspricht. Der Beitrag durch diese Anregungsprozesse wird von der R-Matrix-Rechnung nicht gut vorhergesagt, ebenso wie die zwischen 380 eV und 390 eV beobachteten Resonanzstrukturen. Die Berechnungen mit dem GRASP Programm zeigen, dass sich in diesem Energiebereich Zustände befinden, die durch Anregung des K-Schalen Elektrons in die M-Schale mit gleichzeitigem Einfang des stoßenden Elektrons ebenfalls in die M-Schale bevölkert werden. Daher sind die beobachteten Resonanzen zwischen 380 eV und 390 eV durch REDA- bzw. READI-Mechanismen, die über die $2s3l3l'$ -Zustände ablaufen, bedingt. Auf diese Resonanzstrukturen folgt bei 400 eV bis 415 eV eine weitere Gruppe durch REDA- bzw. READI-Mechanismen bedingte Resonanzen. Die Energielage dieser Strukturen entspricht den Energien, die das

³Die Anregungsenergie ist aus dem Einsatzzpunkt für den Anstieg der EA-Beiträge bestimmt worden.

⁴Es sind Energien für 15 verschiedene Konfigurationen des Typs $2snln'l'$ mit $3 \leq n \leq 4$ und $3 \leq n' \leq 5$ berechnet worden

stoßende Elektron für eine resonante Anregung in einen $2s3lnl'$ -Zustand mit $n \geq 4$ haben muss. Der Beitrag der REDA-Prozesse über die $2s3lnl'$ -Zustände wird durch die R-Matrix-Rechnung deutlich überschätzt, die zudem noch bei 395 eV eine Resonanz vorhersagt für die es keine experimentelle Entsprechung gibt.

Für Energien ab 420 eV ist im Verlauf des experimentellen Wirkungsquerschnittes als Struktur nur noch ein Anstieg bei 420 eV zu beobachten. Die Daten aus der Auger-Spektroskopie legen den Schluss nahe, dass es sich hierbei um EA-Prozesse mit der Anregung des C^{4+} -Ions in $2l3l$ -Zustände handelt. Im Gegensatz zum Experiment sagen die R-Matrix-Resultate noch deutliche Resonanzen bei ~ 445 eV voraus. Insgesamt ist eine Diskrepanz zwischen der R-Matrix-Rechnung und den experimentellen Daten für den Energiebereich, in dem EA- und REDA-Prozesse zur Ionisation beitragen, zu beobachten. Eine Erklärung für diese Diskrepanzen muss noch gefunden werden.

6. Einfachionisation von C^{4+} -Ionen

7. Ein- und Mehrfachionisation von Ba^{n+} -Ionen

Neutrales Barium hat die Elektronenkonfiguration $[\text{Kr}]4d^{10}5s^25p^66s^2$, wobei $[\text{Kr}]$ die Elektronenkonfiguration von Krypton bezeichnet. In Abbildung 7.1 ist die Einfachionisation von Ba^{4+} -Ionen, die mit der EZR-Ionenquelle erzeugt worden sind, von der Schwelle bis 1000 eV Elektronenenergie dargestellt. In früheren Untersuchungen zur Ein- und Zweifachionisation von Ba^{1+} , Ba^{2+} und Ba^{3+} [Mül88b, Tin91, Pea89, Pea93]

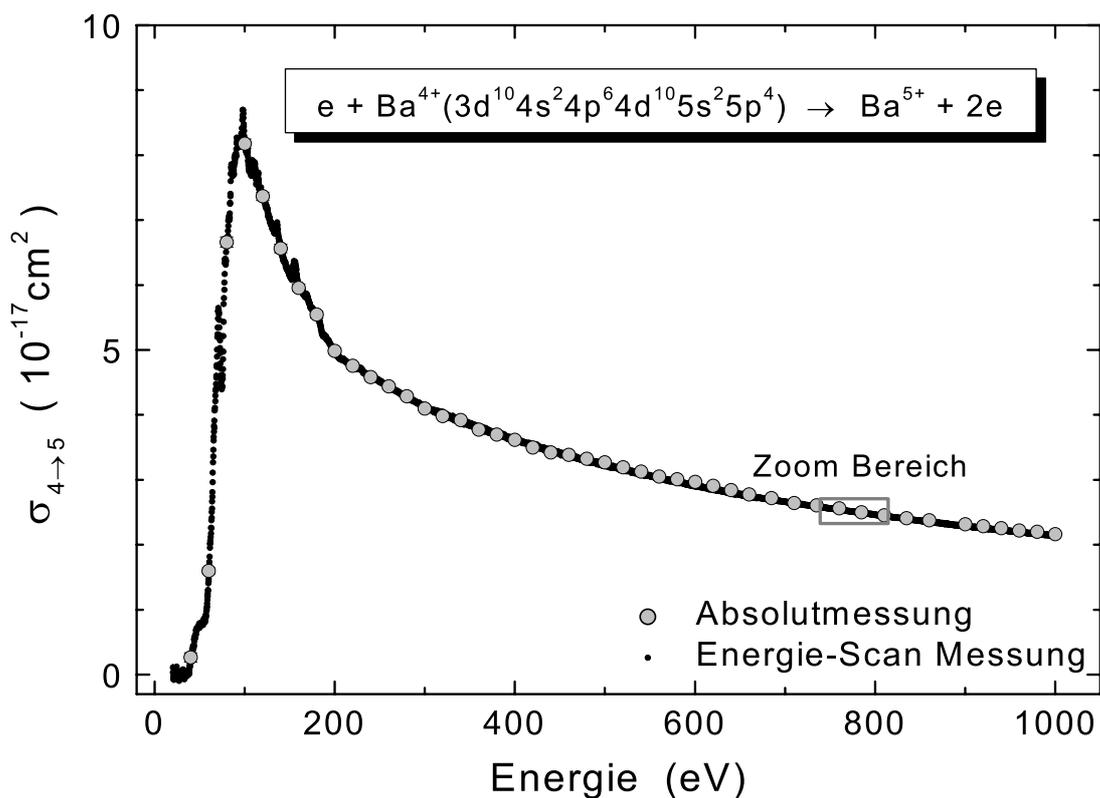


Abbildung 7.1.: Einfachionisation von Ba^{4+} -Ionen. Sowohl für die Energie-Scan-Messung als auch für die Absolutmessung ist der statistische Fehler eingezeichnet.

7. Ein- und Mehrfachionisation von Ba^{n+} -Ionen

ist speziell das Verhalten der äußeren Schalen untersucht worden. Resonante und indirekte Prozesse tragen für diese Schalen in einem Energiebereich bis zu 200 eV zum Wirkungsquerschnitt bei, wie in Abbildung 7.1 zu erkennen ist. Im Gegensatz zu diesen Untersuchungen wird bei den hier vorgestellten Messungen, die Bildung und der Zerfall sehr hoch angeregter Bariumionen untersucht. Dazu wird die Anregung eines $3d$ -Elektrons in eine äußere Schale mit gleichzeitigem Einfang des stoßenden Elektrons betrachtet. Das hoch angeregte Bariumion kann durch sukzessive Autoionisationen zerfallen und somit Strukturen im Wirkungsquerschnitt für die Ein- bzw. Mehrfachionisation verursachen. Erste Messungen an Ba^{1+} und Ba^{2+} von Hofmann *et al.* [Hof91b] zeigen solche Strukturen. Ziel dieser Arbeit war es eine systematische Untersuchung von allen Bariumionen für die solche Prozesse möglich sind vorzunehmen.

Der Energiebereich, in dem Signaturen für diese Effekte beim Ba^{4+} -Ion erwartet werden, ist in Abbildung 7.1 als Zoom-Bereich markiert und in Abbildung 7.2 detailliert dargestellt. Bei den Elektronenenergien um 755 eV und 770 eV sind schwache Strukturen im Verlauf des Wirkungsquerschnittes zu erkennen. Approximiert man den Wirkungsquerschnitt außerhalb der Strukturen durch eine Gerade und subtrahiert diese

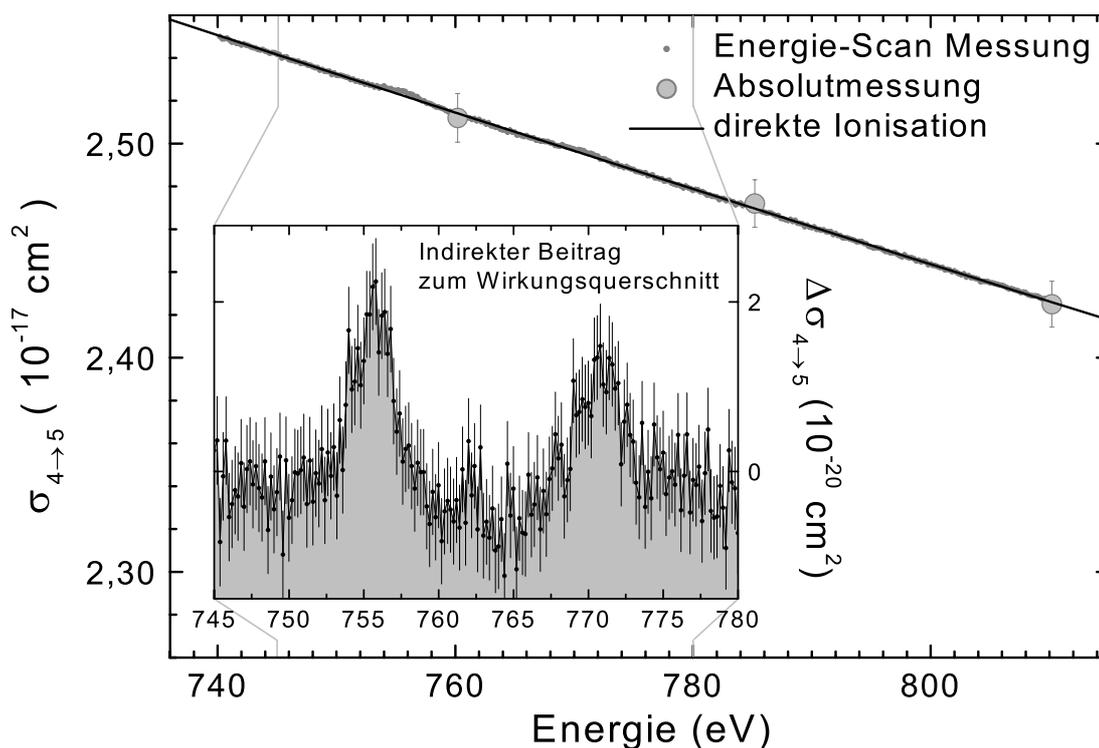


Abbildung 7.2.: Darstellung des Zoom-Bereiches aus Abbildung 7.1. Als Abschätzung für die direkte Ionisation ist eine Gerade an die Daten angepaßt worden, durch Subtraktion ergibt sich der indirekte Beitrag $\Delta\sigma$ in der Ausschnittsvergrößerung.

vom Wirkungsquerschnitt, so erhält man den indirekten Beitrag in der Ausschnittsvergrößerung in Abbildung 7.2. Dort sind zwei deutliche Maxima bei 755 eV und 770 eV zu erkennen. Diese entsprechen der Anregung eines $3d_{3/2}$ bzw. $3d_{5/2}$ Elektrons in eine äußere Schale bei gleichzeitigem Einfang des stoßenden Elektrons. Der dabei entstehende hoch angeregte Zustand des Ba^{3+} -Ions kann nun über viele verschiedene Kanäle zerfallen, von denen zur Einfachionisation nur die Kanäle beitragen, in denen genau zwei Elektronen das hochangeregte Ion verlassen. Kanäle in denen mehr als zwei Elektronen das Ion verlassen tragen zur Mehrfachionisation bei.

	Ba^{1+}	Ba^{2+}	Ba^{3+}	Ba^{4+}	Ba^{5+}	Ba^{6+}	Ba^{7+}	Ba^{8+}	Ba^{9+}	Ba^{10+}	Ba^{11+}	Ba^{12+}	Ba^{13+}
einfach		$\sigma_{2 \rightarrow 3}$	$\sigma_{3 \rightarrow 4}$	$\sigma_{4 \rightarrow 5}$	$\sigma_{5 \rightarrow 6}$	$\sigma_{6 \rightarrow 7}$	$\sigma_{7 \rightarrow 8}$	$\sigma_{8 \rightarrow 9}$	$\sigma_{9 \rightarrow 10}$	$\sigma_{10 \rightarrow 11}$	$\sigma_{11 \rightarrow 12}$	$\sigma_{12 \rightarrow 13}$	$\sigma_{13 \rightarrow 14}$
zweifach	$\sigma_{1 \rightarrow 3}$	$\sigma_{2 \rightarrow 4}$	$\sigma_{3 \rightarrow 5}$	$\sigma_{4 \rightarrow 6}$	$\sigma_{5 \rightarrow 7}$	$\sigma_{6 \rightarrow 8}$	$\sigma_{7 \rightarrow 9}$	$\sigma_{8 \rightarrow 10}$	$\sigma_{9 \rightarrow 11}$	$\sigma_{10 \rightarrow 12}$	$\sigma_{11 \rightarrow 13}$	$\sigma_{12 \rightarrow 14}$	
dreifach	$\sigma_{1 \rightarrow 4}$	$\sigma_{2 \rightarrow 5}$	$\sigma_{3 \rightarrow 6}$	$\sigma_{4 \rightarrow 7}$	$\sigma_{5 \rightarrow 8}$	$\sigma_{6 \rightarrow 9}$	$\sigma_{7 \rightarrow 10}$	$\sigma_{8 \rightarrow 11}$	$\sigma_{9 \rightarrow 12}$	$\sigma_{10 \rightarrow 13}$			
vierfach	$\sigma_{1 \rightarrow 5}$	$\sigma_{2 \rightarrow 6}$	$\sigma_{3 \rightarrow 7}$	$\sigma_{4 \rightarrow 8}$	$\sigma_{5 \rightarrow 9}$	$\sigma_{6 \rightarrow 10}$	$\sigma_{7 \rightarrow 11}$						
fünffach	$\sigma_{1 \rightarrow 6}$	$\sigma_{2 \rightarrow 7}$	$\sigma_{3 \rightarrow 8}$	$\sigma_{4 \rightarrow 9}$	$\sigma_{5 \rightarrow 10}$	$\sigma_{6 \rightarrow 11}$							
sechsfach	$\sigma_{1 \rightarrow 7}$	$\sigma_{2 \rightarrow 8}$	$\sigma_{3 \rightarrow 9}$	$\sigma_{4 \rightarrow 10}$									
siebenfach	$\sigma_{1 \rightarrow 8}$	$\sigma_{2 \rightarrow 9}$											

Tabelle 7.1.: Übersicht über die gemessenen Wirkungsquerschnitte zur k-fach Ionisation von Ba^{n+} -Ionen. Die Wirkungsquerschnitte sind in dem Energiebereich gemessen worden, in dem die resonante Anregung eines $3d$ -Elektrons indirekte Ionisationsbeiträge verursacht.

Die über resonante Anregung eines $3d$ -Elektrons verlaufenden Ionisationsprozesse sind allgemein bei n -fach geladenen Bariumionen möglich, solange im Ba^{n+} -Ion noch Elektronen außerhalb der $3d$ -Schale vorhanden sind und die dem Ion zugeführte Anregungsenergie für die nach dem Einfang des Elektrons notwendige Emission von zwei Elektronen ausreicht. Berechnungen mit dem Atomstrukturprogramm GRASP [Dya89] ergeben, dass maximal für Ba^{13+} -Ionen noch Beiträge zum Ionisationsquerschnitt über die resonante Anregung eines $3d$ -Elektrons möglich sind. Die maximal beobachtbare Mehrfachionisation kann aus der Energie, die durch die Anregung dem Bariumion zugeführt wird, und aus dem Ionisationspotential (s. Tab. 7.2) des nach dem Einfang vorliegenden $Ba^{(n-1)+}$ -Ions abgeschätzt werden. Zur systematischen Untersuchung sind alle möglichen Ionisationsquerschnitte mit einem möglichen Beitrag durch die resonante Anregung eines $3d$ -Elektrons untersucht worden. In Tabelle 7.1 sind von den untersuchten Wirkungsquerschnitten diejenigen aufgeführt, für die experimentell ein Beitrag durch die resonante Anregung eines $3d$ -Elektrons bestimmt werden konnte. Ein Beitrag der resonanten Anregung ist je nach Ladungszustand in der Ein- bis hin zur Siebenfachionisation zu beobachten. In den nun folgenden Abbildungen sind die

7. Ein- und Mehrfachionisation von Ba^{n+} -Ionen

Ergebnisse der Energie-Scan-Messung (schwarz) sowie der Absolutmessungen (hellgrau) für die in Tabelle 7.1 aufgeführten Wirkungsquerschnitte dargestellt.

Ion	I_P [Car70]	I_P [Dya89]	Ion	I_P [Car70]	I_P [Dya89]
Ba	4,44 eV	4,28 eV	Ba ⁷⁺	107,1 eV	98,7 eV
Ba ¹⁺	9,793 eV	9,363 eV	Ba ⁸⁺	139,2 eV	128,4 eV
Ba ²⁺	34,45 eV	35,95 eV	Ba ⁹⁺	155,7 eV	144,7 eV
Ba ³⁺	48,4 eV	47,4 eV	Ba ¹⁰⁺	232,2 eV	242,5 eV
Ba ⁴⁺	62,35 eV	58,58 eV	Ba ¹¹⁺	266,0 eV	271,0 eV
Ba ⁵⁺	76,3 eV	71,5 eV	Ba ¹²⁺	299,8 eV	297,7 eV
Ba ⁶⁺	92,53 eV	84,19 eV	Ba ¹³⁺	333,6 eV	328,0 eV

Tabelle 7.2.: Ionisationspotentiale für Ba^{n+} -Ionen. Die Werte in der linken Spalten sind den tabellierten Werten aus [Car70] entnommen, die der rechten Spalte wurden im Rahmen dieser Arbeit unter Verwendung des Atomstrukturprogramms GRASP [Dya89] berechnet.

Bei der Ionisation von Ba^{1+} -Ionen sind die Wirkungsquerschnitte für die Zwei- bis Siebenfachionisation im Energiebereich von 700 bis 900 eV bestimmt worden (s. Abb. 7.3). Rechnerisch ist ein Beitrag durch die resonante $3d$ -Anregung bis zur Neunfachionisation zu erwarten, experimentell ist jedoch schon der Wirkungsquerschnitt für die Achtfachionisation wegen zu kleiner Signalraten nicht mehr messbar¹. Für die Dreifachionisation und alle höheren Ionisationsstufen sind zwei deutliche Resonanzpeaks bei 782,8 eV und bei 798 eV zu erkennen. Die hellgrauen Linien in den Abbildungen verdeutlichen, dass die Resonanzen in allen Wirkungsquerschnitten bei der gleichen Energie auftreten. Dies muss der Fall sein, wenn die Beiträge aus verschiedenen Zerfallskanälen derselben angeregten Bariumzustände stammen. Deren Anregungsenergie ist durch den resonanten Einfang des Elektrons vorgegeben. In der Zweifachionisation ist kein signifikanter Beitrag der Anregung mehr zu erkennen, auch wenn man analog zu Abb. 7.2 den Anteil der direkten Ionisation abschätzt und subtrahiert. Da für die Einfachionisation eine noch größere Dominanz des direkten Anteils der Ionisation und somit in endlicher Messzeit kein sichtbarer Beitrag der resonanten Prozesse erwartet wird, ist auf eine Bestimmung dieses Wirkungsquerschnittes verzichtet worden.

Für die Ionisation von Ba^{2+} -Ionen ist der Wirkungsquerschnitt im Energiebereich von 690 bis 890 eV jeweils für die Zwei- bis Siebenfachionisation in Abb. 7.4 dargestellt. Die Untersuchung der Einfachionisation ist, um eine bessere statistische Genauigkeit zu erreichen, auf den Energiebereich von 750 bis 810 eV beschränkt. Jedoch

¹Laut dem statistischen Modell in Kapitel 7.2 ist der zu erwartende Beitrag durch die resonante Anregung für die Achtfachionisation um ungefähr einen Faktor 25 kleiner. Dies würde einen Wirkungsquerschnitt im Bereich von $\leq 10^{-22} \text{ cm}^2$ erwarten lassen. Wirkungsquerschnitte dieser Größenordnungen sind mit der verwendeten Apparatur kaum noch zugänglich.

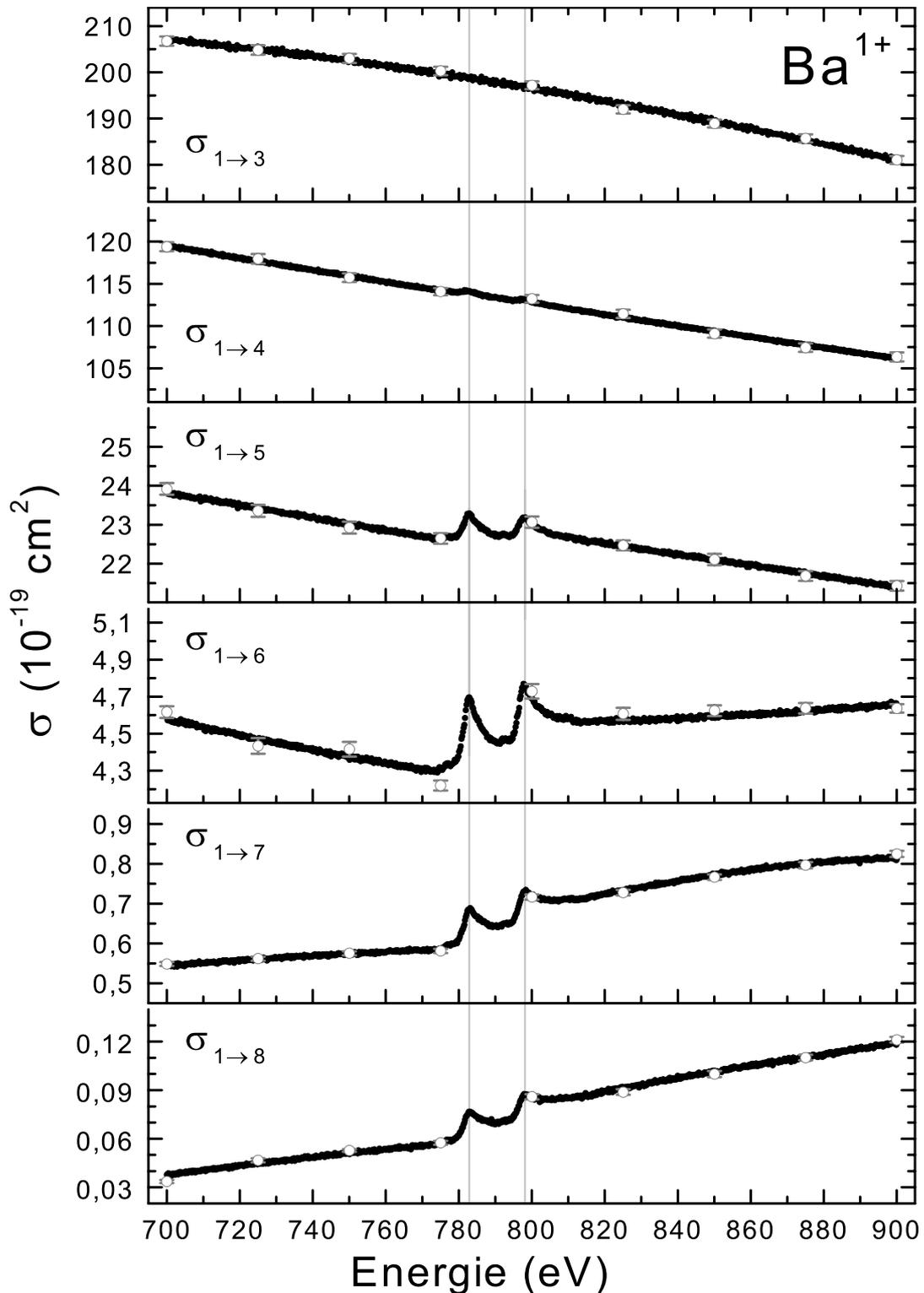


Abbildung 7.3.: Wirkungsquerschnitte für die Ionisation von Ba^{1+} . Die beiden Maxima bei 782,8 und 798,2 eV sind auf den resonanten Einfang des freien Elektrons bei gleichzeitiger Anregung eines $3d_{3/2}$ bzw. $3d_{5/2}$ Elektrons zurückzuführen. (Absolutmessungen hellgrau, Scanmessungen schwarz, jeweils mit statistischem Fehler).

7. Ein- und Mehrfachionisation von Ba^{n+} -Ionen

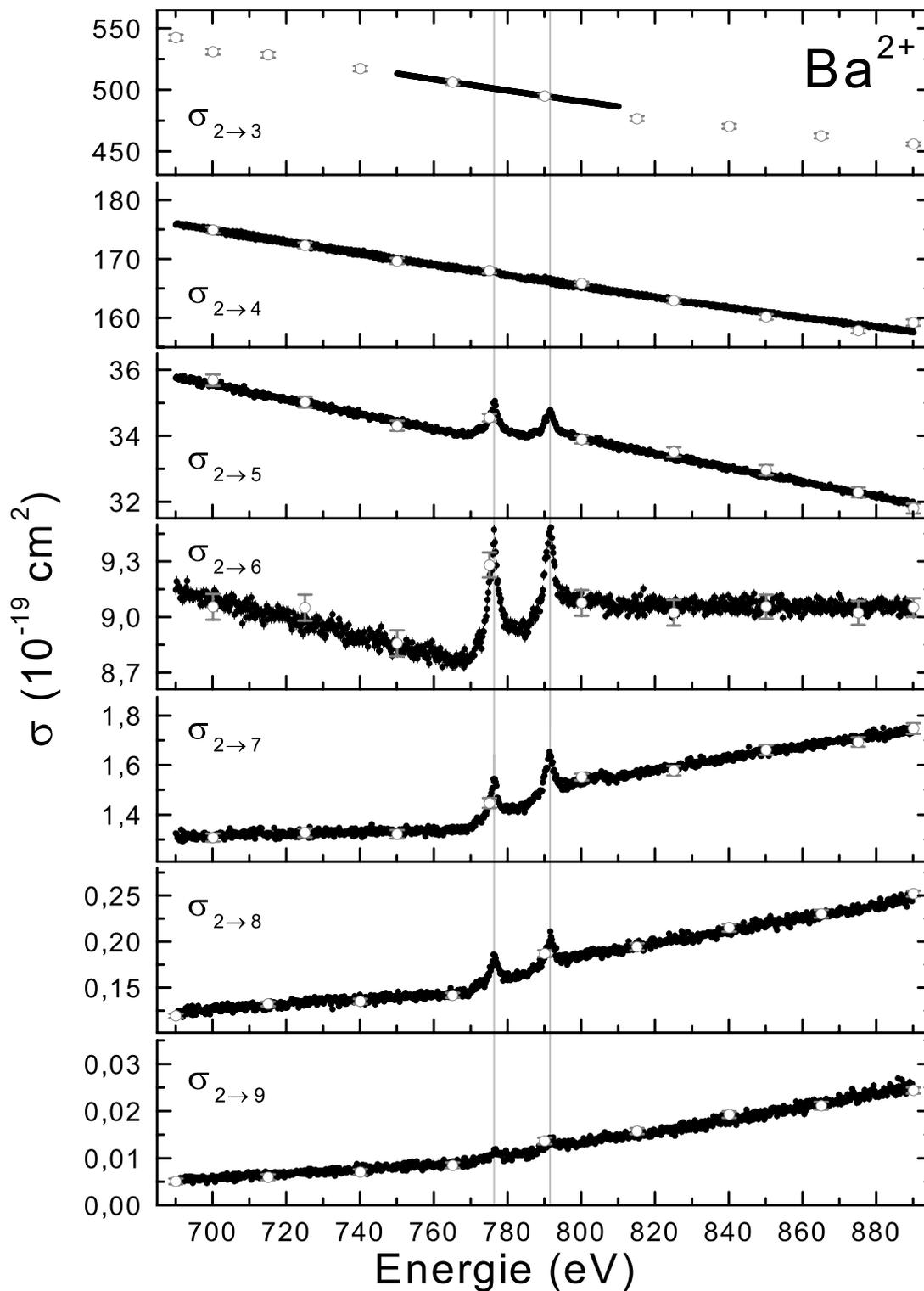


Abbildung 7.4.: Wirkungsquerschnitte für die Ionisation von Ba^{2+} . Bei der Einfachionisation ist der Energiebereich eingeschränkt worden, um eine höhere statistische Genauigkeit zu erreichen. Wie in Abb. 7.3 sind die Resonanzen auf die resonante Anregung eines $3d_{3/2}$ bzw. $3d_{5/2}$ Elektrons zurückzuführen. (Absolutmessungen hellgrau, Scanmessungen schwarz, jeweils mit statistischem Fehler)

ergibt sich auch mit einer dadurch erreichten statistischen Genauigkeit von 0,05% kein sichtbarer Beitrag der resonanten Prozesse bei der Einfachionisation. Für die höheren Ionisationen trägt bei 776,5 eV und 791,3 eV die resonante Anregung des $3d_{3/2}$ bzw. $3d_{5/2}$ -Elektrons zum Wirkungsquerschnitt sichtbar bei. Gegenüber den Energienlagen der Resonanzen bei der Ionisation von Ba^{1+} -Ionen werden diese hier ca. 4,5 eV tiefer beobachtet. Dies spiegelt die etwas anderen Bindungsverhältnisse im Ba^{2+} -Ion verglichen mit Ba^{1+} wieder. Für die energetisch mögliche Achtfachionisation war im Experiment kein Ionisationssignal auffindbar.

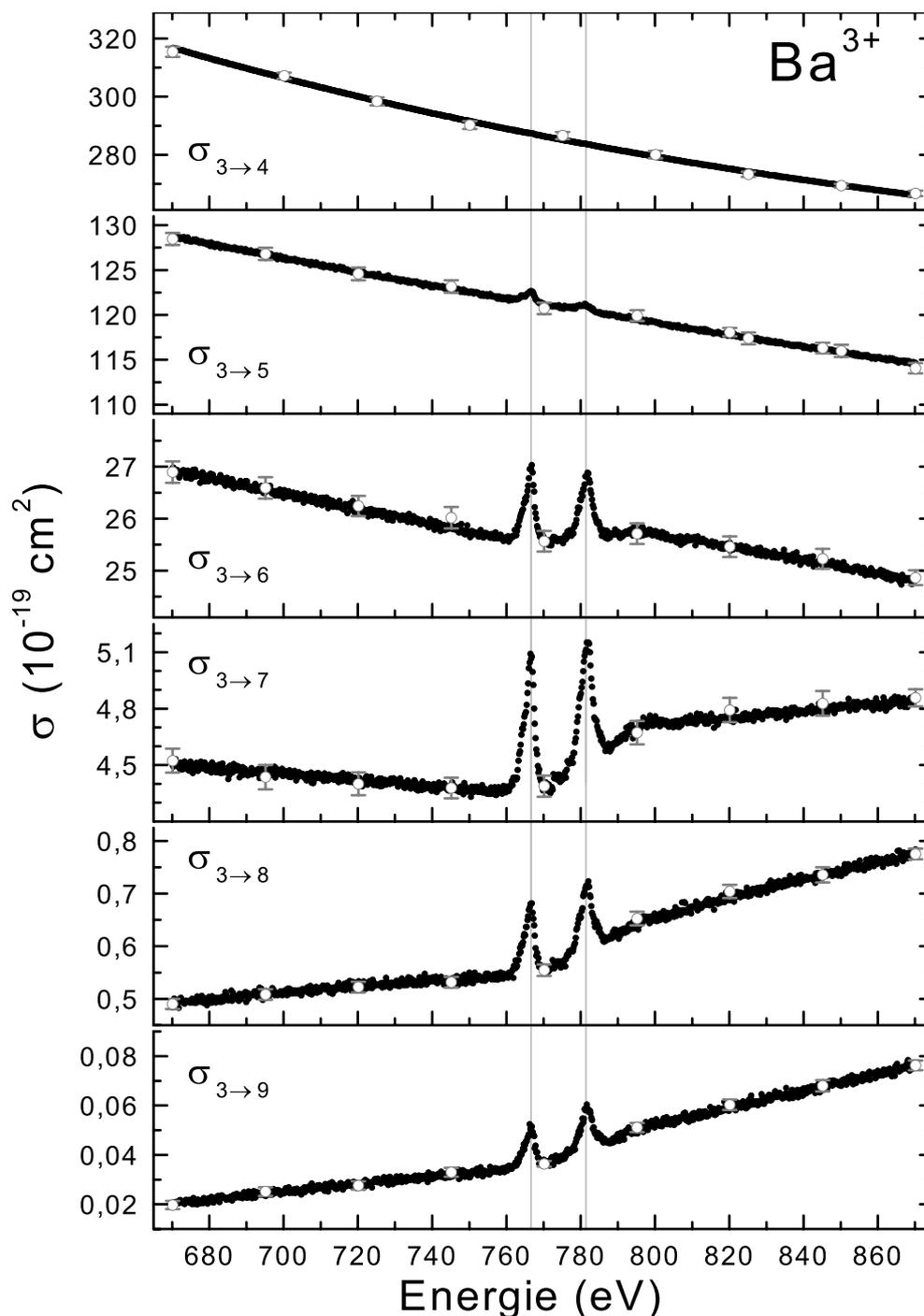
Die Ionisation von Ba^{3+} - und Ba^{4+} -Ionen weist wie schon die Ionisation der ersten beiden Ladungszustände zwei resonante Beiträge zur jeweiligen Ionisationsstufe auf (s. Abb. 7.5,7.6). Möglich ist im Falle von Ba^{3+} neben der beobachteten Sechsfachionisation noch die experimentell nicht beobachtete Siebenfachionisation. Für Ba^{4+} reicht die durch den resonanten Einfang übertragene Energie nicht mehr aus, um eine Siebenfachionisation zu beobachten. Hier sind die Wirkungsquerschnitte für alle Mehrfachionisationen mit Beiträgen durch die $3d$ -Anregung experimentell bestimmt. Bei Ba^{4+} tritt auf der Hochenergieflanke des zweiten Peaks ein weiterer Peak auf. Dies ist besonders deutlich bei der Vierfachionisation. Es gibt zwei mögliche Erklärungen für diese zusätzlichen Strukturen. Einmal ändern sich mit zunehmendem Ladungszustand die Energien der durch die Anregung bevölkerten angeregten Zustände. Aufgrund der experimentellen Energieauflösung werden die einzelnen Resonanzzustände durch die Energieverteilung im Elektronenstrahl verschmiert. Wird nun durch den steigenden Ladungszustand der relative Abstand zwischen verschiedenen Resonanzen größer, so werden vorher nicht getrennt sichtbare Resonanzen experimentell auflösbar und treten im Wirkungsquerschnitt als individuelle Peaks hervor. Eine andere Erklärung für die sich mit dem Ladungszustand ändernde Resonanzstruktur ist, dass sich die Elektronenkonfiguration des Ba^{n+} -Ions ändert. So ist für Ba^{1+} und Ba^{2+} keine Anregung bzw. kein Einfang in die $5p$ -Schale möglich, da diese gefüllt ist. Für höhere Ladungszustände ist ein dielektronischer Einfang in die $5p$ -Schale möglich, der eventuell für die neuen Strukturen bei höheren Ladungszuständen verantwortlich sein könnte. Neben dem Auftreten dieser zusätzlichen Zustände können die Wahrscheinlichkeiten für die Bevölkering der jeweiligen Zustände vom Ladungszustand abhängen. Daher sind für verschiedene Ladungszustände neben neuen Strukturen auch Änderungen in den relativen Intensitäten der beobachteten Peaks möglich.

Im Prinzip könnten diese Hypothesen mit Hilfe theoretischer Berechnungen überprüft werden. Die zuverlässige Berechnung von Resonanzenergien in Systemen mit vielen Elektronen und mehreren offenen Unterschalen sind allerdings sehr schwierig. Versuche, dies mit Hilfe des GRASP-Programms [Dya89] durchzuführen, führten nur für wenige Konfigurationen zu einem Ergebnis. Bei der Berücksichtigung von Konfigurationswechselwirkungen überstieg die Zahl der möglichen Zustände entweder das vom Programm handhabbare Maß oder es ergab sich keine Konvergenz des selbstkonsistenten Berechnungsverfahrens. Eine systematische Betrachtung der hier beobachteten Strukturen ist mit den erhaltenen Ergebnissen nicht durchführbar.

Für die Ladungszustände Ba^{5+} bis Ba^{9+} sind die Ergebnisse der Messungen in

7. Ein- und Mehrfachionisation von Ba^{n+} -Ionen

den Abbildungen 7.7 bis 7.11 dargestellt. Bei diesen Ladungszuständen sind jeweils alle Ionisationsstufen berücksichtigt, für die ein Beitrag durch die Anregung eines $3d$ -Elektrons energetisch erwarten werden kann. Alle Wirkungsquerschnitte weisen deutliche Resonanzstrukturen auf. Im Gegensatz zu den niedriger geladenen Ionen sind hier mehr als nur zwei Peaks deutlich zu erkennen, wobei auch hier die Energie-lage der Peaks innerhalb eines Ladungszustandes für alle Ionisationsprozesse gleich ist. Alle Strukturen für ein Ion entsprechen also verschiedenen Zerfallskanälen jeweils desselben angeregten Zustandes.



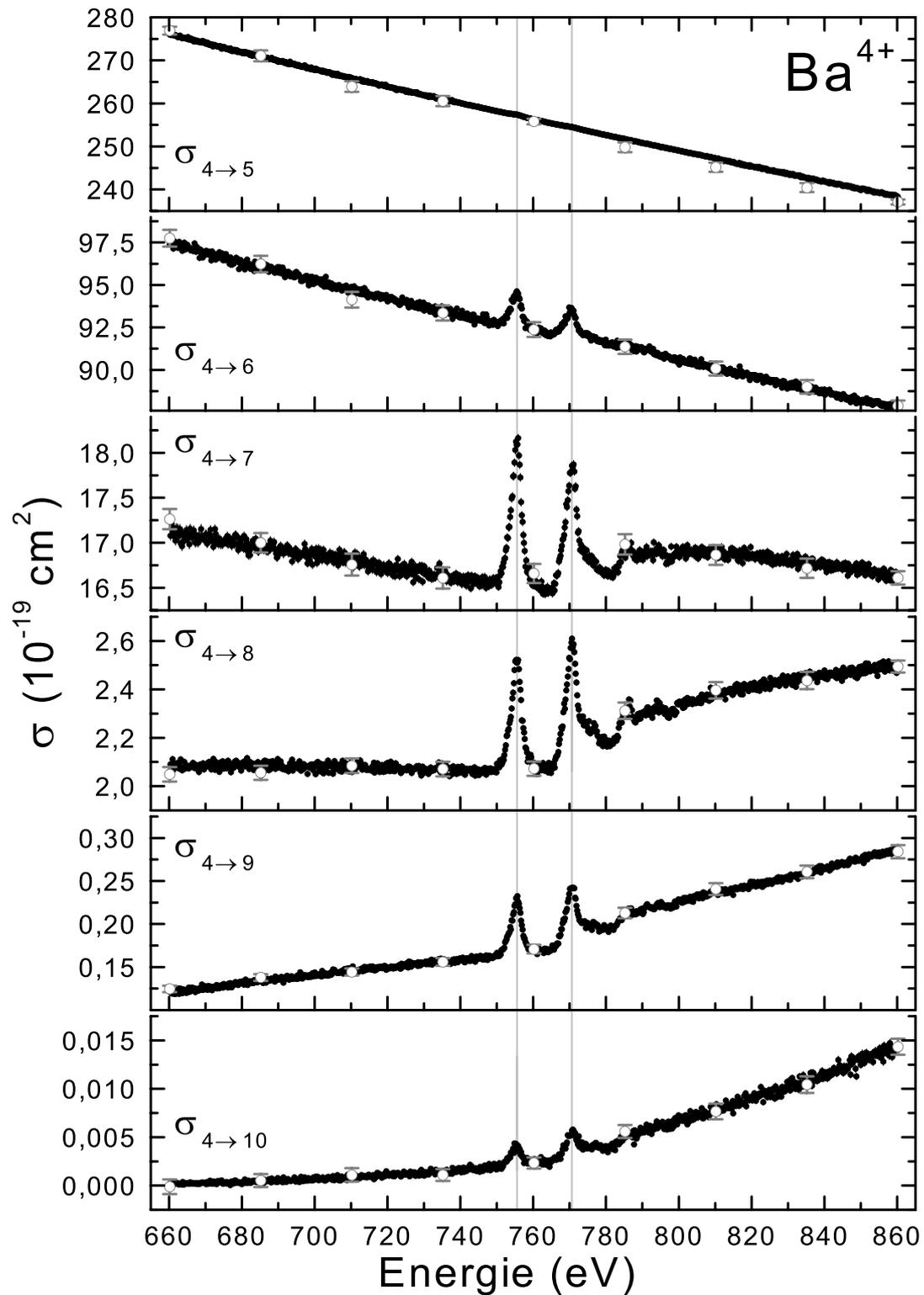


Abbildung 7.6.: Wirkungsquerschnitte für die Ionisation von Ba^{4+} . (Absolutmessungen hellgrau, Scanmessungen schwarz, jeweils mit statistischem Fehler)

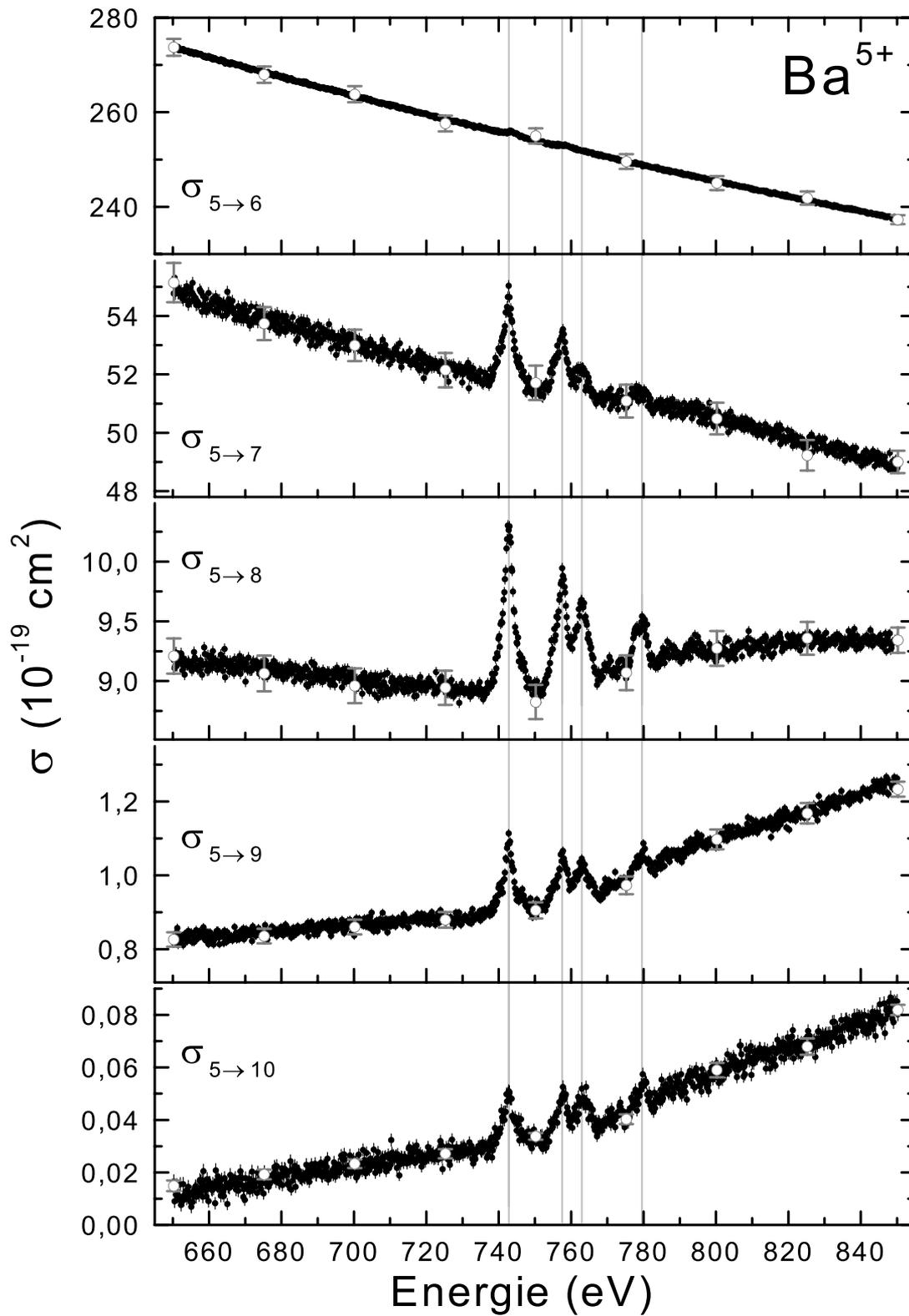


Abbildung 7.7.: Wirkungsquerschnitte für die Ionisation von Ba^{5+} . (Absolutmessungen hellgrau, Scanmessungen schwarz, jeweils mit statistischem Fehler)

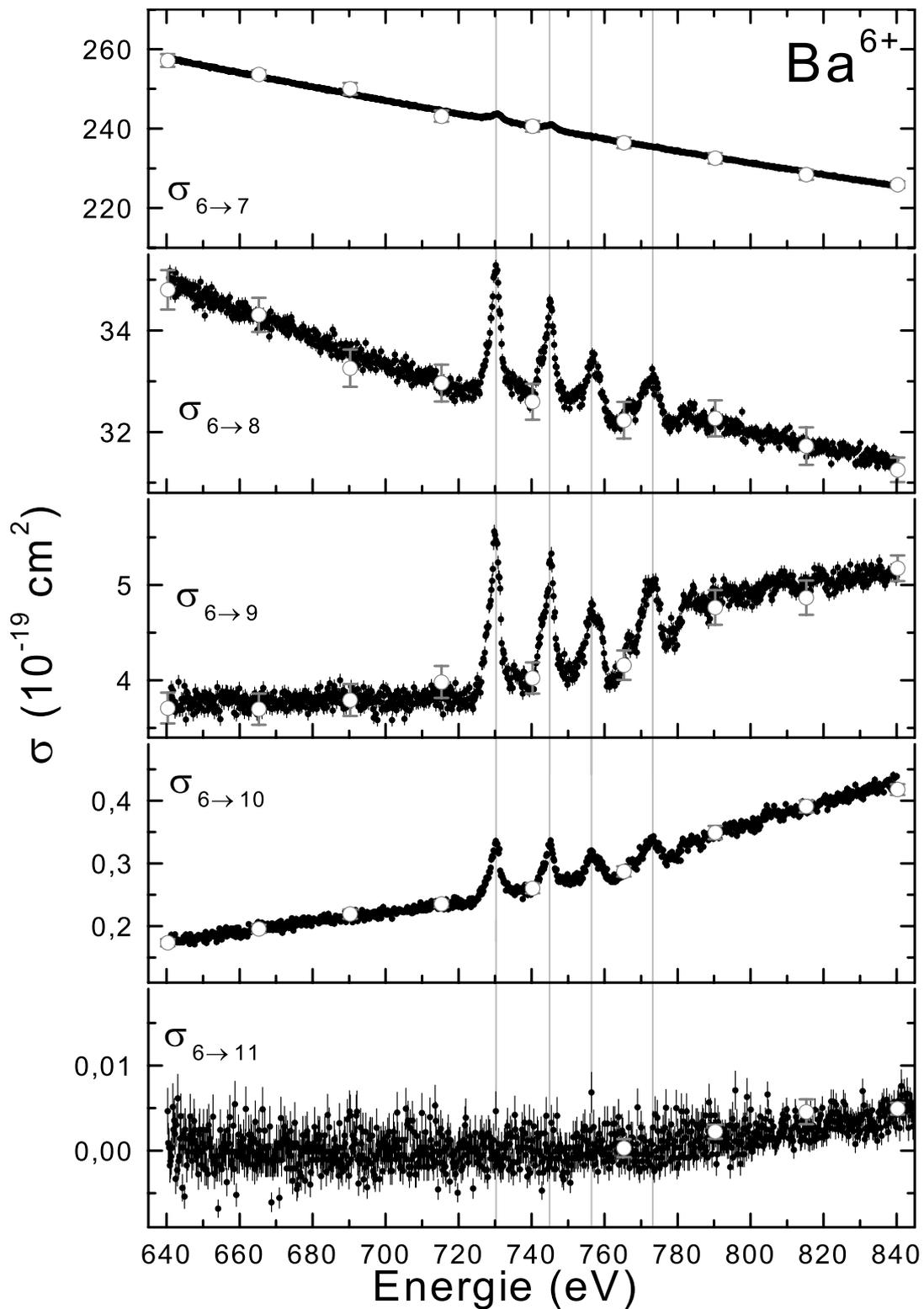


Abbildung 7.8.: Wirkungsquerschnitte für die Ionisation von Ba^{6+} . (Absolutmessungen hellgrau, Scanmessungen schwarz, jeweils mit statistischem Fehler)

7. Ein- und Mehrfachionisation von Ba^{n+} -Ionen

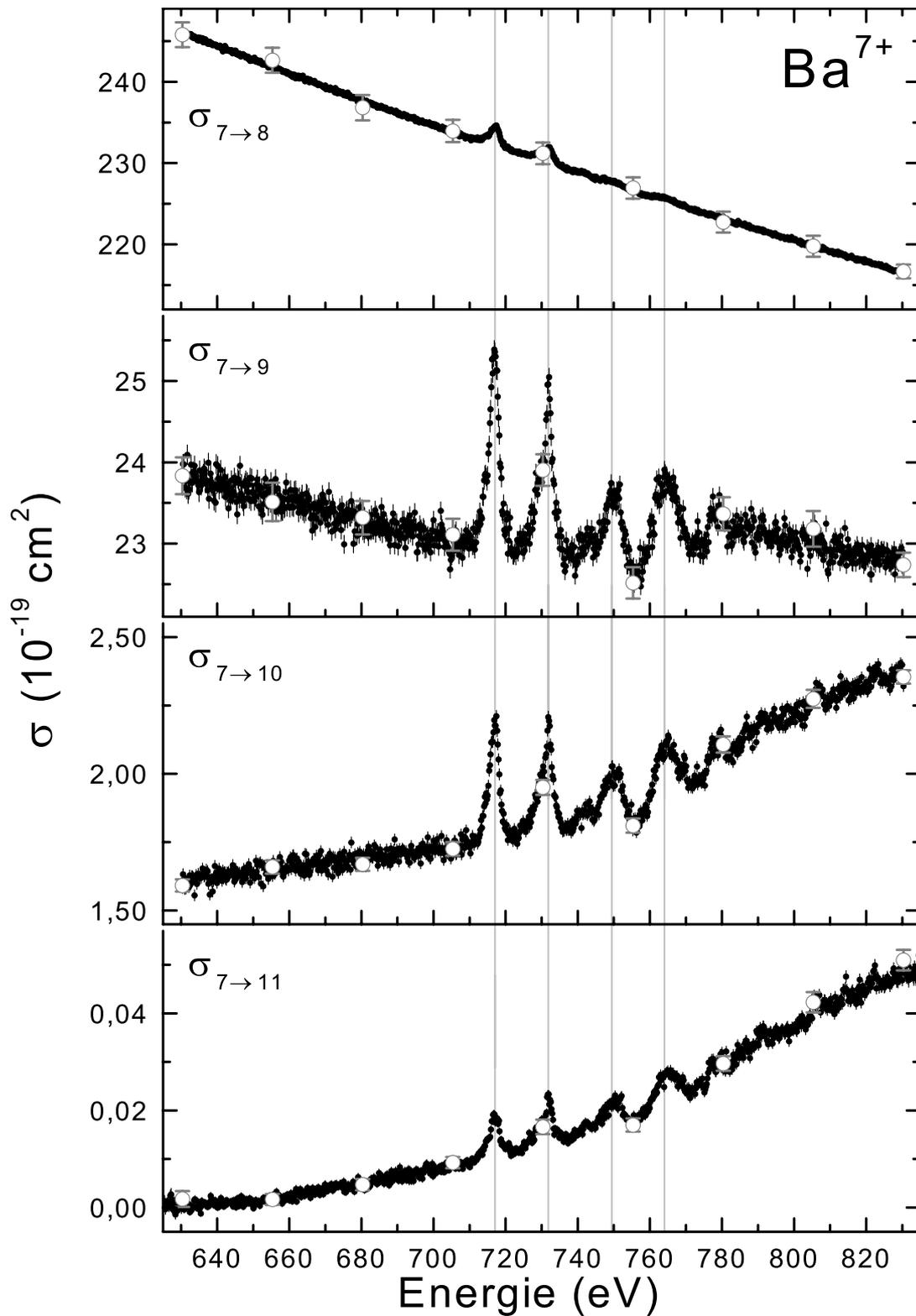


Abbildung 7.9.: Wirkungsquerschnitte für die Ionisation von Ba^{7+} . (Absolutmessungen hellgrau, Scanmessungen schwarz, jeweils mit statistischem Fehler)

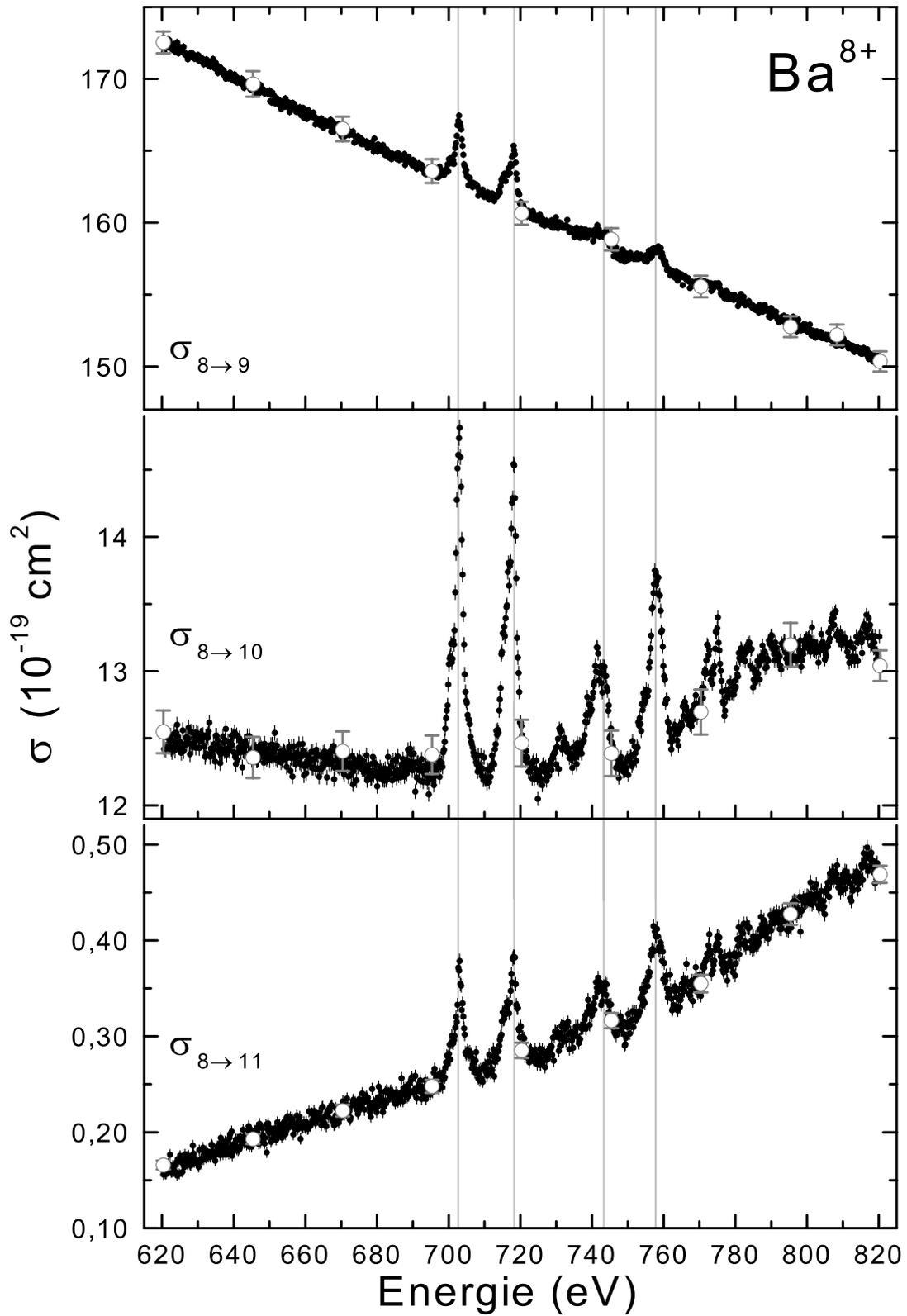


Abbildung 7.10.: Wirkungsquerschnitte für die Ionisation von Ba^{8+} . (Absolutmessungen hellgrau, Scanmessungen schwarz, jeweils mit statistischem Fehler)

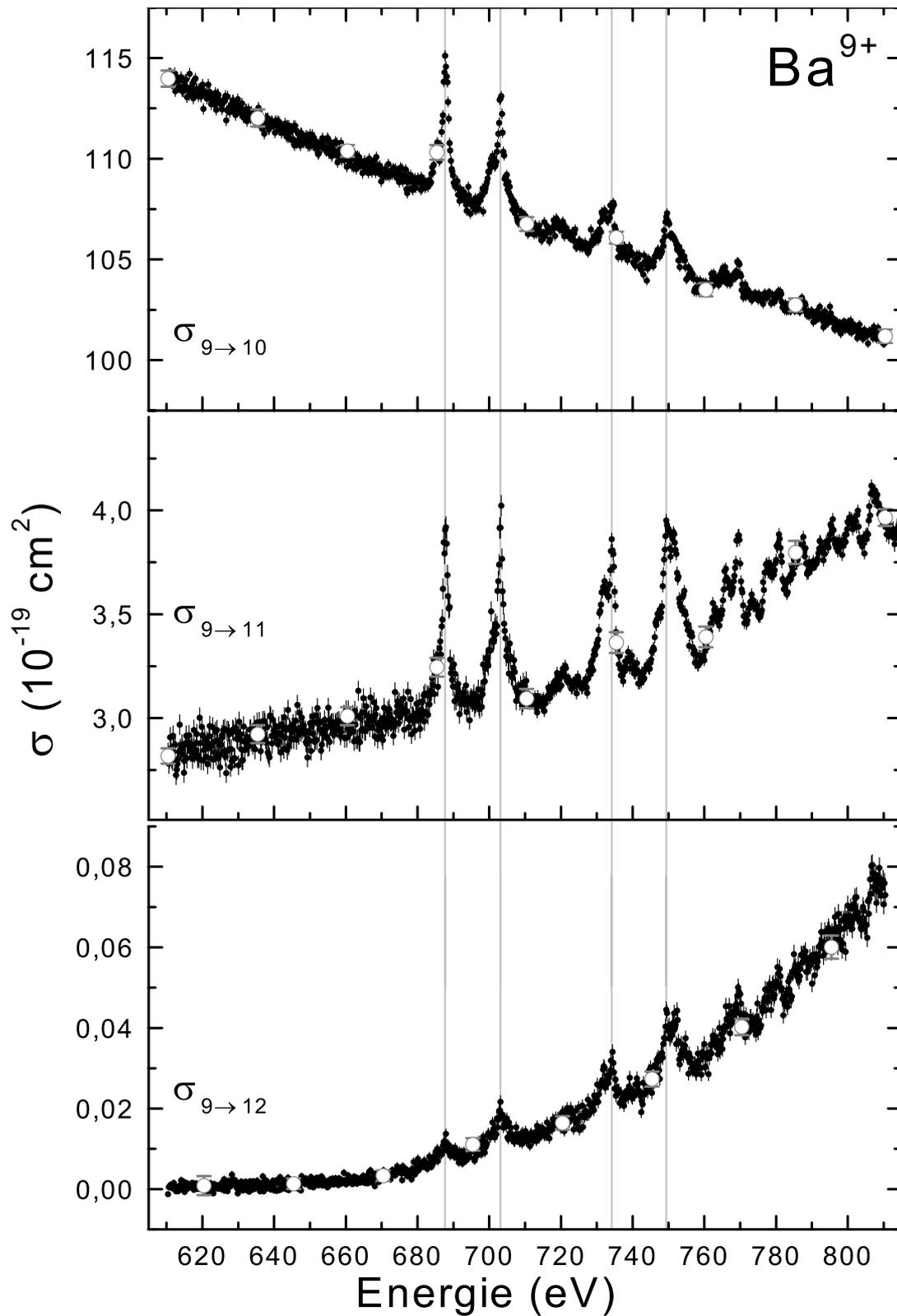
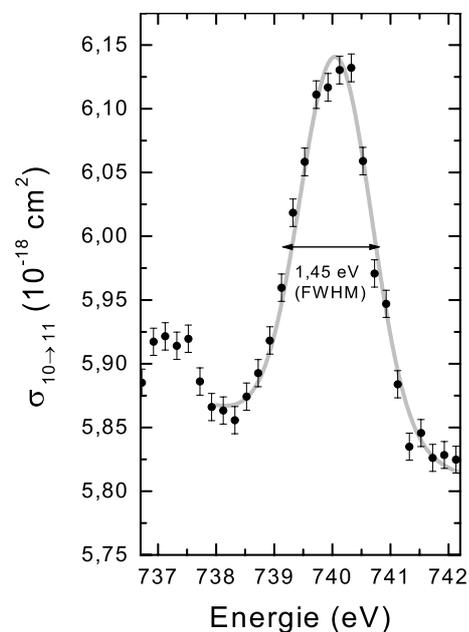


Abbildung 7.11.: Wirkungsquerschnitte für die Ionisation von Ba^{9+} . (Absolutmessungen hellgrau, Scanmessungen schwarz, jeweils mit statistischem Fehler)

In den in Abbildung 7.3 bis 7.11 gezeigten Wirkungsquerschnitten verschieben sich die Resonanzlagen zu immer kleineren Energien (siehe auch Abb. 7.16 in Kap. 7.1). Durch diese Verschiebung gelangen ab Ba^{10+} -Ionen die resonanten Prozesse, die mit der Anregung eines $3p$ -Elektrons verbunden sind, in den mit der hier verwendeten Elektronenkanone experimentell zugänglichen Bereich. Für die niedrigeren Ladungszustände liegen diese oberhalb der maximal möglichen Elektronenenergie von ~ 1000 eV. Um die $3p$ -Resonanzen mit in die Messung einzubeziehen, wurde die Ionisation von Ba^{10+} -Ionen über einen größeren Energiebereich bestimmt. Bei den in Abb. 7.12 dargestellten Wirkungsquerschnitten sind die Anregungen eines $3d$ -Elektrons in der Ein- bzw. Zweifachionisation bei Energien von 660 bis 790 eV zu erkennen. Das Ionisationspotential für die Dreifachionisation eines Ba^{10+} -Ions beträgt nach Tabelle 7.2 für die Berechnungen mit dem GRASP-Programm 811 eV bzw. 798 eV [Car70]. Die Resonanzen der $3d$ -Elektronen befinden sich unterhalb dieser Energien und sind daher in der Dreifachionisation nicht beobachtbar. Eine Rechnung mit dem GRASP-Program ergibt für die Anregung eines $3p$ -Elektrons in die $4f$ -Schale bei gleichzeitigem Einfang ebenfalls in die $4f$ -Schale 69 Zustände mit Energien zwischen 954 eV und 1038 eV. Die Resonanzstrukturen oberhalb von 900 eV können daher der Anregung eines $3p$ -Elektrons zugeordnet werden. Durch den dielektronischen Einfang mit Anregung eines $3p$ -Elektrons hat das entstandene angeregte Ba^{9+} -Ion ausreichend Energie, um vier Elektronen durch Augerprozesse zu emittieren. Daher sind in der Dreifachionisation die Beiträge dieser Zerfälle im Gegensatz zu denen der Anregung eines $3d$ -Elektrons noch messbar und sogar deutlich sichtbar.

Bei der Einfachionisation von Ba^{10+} tritt bei 740 eV die schmalste beobachtete Resonanz auf. In der nebenstehenden Abbildung ist an diese Resonanz ein gaußförmiger Peak mit einer Breite von 1,45 eV (FWHM) (graue Kurve) angefitet worden. Diese Breite stellt eine Obergrenze für die experimentelle Energieauflösung bei einer Elektronenenergie um 740 eV dar.

Für die noch höheren Ladungszustände ist ein Beitrag durch Autoionisationen nach einem dielektronischen Einfang unter Beteiligung eines $3d$ -Elektrons nur bis zum Ba^{13+} zu erwarten. Die Wirkungsquerschnitte für Ba^{11+} , Ba^{12+} und Ba^{13+} sind in Abb. 7.13 bis 7.15 dargestellt. Für Ba^{11+} und Ba^{12+} ist sowohl für die Ein- als auch für die Zweifachionisation ein Beitrag möglich, jedoch sind die resonanten Beiträge zur Zweifachionisation sehr klein. Die ersten Resonanzstrukturen in der Einfachionisation sind bei der Doppelionisation fast nicht mehr zu erkennen. Für die höher geladenen Bariumionen werden die resonanten Beiträge bei größeren Energien immer



7. Ein- und Mehrfachionisation von Ba^{n+} -Ionen

deutlicher erkennbar und ihr relativer Beitrag zum Wirkungsquerschnitt übersteigt teilweise sogar den der ersten Peaks.

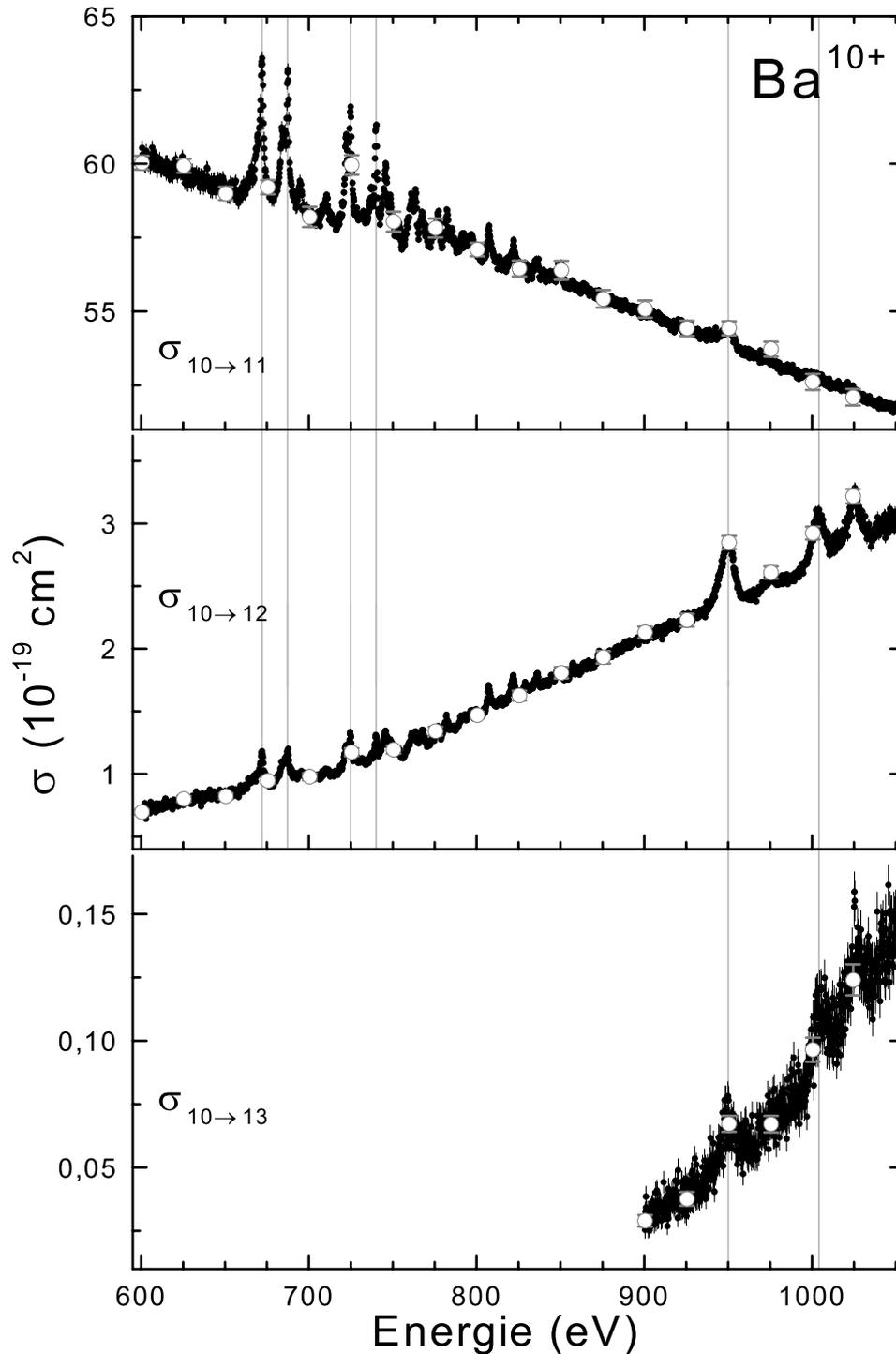


Abbildung 7.12.: Wirkungsquerschnitte für die Ionisation von Ba^{10+} .

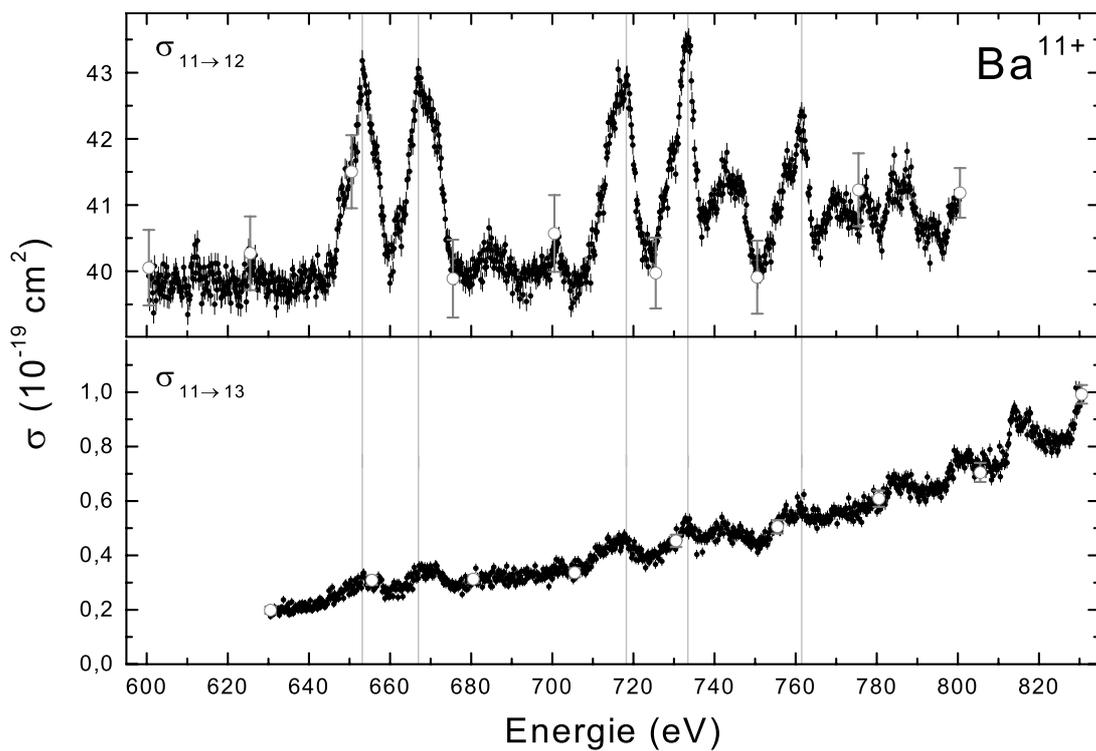


Abbildung 7.13.: Wirkungsquerschnitte für die Ionisation von Ba^{11+} . (Absolutmessungen hellgrau, Scanmessungen schwarz, jeweils mit statistischem Fehler)

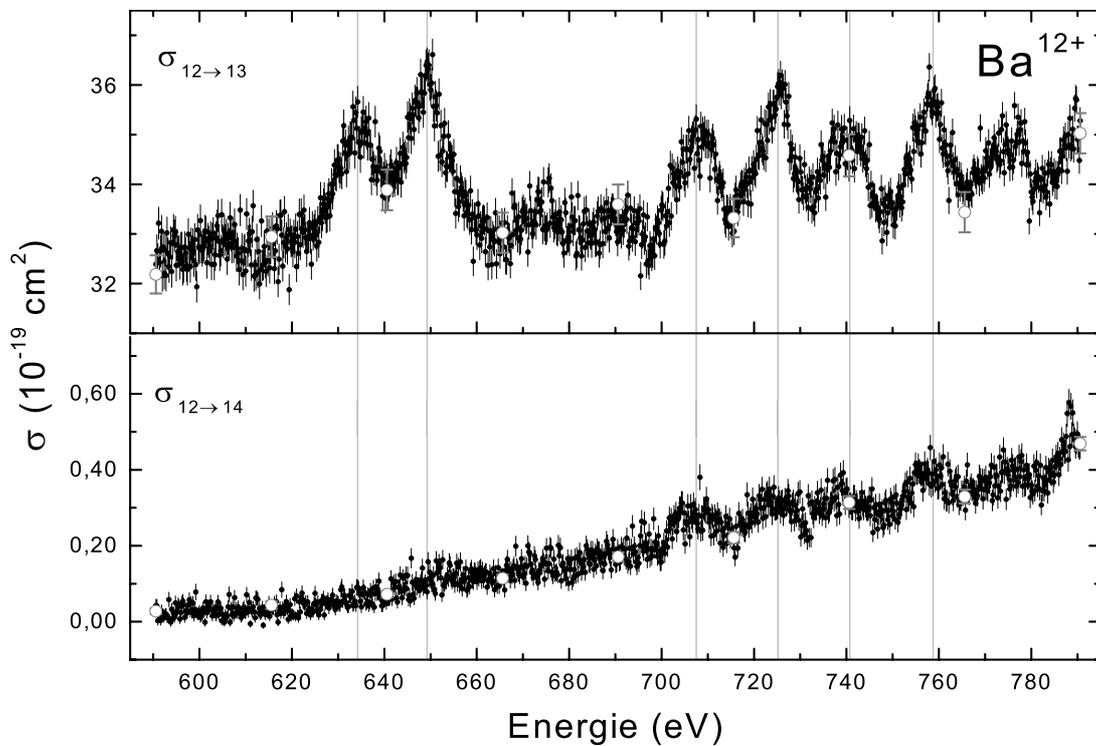


Abbildung 7.14.: Wirkungsquerschnitte für die Ionisation von Ba^{12+} . (Absolutmessungen hellgrau, Scanmessungen schwarz, jeweils mit statistischem Fehler)

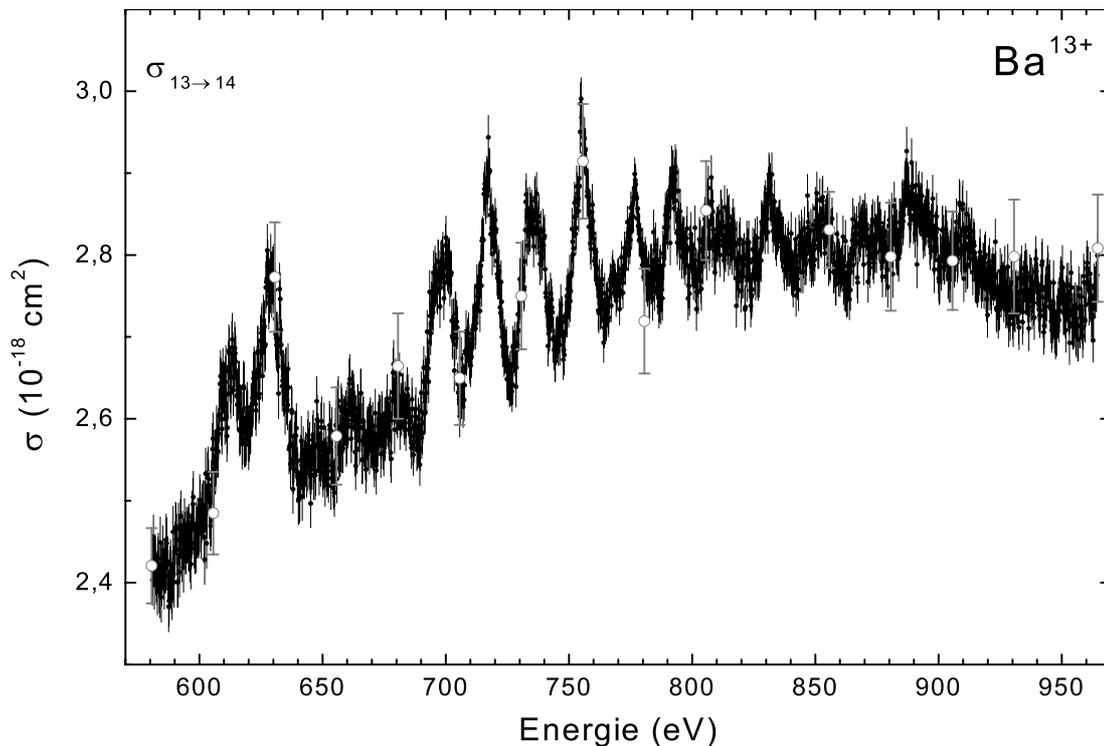


Abbildung 7.15.: Wirkungsquerschnitt für die Einfachionisation von Ba^{13+} . (Absolutmessungen hellgrau, Scanmessungen schwarz, jeweils mit statistischem Fehler)

7.1. Diskussion der resonanten Beiträge

Im folgenden sollen die Beiträge der resonanten Anregung eines $3d$ -Elektrons zu den jeweiligen Wirkungsquerschnitten genauer betrachtet werden. Neben der Lage der Resonanzen wird insbesondere der relative Anteil der resonanten Prozesse am Wirkungsquerschnitt und in Kapitel 7.2 ihr Verlauf entlang der einzelnen Ionisationsstufen diskutiert.

Abbildung 7.16 zeigt die energetische Lage der beiden ersten im Wirkungsquerschnitt sichtbaren Resonanzen als Funktion des Ladungszustandes n des jeweiligen Ions Ba^{n+} . Mit zunehmendem Ladungszustand fällt die Resonanzenergie ab. Eine Rechnung für die Anregung eines $3d$ -Elektrons nach $4f$ mittels des GRASP-Programmes ergibt für $Ba^{1+} \sim 791$ eV und für $Ba^{12+} \sim 815$ eV; dieser Unterschied beträgt nur 24 eV. Der Energieunterschied für den ersten Peak zwischen diesen beiden Ionen beträgt 146 eV. Daher kann anschaulich die Verschiebung der Resonanzen mit steigendem Ladungszustand im wesentlichen durch die für den Einfang wachsende Energie erklärt werden. Denn mit zunehmendem Ladungszustand wächst die beim Einfang

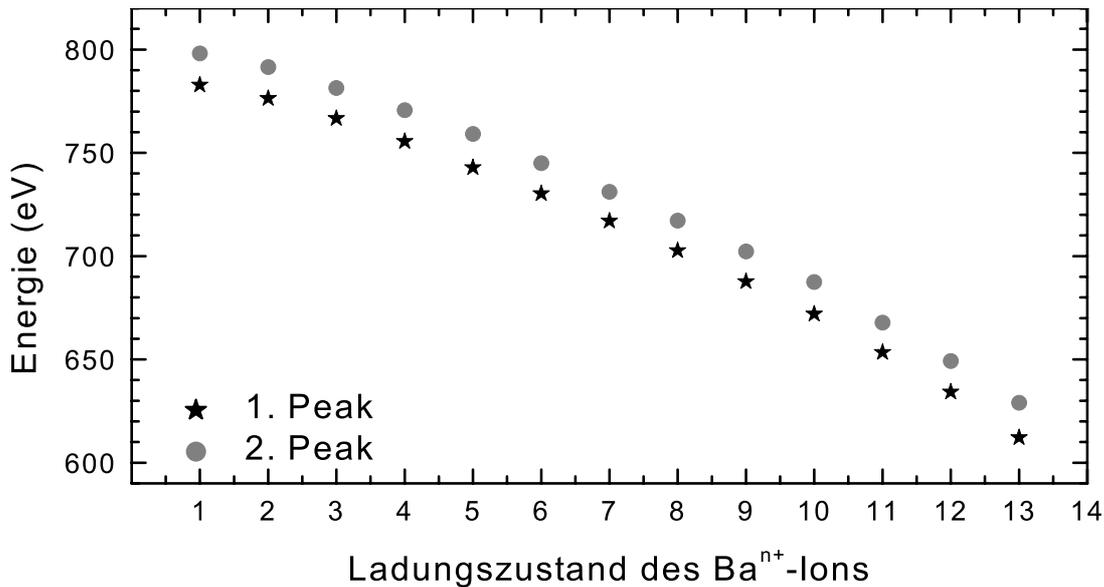


Abbildung 7.16.: Energien der ersten beiden im Wirkungsquerschnitt sichtbaren $3d$ -Resonanzen.

frei werdenden Energie durch das stärkere Coulomb-Potential an, die Anregungsenergie für das am Ion befindliche Elektron ändert sich hingegen nur unwesentlich.

Zur weiteren Diskussion werden die Resonanzstärken für die einzelnen Wirkungsquerschnitte bestimmt. Betrachtet man das Integral² über den gemessenen Wirkungsquerschnitt vom linken bis zum rechten Rand eines Peaks, so schließt dieses auch den nicht-resonanten Anteil am Wirkungsquerschnitt ein. Dieser muss als eine Art „Untergrund“, der auf verschiedene Weisen bestimmt wurde, subtrahiert werden. Abb. 7.17 zeigt am Beispiel für die Vierfachionisation von Ba³⁺ die verwendeten Verfahren. Einmal wird der nichtresonante Anteil direkt in den gemessenen Daten durch den Flächeninhalt des Trapezes, welches sich durch eine lineare Verbindung der beiden Randpunkte des Integrals ergibt, approximiert. Eine weitere Bestimmung erfolgt indem für den „Untergrund“ verschiedene funktionale Abhängigkeiten von der Elektronenenergie angenommen werden und die Integration dann für den durch Subtraktion des Untergrundes erhaltenen Wirkungsquerschnitt durchgeführt wird. Als „Untergrund“ ist eine an die Daten unterhalb des ersten Peaks angepasste Gerade bzw. ein Polynom zweiten Grades verwendet worden. Bei einem Teil der gemessenen Wirkungsquerschnitte war es auch möglich, über den gesamten Energiebereich eine Kombination von drei Geraden an den Verlauf anzupassen, deren Summe zur Berücksichtigung der experimentellen Energieauflösung mit einer gaußförmigen Verteilung gefaltet wurde. Die verschiedenen Arten der Behandlung des nichtresonanten Anteils führen im Wesentlichen zu einer konsistenten Beschreibung der Peakfläche. Für die unterschiedlichen Verfahren sowie bei kleinen Variationen der Grenzen für die Bestimmung der

²Die Integrationen sind numerisch mittels des Trapez-Verfahrens [Pre92] durchgeführt worden.

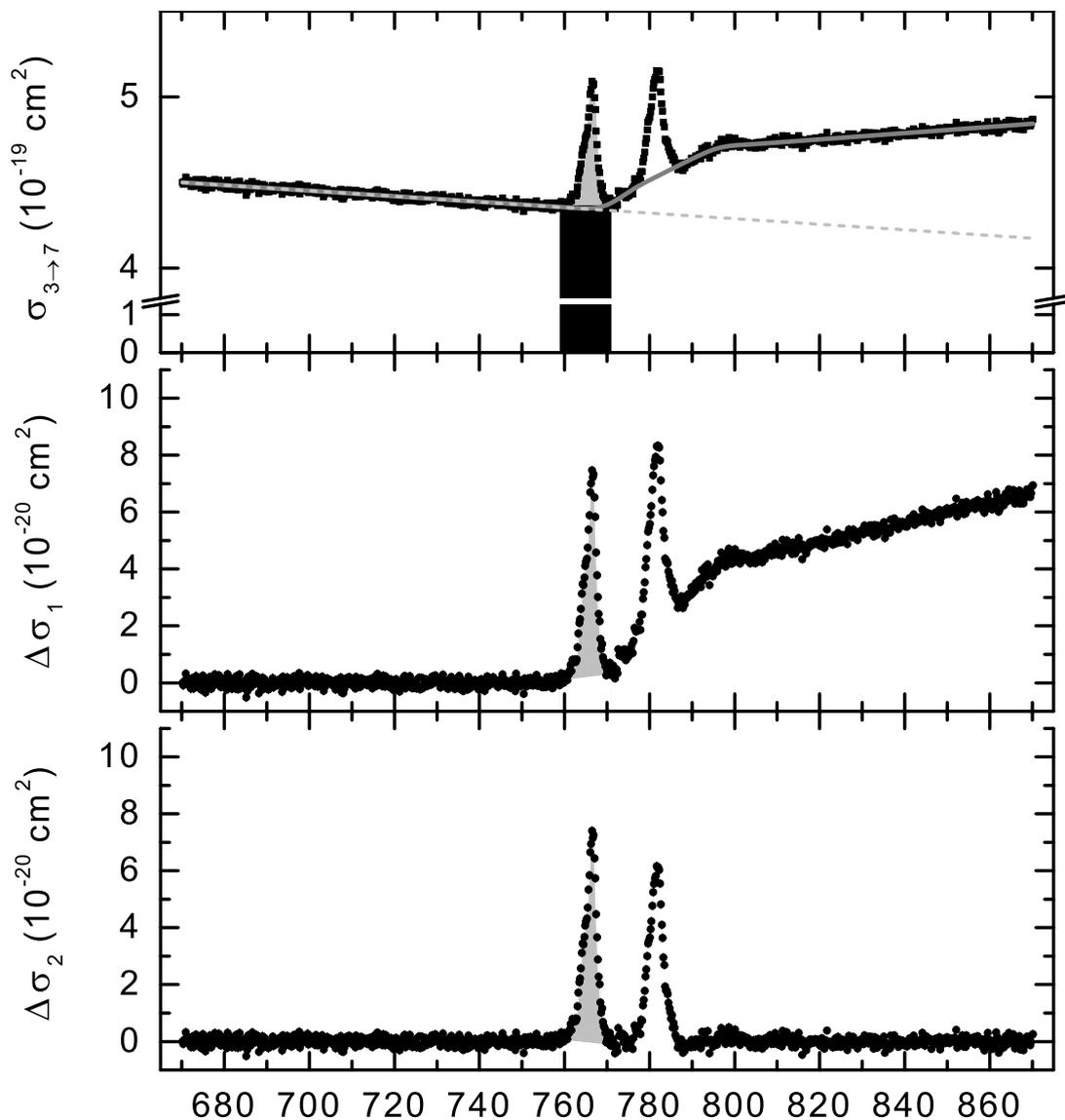


Abbildung 7.17.: Beispiel für die Bestimmung der Resonanzstärke. Im oberen Graph ist der gemessene Wirkungsquerschnitt für die Vierfachionisation von Ba^{3+} -Ionen mit den beiden für die Abschätzung des nichtresonanten Anteils verwendeten Funktionen dargestellt (siehe Beschreibung in Kap. 7.1). Der mittlere Graph stellt die Differenz zwischen den Messwerten und der gestrichelten Geraden dar. Der untere Graph enthält die Differenz zwischen den Messwerten und der dunkelgrauen Kurve. Die Resonanzstärke entspricht jeweils der hellgrau unterlegten Fläche.

Peaks ergeben sich nur geringfügig voneinander abweichende Werte. Die maximale Abweichung vom Mittelwert wird als systematischer Fehler der Peakflächenbestimmung benutzt. Neben diesem ergibt sich ein statistischer Fehler für die Resonanzstärken aus den statistischen Fehlern der Energie-Scan-Messung gemäß den Regeln für die Fehlerfortpflanzung. Durch quadratische Addition beider Fehler ergibt sich der verwendete Gesamtfehler für die Resonanzstärken.

Auf diese Weise sind für alle beobachteten Resonanzen die entsprechenden Stärken bestimmt worden. Für einzelne Ionisationsvorgänge sind keine Resonanzen im Wirkungsquerschnitt sichtbar (z. B. Zweifachionisation von Ba^{1+}). Aus den für das gleiche Ion gemessenen Wirkungsquerschnitten für andere Ionisationsstufen kennt man jedoch den Energiebereich, in dem die Beiträge der Resonanz auftreten können. Aus dem statistischen Fehler lässt sich daher zumindest eine Obergrenze für die Resonanzstärke ableiten. Abb. 7.21 zeigt exemplarisch die Resonanzstärken für den jeweils ersten Peak in der Ionisation von Ba^{1+} bis Ba^{9+} . Die absolute Größe der Resonanzstärke liefert hier keine weitere Information, da keine theoretischen Vorhersagen für die absoluten Werte vorliegen. Jedoch können aus dem Verlauf und dem Vergleich zwischen den verschiedenen Ionen bzw. Ionisationsstufen Rückschlüsse gezogen werden. Da sich nicht in allen Wirkungsquerschnitten identische Strukturen zeigen, wird ab hier nur die Resonanzstärke des ersten Peaks diskutiert.

Um den resonanten Beitrag zum Ionisationsquerschnitt zwischen verschiedenen Ionen bzw. Ionisationsstufen vergleichen zu können, wird der relative Anteil der re-

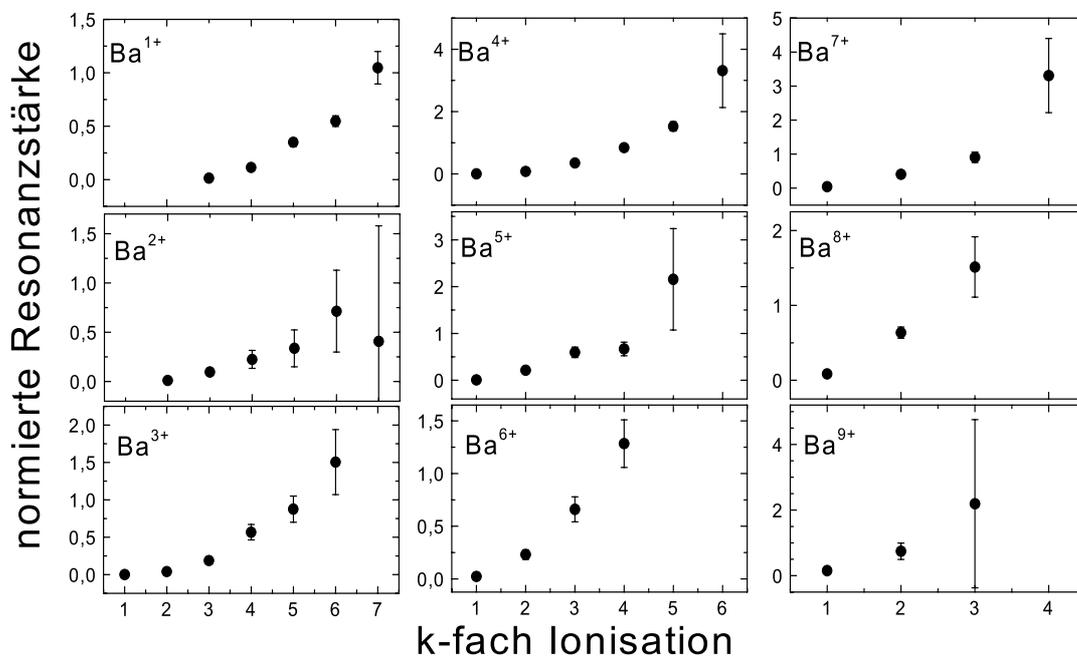


Abbildung 7.18.: Auf den nichtresonanten Anteil des Wirkungsquerschnitts normierte Resonanzstärken in Abhängigkeit von der Ionisationsstufe.

7. Ein- und Mehrfachionisation von Ba^{n+} -Ionen

sonanten Beiträge zum Gesamtwirkungsquerschnitt betrachtet. Dazu ist der Quotient aus Resonanzstärke und dem abgeschätzten Beitrag³ für die nichtresonante Ionisation in Abhängigkeit von der Ionisationstufe betrachtet worden. Abbildung 7.18 zeigt dieses Verhältnis für Ba^{1+} bis Ba^{9+} . Auf die Betrachtung höher geladener Bariumionen kann verzichtet werden, da hier für maximal zwei Ionisationstufen Resonanzstärken bestimmbar sind. Für alle Bariumionen wächst die normierte Resonanzstärke mit steigendem Ionisationsgrad an. Insbesondere bei Mehrfachionisation ist der Prozess des resonanten Einfangs mit nachfolgenden Autoionisationen im Energiebereich für die Resonanzenergie der dominierende Prozess. Betrachtet man zum Beispiel die Sechsfachionisation von Ba^{4+} in Abbildung 7.19, so beträgt der nichtresonante Anteil um 750-760 eV etwa $2,2 \times 10^{-22} \text{ cm}^2$. Die Höhe des Peaks im Maximum von $4,3 \times 10^{-22} \text{ cm}^2$ ist doppelt so groß wie dieser Anteil. Da bei der direkten Ionisation das stoßende Elektron hier sechs Targetelektronen ionisieren muss, ist die Wahrscheinlichkeit für einen solchen Prozess sehr gering. Zur Anregung eines $3d$ -Elektrons bei gleichzeitigem Einfang ist im wesentlichen nur die Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen notwendig. Dieser Prozess findet also sehr viel häufiger statt als die direk-

³Eine Normierung auf den Flächeninhalt des „Untergrund“ Trapezes in Abb.7.17 führt zu einem stark von den gewählten Grenzen abhängigen Wert, daher ist auf ein Rechteck mit einer Breite von 1 eV und einer Höhe, die dem Mittelwert der Wirkungsquerschnitte am Rande des Peaks entspricht, normiert worden.

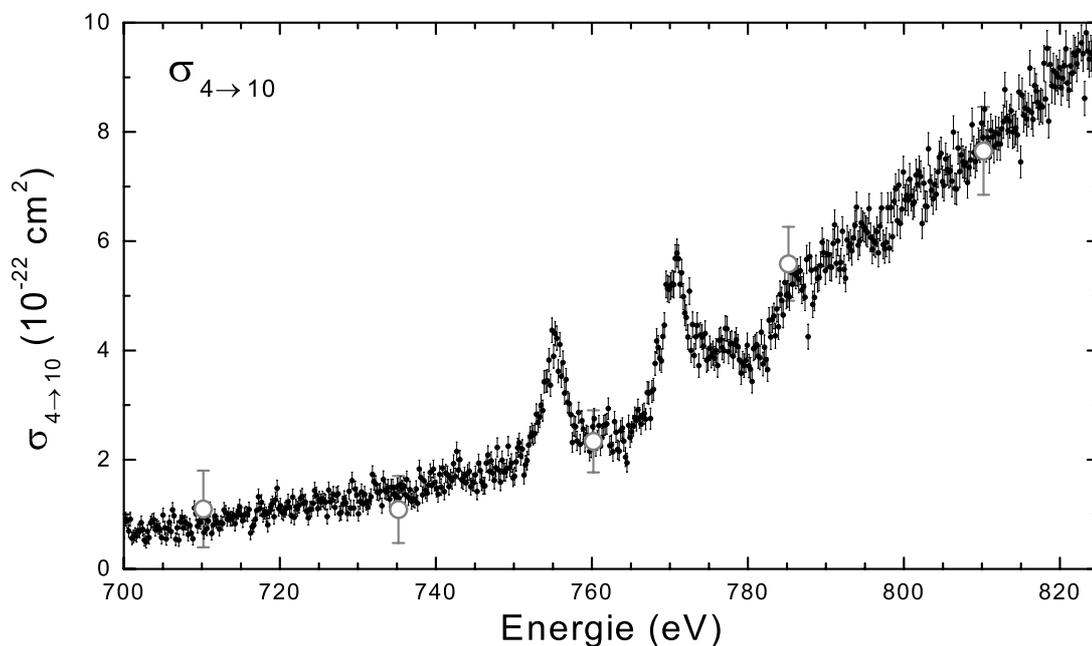


Abbildung 7.19.: Wirkungsquerschnitt für die Sechsfachionisation von Ba^{4+} . (Absolutmessungen hellgrau, Scanmessungen schwarz, jeweils mit statistischem Fehler)

te Ionisation. Da nach Kapitel 7.2 nur 0,03% der angeregten Ionen sieben Elektronen emittieren, also zur Sechsfachionisation beitragen, ist der resonante Einfang deutlich wahrscheinlicher als die direkte Ionisation von sechs Elektronen. Diese Überlegung gilt analog für die anderen Ba^{n+} -Ionen. Generell wächst der Anteil der resonanten Anregung eines $3d$ -Elektrons mit zunehmender Ionisationsstufe an und kann sogar den Wirkungsquerschnitt dominieren.

Summiert man die absoluten Resonanzstärken in der $3d_{[5/2]-1}$ -Resonanz für einen Ladungszustand n der Ba^{n+} -Ionen auf, so gibt dies Aufschluss darüber, wie wahrscheinlich der dielektronische Einfang mit Anregung eines $3d$ -Elektrons ist. Summiert man nur die gemessenen Resonanzstärken auf, so werden alle Prozesse, die nach dem Einfang höchstens ein Elektron emittieren, vernachlässigt. Diese tragen nicht zur Ionisation bei und sind daher nicht beobachtet wurden. Wie im folgenden Kapitel gezeigt wird, ist die Wahrscheinlichkeit für die Emission von nur einem Elektron für die niedrig geladenen Ba^{n+} -Ionen vernachlässigbar. Für die Ladungszustände mit $n \geq 7$ gilt dies nur noch eingeschränkt. Abbildung 7.20 zeigt die Summe der gemessenen Resonanzstärken für Ba^{1+} bis Ba^{9+} (schwarz). Mit Hilfe des statistischen Modells (s. Kap. 7.2) kann man die Resonanzstärken für die Emission von einem bzw. keinem Elektron abschätzen, das Ergebnis einer Summation inklusive dieser Abschätzung ist in Abb. 7.20 hellgrau eingezeichnet. Die Summe zeigt ein Ansteigen mit dem Ladungszustand. Mit steigendem Ladungszustand nimmt also entlang der Sequenz von Ba^{n+} -Ionen auch die Wahrscheinlichkeit für einen resonanten Einfang mit Anregung eines $3d$ -Elektrons zu.

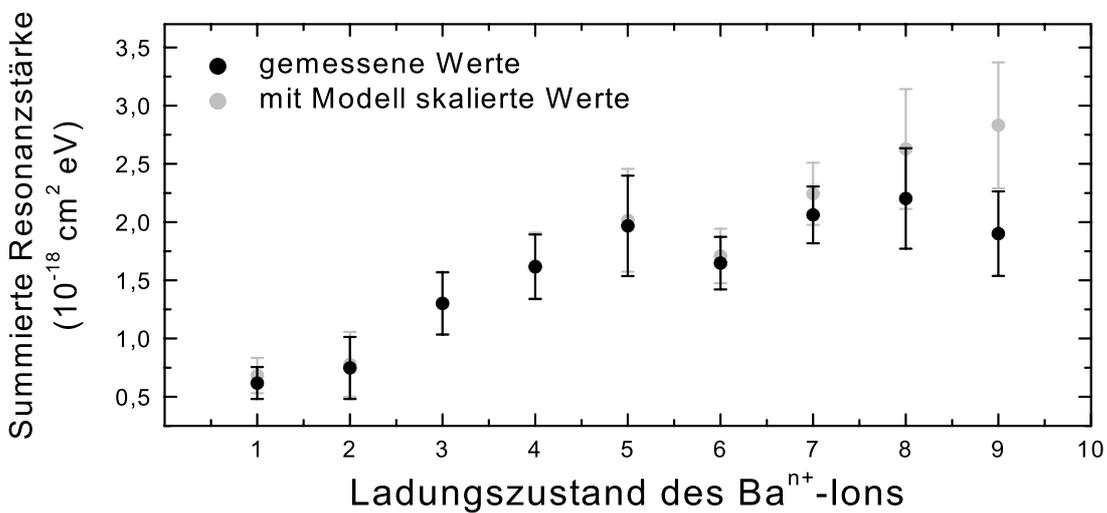


Abbildung 7.20.: Summierte Resonanzstärken für die einzelnen Ba^{n+} -Ionen. Die hellgrauen Werte enthalten mit den sich aus dem statistischen Modell ergebenden Wahrscheinlichkeiten skalierte Beiträge der Emission von einem bzw. keinem Elektron.

7.2. Statistisches Modell

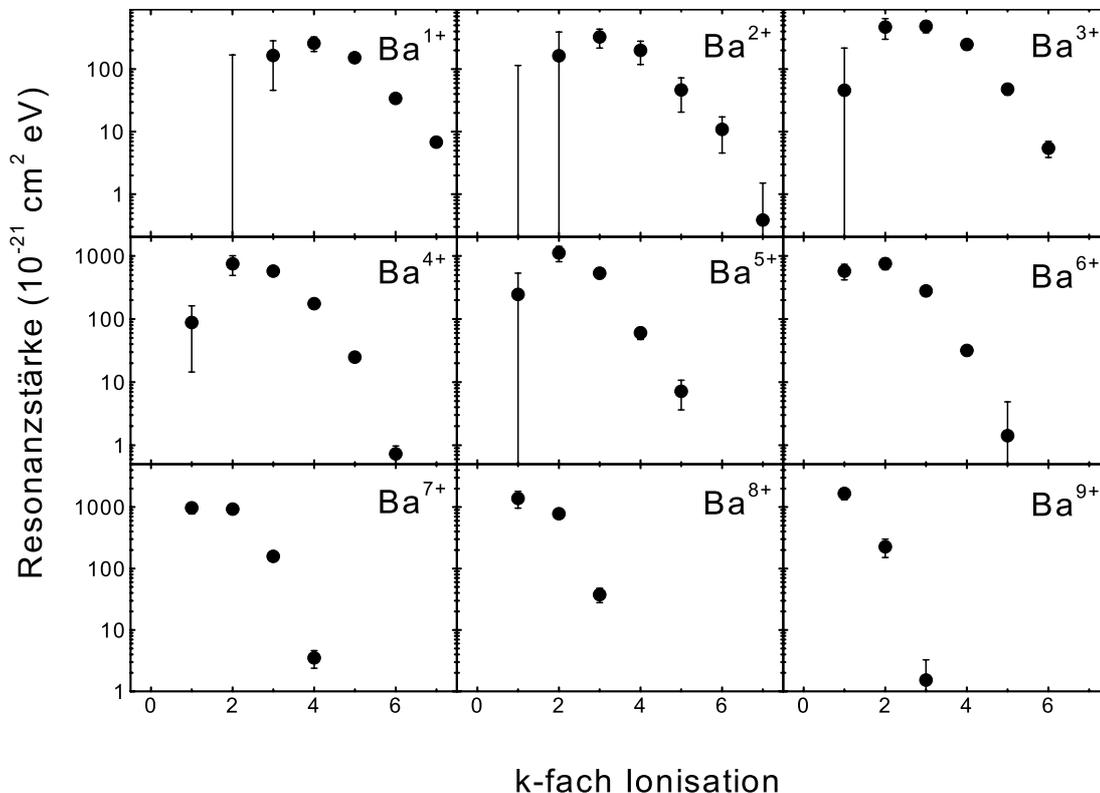


Abbildung 7.21.: Resonanzstärken in Abhängigkeit von der Ionisationsstufe. In einigen Fällen liegen lediglich obere Abschätzungen vor.

Abbildung 7.21 zeigt die Resonanzstärken in Abhängigkeit von der Ionisationsstufe. Da es keine theoretischen Daten für die totalen Resonanzstärken gibt, wird in diesem Kapitel ein statistisches Modell zur Beschreibung der Verhältnisse der Resonanzstärken entwickelt. In Abb. 7.21 weisen die Resonanzstärken einen Verlauf auf, der dem einer statistischen Verteilung ähnelt. Die Beschreibung der Ladungsverteilung durch ein statistisches Modell ist bereits bei Ion-Atom bzw. Atom-Atom-Stößen erfolgreich gewesen [Rus58, Rus59, Rus63, Rus70], eine Variante dieser Modellbeschreibung konnte sehr erfolgreich auf Prozesse der Transferionisation hochgeladener Ionen angewendet werden [Mül83]. Im folgenden werden die Überlegungen zur Beschreibung von Ion-Atom bzw. Atom-Atom Stößen auf die resonante Ein- und Mehrfachionisation von Ba^{n+} -Ionen angepasst.

Die Prozesse, die zu den resonanten Strukturen im Wirkungsquerschnitt führen, kann man sich in zwei Stufen ablaufend vorstellen (s. Kap. 2.1). In der ersten Stufe wird durch den resonanten Einfang des stoßenden Elektrons ein hoch angeregter Zustand des Bariumions erzeugt. In der zweiten Stufe zerfällt dieser Zustand anschlie-

ßend durch Autoionisationen⁴. Die Energie des hoch angeregten Bariumions ist so groß, dass für die Abregung viele verschiedene Reaktionskanäle möglich sind. Daher ist ein statistischer Ansatz zur Beschreibung dieser Abregung sinnvoll. Ziel dieser Beschreibung ist es, die Wahrscheinlichkeit für die Emission von i Elektronen durch Autoionisationen zu bestimmen. Die so bestimmten Wahrscheinlichkeiten sollten in ihrem Verlauf den in Abb. 7.21 dargestellten Resonanzstärken für die $(i - 1)$ -fache Ionisation entsprechen.

Zur Bestimmung der Wahrscheinlichkeiten wird vereinfacht angenommen, dass sich die bei dem dielektronischen Einfang übertragene Energie ΔE statistisch auf die äußeren Elektronen verteilt. Hat ein Elektron bei dieser Verteilung mehr Energie als sein Ionisationspotential erhalten, so wird es als durch eine Autoionisation emittiert betrachtet. Zur weiteren Vereinfachung wird für alle Elektronen ein mittleres Ionisationspotential \bar{I}_B angenommen. Anschaulich befinden sich die äußeren Elektronen in einem Potentialtopf mit der festen Tiefe \bar{I}_B . Nun wird auf diese Elektronen die Energie ΔE statistisch verteilt und alle Elektronen, die bei dieser Verteilung mehr als \bar{I}_B an Energie erhalten haben, verlassen den Topf und zählen als emittierte Elektronen. Betrachtet man dieses für alle möglichen Energieverteilungen, so erhält man die Wahrscheinlichkeitsverteilung für die Emission von i Elektronen aus dem hoch angeregten Bariumion.

Für eine mathematische Formulierung betrachtet man Energiepakete der Größe ϵ . Für das mittlere Ionisationspotential und die übertragene Energie gilt dann

$$\left. \begin{aligned} \Delta E &= \nu \cdot \epsilon \\ \bar{I}_B &= \eta \cdot \epsilon \end{aligned} \right\} \frac{\Delta E}{\bar{I}_B} = \frac{\nu}{\eta} = \mu, \quad (7.1)$$

wobei ϵ so klein gewählt wird, dass sich für ν und η ohne zu große Fehler ganze Zahlen ergeben. Die Verteilung erfolgt auf N Elektronen; die Elektronen werden hier als unterscheidbar angesehen. Dies ist physikalisch sinnvoll, da sich die Elektronen in einem Ion in unterschiedlichen Zuständen befinden und jedes Elektron durch die vollständige Angabe seiner Quantenzahlen eindeutig identifizierbar ist. Die nach der Autoionisation freien Elektronen werden im Modell nicht unterschieden. Für die mathematische Behandlung ist es sinnvoll zwei Hilfsfunktionen einzuführen. Dies ist einmal eine Funktion

⁴Da die radiativen Zerfälle nicht zur Ionisation beitragen, werden diese hier vernachlässigt.

$A(j, l)$. Sie gibt die Anzahl der Möglichkeiten an, die ganze Zahl j als eine Summe aus l nicht negativen ganzen Zahlen zu schreiben. Hier entspricht j der Zahl der übertragenen Energiepakete und l der Anzahl der Elektronen, auf die verteilt wird. A entspricht in der Kombinatorik einer ungeordneten Stichprobe mit Zurücklegen [Eng87], und ist daher ein Binomialkoeffizient.

$$A(j, l) = \binom{j+l-1}{l} \quad (7.2)$$

Daneben wird noch eine zweite Funktion

$B_\eta(j, l)$ eingeführt. Dies ist die Zahl der Möglichkeiten, j als Summe aus l nicht negativen ganzen Zahlen zu schreiben unter der Nebenbedingung, dass jeder Summand kleiner als η sein muss. Für B gilt folgende Rekursion

$$B_\eta(j, l+1) = \sum_{m=0}^{\eta-1} B_\eta(j-m, l),$$

da der zusätzliche Summand $l+1$ alle Zahlen m von 0 bis $\eta-1$ annehmen kann. Der dann noch zu j fehlende Anteil $j-m$ ergibt die Anzahl der anderen Summanden. Durch vollständige Induktion mit $B_\eta(j, 1) = 1$ für $0 \leq j < \eta$ und $B_\eta(j, 1) = 0$ sonst, kann man B bestimmen [Rus63]:

$$B_\eta(j, l) = \sum_{m=0}^{\lfloor \frac{j}{\eta} \rfloor} (-1)^m \binom{l}{m} A(j - i\eta, l) \quad (7.3)$$

$\lfloor \frac{j}{\eta} \rfloor$ ist die größte ganze Zahl, die kleiner oder gleich $\frac{j}{\eta}$ ist. Für $\lfloor \frac{j}{\eta} \rfloor > l$ ist $B_\eta(j, l) = 0$, da mit l Summanden, die alle kleiner als η sind, als Summe maximal $l(\eta-1)$ erreicht werden kann.

Mit diesen Hilfsfunktionen kann nun ein Ausdruck für die Wahrscheinlichkeit $P_n^{(\eta)}(\nu, N)$ angegeben werden, dass n Elektronen mehr Energie als $\bar{I}_B = \eta \cdot \epsilon$ erhalten, wenn ν Energiepakete der Größe ϵ auf N Elektronen verteilt werden:

$$P_n^{(\eta)}(\nu, N) = \frac{\binom{N}{n} \left\{ \sum_{m=0}^{\nu-\eta n} A(m, n) B_\eta(\nu - \eta n - m, N - n) \right\}}{A(\nu, N)} \quad (7.4)$$

Die Wahrscheinlichkeit ergibt sich nach dem grundlegenden Satz der Wahrscheinlichkeitsrechnung als Quotient aus der Zahl der günstigen Fälle und der Zahl der mög-

lichen Fälle. Der Nenner in Gl. 7.4 gibt die Zahl der Möglichkeiten an, die übertragenen Energiepakete auf N Elektronen zu verteilen, und der Zähler ergibt die Anzahl der Möglichkeiten n Elektronen zu emittieren. Er setzt sich wie folgt zusammen:

$\left\{ \sum_{m=0}^{\nu-\eta n} \dots \right\}$ in dieser Summe wird die Anzahl der möglichen Energieverteilungen für die Emission von n Elektronen berechnet. Für die Ionisation werden ηn Energiepakete verbraucht. Die Summation beschreibt nun die Verteilung der restlichen Energiepakete $\nu - \eta n$. Diese werden entweder von den emittierten Elektronen mitgenommen ($A(m, n)$) oder verbleiben am Ion ($B_\eta(\dots)$). Jeder Summand beschreibt die Zahl der Möglichkeiten für eine Aufteilung von $\nu - \eta n$ Paketen in m Pakete, die die emittierten Elektronen mitnehmen, und $\nu - \eta n - m$ Paketen, die sich unter den Elektronen am Ion aufteilen. Für jede solche Aufteilung ergibt sich die Zahl der Möglichkeiten als Produkt aus,

$A(m, n)$ – dies ist die Zahl der Möglichkeiten, die von den emittierten Elektronen mitgeführten Energiepakete m unter diesen aufzuteilen und

$B_\eta(\dots)$ – dies ist die Zahl der Möglichkeiten, die $\nu - \eta n - m$ verbleibenden Energiepakete so aufzuteilen, dass keines der nicht ionisierten Elektronen mehr als das mittlere Ionisationspotential an Energie erhält.

$\binom{N}{n}$ gibt das statistische Gewicht an, also die Zahl der Möglichkeiten aus N die n emittierten Elektronen auszuwählen.

Die in Gl. 7.4 angegebene Wahrscheinlichkeit setzt eine Diskretisierung der Energie voraus. Die übertragene Energie ΔE wird durch ν Energiepakete der Größe ϵ repräsentiert. Betrachtet man nun eine immer feinere Unterteilung der Energie also $\epsilon \rightarrow 0$ so gilt $\nu \rightarrow \infty$. Für diesen Fall können die auftretenden Binomialkoeffizienten durch eine Approximation beschrieben werden, die Summe in Gl. 7.4 wird zu einem analytisch auswertbaren Integral. Führt man den Grenzübergang durch, so ergibt sich [Rus63]:

$$P_n(N, \mu) = \binom{N}{n} \sum_{m=0}^k (-1)^m \binom{N-n}{m} \left(1 - \frac{n+m}{\mu}\right)^{\mu-1} \quad (7.5)$$

Dabei ist P_n die Wahrscheinlichkeit, dass n Elektronen emittiert werden für einen Quotienten μ (s. Gl. 7.1) aus übertragener Energie und mittlerem Ionisationspotential, und k die größte ganze Zahl, die die Bedingung $n+k \leq \mu \leq n+k+1$ oder $k \leq N-n$ erfüllt. Die zweite Bedingung stellt sicher, dass bei einem sehr großen Energieübertrag nur die Fälle in der Summe berücksichtigt werden, in denen die am Ion verbleibenden Elektronen auch die dort verbleibende Energie aufnehmen können, ohne dass eines mehr als das Ionisationspotential an Energie erhält.

7. Ein- und Mehrfachionisation von Ba^{n+} -Ionen

Für den Vergleich mit den experimentellen Daten muss sowohl die übertragene Energie als auch das mittlere Ionisationspotential bestimmt werden. Bei den hier untersuchten resonanten Beiträgen ist die übertragene Energie gerade die Resonanzenergie, da nach dem Einfang des Elektrons die gesamte kinetische Energie des Stoßes an das rekombinierte Ion übertragen ist. Diese ist schon in Kapitel 7.1 bestimmt worden. Somit müssen für die Anwendung des Modells noch ein mittleres Ionisationspotential sowie die Zahl der für die Verteilung der Energie berücksichtigten Elektronen festgelegt werden.

Am Beispiel des $3d_{3/2}$ -Resonanzpeaks von Ba^{2+} wird im folgenden die Methodik zur Bestimmung dieser Parameter vorgestellt. Durch den resonanten Einfang des Elektrons entsteht ein Ba^{1+} -Ion. Aus Tabelle 7.2 ergibt sich die maximale Anzahl der Elektronen, die bei der zugeführten Energie von 776,38 eV, das Ion verlassen können. Es sind dies 9 Elektronen, die zum Verlassen eines Ba^{1+} -Ions 678,8 eV bzw. 725,8 eV benötigen, je nachdem, ob die Werte des GRASP-Programms [Dya89] oder die Werte von Carlson [Car70] benutzt werden. Zur Berechnung des mittleren Ionisationspotentials μ wird die benötigte Energie durch die maximal emittierte Anzahl der Elektronen geteilt. Carlson [Car70] gibt für seine Werte einen Fehler von $\sim 5\%$ an. Nimmt man für die mit dem GRASP-Programm berechneten Werte ebenfalls diesen Fehler an, so ergibt sich für beide Werte ein Intervall für μ . Da sich diese Intervalle in allen Fällen überschneiden ergibt die Vereinigung beider Intervalle den theoretisch zu erwartenden Bereich für μ . Die Werte für μ , die übertragene Energie E_{tr} sowie die Zahl der berücksichtigten Elektronen N_{el} sind in Tabelle 7.3 für den ersten Peak und Tabelle 7.4 für den zweiten Resonanzpeak angegeben.

Ion	Ba^{1+}	Ba^{2+}	Ba^{3+}	Ba^{4+}	Ba^{5+}	Ba^{6+}	Ba^{7+}	Ba^{8+}	Ba^{9+}
E_{tr} (eV)	782,9	776,4	766,6	755,6	742,8	730,2	717,0	702,7	687,7
N_{el}	11	10	9	8	7	6	6	5	4
μ [Car70]	11,79	10,70	9,64	8,87	8,21	7,68	5,92	5,54	5,22
μ [Dya89]	12,61	11,44	10,31	9,54	8,87	8,31	6,16	5,72	5,34

Tabelle 7.3.: Parameter des statistischen Modells für den ersten Resonanzpeak

Die Zahl der Elektronen N_{el} , die bei der Energieverteilung mit berücksichtigt werden, wurde in folgender Weise bestimmt. Das nach dem resonanten Einfang vorliegende Ba^{1+} -Ion hat 55 Elektronen. Selbstverständlich muss mindestens die Zahl der emittierbaren Elektronen (in diesem Fall 9) berücksichtigt werden. Für dieses Beispiel sind im hoch angeregten Ion zehn Elektronen oberhalb der $4d$ -Schale. Also steht selbst im Falle der maximalen Emission von neun Elektronen noch ein Elektron zur Verfügung, um eventuell im Ion verbleibende Energie aufzunehmen. Daher ist für Ba^{2+} -Ionen im Modell für die Zahl der an der Verteilung beteiligten Elektronen $N_{el} = 10$ gewählt worden. Für die anderen hier betrachteten Ba^{n+} -Ionen befinden sich nach dem Einfang $11 - n$ Elektronen außerhalb der $4d$ -Schale, jedoch können bei ei-

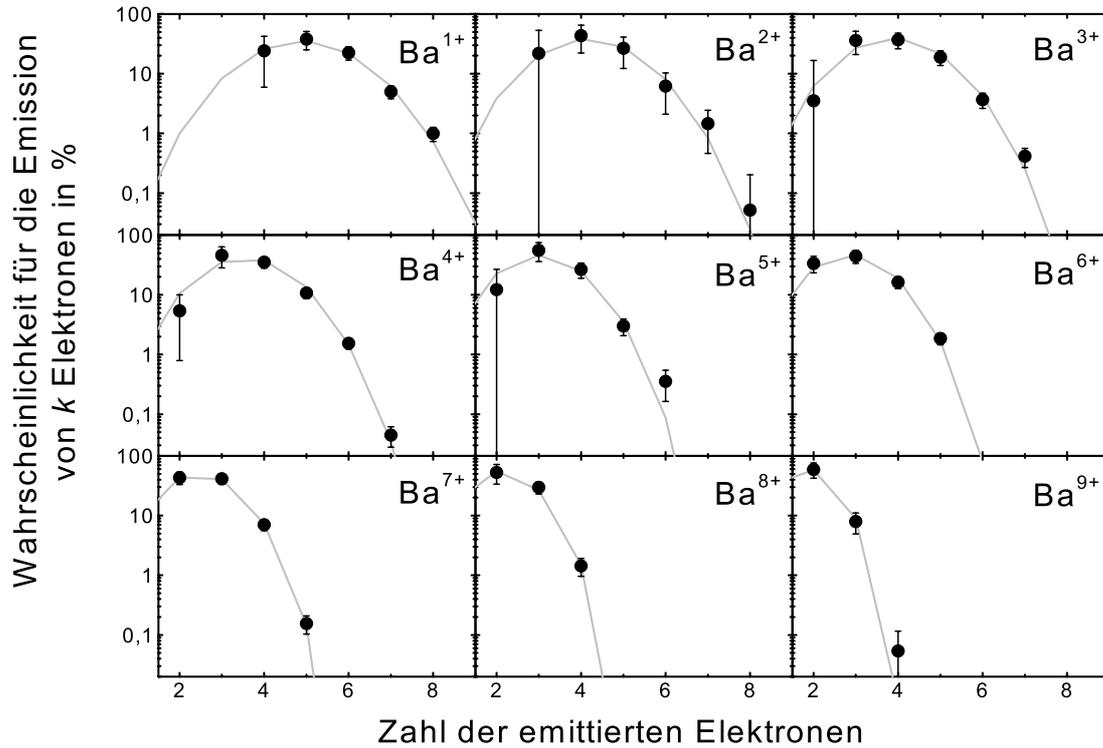


Abbildung 7.22.: Vergleich der Ergebnisse des statistischen Modells (graue Linie) mit den experimentellen Daten für den ersten Peak.

nem Teil der Ionen mehr als diese Anzahl emittiert werden. Für diese Fälle führt eine komplette Berücksichtigung aller Elektronen in der $4d$ -Schale zu einer relativ großen Anzahl an der Verteilung beteiligter Elektronen, da sich zehn Elektronen in der $4d$ -Schale befinden. Aus physikalischer Sicht können auch nicht alle $4d$ -Elektronen an den Autoionisationsprozessen beteiligt sein. Da sich unterhalb der $4d$ -Schale nur ein „Loch“ befindet, kann nur eins der $4d$ -Elektronen in dieses springen und so an einem Auger-Prozess teilnehmen. Die anderen an eventuellen Autoionisationen als emittierte Elektronen beteiligten Elektronen der $4d$ -Schale sind in der Anzahl der maximal emittierten Elektronen mitgezählt. Daher ist als Zahl der für die Verteilung berücksichtigten Elektronen N_{el} die Zahl der maximal emittierbaren Elektronen plus eins gewählt worden⁵.

Zum Vergleich mit den sich aus dem Modell ergebenden Wahrscheinlichkeiten muss aus den in Kap. 7.1 bestimmten Resonanzstärken eine Wahrscheinlichkeit errechnet werden. Dazu werden alle experimentell vorhandenen Resonanzstärken⁶ für je einen Anfangsladungszustand Ba^{n+} summiert. Die Summe muss nun normiert wer-

⁵Diese Zahl ist für alle betrachteten Ba^{n+} -Ionen größer gleich der Zahl der Elektronen außerhalb der $4d$ -Schale

⁶Die Fälle, in denen für die Resonanzstärke nur eine Obergrenze bestimmt werden konnte, werden hier vernachlässigt

7. Ein- und Mehrfachionisation von Ba^{n+} -Ionen

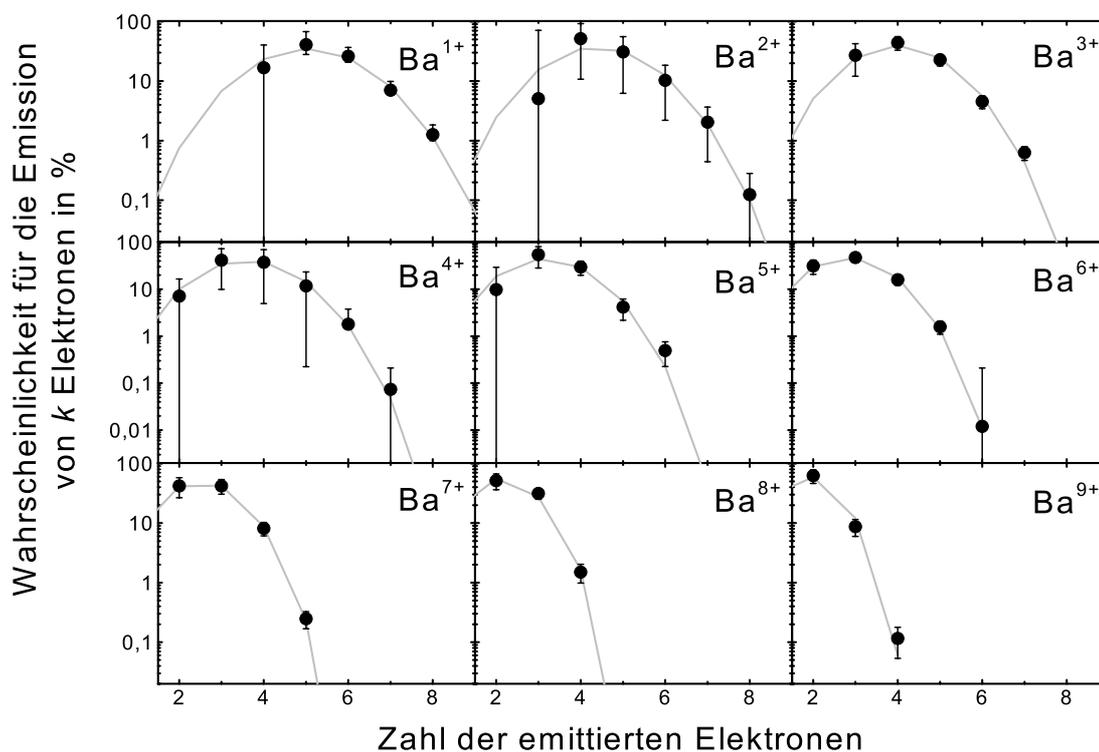


Abbildung 7.23.: Vergleich der Ergebnisse des statistischen Modells (graue Linie) mit den experimentellen Daten für den zweiten Peak.

den, um eine Wahrscheinlichkeit zu erhalten. Da experimentell für die Emission von keinem bzw. einem Elektron – dies sind keine Ionisationsprozesse – sowie bei einem Teil der Ionen auch für die höchsten Ionisationsstufen keine Daten vorliegen, kann nicht auf eine Summe von Eins, die sich als Summe *aller* Prozesse ergeben muß, normiert werden. Die Normierung erfolgte daher auf die sich aus den entsprechenden Modellwahrscheinlichkeiten ergebende Summe. Diese normierten Wahrscheinlichkeiten können nun mit den Vorhersagen des Modells verglichen werden.

Für die ersten beiden Peaks ist für die sich so ergebenden experimentellen Wahrscheinlichkeiten mit der in Tab. 7.3 bzw. 7.4 angegebene Elektronenzahl durch einen

Ion	Ba ¹⁺	Ba ²⁺	Ba ³⁺	Ba ⁴⁺	Ba ⁵⁺	Ba ⁶⁺	Ba ⁷⁺	Ba ⁸⁺	Ba ⁹⁺
E_{tr} (eV)	798,2	791,5	781,4	770,6	759,1	744,9	731,16	717,15	702,26
N_{el}	11	10	9	8	7	6	6	5	4
μ [Car70]	12,02	10,91	9,82	9,05	8,39	7,83	6,04	5,65	5,32
μ [Dya89]	12,85	11,66	10,51	9,73	9,07	8,47	6,28	5,84	5,45

Tabelle 7.4.: Parameter des statistischen Modells für den zweiten Resonanzpeak

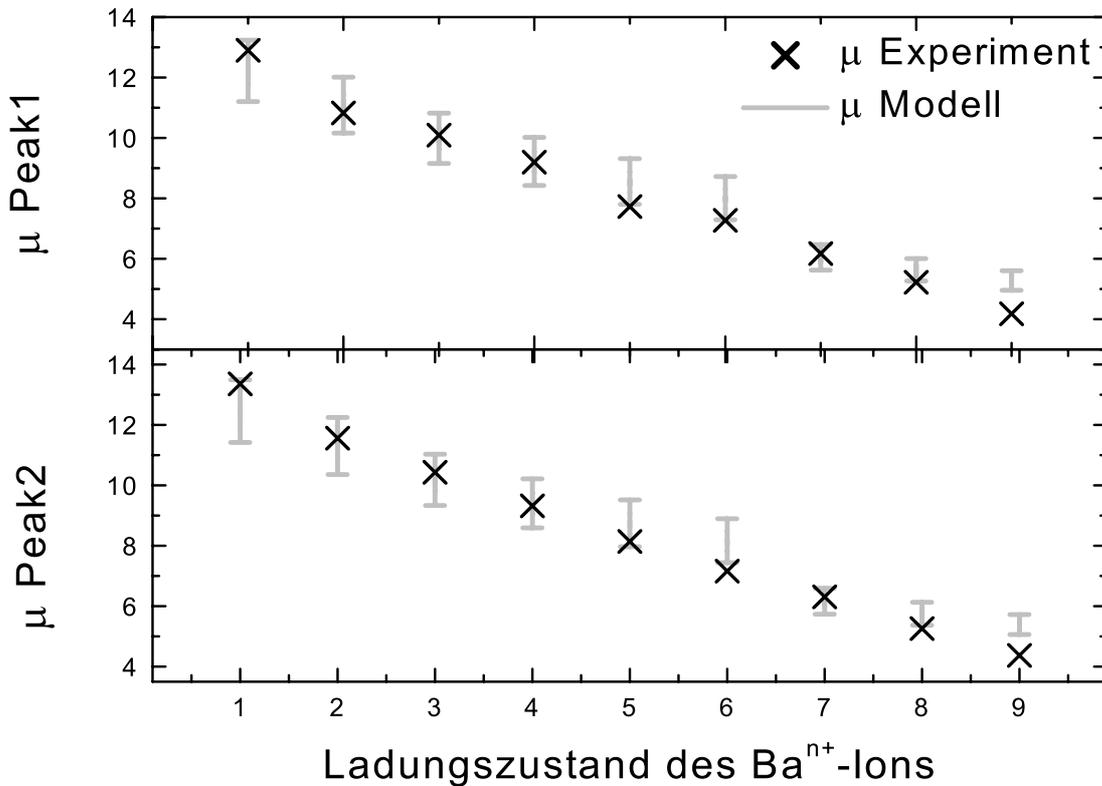


Abbildung 7.24.: Vergleich von vorhergesagtem Modellparameter μ mit experimentell bestimmten Werten.

Fit ein optimales experimentelles μ bestimmt worden. Abb. 7.22 zeigt für den ersten Peak, dass das Modell sehr gut den Verlauf der Resonanzstärken für verschiedene Ionisationsstufen eines Ba^{n+} -Ions beschreibt. Analog ist auch die Beschreibung des Verlaufs der Resonanzstärken für den zweiten Peak in Abb. 7.23 durch das statistische Modell in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Da für diese Abbildungen der Parameter μ des Modells an die experimentellen Werte angepasst ist, wird dieser Wert in Abb. 7.24 mit den sich aus den oben beschriebenen Überlegungen ergebenden Bereich für μ verglichen. Für fast alle Fälle beschreibt das statistische Modell mit den sich aus den Vorüberlegungen ergebenden Parametern die experimentellen Daten. Beachtet man die stark vereinfachenden Annahmen des Modells, so wird der komplexe Vorgang der Abregung eines hoch angeregten Zustandes überraschend gut beschrieben. Nur bei der Ionisation von Ba^{9+} -Ionen liegt dasjenige das Experiment am besten beschreibende μ für beide Resonanzen deutlich außerhalb des vorhergesagten Bereiches. Bei der Bestimmung von μ geht neben der übertragenen Energie, die hier durch das Experiment hinreichend genau bestimmt ist, noch das mittlere Ionisationspotential ein. Dieses mittlere Potential ist eine starke Vereinfachung des physikalischen Sachverhaltes. Die benötigte Energie für die Ionisation des ersten Elektrons

7. Ein- und Mehrfachionisation von Ba^{n+} -Ionen

unterscheidet sich deutlich von der für die Ionisation in der letzten maximal möglichen Stufe. Da die Energien für diese letzte Stufe einen großen Anteil an dem gesamten Ionisationspotential haben, ändert sich das angenommene mittlere Ionisationspotential sehr stark falls man nur eine weitere Ionisation in der Bestimmung mitnimmt. Betrachtet man die im Falle der maximalen Ionisation verbleibende Energie, so ist diese für Ba^{5+} -, Ba^{6+} und Ba^{9+} -Ionen sehr groß. Hier reicht die Energie gerade nicht mehr aus, um noch ein zusätzliches Elektron zu ionisieren. Wird nun bei einer Autoionisation doch ein Elektron mit höherer Bindungsenergie ionisiert, so ist das angenommene mittlere Ionisationspotential zu klein, da es diese Fälle vernachlässigt. Ein kleineres mittleres Ionisationspotential führt zu einem größeren μ . In Abb. 7.24 liegen die experimentell bestimmten μ -Werte auch bei Ba^{5+} , Ba^{6+} und Ba^{9+} am unteren Rand bzw. unterhalb des vorhergesagten Bereiches. Da jedoch die Ionisation ein diskreter Prozess ist, das statistische Modell aber eine gleichmäßige Verteilung der Energien vornimmt, sind solche Effekte für die Anwendung des Modells zu erwarten.

Für fast alle beobachteten Bariumionen liegen jedoch die Parameter des Modells innerhalb des sich aus den vorgestellten Überlegungen ergebenden Bereichs. Daher ist anzunehmen, dass mittels dieses Modells Vorhersagen für den Verlauf der Resonanzstärken bei anderen Anregungen oder Ionen möglich sind.

Abbildungsverzeichnis

2.1. Nicht-resonante Ionisationsmechanismen	7
2.2. Resonante Ionisationsmechanismen	8
2.3. Schematischer Wirkungsquerschnitt für die Einfachionisation	10
2.4. Termschema für lithiumähnliche Ionen am Beispiel von O^{5+}	11
2.5. Fano-Profil einer autoionisierenden Resonanz	14
3.1. Darstellung des Experimentaufbaus	20
3.2. Darstellung der Elektronenkanone	21
3.3. Ströme an der Elektronenkanone	23
3.4. Korrekturfunktion für den Elektronenstrom	24
3.5. Einfluss des Analysiermagneten und des Kugelkondensators auf die Messung des Wirkungsquerschnittes	25
3.6. Wirkungsquerschnitt für die Einfachionisation von He^+ -Ionen	26
4.1. Blockschaltbild für das dynamische Messverfahren	29
4.2. Teilspektren des dynamischen Messverfahrens	30
4.3. Bestimmung des normierten Signals	31
4.4. Teilspektren des Energie-Scan-Messverfahrens	34
4.5. Blockschaltbild für das Energie-Scan-Messverfahren	35
5.1. Energieschema für die Einfachionisation von C^{3+} -Ionen.	39
5.2. Wirkungsquerschnitt für die Einfachionisation von C^{3+} -Ionen	41
5.3. Indirekte Beiträge zur Einfachionisation von C^{3+} -Ionen	42
5.4. READI-Resonanzen für die Einfachionisation von C^{3+} -Ionen	44
5.5. EA und REDA für die Einfachionisation von C^{3+} -Ionen	46
5.6. Beiträge zur Ionisation durch resonanten Einfang in $1s2s3l3l'$ -Zustände	47
6.1. Energieschema für die Einfachionisation von C^{4+} -Ionen	50
6.2. Ionisationsquerschnitt für C^{4+} -Ionen mit unterschiedlichem Anteil an metastabilen Ionen	51
6.3. READI-Resonanzen für C^{4+} -Ionen im $1s2s^3S_1$ -Zustand	52
6.4. Indirekte Prozesse bei der Elektronenstoßionisation von C^{4+} -Ionen . .	54
6.5. Vergleich der indirekten Beiträge zur Einfachionisation von C^{4+} -Ionen für unterschiedlichen metastabilen Anteil	55

6.6. Vergleich zwischen Experiment und Theorie für die indirekten Beiträge zur Ionisation	57
7.1. Einfachionisation von Ba^{4+} -Ionen	61
7.2. Detailansicht für die Einfachionisation von Ba^{4+} -Ionen	62
7.3. Wirkungsquerschnitte für die Ionisation von Ba^{1+}	65
7.4. Wirkungsquerschnitte für die Ionisation von Ba^{2+}	66
7.5. Wirkungsquerschnitte für die Ionisation von Ba^{3+}	68
7.6. Wirkungsquerschnitte für die Ionisation von Ba^{4+}	69
7.7. Wirkungsquerschnitte für die Ionisation von Ba^{5+}	70
7.8. Wirkungsquerschnitte für die Ionisation von Ba^{6+}	71
7.9. Wirkungsquerschnitte für die Ionisation von Ba^{7+}	72
7.10. Wirkungsquerschnitte für die Ionisation von Ba^{8+}	73
7.11. Wirkungsquerschnitte für die Ionisation von Ba^{9+}	74
7.12. Wirkungsquerschnitte für die Ionisation von Ba^{10+}	76
7.13. Wirkungsquerschnitte für die Ionisation von Ba^{11+}	77
7.14. Wirkungsquerschnitte für die Ionisation von Ba^{12+}	77
7.15. Wirkungsquerschnitt für die Einfachionisation von Ba^{13+}	78
7.16. Energielagen der ersten beiden $3d$ -Resonanzen	79
7.17. Beispiel für die Bestimmung der Resonanzstärke.	80
7.18. Normierte Resonanzstärken	81
7.19. Wirkungsquerschnitt für die Sechsfachionisation von Ba^{4+} . (Absolutmessungen hellgrau, Scanmessungen schwarz, jeweils mit statistischem Fehler)	82
7.20. Summierte Resonanzstärken	83
7.21. Resonanzstärken in Abhängigkeit von der Ionisationsstufe	84
7.22. Vergleich statistisches Modell–Experiment für den ersten Peak.	89
7.23. Vergleich statistisches Modell–Experiment für den zweiten Peak.	90
7.24. Vergleich von vorhergesagtem Modellparameter μ mit experimentell bestimmten Werten.	91

Tabellenverzeichnis

2.1. Zusammenstellung der verschiedenen Ionisationsmechanismen	6
4.1. Instrumentelle Fehler	33
6.1. Anregungsenergie aus dem $1s2s\ ^3S_1$ -Zustand in einige autoionisierenden Zustände.	58
7.1. Übersicht über die gemessenen Wirkungsquerschnitte zur k-fach Ionisation von Ba^{n+} -Ionen	63
7.2. Ionisationspotentiale für Ba^{n+} -Ionen.	64
7.3. Parameter des statistischen Modells für den ersten Resonanzpeak . . .	88
7.4. Parameter des statistischen Modells für den zweiten Resonanzpeak . .	90

Literaturverzeichnis

- [Aic98] K. Aichele, U. Hartenfeller, D. Hathiramani, G. Hofmann, V. Schäfer, M. Steidl, M. Stenke, M. Salzborn, M. Pattard und J. M. Rost. *Electron impact ionization of the hydrogen-like ions B^{4+} , C^{5+} , N^{6+} and O^{7+}* . J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. (1998). **31**(10), S. 2369.
- [Aic00] K. Aichele, W. Shi, F. Scheuermann, H. Teng, E. Salzborn und A. Müller. *Resonant indirect processes in electron-impact single ionization of Ne^{7+} ions*. Phys. Rev. A (2000). **63**, S. 014701.
- [Bad98] N. R. Badnell, M. S. Pindzola, I. Bray und D. C. Griffin. *Time-independent and time-dependent close-coupling methods for the electron-impact ionization of Mg^+ , Al^{2+} and Si^{3+}* . J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. (1998). **31**(4), S. 911.
- [Ban99] M. E. Bannister. *Private Mitteilung* (1999).
- [Bar96] K. Bartschat, E. T. Hudson, M. P. Scott, P. G. Burke und V. M. Burke. *Electron - atom scattering at low and intermediate energies using a pseudo-state/ R -matrix basis*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. (1996). **29**(1), S. 115.
- [Bar98] K. Bartschat. *The R -Matrix with pseudo-states method: theory and applications to electron scattering and photoionization*. Comput. Phys. Commun. (1998). **114**, S. 168.
- [Bec85] R. Becker, A. Müller, C. Achenbach, K. Tinschert und E. Salzborn. *A dense electron target for the study of electron-ion collisions*. Nucl. Instrum. Meth. in Phys. Res. B (1985). **9**, S. 385.
- [Bél97] C. Bélenger, P. Defrance, E. Salzborn, V. P. Shevelko, H. Tawara und D. B. Uskov. *Double ionization of neutral atoms, positive and negative ions by electron impact*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. (1997). **30**(11), S. 2667.
- [Ber97] K. Berrington, J. Pelan und L. Quigley. *Electron impact ionization of Be^+ and photoionization of be at the K edge*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. (1997). **30**(21), S. 4973.
- [Ber99] K. Berrington (1999). *Private Mitteilung*.

- [Bev69] P. R. Bevington. *Data reduction and error analysis for the physical sciences*. McGraw-Hill Book Company, New York (1969).
- [Böh97] C. Böhme. *Messung von Wirkungsquerschnitten für die Doppelionisation von Li^+ Ionen*. Diplomarbeit, Universität Gießen (1997).
- [Bra92] I. Bray und A. Stelbovics. *Convergent close-coupling calculations of electron-hydrogen scattering*. Phys. Rev. A (1992). **46**, S. 6995.
- [Bra94] I. Bray. *Convergent close-coupling method for the calculation of electron scattering on hydrogenlike targets*. Phys. Rev. A (1994). **49**(2), S. 1066.
- [Bra95] I. Bray. *Calculation of electron-impact ionization of lithium-like targets*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. (1995). **28**(7), S. L247.
- [Bur93] P. G. Burke und K. A. Berrington. *Atomic and molecular processes: an R-Matrix Approach*. Institute of Physics Publishing, Bristol, Grossbritannien (1993).
- [Cal93] J. Callaway und K. Unnikrishnan. *Electron impact excitation of the $n = 3$ states of hydrogen at intermediate energies*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. (1993). **26**(14), S. L419.
- [Car70] T. A. Carlson, C. W. Nestor, N. Wassermann und J. D. McDowell. *Calculated ionization potentials for multiply charged ions*. Atomic Data (1970). **2**(1), S. 63.
- [Cra79] D. H. Crandall, R. A. Phaneuf, B. E. Hasselquist und D. C. Gregory. *Measured cross sections for ionisation of C^{3+} , N^{4+} and O^{5+} ions with contribution due to excitation-autoionisation*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. (1979). **12**(7), S. L249.
- [Der97] A. Derevianko und W. R. Johnson. *Two-photon decay of 2^1S_0 and 2^3S_1 states of heliumlike ions*. Phys. Rev. A (1997). **56**, S. 1288.
- [Dol61] K. T. Dolder, M. F. Harrison und P. C. Thoneman. *A measurement of the ionization cross-section of Helium ions by electron Impact*. Proc. Roy. Soc. (1961). **A264**, S. 367.
- [Dra86] G. W. F. Drake. *Spontaneous two-photon decay rates in hydrogenlike and heliumlike ions*. Phys. Rev. A (1986). **34**(4), S. 2871.
- [Dun85] G. H. Dunn. *Electron-ion ionization*. In: *Electron Impact Ionization* (G. H. Dunn und T. D. Märk, Hg.). Springer Verlag, Wien-New York (1985) S. 277–319.

- [Dya89] K. D. Dyll, I. P. Grant, C. D. Johnson, F. A. Parpia und E. P. Plummer. *GRASP: A General-Purpose Relativistic Atomic Structure Program*. Comput. Phys. Commun. (1989). **55**, S. 425.
- [Eng87] A. Engel. *Stochastik*. Ernst Klett Verlag, GmbH u. Co. KG, Stuttgart (1987).
- [Fan61] U. Fano. *Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts*. Physical Review (1961). **124**(6), S. 1866.
- [Fan65] U. Fano und J. W. Cooper. *Line profiles in far-UV absorption spectra on the rare gas*. Physical Review (1965). **137**, S. 1364.
- [Fis95] V. Fisher, Y. Ralchenko, A. Goldgirsh, D. Fisher und Y. Maron. *A scaling of multiple ionization cross sections*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. (1995). **28**(14), S. 3027.
- [Fra97] A. Frank. *Eine Experimentieranlage zum Studium der Streuung von Elektronen an Ionen*. Dissertation, Universität Gießen (1997).
- [Gry65] M. Gryziński. *Classical theory of atomic collisions. I. Theory of inelastic collisions*. Phys. Rev. A (1965). **138**, S. 336.
- [Har66] M. F. A. Harrison. *The determination of atomic collision cross section using crossed electron and ion beams (and some sources of error in such experiments)*. Brit. J. Appl. Phys. (1966). **17**, S. 371.
- [Hen82] R. J. W. Henry und A. Z. Msezane. *Cross sections for inner-shell excitation of Na-like ions*. Phys. Rev. A (1982). **26**, S. 2545.
- [Hof87] G. Hofmann. *Messungen zur Elektronenstoßionisation von Ionen: Aufbau eines Datenaufnahmesystems und Untersuchung von Raumladungseinflüssen*. Diplomarbeit, Universität Gießen (1987).
- [Hof91a] G. Hofmann. *Messung zur Elektronenstoßionisation mehrfach geladener Ionen mit einem Energie-Scan Messverfahren*. Dissertation, Universität Gießen (1991).
- [Hof91b] G. Hofmann, A. Müller, J. Neumann, U. Pracht, M. Stenke, R. Völpel, B. Weissbecker und E. Salzborn. *Resonances in the electron-impact multiple ionization of Ba^{1+} and Ba^{2+} Ions*. In: *Proceedings of the XVIIth International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions* (I. E. McCarthy, W. R. MacGillivray und M. C. Standage, Hg.). Griffith University, Brisbane, Australia (1991) S. 295.
- [Kim83] Y. K. Kim. *Physics of ion-ion and electron-ion collisions*. In: *Physics of Ion-Ion and Electron-Ion Collisions* (F. Brouillard und J. W. McGowan, Hg.). Plenum Press, New York (1983) S. 101.

- [LaG81] K. J. LaGattuta und Y. Hahn. *Electron impact ionization of Fe^{15+} by resonant double auger ionization*. Phys. Rev. A (1981). **24**(4), S. 2273.
- [Len94] P. Lenard. Wied. Ann. (1894). **51**, S. 225.
- [Len03] P. Lenard. *Über die Absorption von Kathodenstrahlen verschiedener Geschwindigkeiten*. Annalen der Physik (1903). **12**, S. 714.
- [Lin95] J. Linkemann, A. Müller, J. Kenntner, D. Habs, D. Schwalm, A. Wolf, N. R. Badnell und M. S. Pindzola. *Electron-impact ionization of Fe^{15+} ions: an ion storage ring cross section measurement*. Phys. Rev. Lett. (1995). **74**(24), S. 4173.
- [Lot67] W. Lotz. *An empirical formula for the electron-impact ionization cross-section*. Zeitschrift für Physik (1967). **206**, S. 205.
- [Lot68] W. Lotz. *Electron-impact ionization cross-sections and ionization rate coefficients for atoms and ions from Hydrogen to Calcium*. Zeitschrift für Physik (1968). **216**, S. 241.
- [Lot69] W. Lotz. *Electron-impact ionization cross-sections and ionization rate coefficients for atoms and ions from Scandium to Zinc*. Zeitschrift für Physik (1969). **220**, S. 466.
- [Lot70] W. Lotz. *Electron-impact ionization cross-sections for atoms up to $Z=108$* . Zeitschrift für Physik (1970). **232**, S. 101.
- [Mar] W. C. Martin, J. Sugar und A. Musgrove.
[http : //physics.nist.gov/PhysRefData/contents – atomic.html](http://physics.nist.gov/PhysRefData/contents-atomic.html).
Atomic Spectra Database.
- [Mar94] R. E. Marrs, S. R. Elliott und D. A. Knapp. *Production and trapping of hydrogenlike and bare uranium ions in an electron beam ion trap*. Phys. Rev. A (1994). **72**, S. 4082.
- [Mit99] D. M. Mitnik, M. S. Pindzola, D. C. Griffin und N. R. Badnell. *Electron-impact ionization of C^{3+} using the R -matrix pseudo-state method*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. (1999). **32**(17), S. L479.
- [Mül80] A. Müller und R. Frodl. *L-Shell contributions to multiple ionization of Ar^{i+} ions ($i = 1, 2, 3$) by electron impact*. Phys. Rev. Lett. (1980). **44**(1), S. 29.
- [Mül83] A. Müller, W. Groh und E. Salzborn. *A statistical interpretation of transfer-ionization in slow collisions of multiply charged ions with atoms*. Phys. Rev. Lett. (1983). **51**, S. 107.

- [Mül85] A. Müller, K. Tinschert, C. Achenbach, R. Becker und E. Salzborn. *A new technique for the measurement of ionization cross sections with crossed electron and ion beams*. Nucl. Instrum. Meth. in Phys. Res. B (1985). **10**(11), S. 204.
- [Mül87] A. Müller, G. Hofmann, K. Tinschert, R. Sauer und E. Salzborn. *Signal enhancement in electron-ion crossed-beams experiments*. Nucl. Instrum. Meth. in Phys. Res. B (1987). **24**(25), S. 369.
- [Mül88a] A. Müller, G. Hofmann, K. Tinschert und E. Salzborn. *Dielectronic capture with subsequent two-electron emission in electron-impact ionization of C^{3+} ions*. Phys. Rev. Lett. (1988). **61**(12), S. 1352.
- [Mül88b] A. Müller, K. Tinschert, G. Hofmann, E. Salzborn und G. H. Dunn. *Resonances in electron-impact single, double, and triple ionization of heavy metal ions*. Phys. Rev. Lett. (1988). **61**(1), S. 70.
- [Mül89] A. Müller, G. Hofmann, B. Weissbecker, M. Stenke, K. Tinschert, M. Wagner und E. Salzborn. *Correlated two-electron transitions in electron-impact ionization of Li^+ ions*. Phys. Rev. Lett. (1989). **63**(7), S. 758.
- [Mül00] A. Müller, H. Teng, G. Hofmann, R. A. Phaneuf und E. Salzborn. *Autoionizing resonances in electron-impact ionization of O^{5+} ions*. Phys. Rev. A (2000). **62**, S. 062720.
- [Nas99] S. Nasu, S. Nakazaki und K. Berrington. *Ionization cross section of Be^{2+} , B^{3+} and C^{4+} by electron impact*. In: *The physics of electronic and atomic collisions* (Y. Itikawa, K. Okuno, H. Tanaka, A. Yagishita und M. Matsuza-wa, Hg.), AIP Conference Proceedings. American Institute of Physics, New York (1999) S. 449.
- [Pea69] B. Peart, D. S. Walton und K. T. Dolder. *The ranges of validity of the born and bethe approximations for the single ionization of He^+ and Li^+ ions by electron impact*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. (1969). **2**(2), S. 1347.
- [Pea89] B. Peart, J. R. A. Underwood und K. Dolder. *Autoionisation and threshold ionisation of Ba^+ by energy-resolved electrons*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. (1989). **22**(10), S. 1679.
- [Pea93] B. Peart, S. J. T. Green und J. W. G. Thomason. *The double ionization of Ba^+ by energy-resolved electrons*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. (1993). **26**(1), S. 149.
- [Pha86] R. A. Phaneuf. *Experiments on electron-impact excitation and ionisation of ions*. In: *Atomic processes in electron-ion and ion-ion collisions* (F. Brouil-lard, Hg.), NATO ASI Series. Plenum Press (1986) S. 117.

- [Pin97] M. S. Pindzola, F. Robicheaux, N. R. Badnell und T. W. Gorczyca. *Time-dependent and time-independent close-coupling methods for the electron-impact ionization of Be^+* . Phys. Rev. A (1997). **56**(3), S. 1994.
- [Pre92] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling und B. P. Flannery. *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press, New York (1992).
- [Qui96] L. Quigley und K. Berrington. *The QB method: analysing resonances using R-Matrix theory. Applications to C^+ , He and Li*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. (1996). **29**(20), S. 4529.
- [Ree92] K. J. Reed und M. H. Chen. *Distorted-wave calculations of cross sections for electron-impact ionization of lithiumlike ions*. Phys. Rev. A (1992). **45**(7), S. 4519.
- [Rin82] K. Rinn, A. Müller, H. Eichenauer und E. Salzborn. *Development of single-particle detectors for keV ions*. Rev. Sci. Instrum. (1982). **53**(6), S. 829.
- [Rød79] M. Rødbro, R. Bruch und P. Bisgaard. *High-resolution projectile auger spectroscopy for Li, Be, B and C excited in single gas collisions I. Line energies for prompt decay*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. (1979). **12**(15), S. 2413.
- [Rus58] A. Russek und M. Tom Thomas. *Ionization produced by atomic collisions at keV energies*. Physical Review (1958). **109**(6), S. 2015.
- [Rus59] A. Russek und M. Tom Thomas. *Ionization produced by atomic collisions at keV energies. II*. Physical Review (1959). **114**(6), S. 1538.
- [Rus63] A. Russek. *Ionization Produced by High-Energy Atomic Collisions*. Physical Review (1963). **132**, S. 246.
- [Rus70] A. Russek und J. Meli. *Ionization phenomena in high-energy atomic collisions*. Physica (1970). **46**, S. 222.
- [Sch77] D. Schneider, R. Bruch, W. H. E. Schwarz, T. C. Chang und C. F. Moore. *Identifications of auger spectra from 2-MeV foil-excited Carbon ions*. Phys. Rev. A (1977). **15**(3), S. 926.
- [Sch94] H. T. Schmidt, P. Forck, M. Grieser, D. Habs, J. Kenntner, G. Miersch, R. Repnow, U. Schramm, T. Schüssler, D. Schwalm und A. Wolf. *High-precision measurement of the magnetic-dipole decay rate of metastable heliumlike carbon ions in a storage ring*. Phys. Rev. Lett. (1994). **72**, S. 1616.
- [Sco00] M. P. Scott, H. Teng und P. G. Burke. *Autoionizing states in electron-impact ionization of C^{3+}* . J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. (2000). **33**(2), S. L63.

- [Sea62] M. J. Seaton. *The theory of excitation and ionization by electron impact*. In: *Atomic and Molecular Processes* (D. R. Bates, Hg.). Academic Press, New York (1962) S. 374.
- [She95] V. P. Shevelko und H. Tawara. *Semiempirical formulae for multiple ionization of neutral atoms and positive ions by electron impact*. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* (1995). **28**(18), S. L589.
- [Tay90] S. S. Tayal und R. J. W. Henry. *Doubly excited states in electron-impact ionization of C^{3+} ions*. *Phys. Rev. A* (1990). **42**(3), S. 1831.
- [Ten00] H. Teng (2000). Private Mitteilung.
- [Tho12] S. J. J. Thomson. *Ionization by moving electrified particles*. *Phil. Mag.* (1912). **23**, S. 449.
- [Tim98] F. Timphus. *Ausbau einer Experimentieranlage mit gekreuzten Elektronen- und Ionenstrahlen*. Diplomarbeit, Universität Gießen (1998).
- [Tin89] K. Tinschert. *Experimentelle Untersuchung resonanter und nichtresonanter Ionisationsmechanismen bei der Elektronenstoßionisation von Ionen*. Dissertation, Universität Gießen (1989).
- [Tin91] K. Tinschert, A. Müller, G. Hofmann und E. Salzborn. *Electron-impact single and double ionization of Ba^{2+} and Ba^{3+} ions*. *Phys. Rev. A* (1991). **43**(7), S. 3522.
- [VR62] H. Van Regemorter. *Rate of collisional excitation in stellar atmospheres*. *Astrophys. J.* (1962). **136**, S. 906.
- [Wig47] E. P. Wigner und L. Eisenbud. *Higher angular momenta and long range interaction in resonance reactions*. *Physical Review* (1947). **72**, S. 29.
- [You81] S. M. Younger. *Electron impact ionization cross sections and rates for highly ionized atoms*. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* (1981). **26**(4), S. 329.
- [You85a] S. M. Younger. *Quantum theoretical methods for calculation ionization cross sections*. In: *Electron Impact Ionization* (G. H. Dunn und T. D. Märk, Hg.). Springer Verlag, Wien-New York (1985) S. 1.
- [You85b] S. M. Younger und T. D. Märk. *Semi-empirical and semi-classical approximations for electron ionization*. In: *Electron Impact Ionization* (G. H. Dunn und T. D. Märk, Hg.). Springer Verlag, Wien-New York (1985) S. 24.

Danksagung

Eine solche Arbeit fasst die wissenschaftlichen Ergebnisse eines längeren Arbeitszeitraums zusammen. Diese kann man jedoch nicht alleine erzielen, daher möchte ich die letzten Seiten dieser Arbeit nutzen um allen Personen zu danken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Die Arbeit wurde am Institut für Kernphysik im Strahlencentrum der Justus-Liebig-Universität Giessen durchgeführt.

Als erstes möchte ich meinen Dank meinem Betreuer Prof. Dr. A. Müller aussprechen. Neben der interessanten Aufgabenstellung war sein stetes Interesse am Fortgang dieser Arbeit eine große Motivationshilfe. In vielen Gesprächen war er bei der Interpretation und Auswertung der Messungen eine sehr große Unterstützung, aber auch in der alltäglichen Laborarbeit konnte er durch seine Erfahrung viel zur Lösung anstehender Probleme beitragen und fehlte es mal an der nötigen „Manpower“ für die Messungen, so hat er kurzerhand selbst eine Schicht übernommen. Meine besondere Dankbarkeit gebührt ihm dafür, dass er mir bei der Fertigstellung dieser Arbeit hilfreich zur Seite stand, trotz des Handicaps durch einen Unfall. Ich wünsche ihm auf diesem Weg gute Besserung.

Weiterhin gilt mein besonderer Dank Herrn Dr. S. Ricz. In seinem Aufenthalt am Institut für Kernphysik trug er durch seine tatkräftige Unterstützung bei der Laborarbeit sowie den Messungen wesentlich zum Gelingen dieser Arbeit bei. Darüber hinaus hat er mir in sehr vielen Gesprächen geholfen, die Atomphysik zu verstehen und den Spaß an der Arbeit nicht zu verlieren.

Bei Herrn Dr. S. Schippers möchte ich mich für die Unterstützung bei den Messungen sowie bei der Laborarbeit bedanken. Sowie dafür, dass er immer die Ruhe bewahrend bei allen auftretenden Problemen mit Rat und Tat zur Stelle war.

Die Messungen wären ohne die Beteiligung von Herrn Dipl.-Phys. C. Böhme und Herrn cand. phys. J. Jacobi nicht möglich gewesen. Durch die gute Zusammenarbeit mit ihnen waren die langen Messzeiten und die notwendigen Wartungsarbeiten im Labor viel leichter zu bewältigen.

Bei allen anderen aktiven und ehemaligen Mitgliedern der Arbeitsgruppe möchte ich mich für das angenehme Arbeitsklima sowie die hervorragende Zusammenarbeit bedanken. Es sind dies die Herrn Dr. A. Frank, Dr. O. Uwira, Dr. T. Bartsch, denen ich insbesondere für die moralische Unterstützung in der Anfangsphase nochmals danken möchte, Dr. A. Hoffknecht, Dr. W. Shi, dem ich für die Mithilfe bei einem Teil der Messungen danken möchte, Dr. H. Teng, dessen R-Matrix-Rechnungen Mo-

tivation für die Messungen an C^{3+} waren, Dr. C. Brandau, Dipl. Phys. S. Böhm, Dipl. Phys. S. Kieslich.

Herrn Prof. Dr. E. Salzborn, dem ich hier nochmals für seine kurzfristige Bereitschaft als zweiter Gutachter zu fungieren danken möchte, sowie allen Mitgliedern seiner Arbeitsgruppe danke ich für die Hilfsbereitschaft und gute Zusammenarbeit. Besonders den „Elektronenstoßionisierern“ sei für den Austausch von Bauteilen und technischem Wissen nochmals herzlich gedankt.

Den Mitarbeitern des Strahlencentrums gilt ebenfalls ein besonderes Dankeschön für die Bereitstellung der notwendigen Infrastruktur und das angenehme freundschaftliche Arbeitsklima. Besonderen Dank verdient Herr U. Juritz für die vielen Arbeiten im Labor, sowie Herr Dipl. Phys. W. Arnold für die Hilfe bei allen Problemen die die Elektronik betreffen, Herrn Dr. K. Huber für die Software zur Experimentsteuerung sowie die ständige Unterstützung bei Software-Fragen. Frau I. Allendörfer und Frau G. Bernhardt danke ich für die Hilfe bei den Verwaltungsaufgaben, ebenso Frau K. Rinn, ihr sei nochmals herzlich für die Suche nach Rechtschreibfehlern gedankt.

Weiterhin möchte allen anderen Freunden und Bekannten dafür danken, dass sie mir ein soziales Umfeld geschaffen haben, welches diese Arbeit mit ermöglicht hat.

Ebenfalls möchte ich mich bei allen bedanken, die hier unerwähnt bleiben.

Mein Dank gilt insbesondere meinem Bruder, meiner Mutter und meinem Vater, ihre Unterstützung erfolgt in so natürlicher und selbstloser Weise, dass ich dies hier nicht ausreichend würdigen kann. Auch meinem Großvater nochmals ein herzliches Dankeschön, er war mein ganzes bisheriges Leben lang als guter Freund und Ansprechpartner für mich da, leider ist er während der Fertigstellung dieser Arbeit verstorben.