

Dielektronische Rekombination lithium- und berylliumartiger Xenonionen am Schwerionenspeicherring ESR

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

vorgelegt beim

Fachbereich 07
(Mathematik und Informatik, Physik, Geographie)
der
Justus-Liebig-Universität Gießen

von

Dietrich Bernhardt, Dipl.-Phys.

aus Braunfels-Tiefenbach

Institut für Atom- und Molekülphysik
Justus-Liebig-Universität Gießen
2012

Dekan: Prof. Dr. C. Diller
1. Berichterstatter: Prof. Dr. A. Müller
2. Berichterstatter: Prof. Dr. W. Scheid

Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurden Messungen zur dielektronischen Rekombination (DR) von lithium- und berylliumartigen Xenonionen untersucht. Der betrachtete Relativenergiebereich von 0 bis 500 eV (Xe^{51+}) bzw. 0 bis 550 eV (Xe^{50+}) deckt hierbei alle $\Delta n = 0$ -DR-Resonanzserien der beiden Ladungszustände ab.

Die Messungen wurden am Experimentierspeicherring (ESR) der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) in Darmstadt durchgeführt. Hierbei wurde der bei einer Ionenenergie von 58.5 MeV/u gespeicherte Strahl mit einem Elektronenstrahl überlagert. Nach einer initialen Kühlphase mit identischen Elektronen- und Ionengeschwindigkeiten wurde die Energie des Elektronenstrahls in Abständen weniger Millisekunden variiert, wobei alternierend Kühl- und Messenergie angesteuert wurden. Dieses Verfahren ermöglicht es, den Elektronenstrahl parallel zur Strahlkühlung und auch als Target energiescharfer, freier Elektronen einzusetzen. Die Messung der Rekombinationsereignisse erfolgte durch Einzelteilchennachweis der rekombinierten Ionen. Durch Normierung auf die Teilchendichte von Elektronen und Ionen wurde der Ratenkoeffizient bestimmt. Die Variation der Messenergie erlaubt die Aufnahme eines kompletten Rekombinationsratenkoeffizientenspektrums.

Schwerpunkt dieser Arbeit war die Bestimmung der Energien der Inter-L-Schalen-Anregungen $2s \rightarrow 2p_{1/2}$ bzw. $2p_{3/2}$ (Xe^{51+}) und $2s^2 \ ^1S_0 \rightarrow 2s2p \ ^3P_1, 2s2p \ ^3P_2$ bzw. $2s2p \ ^1P_1$ sowie $2s2p \ ^3P_0 \rightarrow 2p^2 \ ^3P_0$ (Xe^{50+}). Dies erfolgte durch Extrapolation der zugeordneten DR-Rydbergresonanzserien [$2s + e^- \rightarrow 2p_{1/2} n$ bzw. $2p_{1/2} n; 2s^2 \ ^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p \ ^3P_1)n, (2s2p \ ^3P_2)n$ bzw. $(2s2p \ ^1P_1)n$] zu $n \rightarrow \infty$ bzw. aus der Position einzelner, hochaufgelöster DR-Resonanzen niedrigster Energie [$(2s2p \ ^1P_1)8_j$ bzw. $(2p^2 \ ^3P_1)8_j$]. Im Einzelnen wurden die folgenden Übergangenergien ermittelt (Angaben in eV): 119.796 ± 0.056 ($2s-2p_{1/2}$), 492.19 ± 0.13 ($2s-2p_{3/2}$), 127.262 ± 0.051 ($2s^2 \ ^1S_0-2s2p \ ^3P_1$), 469.010 ± 0.390 ($2s^2 \ ^1S_0-2s2p \ ^3P_2$), 532.834 ± 0.047 ($2s^2 \ ^1S_0-2s2p \ ^1P_1$) und 533.735 ± 0.028 ($2s2p \ ^3P_0-2p^2 \ ^3P_1$). Sie stimmen bei den kleineren Energien ($2s-2p_{1/2}$, $2s^2 \ ^1S_0-2s2p \ ^3P_1$) sehr gut mit spektroskopischen Präzisionsmessungen [1, 2] überein, setzen bei höheren Energien neue Bestmarken ($2s-2p_{3/2}$), oder stellen die ersten Messungen dieser Übergangenergie dar ($2s^2 \ ^1S_0-2s2p \ ^3P_2$, $2s^2 \ ^1S_0-2s2p \ ^1P_1$ bzw. $2s2p \ ^3P_0-2p^2 \ ^3P_1$).

Des Weiteren wurde die dielektronische Rekombination des initial metastabilen $2s2p \ ^3P_0$ -Zustands untersucht und aus der zeitabhängigen Entwicklung des $2s2p \ ^3P_0$ -Strahlanteils eine Obergrenze der ($2s2p \ ^3P_0 \rightarrow 2s^2 \ ^1S_0$)-E1M1-Zweiphotoneneübergangsrate von $(8.8 \pm 2.8) \cdot 10^{-3} /s$ bestimmt. Dies ist äquivalent zu einer Mindestlebensdauer des E1M1-Zweiphotoneneübergangs von etwa 113 ± 36 Sekunden. Letztere übersteigt die aus der bisher einzigen publizierten, theoretischen Arbeit von Laughlin [3] extrahierte Lebensdauer von 30 Sekunden um fast das Vierfache.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Physikalische Grundlagen	3
1.1 Die Atomare Struktur hochgeladener Wenigelektronensysteme	3
1.1.1 Wasserstoffartige Ionen	4
1.1.2 Wenigelektronensysteme	11
1.1.3 Photonenübergänge	15
1.1.4 Rydbergatome	19
1.2 Wirkungsquerschnitt und Ratenkoeffizient	22
1.3 Rekombinationsprozesse	23
1.3.1 Photorekombination	23
1.3.2 Radiative Rekombination (RR)	23
1.3.3 Dielektronische Rekombination (DR)	25
1.3.4 Interferenz zwischen DR und RR	29
1.3.5 Feldionisation hoher Rydbergzustände	30
1.4 Breit-Wechselwirkung	32
2 Experimentelle Grundlagen	35
2.1 Der Beschleunigerkomplex der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI)	35
2.1.1 "Stripping" der Ionen	35
2.2 Experimentierspeicherring (ESR)	37
2.3 Strahlkühlung	38
2.3.1 Elektronenkühlung	38
2.3.2 Elektronenkühler	39
2.3.3 Stochastische Kühlung	40
2.4 Der Elektronenkühler als Elektronentarget	41
2.4.1 Kühlung und Messung parallel	41
2.5 Detektion rekombinierter Ionen	43
2.6 Datenaufnahme	44

3	Datenauswertung	47
3.1	Konsistenzprüfung	47
3.2	Bestimmung der Elektron-Ion-Stoßenergie	47
3.2.1	Energiekalibrierung	49
3.2.2	Fehlerabschätzung	53
3.3	Energieverteilung von Elektronen und Ionen	56
3.3.1	Impulsunschärfe des Ionenstrahls	56
3.3.2	Anisotrope Maxwellverteilung der Elektronen	57
3.3.3	Elektronenenergieverteilung im Kühler	57
3.3.4	Monte-Carlo-Simulation	59
3.4	Experimentelle Resonanzlinienform	59
3.4.1	Impulsunschärfe des Ionenstrahls	60
3.4.2	Anisotrope Maxwellverteilung	61
3.4.3	Relativenergieverteilung im Kühler	62
3.5	Bestimmung des Ratenkoeffizienten	63
3.5.1	Rekombinationsuntergrund durch Stöße mit Restgasmolekülen	64
3.5.2	Effektive Wechselwirkungslänge	66
3.5.3	Elektronendichte	68
3.5.4	Ionenstrom	69
3.5.5	Zählrate	70
3.5.6	Gesamtfehler des Ratenkoeffizienten	72
4	Resultate	73
4.1	Lithiumartiges Xenon	73
4.1.1	$2p_{3/2} 9l_j$ -Resonanzgruppe	75
4.1.2	Bestimmung von Seriengrenzen – Methodik	76
4.1.3	$2s-2p_{1/2}$ -Aufspaltung	80
4.1.4	$2s-2p_{3/2}$ -Aufspaltung	84
4.1.5	Rydbergresonanzgruppenentwicklung	87
4.1.6	Resonanzstärken	89
4.1.7	Plasmaratenkoeffizient	92
4.2	Berylliumartiges Xenon	94
4.2.1	$(2s2p^1P_1)9_j$ -Resonanzgruppe	96
4.2.2	Bestimmung von Intra-L-Schalen Anregungsenergien	97
4.2.3	Präzisionsmessungen der Anregungsenergien	99
4.2.4	Vergleich mit Literaturwerten	108
4.2.5	Rydbergresonanzgruppenentwicklung	114
4.2.6	Struktur der $(2s2p^3P_2)n_j$ -Resonanzgruppen	116
4.2.7	Bestimmung des metastabilen $2s2p^3P_0$ -Strahlanteils	119
4.2.8	Resonanzstärken	123
4.2.9	Trielektronische Rekombination (TR)	125
4.2.10	DR-Spektrum des initial metastabilen $2s2p^3P_0$ -Strahlanteils	126
4.2.11	Plasmaratenkoeffizient	128

4.3	$^{136}\text{Xe}^{50+}(2s2p\ ^3\text{P}_0)$ -Lebensdauerbestimmung	130
4.3.1	Zweiphotonenübergänge	131
4.3.2	Lebensdauer des $2s2p\ ^3\text{P}_0$ -Strahlanteils	133
4.3.3	Ent- und Bevölkerungsprozesse des $2s2p\ ^3\text{P}_0$ -Zustands	144
4.3.4	Folgerungen für die $2s2p\ ^3\text{P}_0 \rightarrow 2p^2\ ^1\text{S}_0$ -E1M1-Übergangsrate $A_{2\gamma}$	159
4.4	Wasserstoffartiges Uran	162
4.4.1	Breit-Wechselwirkung im Ratenkoeffizientenspektrum	163
4.4.2	Einfluss von DR-RR-Interferenzeffekten	165
5	Ausblick	167
5.1	Optimierte E1M1-Lebensdauerermessung	167
5.1.1	Elementauswahl	167
5.1.2	Experimentdurchführung	175
5.2	U^{91+} -KLL-DR bei verbesserter Kühlung	176
	Literaturverzeichniss	179
6	Anhang	195
6.1	Monte-Carlo-Simulation ' <i>VDISTRIB</i> '	195
6.1.1	Eingabedatei der DR-Resonanzen	195
6.1.2	Radiative Rekombination	195
6.1.3	Eingabe von Simulationsparametern	196
6.1.4	Berechnung des DR-Ratenkoeffizienten	197
6.1.5	Ausgabe der Ratenkoeffizienten	197

Einleitung

In der Antike wurde u.a. von Aristoteles der Aufbau der Materie aus den Elementen Erde, Wasser, Luft und Feuer postuliert [4]. In moderner Betrachtung lassen sich diesen Elementen die vier Aggregatzustände Fest, Flüssig, Gasförmig und Plasma zuordnen. Die sichtbare Materie des Universums befindet sich nahezu vollständig im Plasma-Aggregatzustand, während die anderen Aggregatzustände nur etwa 0.001% des Anteils ausmachen [5]*. So ist das Interesse der Astrophysik an den atomphysikalischen Untersuchungen der Vorgänge in Plasmen bis heute ungebrochen. Das wohl augenfälligste, aus Plasma bestehenden Objekt unserer Umwelt, ist die Sonne. Ihre verschiedenen Bereiche Heliosphäre, Korona, Photosphäre, Konvektions- und Strahlungszone sowie Kern befinden sich allesamt im Plasma-Aggregatzustand, weisen aber stark unterschiedliche Dichten und Temperaturen auf, und sind im Detail noch nicht vollständig verstanden. Im Sonnenkern erreichen Dichte und Temperatur des Plasmas Werte (160 g/cm^3 , $15 \cdot 10^6 \text{ K}$), bei denen die Fusion von Wasserstoffkernen abläuft. Auch für die irdische Fusionsforschung mit dem Ziel der kontrollierten Energiegewinnung mittels Fusion von Wasserstoffkernen, ist die Kenntnis der Eigenschaften von Fusionsplasmen und ihrer Konstituenten von großer Wichtigkeit.

Plasmen bestehen aus Ionen, Elektronen und Photonen sowie – in manchen Fällen – einem gewissen Anteil an Neutralatomen. Für das Verständnis von Plasmen ist das Studium von Ionisations-, Rekombinations- und Anregungsprozessen bei Wechselwirkung von Elektronen bzw. Photonen mit Ionen von großer Bedeutung. Rekombinationsprozesse lassen sich danach unterscheiden, ob die frei werdende Energie direkt an einen dritten Stoßpartner übertragen wird (Drei-Körper-Rekombination) oder mit der Emission von Photonen verbunden sind (Photorekombination). Bei der Photorekombination lässt sich wiederum die radiative Rekombination (Elektroneneinfang bei gleichzeitiger Emission eines Photons) von der dielektronischen Rekombination (Elektroneneinfang bei simultaner Anregung eines gebundenen Elektrons und anschließender Relaxation des doppelt angeregten Ions mittels Photoemission) unterscheiden. Die resonante Struktur der dielektronischen Rekombination stellt dabei in der theoretischen Behandlung – insbesondere bei komplexer atomarer Struktur oder geringer Resonanzenergie – eine beträchtliche Herausforderung dar. Dies führt bei der Modellierung von Plasmen in Fragen der Astrophysik oder Fusionsforschung teilweise zu einer drastischen Unterschätzung der entsprechenden Plasmaratenkoeffizienten im Vergleich zu den Ergebnissen von Rekombinationsexperimenten an Speicherringen [7, 8].

*Es sei darauf hingewiesen, dass die sichtbare, baryonische Materie nur etwa 4.6% der Gesamtenergiedichte des Universums ausmacht [6]. Diese wird von 23% dunkler Materie und 72% dunkler Energie dominiert, deren Ursprung und Zusammensetzung weitestgehend unklar sind.

Untersuchungen an Speicherringen ermöglichen Experimente an gekühlten Ionenstrahlen ausgewählter Spezies ohne Beimischung anderer Elemente, Ladungszustände oder Isotope. Selbst einzelne Kernisomere sind – in einigen Fällen – gezielt separierbar. Des Weiteren ist eine Kontrolle der Strahlanteile angeregter Zustände möglich. Gleichzeitig steht mit Elektronenkühlern ein kaltes Elektronentarget zur Verfügung, das – insbesondere bei niedrigen Relativenergien – für eine exzellente Energieauflösung sorgt. Die resonante Struktur der dielektronischen Rekombination sorgt für eine hohe Sensibilität der zugeordneten Spektren hinsichtlich der Resonanzpositionen. Dies bietet alternative Ansätze der Untersuchung atom- oder kernphysikalischer Eigenschaften jenseits des eigentlichen Rekombinationsprozesses. Exemplarisch seien hier die Bestimmung der Kernradienunterschiede verschiedener Isotope eines Elements [9], die Präzisions-Spektroskopie der $(2s_{1/2}-2p_{1/2})$ -„Lamb-Verschiebung“ in für die Quantenelektrodynamik starker Felder relevanten, lithiumartigen Schwerionen [10] und die Messung langsamer hyperfeininduzierter Übergangsraten in berylliumartigen Systemen [11] genannt.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde die dielektronische Rekombination lithium- und berylliumartiger Xenonionen am Experimentierspeicherring (ESR) der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) untersucht und die Intra-L-Schalen-Anregungen $2s \rightarrow 2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$ bzw. $2s^2 \ ^1S_0 \rightarrow 2s2p \ ^3P_1$, $2s2p \ ^3P_2$, $2s2p \ ^1P_1$ und $2s2p \ ^3P_0 \rightarrow 2p^2 \ ^3P_1$ mit relativen Unsicherheiten von weniger als 10^{-4} bestimmt.

Übergänge aus dem ersten angeregten Zustand ($nsnp \ ^3P_0$) von atomaren Systemen mit zwei Valenzelektronen sind im Falle nicht verschwindenden Kernspins ($I \neq 0$) als zentrale Uhren-Übergänge für die Entwicklung ultrastabiler optischer Zeitgeber [12, 13], aber auch für das fundamentale Verständnis von Korrelationseffekten von großer Bedeutung. Im Falle verschwindenden Kernspins ($I=0$) wurden $(2s2p \ ^3P_0-2s^2 \ ^1S_0)$ -Übergänge zur Untersuchung der Paritätsverletzung vorgeschlagen [14]. Bisherige experimentelle Untersuchungen der Übergangsraten beschränken sich auf ersteren Fall [11, 15, 16]. In der vorliegenden Arbeit wurde für $^{136}\text{Xe}^{50+}$ die Entvölkerung des metastabilen ersten, angeregten Zustands ($2s2p \ ^3P_0$) untersucht, der aufgrund verschwindenden Kernspins ($I=0$) radiativ nur über den extrem seltenen E1M1-Zweiphotonenübergang relaxieren kann.

Die Arbeit ist wie folgt aufgebaut: In Kapitel 1 wird ein Überblick über die physikalischen Grundlagen und die für dieser Arbeit essentiellen Prozesse gegeben. Kapitel 2 beschreibt die für das Experiment besonders relevanten Teile von Experimentiereinrichtung und Experimentaufbauten sowie den Ablauf der Messungen. Im Kapitel 3 wird die Datenauswertung und hier insbesondere die Bestimmung von Relativenergie und Ratenkoeffizient erläutert. Die gewonnenen Resultate werden in Kapitel 4 diskutiert. Den Abschluss der Arbeit bildet ein Ausblick auf geplante Experimente zur Messung der E1M1-Übergangsrate in Kapitel 5.

1 Physikalische Grundlagen

Im folgenden Kapitel werden die für die untersuchten Systeme relevanten physikalischen Grundlagen vorgestellt.

1.1 Die Atomare Struktur hochgeladener Wenigelektronensysteme

Seit den Anfängen der Erforschung atomarer Strukturen [17] hat das Verständnis solcher Strukturen und Prozesse stetig zugenommen. Dabei haben sich insbesondere Wenigelektronensysteme als gut geeignete Forschungsobjekte herausgestellt, an denen verschiedenste atomphysikalische Prozesse studiert werden können, ohne jene zusätzlichen Komplikationen in der theoretischen Beschreibung zu verursachen, die Vielteilchensysteme mit sich bringen. So ist es nicht verwunderlich, dass das Wasserstoffatom nach aktuellem Stand der Forschung das an besten verstandene aller existierenden atomaren Systeme ist. Dies gilt nicht nur für die theoretische Beschreibung sondern auch für ihre experimentelle Bestätigung. So ist die Rydberg-Konstante mit $R_\infty = (10\,973\,731.568\,539 \pm 0.000\,055) \text{ m}^{-1}$ [18], aus der sich die Ionisationsenergie des Wasserstoffatoms ergibt, die am genauesten gemessene Naturkonstante [19]. Von einem tiefen Verständnis des Wasserstoffatoms ausgehend bilden gerade die Wenigelektronensysteme eine Brücke zu einem angestrebten, verbesserten Verständnis von Vielelektronensystemen.

Schwere Wenigelektronensysteme unterscheiden sich von ihren leichteren Äquivalenten primär durch ihre deutlich höhere Kernladungszahl. Die höhere Kernladungszahl wiederum führt unter anderem zu höheren Bindungsenergien $\propto Z^2$, stark komprimierten Wellenfunktionen (mittlerer Radius $\langle r \rangle \propto Z^{-1}$), höheren Feldstärken und einem erhöhten Einfluss relativistischer und quantenelektrodynamischer Effekte. Durch den Vergleich von isoelektronischen leichten und schweren Systemen lassen sich die Einflüsse dieser Parameter auf die atomare Struktur im Detail studieren. Ein weiterer Effekt, der bei schweren Systemen stärker auftritt, beruht auf der endlichen Ausdehnung des Atomkerns und die sich daraus ergebende Abweichung des elektrischen Kernpotentials vom $1/r$ Potential einer punktförmigen Ladung [20]. Dies beeinflusst wiederum die Wechselwirkung zwischen Hüllenelektronen und Kern. Hierbei ist nicht nur der mit der dritten Wurzel der Nukleonenzahl steigende Kernradius sondern auch der mit der Kernladungszahl sinkende mittlere Abstand zwischen Hüllenelektronen und Kernzentrum von Bedeutung.

1.1.1 Wasserstoffartige Ionen

1.1.1.1 Entwicklung bis zur Dirac Theorie

Ein langer Weg führte von den Beobachtungen erster Absorptionslinien im Sonnenspektrum durch William H. Wollaston und Joseph von Fraunhofer [21] im Jahre 1817 zu dem theoretischen Verständnis dieser Linien. Als wichtige Zwischenstationen seien die von Gustav Kirchhoff und Robert Bunsen im Jahre 1860 entdeckte Zuordnung charakteristischer Absorptionsspektren zu spezifischen Elementen [17], sowie die hierfür von Johann Jakob Balmer im Jahre 1885 erstmals gegebene empirische Formel [22] genannt. Die erste angemessene, theoretische Beschreibung des Wasserstoffatoms lieferte Niels Bohr [23] im Jahre 1913. Die erstmals 1888 [24] – in einer von der heute üblichen Formulierung (Gl. 1.1) abweichenden Form – niedergelegte, von J. Rydberg [25] ermittelte, Rydberg-Formel gibt die Übergangsenergien im Wasserstoffspektrum in Einheiten der Wellenlänge an. Für $m \rightarrow \infty$ entspricht dies der Bohrschen-Bindungsenergie* (Gl. 1.2) eines Elektrons der Hauptquantenzahl n im Wasserstoffatom ($Z=1$) in Einheiten inverser Wellenlänge. Die sich hieraus ergebenden Energieniveaus atomarer Schalen sind in Abbildung 1.1 graphisch dargestellt. Das Bohrsche Atommodell gibt auch über weitere atomare Eigenschaf-

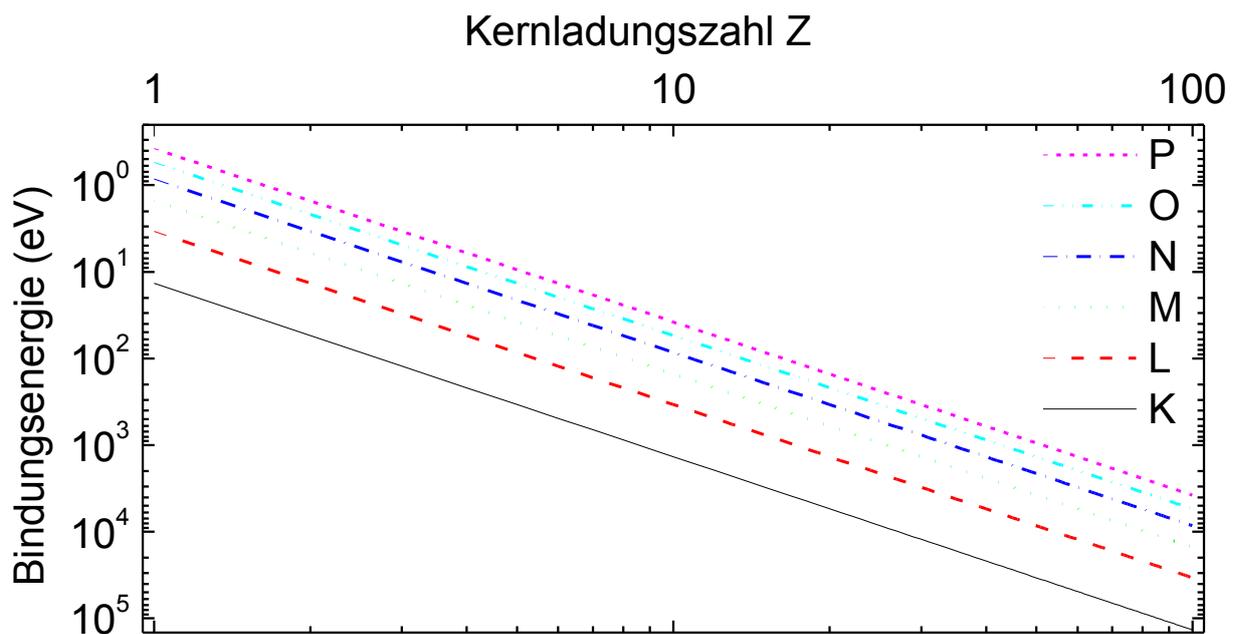


Abbildung 1.1: Energieniveaus verschiedener Schalen wasserstoffartiger Ionen im Bohrschen Atommodell

*Zur Vermeidung unnötig umständlicher Formulierungen wird in dieser Arbeit einheitlich von positiven Bindungsenergien ($E_B \geq 0$) ausgegangen.

ten Auskunft. Exemplarisch seien hier die Bahnradien $r(n)$ (Gl. 1.3) genannt:

$$\frac{1}{\lambda} = R_\infty \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (1.1)$$

$$E_B(n) = Ry \frac{Z^2}{n^2} \quad (1.2)$$

$$r(n) = a_0 \frac{n^2}{Z} \quad (1.3)$$

In obigen Gleichungen sind n bzw. m Hauptquantenzahlen, R_∞ die Rydbergkonstante, Ry die Rydbergenergie, a_0 der Bohrsche Radius, λ die Wellenlänge und Z die Kernladungszahl.

Stark vertiefende Erkenntnisse über atomare Strukturen lieferte die Berücksichtigung des Bahndrehimpulsquantenzahl l , der Übergang zur Quantenmechanik und die Einbeziehung relativistischer Effekte. Dies kulminierte letztlich in der von Paul Dirac 1928 publizierten, nach ihm benannten Theorie [26], die unter anderem eine deutlich bessere Beschreibung der Struktur wasserstoffartiger Ionen bot, welche auch die Feinstrukturaufspaltung über die Gesamtdrehimpulsquantenzahl j erklären konnte. Die möglichen Energieniveaus in wasserstoffartigen Ionen ergaben sich (mit der Ruhemasse des Elektrons m_e und der Feinstrukturkonstanten α) daraus wie folgt:

$$E_B(n, j) = m_e c^2 \cdot \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{Z \cdot \alpha}{n - (j + \frac{1}{2}) + \sqrt{(j + \frac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2}} \right)^2}} - m_e c^2 \quad (1.4)$$

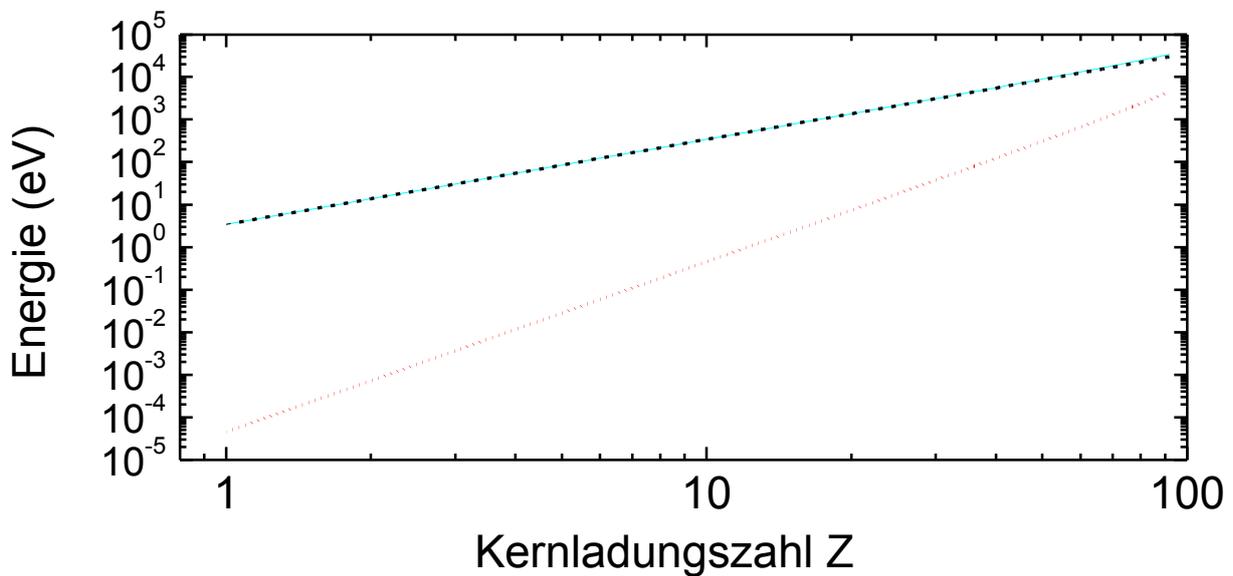


Abbildung 1.2: (kleine) Dirac Feinstrukturaufspaltung ($\cdots\cdots$) zwischen $2p_{3/2}$ (---) und den energetisch entarteten $2s_{1/2}$ und $2p_{1/2}$ Zuständen (- - - -) in wasserstoffartigen Ionen.

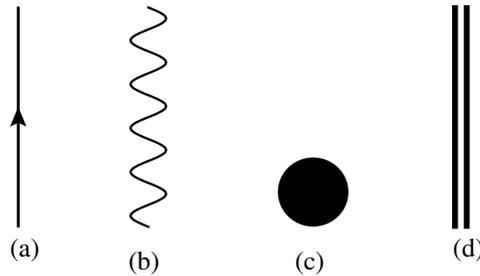


Abbildung 1.3: typische Elemente von Feynman Graphen der QED:
a) freies, geladenes Teilchen; b) Photon; c) Vertex; d) gebundenes Teilchen

Dabei weisen Bindungsenergien und Feinstrukturaufspaltung eine deutlich unterschiedliche Skalierung mit Z auf. Während die Dirac-Bindungsenergien äquivalent zum Bohrschen Modell mit Z^2 anwachsen, nimmt die Feinstrukturaufspaltung mit Z^4 zu. Dies führt dazu, dass die Feinstrukturaufspaltung der L-Schale für $Z = 1$ etwa 10^{-5} der Bindungsenergie ausmacht, während sie für $Z = 92$ mehr als 10% der Bindungsenergie beträgt (Abb. 1.2). Eine erste Korrektur der Energieniveaus gegenüber der Dirac-Theorie stellt die Einbeziehung der reduzierten Masse (RM) gemäß folgender Gleichung [27] dar, wobei der relative Anteil dieser Korrektur an der Bindungsenergie für schwerere Ionen immer weiter abnimmt:

$$\Delta E_B(n, j)_{RM} = -\frac{m_e}{m_e + M} \left(1 - \frac{(Z\alpha)^2}{4n^2} \right) E_B(n, j) \quad (1.5)$$

1.1.1.2 Lamb-Verschiebung und quantenelektrodynamische Erklärung

Die Dirac'sche Beschreibung des Wasserstoffatoms sagte (auch unter Einbeziehung der reduzierten Masse) eine energetische Entartung von Zuständen mit gleicher Hauptquantenzahl n und Gesamtdrehimpulsquantenzahl j , beispielsweise der Zustände $2s_{1/2}$ und $2p_{1/2}$, voraus. Diese Vorhersage konnte von Willis Lamb und Robert Retherford [28] durch die Entdeckung einer Aufspaltung zwischen den beiden genannten Niveaus im Jahre 1947 widerlegt werden. Diese nach Lamb benannte Verschiebung betrifft nicht nur die beiden genannten Zustände, sondern (in unterschiedlicher Stärke) jedes atomare Energieniveau. Die Aufhebung der energetischen Entartung ist dabei nur der auffälligste Effekt. Die Erklärung dieser Aufspaltung lieferte die Theorie der Quantenelektrodynamik (QED), die die Wechselwirkung von Strahlung und geladenen Teilchen über den Austausch von (teils virtuellen) Photonen beschreibt.

Richard Feynman entwickelte eine, Feynman-Diagramme genannte, anschauliche Darstellung der komplexen Formelschreibweise einzelner, möglicher Wechselwirkungen. Diese Diagramme bestehen aus wenigen unterschiedlichen Grundelementen (Abb. 1.3), mit denen sich unendlich viele verschiedene Diagramme bilden lassen, die für jeweils einzelne Prozesse stehen.

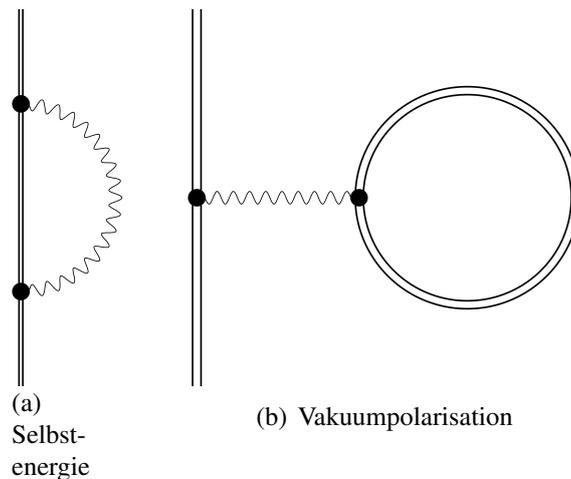


Abbildung 1.4: Feynman Diagramme der Selbstenergie und Vakuumpolarisation eines gebundenen Elektrons der niedrigsten Ordnung der Potentialentwicklung in Potenzen von $Z\alpha$

An den Vertices (Abb. 1.3(c)) findet die Wechselwirkung zwischen Photon und geladenem Teilchen statt. Die Größenordnung dieser Wechselwirkung entspricht der Quadratwurzel des Produktes aus elektrischer Ladung Z (in Einheiten der Elementarladung) und der Feinstrukturkonstanten $\alpha \approx 1/137$. Da $Z\alpha \ll 1$ meist (mit einer besonders ausgeprägten Ausnahme bei superschweren Quasimolekülen [29] wie z.B. U_2^{+183}) erfüllt ist, nimmt der Beitrag der einzelnen Diagramme zur gesamten Wechselwirkung mit steigender Anzahl der Vertices stark ab, weshalb eine Summe über die nach der Zahl der Vertices geordneten Beiträge insbesondere für leichte Elemente schnell konvergiert. Da bei Wechselwirkungen mit schweren, hochgeladenen Ionen der Parameter $Z\alpha$ deutlich größer ist als bei leichten Ionen, eignen sich solche Systeme zur experimentellen Untersuchung von QED Beiträge höherer Ordnung. Die beiden dominanten Beiträge zu dem über die Dirac Theorie hinausgehenden Teil der QED-Wechselwirkung werden als Selbstenergie und Vakuumpolarisation bezeichnet (Abb. 1.4). Außer diesen beiden Prozessen gibt es noch weitere Beiträge zur Lamb-Verschiebung. Nur ein Teil dieser Effekte wird alleine durch QED-Beiträge in höheren Ordnungen von $Z\alpha$ bestimmt.

Die Selbstenergie (Abb. 1.4(a)) lässt sich in einer anschaulichen Betrachtung als kurzfristige Emission und anschließende Reabsorption eines virtuellen Photons durch ein gebundenes Elektron verstehen, wobei die dafür notwendige, scheinbare Verletzung des Energieerhaltungssatzes durch die Heisenbergsche Unschärferelation $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$ ermöglicht wird. Diese kurzfristige Photonenemission ändert trotz der raschen Reabsorption die mittlere Energie eines gebundenen Teilchens. Aus dem anschaulichen Verständnis würde man erwarten, dass die kurzfristige Emission eines virtuellen Photons die mittlere Energie des gebundenen Elektrons reduziert und zu einer leichten Erhöhung der Bindungsenergie führt. Doch bei genauerer Betrachtung (siehe z.B. [27]) erweist sich diese vereinfachte Überlegung als unzutreffend, da die Bindungsenergie durch die Selbstenergie reduziert wird.

Unter Vakuumpolarisation (Abb. 1.4(b)) versteht man die Erzeugung von äußerst kurzlebigen Teilchen-Antiteilchen-Paaren aus dem Vakuum. Die so erzeugten Ladungsträger richten sich in der kurzen Spanne ihrer Existenz im Feld des Atomkerns aus und führen zu einer Erhöhung der Bindungsenergie. Die Vakuumpolarisation erhöht die Bindung zwischen Elektron und Atomkern. Die Veränderung der Energieniveaus durch die Vakuumpolarisation ist deutlich kleiner als der Beitrag der Selbstenergie und wirkt in die entgegengesetzte Richtung, so dass die Lamb-Verschiebung insgesamt zu einer Reduktion der Bindungsenergie führt.

Ein besonders wichtiger – nicht direkt mit der QED verbundener – Beitrag zur Bindungsenergie stammt von der endlichen Ausdehnung des Atomkerns. In der Näherung punktförmiger Ladungen wird das Potential des Atomkerns als $1/r$ Potential beschrieben. Betrachtet man das Modell eines endlich ausgedehnten Kerns mit homogener Ladungsverteilung und Radius R , dann entspricht das Potential für $r > R$ noch immer dem selben $1/r$ -Potential, unterscheidet sich jedoch im Inneren der Ladungsverteilung stark von diesem, denn es gilt $V(r) \propto 3 - r^2/R^2$ für $r < R$. Da diese drastische Abweichung vom $1/r$ -Potential aber nur im Inneren des Kerns gilt, hängt

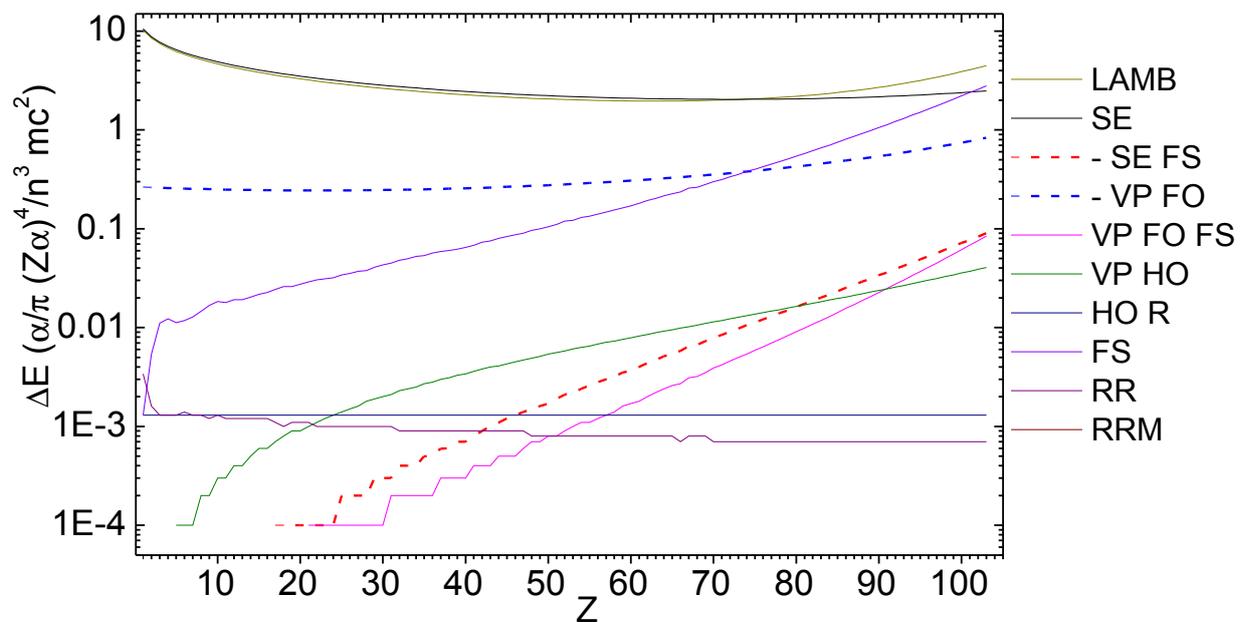


Abbildung 1.5: Kernladungsabhängige Beiträge zur 2s Lamb-Verschiebung (LAMB) nach [27]. Zur besseren Darstellung wurde die leitende $(Z\alpha)^4$ -Abhängigkeit herausgerechnet. Negative Beiträge sind gestrichelt dargestellt. Die einzelnen Beiträge sind: Selbstenergie(SE), deren Korrektur bedingt durch endliche Kernausdehnung(SE FS), Uehling-Term [30] (Vakuumpolarisation erster Ordnung (VP FO)), dessen Korrektur bedingt durch endliche Kernausdehnung (VP FO FS), Wichmann-Kroll-Term [31] (Vakuumpolarisation höherer Ordnung (VP HO)), Strahlungskorrektur höherer Ordnung (HO R), Effekt endlicher Kernausdehnung auf Dirac Energie (FS), relativistischer Rückstoß (RR) und der Effekt der relativistischen, reduzierten Masse (RRM). (Die 0.1 meV Stufen in der logarithmischen Darstellung sind Folge der zählenden Stellen in [27].)

die Auswirkung des Effekts stark von der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons im Atomkern ab, die ihrerseits stark mit der Kernladungszahl anwächst. Als Konsequenz hieraus skaliert die durch die endliche Kernaussdehnung verursachte Änderung der Energieniveaus stark mit der Kernladung skaliert. Infolgedessen lassen sich Effekte der endlichen Kernaussdehnung am besten an schweren Ionen studieren.

Letztlich tragen zur Lamb-Verschiebung ΔE_{Lamb} eine Vielzahl von Effekten bei, denen teils sehr unterschiedliche physikalische Ursachen zugrundeliegen und die über differierende Abhängigkeiten vom Entwicklungsparameter αZ sowie teilweise differierende Vorzeichen der Energieänderung verfügen. Nach Johnson & Soff [27] wird zur Darstellung der verschiedenen Beiträge

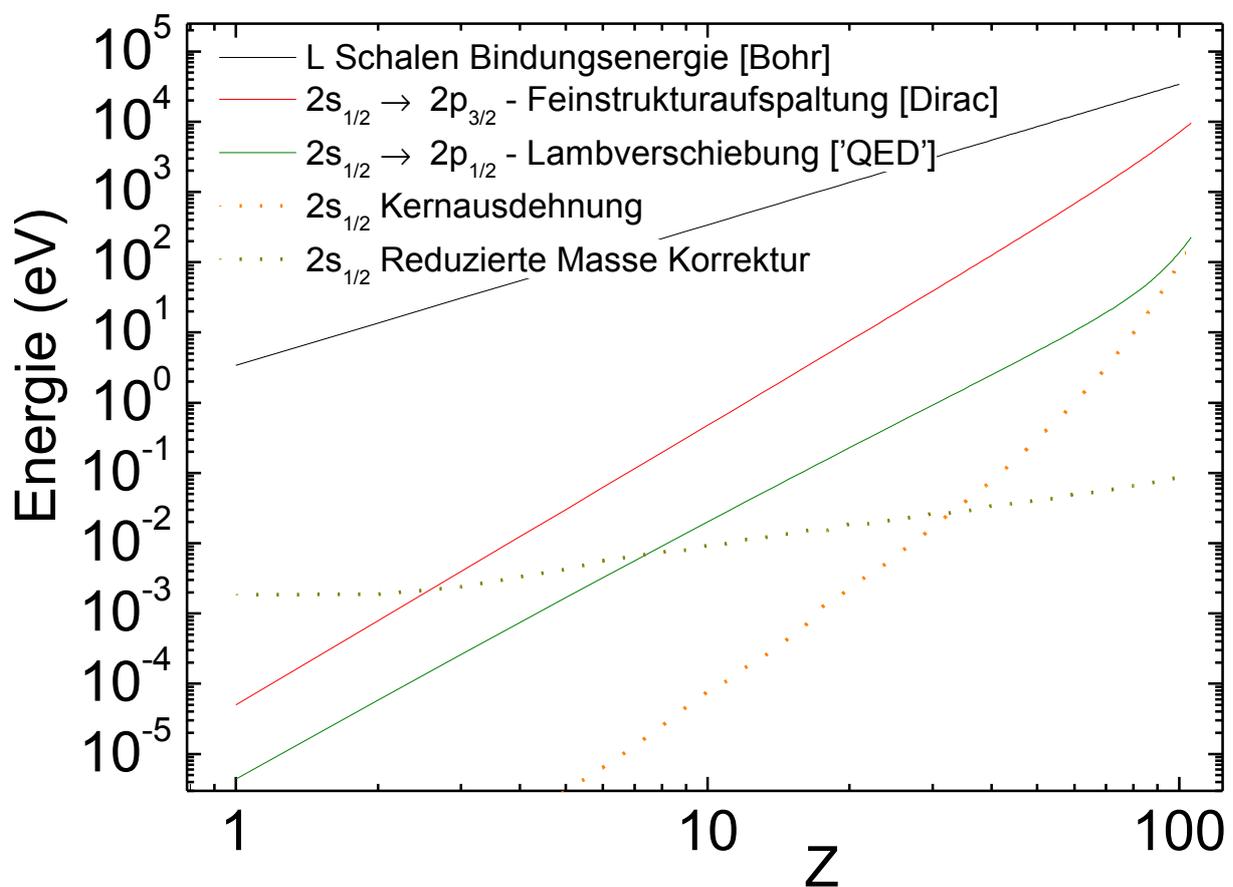


Abbildung 1.6: Einflussfaktoren auf die atomare Struktur der L-Schale bei wasserstoffartigen Systemen in Abhängigkeit von der Kernladungszahl. Lambverschiebung und Kernaussdehnung nach Johnson & Soff [27].

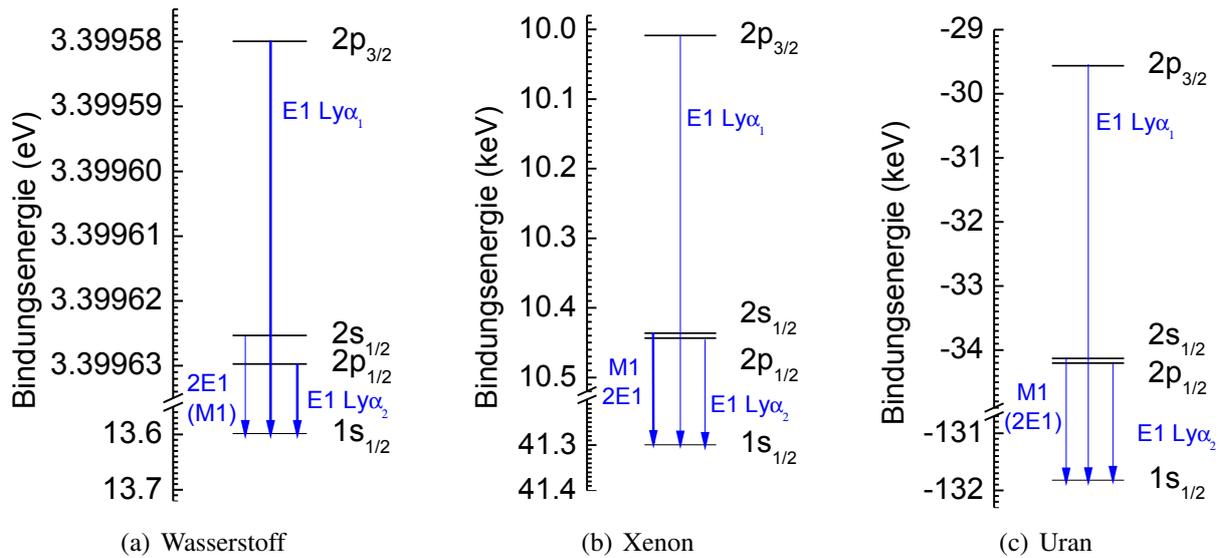


Abbildung 1.7: Atomare Struktur und Übergänge in wasserstoffartigen Ionen nach Johnson & Soff [27].

(F_i) die folgende Formel verwendet:

$$\Delta E_{\text{Lamb}} = \frac{\alpha (Z\alpha)^4}{\pi n^3} \cdot F(Z\alpha) mc^2$$

$$F(Z\alpha) = F_{\text{SE}} + F_{\text{SE FS}} + F_{\text{VP FO}} + F_{\text{VP FO FS}} + F_{\text{VP HO}} + F_{\text{HO R}} + F_{\text{FS}} + F_{\text{RR}} + F_{\text{RRM}}$$

Die einzeln genannten Beiträge sind: Selbstenergie (F_{SE}), deren Korrektur bedingt durch endliche Kernaussdehnung ($F_{\text{SE FS}}$), Uehling-Term [30] (Vakuumpolarisation erster Ordnung $F_{\text{VP FO}}$), dessen Korrektur bedingt durch endliche Kernaussdehnung ($F_{\text{VP FO FS}}$), Wichmann-Kroll-Term [31] (Vakuumpolarisation höherer Ordnung $F_{\text{VP HO}}$), Strahlungskorrektur höherer Ordnung ($F_{\text{HO R}}$), Effekt endlicher Kernaussdehnung auf Dirac Energie (F_{FS}), der Einfluss des (relativistischen) Rückstoßes (RR) und der Effekt der relativistischen, reduzierten Masse (F_{RRM}). Abb. 1.5 zeigt die 2s Lamb-Verschiebung und ihre Beiträge in kernladungsabhängiger Darstellung.

Die dominanten, in diesem Abschnitt skizzierten Effekte und ihre Beiträge zur atomaren Struktur der L-Schale wasserstoffartiger Ionen sind in Abb. 1.6 in Abhängigkeit von der Kernladungszahl aufgetragen. Der L-Schale kommt dabei eine besondere Bedeutung zu, da sie im Gegensatz zur K-Schale Substrukturen besitzt, die auf Feinstrukturaufspaltung und Lambverschiebung beruhen. Letztere führt in der L-Schale zur Aufhebung energetischer Entartungen, statt – wie im Fall der K-Schale – nur zu einer energetischen Verschiebung. Auch für den resonanten Elektroneneinfang in wasserstoffartige Systeme ist die L-Schale von großer Bedeutung, da sie nicht nur die erste mögliche Anregung ($\Delta E \sim Z^2 \cdot 10.2 \text{ eV}$) darstellt, sondern darüber hinaus beim (resonanten) Elektronen-Einfang aus dem Kontinuum die größte Energien freisetzt[†]

[†]Der Elektroneneinfang aus dem Kontinuum in die K-Schale setzt zwar höhere Energien frei, führt aber nicht in einen doppelt angeregten Zustand und ist damit kein resonanter Prozess.

und über die höchsten Einfangwahrscheinlichkeiten verfügt. Abbildung 1.7 zeigt die atomaren Strukturen und dominanten Photonenübergänge für die Systeme H, Xe^{53+} und U^{91+} nach Johnson & Soff [27].

1.1.2 Wenigelektronensysteme

Als einfachsten Vielkörpersystemen der Atomphysik kommen heliumartigen Ionen eine besondere Bedeutung zu. Da im Gegensatz zu wasserstoffartigen Ionen zwei Elektronen vorhanden sind, kommt es erstmals zu (inneratomaren) Elektron-Elektron-Wechselwirkungen. Als Drei-Teilchen-System ist eine vollständige analytische Beschreibung nicht mehr möglich. Eine Gemeinsamkeit von wasserstoff- und heliumartigen Systemen ist, dass in beiden Systemen Anregungen nur bei einem Übergang eines Elektrons in eine höhere Schale möglich sind und deshalb höherer Energien bedürfen. Im Gegensatz hierzu sind bei lithium- und berylliumartigen Ionen Anregungen innerhalb der L-Schale und damit bei weit geringeren Anregungsenergien möglich. Die Komplexität der theoretischen Beschreibung hängt maßgeblich von der Zahl der für Wechselwirkungen und Kopplungen zur Verfügung stehenden Elektronen ab. Von den drei bzw. vier Elektronen lithium- bzw. berylliumartiger Ionen befinden sich – in aller Regel – zwei in der K-Schale, so dass die atomare Struktur maßgeblich von den verbleibenden ein bzw. zwei Va-

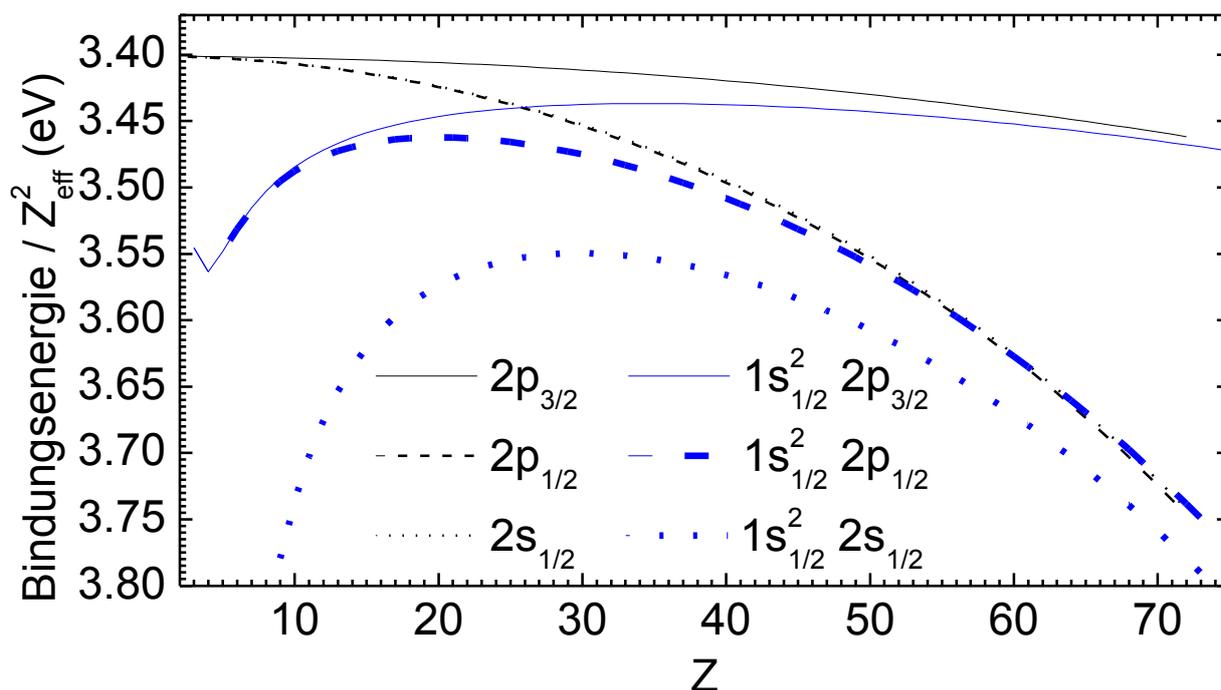


Abbildung 1.8: Die kernladungsabhängige Struktur der L-Schale bei wasserstoff-(dünne Linie) [27] und lithiumartigen (dicke Linie) Ionen [32] für die Zustände $2s_{1/2}$ (\cdots), $2p_{1/2}$ ($- - -$) und $2p_{3/2}$ ($—$). Die dargestellte Bindungsenergie wurde durch Z_{eff}^2 dividiert ($Z_{\text{eff}} = Z$ [H-artig] bzw. $Z_{\text{eff}} = Z-2$ [Li-artig]).

lenzelektronen bestimmt wird, deren theoretische Behandlung deutlich einfacher ist, als es ein echtes Vier- bzw. Fünfkörperproblem wäre. Im Folgenden soll primär die Struktur der L-Schale betrachtet werden, innerhalb derer die ersten möglichen Anregungen in aller Regel erfolgen.

1.1.2.1 Lithiumartige Ionen

Wie in wasserstoffartigen Ionen treten auch in der L-Schale lithiumartiger Ionen die drei Zustände $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ und $2p_{3/2}$ auf. Ihre Bindungsenergie wird durch die quadratische Abhängigkeit von der (effektiven) Kernladungszahl dominiert. Bei letzterer ist für lithiumartige Ionen die Abschirmung durch die Elektronen der K-Schale zu beachten ($Z_{\text{eff}} = Z - 2$ [Li-artig] bzw. $Z_{\text{eff}} = Z$ [H-artig]). Dividiert man durch diese leitende Z_{eff}^2 Abhängigkeit – wie in Abb. 1.8 geschehen – so verbleibt primär eine leicht stärkere Bindung des $2s_{1/2}$ Zustands in lithiumartigen Ionen. Hauptgrund hierfür ist, dass die Abschirmung bei Elektronen mit niedrigen Drehimpulsen geringer ausfällt, da diese eine deutlich höhere Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Kernnähe haben. Bedingt durch die unterschiedliche, mittlere Abschirmung des Kernladungspotentials bei den Zuständen $2s_{1/2}$ und $2p_{1/2}$ kommt es zu einer zusätzlichen Aufspaltung dieser Zustände, die die Gesamtaufspaltung gegenüber der bei wasserstoffartigen Ionen schon vorhandenen Lamb-Verschiebung bei lithiumartigen Ionen deutlich erhöht (Abb. 1.9). Daraus leitet sich ab, dass

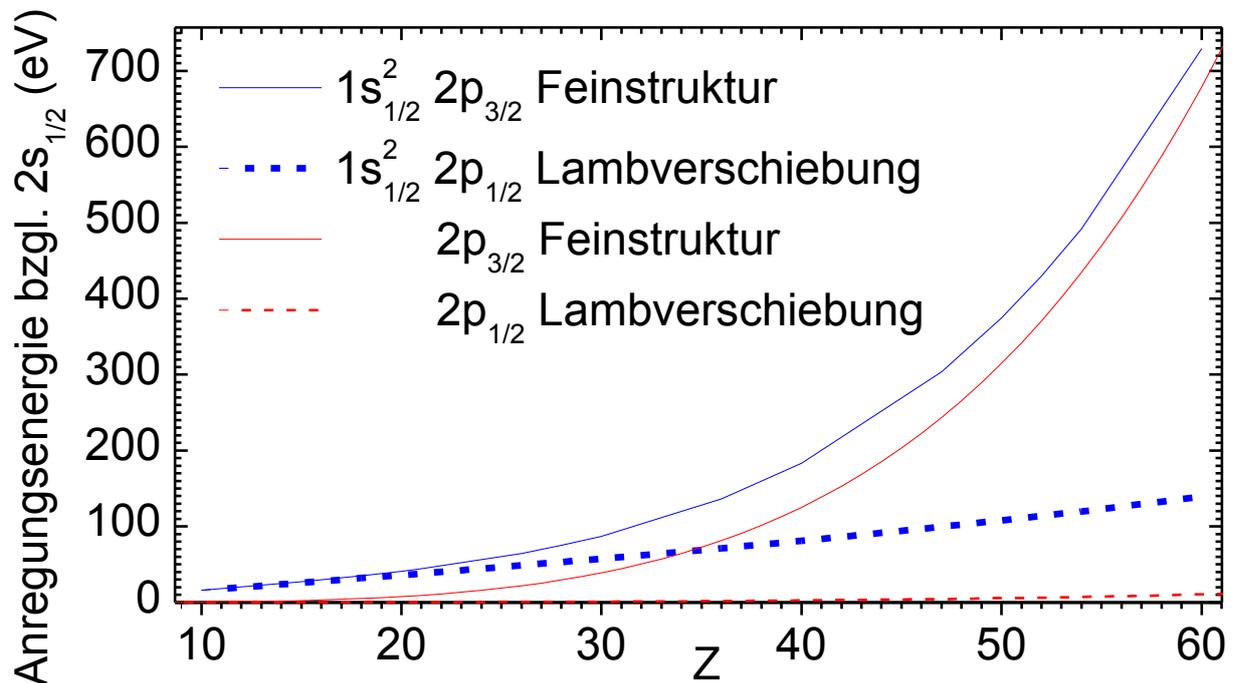


Abbildung 1.9: $2p_{3/2} - 2s_{1/2}$ Feinstrukturaufspaltung (—) und $2p_{1/2} - 2s_{1/2}$ Lamb-Verschiebung (- - -) bei wasserstoffartigen (dünn)[27] und lithiumartigen Ionen (dick)[33] in Abhängigkeit von der Kernladungszahl.

die ($2s_{1/2}-2p_{1/2}$)-Aufspaltung bei lithiumartigen Ionen im Gegensatz zu wasserstoffartigen Ionen kein hauptsächlich quantenelektrodynamischer Effekt ist.

Trotz der beträchtlichen Auswirkung der unterschiedlichen Abschirmungen sind aber die zuvor erläuterten Beiträge zur Lamb-Verschiebung in wasserstoffartigen Ionen (siehe Abb. 1.5) auch für lithiumartige Ionen in vergleichbarer Größenordnung relevant. In Abbildung 1.10 sind die Beiträge der Elektron-Elektron Wechselwirkung durch Austausch eines oder mehrerer virtueller Photonen und unterschiedliche Beiträge der QED dargestellt. Wie man sieht, dominiert die „Ein-Photon-Elektron-Elektron“-Wechselwirkung die Aufspaltung. Der Zwei-Photonenaustausch trägt einige eV zur Aufspaltung bei. Bei schweren Elementen erreichen die führenden QED Beiträge der Selbstenergie und Vakuumpolarisation eine ähnliche Größe. QED Effekte höherer Ordnung – aber auch die Ausdehnung des Atomkerns – tragen bei schwereren Kernen einige Zehntel eV bei.

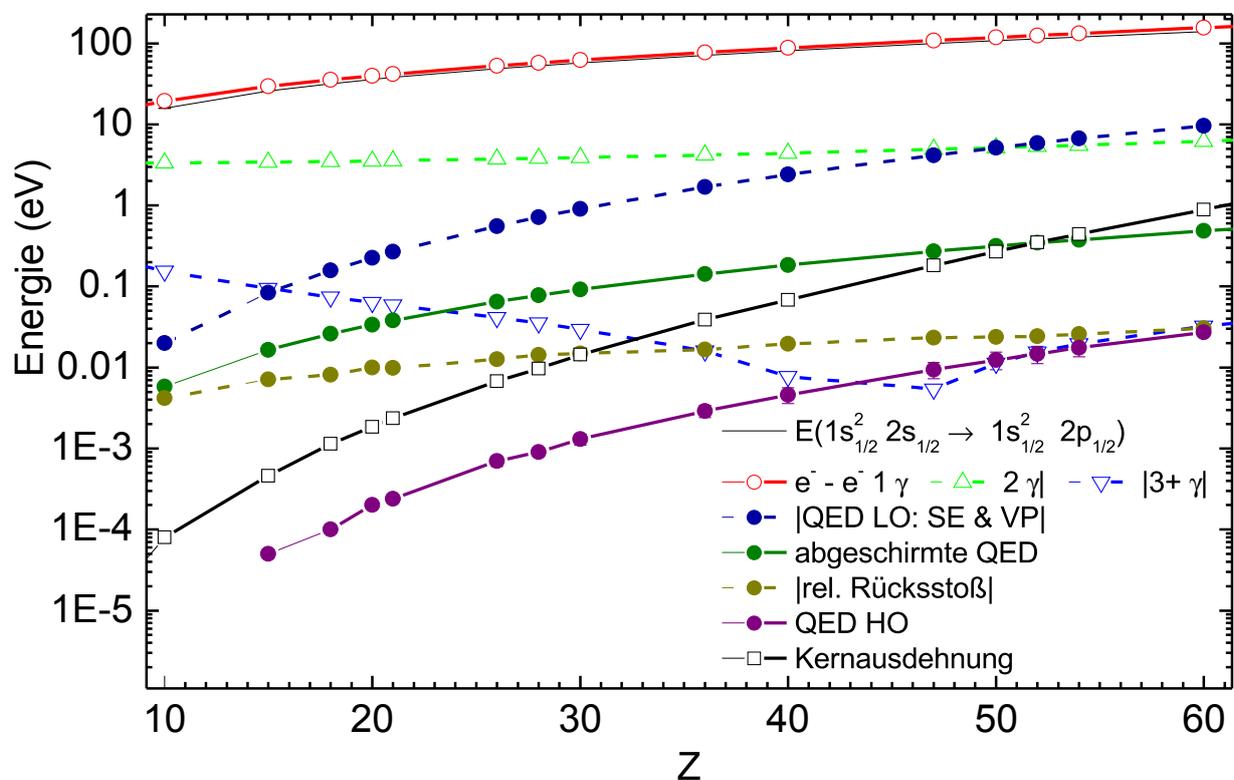


Abbildung 1.10: Beiträge zur $2p_{1/2} \rightarrow 2s_{1/2}$ Lamb-Verschiebung bei lithiumartigen Ionen in Abhängigkeit von der Kernladungszahl nach [33]. Dargestellt sind die Beiträge der Elektron-Elektron-Wechselwirkung über Austausch von ein, zwei und drei oder mehr Photonen ($e^- - e^- n\gamma$), der Selbstenergie und Vakuumpolarisation als QED-Beiträge niedriger Ordnung (QED LO: SE VP), der abgeschirmten QED, des relativistischen Rücksstoßes und der QED Beiträge höherer Ordnung (QED HO: SEVP, VPVP, S(VP)E). Bei Verwendung gestrichelter Linien (- -) ist der Absolutbetrag des eigentlich negativen Beitrages dargestellt.

1.1.2.2 Berylliumartige Ionen

Berylliumartige Ionen besitzen zwei Valenzelektronen, die miteinander wechselwirken. Diese Wechselwirkung hat eine – im Vergleich zu lithiumartigen Ionen – etwas kompliziertere Struktur der L-Schale zur Folge. Hierbei koppeln die zwei Valenzelektronen der drei möglichen Ein-elektronenzustände der L-Schale ($2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$) zu zehn in Tabelle 1.1 aufgeführten Mehr-elektronenzuständen. Abbildung 1.11 stellt die Anregungsenergie der Zustände bezüglich des $2s^2\ ^1S_0$ Grundzustandes kernladungsabhängig dar. Im Bereich niedriger Kernladungszahlen dominiert die L-S-Kopplung, erkennbar an der energetischen Ähnlichkeit von Zuständen gleichen Gesamtspins S und Gesamtdrehimpulses L . Für höhere Kernladungszahlen findet ein Übergang zur j-j-Kopplung statt. Im Falle dieser hochgeladenen Ionen sind Zustände, die sowohl in j_1 als auch in j_2 übereinstimmen, energetisch sehr ähnlich. Von den neun angeregten Zuständen der L-Schale lassen sich vier ($2s2p\ ^3P_0$, $2s2p\ ^3P_1$, $2s2p\ ^3P_2$ und $2s2p\ ^1P_1$) durch Anregung eines Elektrons erreichen, während die anderen fünf ($2p^2\ ^3P_0$, $2p^2\ ^3P_1$, $2p^2\ ^3P_2$, $2p^2\ ^1D_2$ und $2p^2\ ^1S_0$)

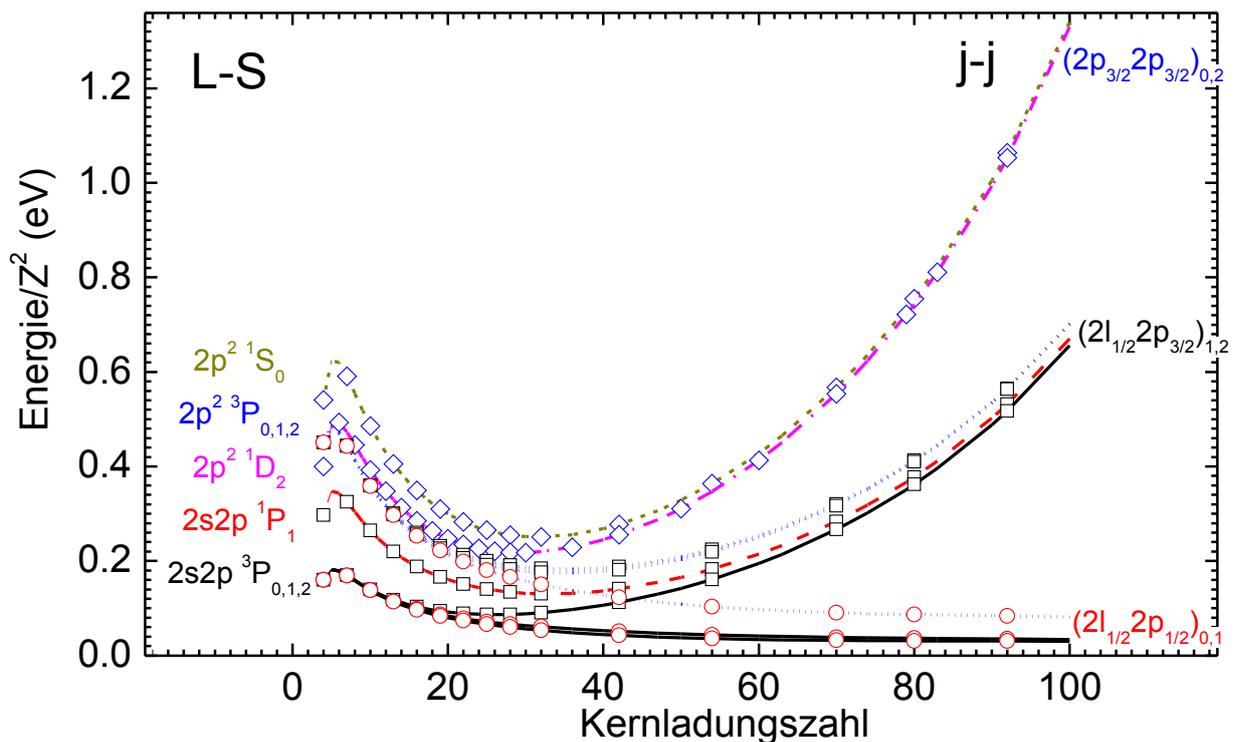


Abbildung 1.11: Kernladungsabhängige L-Schalen-Anregungsenergien berylliumartiger Ionen relativ zum $(1s_{1/2}^2\ 2s_{1/2}^2\ ^1S_0)$ Grundzustand nach [34]. Für niedrige Kernladungen dominiert L-S-Kopplung ($2p^2\ ^1S_0$ (---); $2p^2\ ^3P_{0,1,2}$ (.....); $2p^2\ ^1D_2$ (-.-.-); $2s2p\ ^1P_1$ (-.-.-); $2s2p\ ^3P_{0,1,2}$ (—)), während für hohe Kernladungen j-j-Kopplung gilt ($(2p_{3/2}2p_{3/2})_{J=0,2}$; $(2l_{1/2}2p_{3/2})_{J=1,2}$; $(2l_{1/2}2p_{1/2})_{J=0,1}$).

Tabelle 1.1: Konfigurationen der L-Schale berylliumartiger Ionen und bei L-S-Kopplung resultierende Zustände.

	$2s_{1/2}$	$2p_{1/2}$	$2p_{3/2}$
$2s_{1/2}$	1S_0	$^3P_0, ^3P_1$	$^3P_2, ^1P_1$
$2p_{1/2}$		3P_0	$^3P_1, ^3P_2$
$2p_{3/2}$			$^1D_2, ^1S_0$

– ohne Berücksichtigung möglicher Konfigurationsmischungen – nur durch Anregung beider Elektronen erreicht werden können. Abbildung 1.12 zeigt den Aufbau der L-Schale für Xe^{50+} und mögliche Photonenübergänge aus einfach angeregten Zuständen.

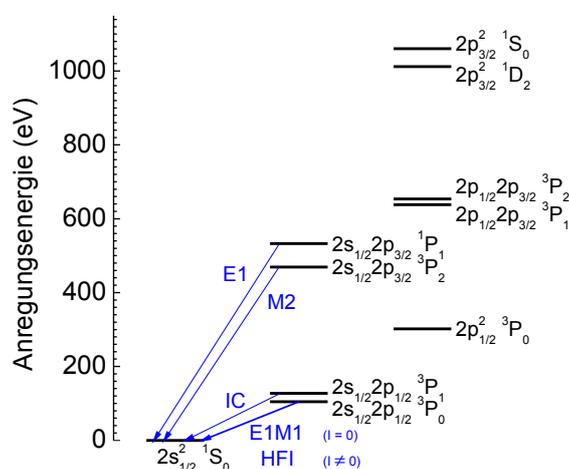


Abbildung 1.12: Termschema der L-Schale in Xe^{50+} nach Safronova *et al.* [34] mit dominanten Übergängen für einfach angeregte Zustände.

1.1.3 Photonenübergänge

Angeregte atomare Zustände unterhalb der Ionisationsschwelle relaxieren mittels Photonemission. Für elektrische Dipolübergänge (E1) kann man die Übergangswahrscheinlichkeit $A_{i,k}$ mit Gl. 1.6 [35] berechnen. Dabei tritt – im einfachsten Fall wasserstoffartiger Ionen – eine Z^4 Abhängigkeit der Übergangsrates auf [36]. Für magnetische Dipolübergänge (M1) lässt sich der Quotient aus M1 und E1 Übergangswahrscheinlichkeiten nach [36] zu $(Z\alpha)^2/4$ abschätzen. Äquivalent lässt sich auch das Verhältnis der Übergangswahrscheinlichkeiten der elektrischen Quadrupol-(E2) und Dipolübergänge, wie in Gleichung 1.7 angegeben, berechnen [36]. Obwohl M1-Übergänge bei hochgeladenen schweren Ionen relevanter werden und E2-Übergänge bei extrem hochenergetischen Photonen oder aber den in Rydbergatomen (Abs. 1.1.4) vorkommenden hohen Atomdurchmessern von Bedeutung sind, dominieren doch in der Regel E1 Übergänge,

solange diese möglich sind. Umgekehrt sind Übergänge mit geringen Übergangsraten immer dann prominent anzutreffen, wenn Übergangsarten, die typischerweise höhere Raten aufweisen, verboten sind. Kann die Abregung eines angeregten Zustandes nur über seltene Übergänge geschehen, so werden diese langlebigen, angeregten Zustände als metastabil bezeichnet.

$$A_{i,k \text{ E1}} = \frac{2 e^2 \omega_{i,k}^3}{3 \epsilon_0 c^3 h} \left| \int \Psi_i^* \vec{r} \Psi_k dV \right|^2 \quad (1.6)$$

$$\frac{A_{i,k \text{ E2}}}{A_{i,k \text{ E1}}} \simeq \left(\frac{\pi a_0}{Z \lambda_{i,k}} \right)^2 \quad (1.7)$$

In obigen Gleichungen ist Z die Kernladungszahl, ϵ_0 die Elektrische Feldkonstante, c die Lichtgeschwindigkeit, h das Plancksche Wirkungsquantum, a_0 der Bohrsche Radius und $\omega_{i,k}$ bzw. $\lambda_{i,k}$ die Frequenz bzw. Wellenlänge des Übergangspotons.

1.1.3.1 Mehrphotonenübergänge

Zu den besonders langlebigen metastabilen Zuständen gehören solche, die dominant über Zweiphotonenübergänge relaxieren können, wie sie 1929 von Maria Göppert vorhergesagt [37] und 1965 erstmals von Lipeles et al. [38] nachgewiesen wurden. Anschaulich betrachtet handelt es sich dabei um den unter Photonenemission stattfindenden Übergang des angeregten metastabilen Atoms oder Ions in einen intermediären Zustand, von dem aus das System nahezu instantan durch Emission eines weiteren Photons in den Endzustand übergeht. Beim notwendigen intermediären Zustand handelt es sich nicht um einen aus dem 'Nichts' erschaffenen, zusätzlichen Zustand sondern um einen normalen atomaren oder Kontinuums-Zustand, dessen Energie oberhalb der Energie des initialen Zustands liegt. Dass diese Zustände trotzdem für Übergänge zur Verfügung stehen, könnte man anschaulich mit einer extrem kurzen Verweildauer Δt in diesem Zwischenzustand erklären. Aus dieser ergäbe sich eine extrem große Energieunschärfe ΔE des intermediären Zustands, so dass relevante Teile seiner Zustandsbreite unterhalb des initialen Zustandes zu liegen kämen.

In nichtrelativistischer Näherung wird die Übergangsrate von Zustand i in Zustand f unter Emission eines E1-Photons der Frequenz $h\nu_1$ und eines zweiten E1-Photons der komplementären Frequenz $h\nu_2$ mit $h\nu_1 + h\nu_2 = E_0 = h\nu_0$ über die Gleichung 1.8 mit dem Übergangsmatrixelement $M_{f,i}$, den Photonenpolarisationsvektoren $\vec{\epsilon}_{1,2}$, dem realen intermediären Zustand n und den elektrischen Dipolmatrixelementen $z_{f,n}$ und $z_{n,i}$ beschrieben [39], woraus sich durch Integration über alle möglichen Photonenfrequenzen die totale Zweiphotonenübergangsrate $A_{T \text{ } i,f \text{ } 2\text{E1}}$ ergibt.

$$A_{i,f \text{ } 2\text{E1}}(\nu_1) d\nu_1 = \frac{2^{10} \pi^6 e^4}{h^2 c^6} \nu_1^3 \nu_2^3 |M_{i,k}|^2 d\nu_1 \quad (1.8)$$

$$M_{f,i} = \vec{\epsilon}_1 \cdot \vec{\epsilon}_2 \sum_{n=2} z_{f,n} z_{n,i} \left(\frac{1}{\nu_{ni} + \nu_2} + \frac{1}{\nu_{ni} + \nu_1} \right) \quad (1.9)$$

$$A_{T \text{ } i,f \text{ } 2\text{E1}} = \frac{1}{2} \int_{\nu_1=0}^{\nu_1=\nu_0} A_{i,f \text{ } 2\text{E1}}(\nu_1) d\nu_1 \quad (1.10)$$

Hierbei ist $h\nu_{n,i}$ die Differenz der Energien des initialen und des realen intermediären Zustands.

Der in wasserstoffartigen Ionen stattfindende Übergang aus dem angeregten $2s_{1/2}$ -Zustand in den $1s_{1/2}$ -Grundzustand unter Emission zweier Photonen ist ein besonders prominentes Beispiel für Zweiphotonenübergänge (Abb. 1.7). Für Wasserstoff beträgt die $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ Lebensdauer eine siebtel Sekunde [40]. Höhere Kernladungszahlen führen zu quadratisch steigenden Photonenfrequenzen ($\nu_{0,1,2}$) und linear fallenden Dipolmatrixelementen $z_{i,n}$. Insgesamt ergibt sich eine Z^6 -Abhängigkeit der Gesamtübergangsrate und damit eine $1/Z^6$ -Abhängigkeit der Lebensdauer. Für leichte Ionen ist die Gesamtübergangsrate des 2E1 Übergangs höher als die des gleichermaßen möglichen M1 Übergangs, der aber bei hochgeladene Ionen dominiert [40].

Im Falle berylliumartiger Ionen (Abb. 1.12) ist $2s_{1/2}2p_{1/2}^3P_0$ der erste angeregte Zustand oberhalb des $2s_{1/2}^2\ ^1S_0$ -Grundzustandes. Bedingt durch den in beiden Zuständen verschwindenden totalen Gesamtdrehimpuls J sind hier keinerlei Einphotonenübergänge erlaubt. Einzig bei Vorliegen eines Kernspins ($I \neq 0$), der daraus resultierenden Hyperfeinaufspaltung und der sich hieraus ergebenden kleinen Beimischung von Zuständen mit $J \neq 0$ zum $2s2p\ ^3P_0$ -Zustand, kann dieser metastabile Zustand doch noch über einen Einphotonenübergang relaxieren [11]. Bei Kernen mit gerader Kernladungs- und Massenzahl verschwindet im Grundzustand des Kerns der Kernspin [41], entsprechend sind keine hyperfeininduzierten Übergänge möglich. Da auch ein 2E1-Übergang nur bei gerader Übergangsparität möglich ist, bleibt für die Relaxation des $2s_{1/2}2p_{1/2}^3P_0$ -Zustandes in den $2s_{1/2}^2\ ^1S_0$ -Grundzustand nur die außerordentlich langlebige E1M1-Zweiphotonenemission als wahrscheinlichste Übergangsart.

Der Prozess der Zweiphotonenemission des metastabilen $2s2p\ ^3P_0$ -Zustandes wurde von Schmieder [42] theoretisch untersucht, wobei Übergangsraten für Ionen mit Kernladungszahlen zwischen 12 und 20 angegeben wurden. C. Laughlin [3] gibt für die Lebensdauer τ_{E1M1} bzw. Übergangsrate $A_{E1M1} = \tau_{E1M1}^{-1}$ eine Näherungsformel an, die in Abhängigkeit von Kernladungszahl und der Summe der Energie beider Photonen ($E_{\omega_1} + E_{\omega_2}$) folgendermaßen ausgedrückt werden kann:

$$\tau_{E1M1} = 3.1 \cdot 10^{18} \text{s} \cdot Z^{-4} (E_{\omega_1} + E_{\omega_2})^{-5} \quad (1.11)$$

Die Ergebnisse beider Arbeiten sind in Abb. 1.13 dargestellt. Letztere Gleichung wurde unter der Voraussetzung entwickelt, dass die energetische Aufspaltung der Zustände $2s2p\ ^3P_0$ und $2s2p\ ^3P_1$ klein gegenüber der Energie des ($2s2p\ ^3P_0 \rightarrow 2s^2\ ^1S_0$)-Übergangs ist. Diese Voraussetzung ist bei niedrig geladenen Ionen aufgrund der L-S-Kopplung erfüllt, gilt aber – wie man in Abb. 1.11 sieht – nicht für hochgeladene, der j-j-Kopplung unterliegende, atomare Systeme. Laughlin erhält Gleichung 1.11 aus den folgenden Ausdrücken unter der Annahme $E(^3P_0) \approx E(^3P_1)$ in

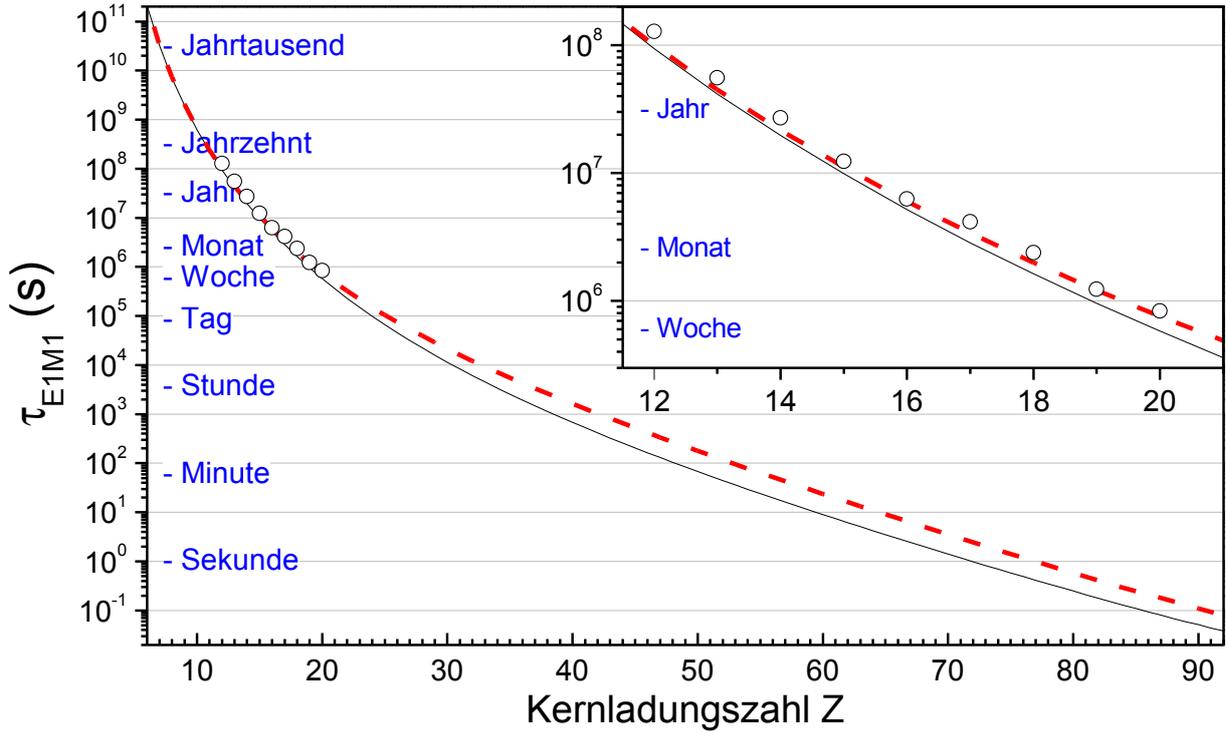


Abbildung 1.13: Berechnete Lebensdauer des metastabilen, ersten angeregten Zustandes berylliumartiger Ionen ($2s_{1/2}2p_{1/2}^3P_0$) gegenüber dem dominanten E1M1 Zweiphotonenübergang. Dargestellt sind Rechnungen von Schmieder(○) [42], Laughlin(—) [3] und die Anpassung der letztgenannten Rechnung an die bei hochgeladenen Ionen nicht mehr vernachlässigbare Aufspaltung der Energieniveaus $2s2p^3P_0$ und $2s2p^3P_1$ (---) (Gl. 1.17).

Gleichung 1.16 (wobei $\hbar = 1$ gesetzt wurde):

$$\omega_1 + \omega_2 = E(^3P_0) - E(^1S_0) \quad (1.12)$$

$$A_T = \int_{\omega_1=0}^{E(^3P_0)-E(^1S_0)} P(\omega_1) d\omega_1 \quad (1.13)$$

$$P(\omega_1) d\omega_1 = \frac{8\omega_1^3 \omega_2^3}{9\pi c^6} N(\omega_1) d\omega_1 \quad (1.14)$$

$$N(\omega_1) = 0,1075\alpha^6 Z^4 \left(\frac{1}{\Delta E_1} + \frac{1}{\Delta E_2} \right)^2 \quad (1.15)$$

$$\Delta E_i = E(^3P_0) - E(^3P_1) - \omega_i \quad (1.16)$$

Dabei erlauben diese Gleichungen auch ohne obige Näherung die Extraktion der im Folgenden angegebene E1M1-Zweiphotonenlebensdauer τ_{E1M1} :

$$\tau_{\text{E1M1}}(Z, E, E_{0,1}) = 5.2 \times 10^{17} \text{ s} \cdot Z^{-4} \left(\frac{2E_{01}^2 (3E^2 - 10EE_{01} + 10E_{01}^2) (E_{01} - E)^2 \log\left(\frac{E_{01}}{E_{01}-E}\right)}{2E_{01} - E} + \frac{E}{6} (E^4 + 8E^3E_{01} - 68E^2E_{01}^2 + 120EE_{01}^3 - 60E_{01}^4) \right)^{-1} \quad (1.17)$$

Hierbei ist E die Anregungsenergie des $2s2p \ ^3P_0$ -Zustandes und E_{01} entspricht dem Betrag der Aufspaltung der Zustände $2s2p \ ^3P_1$ und $2s2p \ ^3P_0$. Unter Nutzung von Literaturwerten [34] für die Energie der $2s2p \ ^3P_1$ - bzw. $2s2p \ ^3P_0$ -Niveaus in berylliumartigen Systemen kann hieraus die Lebensdauer des E1M1-Zweiphotonenübergangs berechnet werden. Abb. 1.13 zeigt die so ermittelten Werte im Vergleich zur Näherung (Gl. 1.11) und den von Schmieder explizit berechneten Werten. Es sei darauf hingewiesen, dass die Rechnungen von Laughlin nur den energetisch benachbarten $2s2p \ ^3P_1$ -Zwischenzustand berücksichtigen. Angesichts der im Vergleich zum $(2s2p \ ^3P_1 - 2s^2 \ ^1S_0)$ -Interkombinationsübergang um mehrere Größenordnungen höheren Rate des $(2s2p \ ^1P_1 - 2s^2 \ ^1S_0)$ -Dipolübergangs [43] erscheint die Beschränkung auf erstgenannten Zwischenzustand problematisch. Außerdem ist der verwendete, nichtrelativistische Ansatz eher für niedrige Kernladungen geeignet, so dass man für höhere Kernladungen größere Unterschiede erwarten kann.

Sowohl Schmieder als auch Laughlin folgern, dass der Zweiphotonenübergang auf experimentellem Weg außergewöhnlich schwierig zu untersuchen sein wird und werden dahingehend bestätigt, dass heute – gut 30 Jahre später – keine experimentell bestimmte E1M1-Zweiphotonenlebensdauer in berylliumartigen Systemen vorliegt [40].

1.1.4 Rydbergatome

Als Rydbergatome werden Atome mit Elektronen in Zuständen hoher Quantenzahl (Rydbergzustand) bezeichnet. Ab welcher Quantenzahl Zustände als Rydbergzustände bezeichnet werden, ist dabei nicht genau festgelegt. Rydbergzustände weisen aufgrund ihrer hohen Hauptquantenzahl eine Reihe von Eigenschaften auf, die sie von anderen Zuständen unterscheiden.

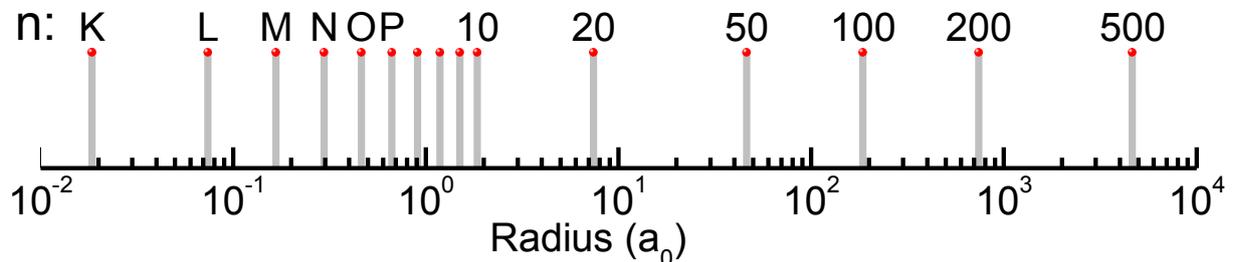


Abbildung 1.14: Hauptquantenzahlabhängige Bahnradien (Gl. 1.3) bei $Z=54$ in Einheiten des Bohrschen Radius.

Zu diesen Eigenschaften gehört die außergewöhnlich niedrige Ionisierungsenergie des Rydbergzustandes (Gl. 1.1), die dazu führt, dass sich Elektronen in Rydbergzuständen sowohl durch äußere Felder als auch durch höhere Temperaturen sehr leicht ionisieren lassen (Abs. 1.3.5). Ebenfalls bemerkenswert ist, dass auf einen sehr kleinen Energiebereich knapp unterhalb der Ionisationsschwelle eine unendlich große Zahl unterschiedlicher Rydbergzustände unterschiedlicher Quantenzahlen kommen, die ihrerseits wieder über eine sehr große Zahl von Unterzuständen verfügen. Eine der interessantesten Eigenschaften von Rydbergzuständen ist jedoch der hohe mittlere Abstand des Rydberg-Elektrons vom Atomkern. Diese wird schon vom Bohrschen Atommodell – gemäß dem der Bahnradius mit dem Quadrat der Hauptquantenzahl zunimmt (Gl. 1.3) – richtig vorhergesagt (Abb. 1.14). Hieraus ergeben sich sehr große Atomdurchmesser, die für hohe Quantenzahlen beinahe makroskopische Dimensionen erreichen.

In quantenphysikalischer Betrachtung ist mit großen mittleren Kernabständen meist eine sehr geringe Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons im Bereich des Atomrumpfes verbunden. Dies erlaubt es, die Energieniveaus von Rydbergzuständen auch bei komplexer Struktur des Atomrumpfes in einem wasserstoffartigen Modell (Gl. 1.4) mit überraschend hoher Genauigkeit zu beschreiben. Hierbei wird eine, um die abschirmenden Rumpfelektronen reduzierte, effektive Kernladungszahl ($Z_{\text{eff}} = Z - n_{\text{e Rumpf}}$) verwendet. Zu berücksichtigen bleibt hierbei allerdings, dass diese Beschreibung nur angemessen ist, solange der Einfluss der Rumpfelektronen mit einer Abschirmung des Kernpotentials vollständig beschrieben werden kann. Dies ist der Fall, solange die Wellenfunktion des Rydbergelektrons nicht signifikant mit den Wellenfunktionen der Rumpfelektronen überlappt; sich das Rydbergelektron also immer weit außerhalb des Bereiches der Rumpfelektronen befindet. Bei sehr geringen Drehimpulsen gilt dies nicht mehr. Hier haben auch Rydbergelektronen noch relevante Aufenthaltswahrscheinlichkeiten im Bereich der inneren Schalen. Interessanterweise lässt sich dieser Effekt schon im klassischen Bohr-Sommerfeld Atommodell erklären. In diesem Modell entsprechen Zustände, die sowohl über eine hohe Hauptquantenzahl (n) als auch eine niedrige Bahndrehimpulsquantenzahl (l) besitzen, Elektronen auf hochgradig exzentrische Bahnen, deren Perihel den Elektronenbahnen des Atomrumpfes sehr nahe kommt oder gar in sie abtaucht (Abb. 1.15). Sobald dies geschieht können die entsprechenden Rumpfelektronen das Kernpotential nicht mehr, wie angenommen, mit ihrer vollständigen Elektronenladung abschirmen. Diese geringere Abschirmung führt bei Rydbergelektronen mit niedrigem Drehimpuls zu einem höheren, mittleren effektiven Kernladungspotential und damit zu einer stärkeren Bindung als dies ein wasserstoffartiges Modell mit $Z_{\text{eff}} = Z - n_{\text{e Rumpf}}$ vorher-sagt. Entsprechend müssen die Grenzen der Gültigkeit der wasserstoffähnlichen Beschreibung von Rydbergzuständen beachtet werden.

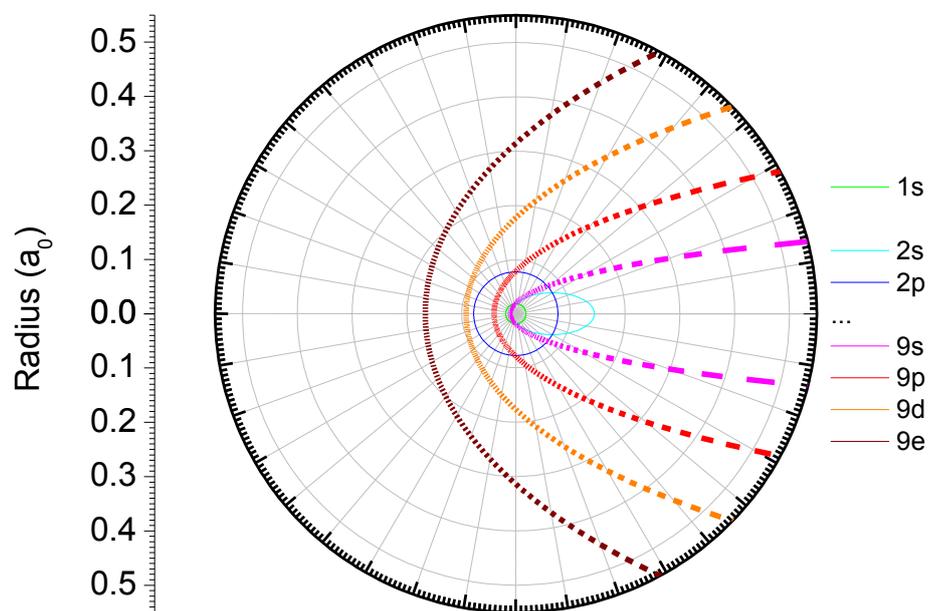


Abbildung 1.15: exemplarische Bahnen im Bohr-Sommerfeldschen Atommodell für verschiedene Zustände bei $Z_{\text{eff}} = 50$ in Einheiten des Bohrschen Radius.

1.2 Wirkungsquerschnitt und Ratenkoeffizient

Der Wirkungsquerschnitt ist ein Maß für die Wahrscheinlichkeit einer Reaktion. Er hängt von der Relativgeschwindigkeit der beteiligten Partner ab. Betrachtet man nicht einen einzelnen Stoß zwischen zwei Teilchen sondern die Ereignisse bei der Kollision von Teilchenensembles, die räumliche und energetische Verteilungen besitzen, dann hängt die Reaktionsrate vom Wirkungsquerschnitt $\sigma(v)$, der ortsabhängigen Elektronendichte $n_e(\vec{r})$, der ortsabhängigen Ionendichte $n_i(\vec{r})$ und der Geschwindigkeitsverteilung $f(v_0, \vec{v})$ der Teilchen sowie ihrer mittleren Relativgeschwindigkeit v_0 ab, wobei für letztere hier angenommen wird, dass sie ortsunabhängig ist. Es gilt die Formel [44]:

$$R = \int_r \int_v n_e(\vec{r}) n_i(\vec{r}) \sigma(v) v f(v_0, \vec{v}) d^3 v d^3 r \quad (1.18)$$

$$= \int_r n_e(\vec{r}) n_i(\vec{r}) d^3 r \int_v \sigma(v) v f(v_0, v) d^3 v \quad (1.19)$$

Dabei beschreibt das erste Integral in Gl. 1.19 den geometrischen Überlapp der Teilchendichten, und das zweite Integral ist der sogenannte Ratenkoeffizient (α).

$$\alpha(v_0) = \langle \sigma v \rangle = \int \sigma(v) v f(v_0, \vec{v}) d^3 v \quad (1.20)$$

Da im Experiment ein Ratenkoeffizient bestimmt wird, muss für den Vergleich zwischen Theorie und Experiment der theoretisch bestimmte Wirkungsquerschnitt mit der experimentellen Geschwindigkeitsverteilung $f(v_0, \vec{v})$ gemäß Gl. 1.20 gefaltet werden. In einem Speicherringexperiment gilt in guter Näherung [45] die folgende, modifizierte Maxwell-Boltzmann-Verteilung für die Geschwindigkeitsverteilung:

$$f(v_0, \vec{v}) = \left(\frac{m_e}{2\pi k T_{\parallel}} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{m_e (v_{\parallel} - v_0)^2}{2k T_{\parallel}} \right] \times \frac{m_e}{2\pi k T_{\perp}} \exp \left(-\frac{m_e v_{\perp}^2}{2k T_{\perp}} \right) \quad (1.21)$$

Dabei ist k die Boltzmannkonstante, v_{\parallel} und v_{\perp} repräsentieren die longitudinale und transversale Komponente der Geschwindigkeit \vec{v} . Diese sogenannte abgeplattete Maxwellverteilung ist durch die Temperaturen T_{\parallel} und T_{\perp} longitudinal bzw. transversal zum Strahl charakterisiert. Bei Experimenten mit Teilchenstrahlen sind möglichst geringe Strahltemperaturen und damit näherungsweise monoenergetische Strahlen für eine gute Energieauflösung wünschenswert.

Die meisten in der Natur vorkommenden Rekombinationsprozesse finden in Plasmen statt, in denen die Geschwindigkeitsverteilung der Elektronen einer nur durch die Elektronentemperatur T_e bestimmten Maxwell-Boltzmann-Verteilung entspricht. In diesem Fall ergibt sich aus Gl. 1.20 ein nur noch von T_e abhängiger Plasmaratenkoeffizient.

$$\alpha(T_e) = (k_B T_e)^{3/2} \frac{4}{\sqrt{2m_e \pi}} \int_0^{\infty} \sigma(E_{\text{rel}}) \cdot E_{\text{rel}} \cdot \exp \left(\frac{-E_{\text{rel}}}{k_B T_e} \right) dE_{\text{rel}} \quad (1.22)$$

1.3 Rekombinationsprozesse

In diesem Abschnitt werden die Photorekombinationsprozesse der radiativen (Abs. 1.3.2) und dielektronischen Rekombination (Abs. 1.3.3) sowie die zwischen ihnen auftretende Interferenz (Abs. 1.3.4) thematisiert. Des Weiteren wird auch der Einfluss der Feldionisation (Abs. 1.3.5) auf Rekombinationsmessungen erläutert.

1.3.1 Photorekombination

Der Prozess der Photorekombination beschreibt den Einfang eines Elektrons (e^-) durch ein Ion (A^{q+}) unter Emission eines oder mehrerer Photonen (γ), wie er in Gl. (1.23) dargestellt ist:



Im Rahmen der Photorekombination unterscheidet man zwischen dem nichtresonanten Prozess der radiativen Rekombination (RR) und resonanten Prozessen. Unter Letztgenannten dominiert in der Regel die dielektronische Rekombination (DR Abschnitt 1.3.3), doch sind hier auch Prozesse höherer Ordnung, wie z.B. trielektronische Rekombination [46], zu finden.

1.3.2 Radiative Rekombination (RR)

Die radiative Rekombination (RR) ist ein nichtresonanter Prozess, bei dem ein Elektron von einem Ion bei gleichzeitiger Emission eines Photons eingefangen wird (Gl. 1.24). Dabei handelt

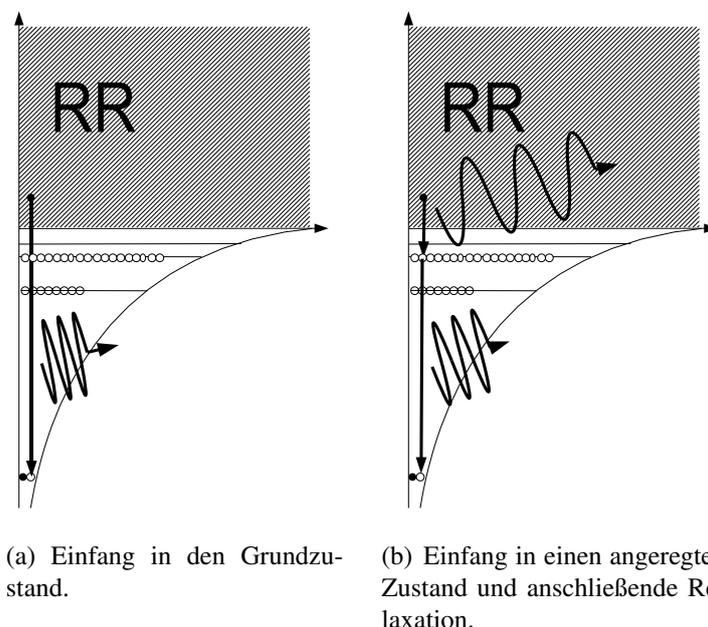
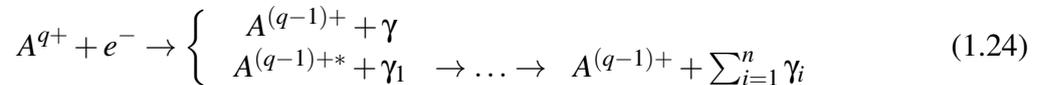


Abbildung 1.16: Schematische Darstellung der radiativen Rekombination.

es sich um den zur Photoionisation [47] zeitinversen Prozess. Ist das Atom nach der Rekombination noch angeregt, dann folgen auf den Einfang noch weitere Relaxationsprozesse, bis nach Emission einer endlichen Photonenzahl der Grundzustand erreicht ist.



Als nichtresonanter Prozess ist der Einfang nicht auf Elektronen bestimmter Energien beschränkt, allerdings durchaus von der Energie abhängig. Die radiative Rekombination ist – im Unterschied zur dielektronischen Rekombination – auch bei nackten Ionen möglich, da hier die Existenz eines zweiten, gebundenen Elektrons nicht vorausgesetzt wird. Die erste theoretische Untersuchung dieses Prozesses stammt von Kramers [48] im Jahre 1923. Flannery [49] (Gl. 54.182) gibt für den energieabhängigen Kramers-Wirkungsquerschnitt des Einfangs in die n -te Schale eines wasserstoffartigen Systems der Kernladungszahl Z folgende Gleichung an:

$$\sigma_{RR\ n}(E) = \frac{3.897 \times 10^{-20} \text{ cm}^2 \text{ eV}^2}{n \frac{E}{Z^2} \left(R_y + n^2 \frac{E}{Z^2} \right)} \quad (1.25)$$

Hierbei ist E die Energie im Schwerpunktsystem von Elektron und Ion und R_y die Rydbergenergie. Den totalen RR-Wirkungsquerschnitt erhält man näherungsweise durch Summation über die Hauptquantenzahl bei Annahme eines Anteils (t_n) der unbesetzten für den Einfang verfügbaren

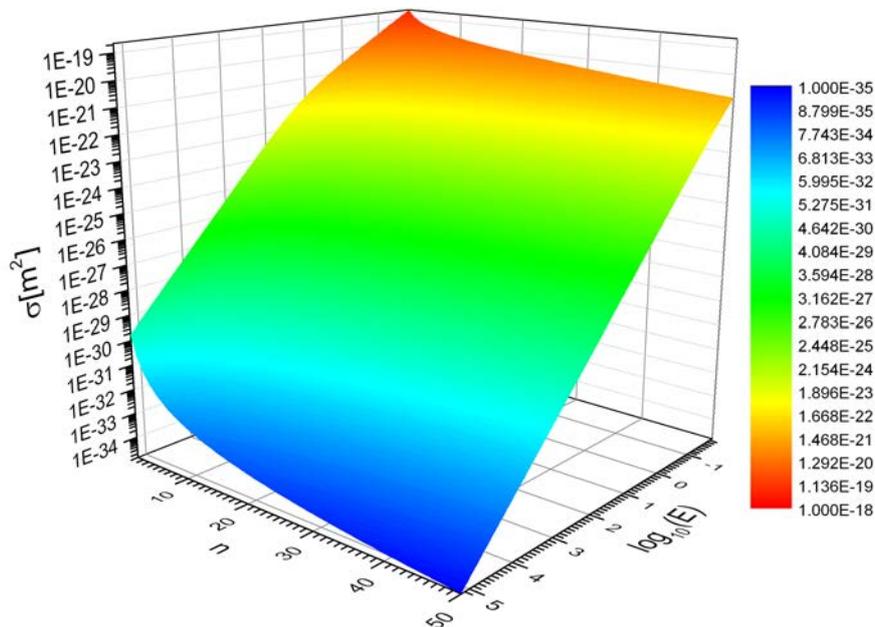


Abbildung 1.17: Wirkungsquerschnitt der radiativen Rekombination für den Einfang in H^+ in Abhängigkeit von Schwerpunktsenergie (E) und Hauptquantenzahl (n)

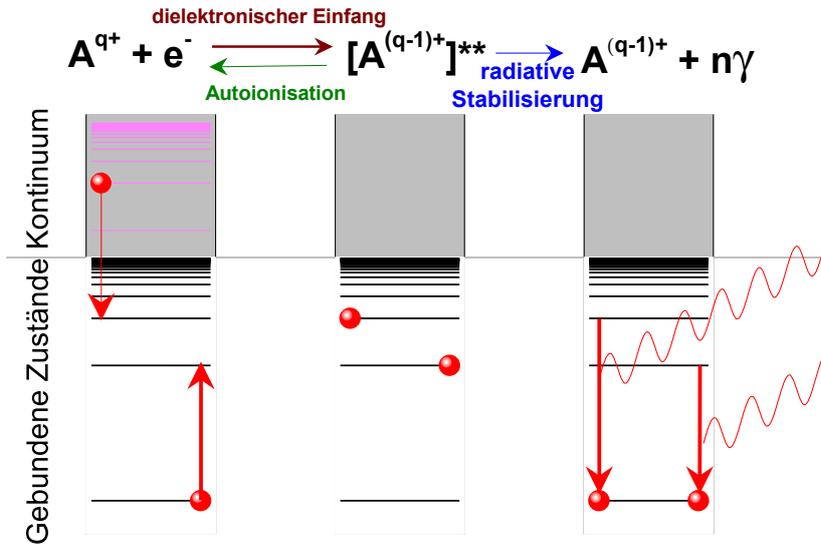
Unterstufen der Hauptschale mit dem Index n gemäß der folgenden Gleichung:

$$\sigma_{RR\ tot}(E) = \sum_{n=n_{\min}}^{n=n_{\max}} \sigma_{RR\ n}(E) \cdot t_n \cdot G_n(E=0) \quad (1.26)$$

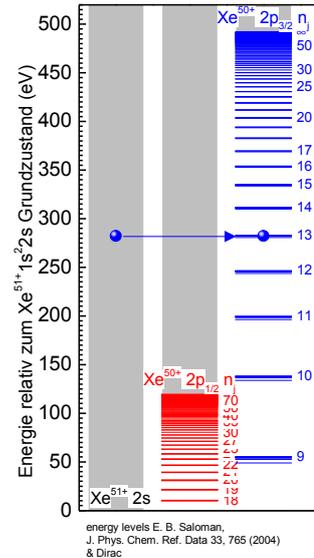
Der Gaunt-Faktor $G_n(E=0)$ [50] ermöglicht hierbei eine Korrektur der semiklassischen Kramers-Formel 1.25 hin zu einer quantenmechanischen Rechnung, wie sie von Stobbe [51] durchgeführt wurde. Die Korrektur ist stark von der Hauptquantenzahl, sehr schwach von der Energie und gar nicht von der Kernladungszahl Z abhängig. Der Parameter n_{\max} lässt sich einerseits als numerische Grenze einer Summation verwenden, die für $n \rightarrow \infty$ aufgrund der $1/n^3$ -Abhängigkeit konvergiert. Andererseits dient er aber auch zur Berücksichtigung experimenteller Gegebenheiten, die die messbare Rekombination auf Zustände mit $n < n_{\max}$ beschränken. Hier ist z.B. die Feldionisation genannte Reionisierung schwach gebundener Rydbergzustände durch den Einfluss des äußeren Magnetfeldes (Abs. 1.3.5), aber auch die Berücksichtigung von Autoionisationsschwellen bei radiativem Einfang in schon gegenüber dem Grundzustand angeregten Ionen (Abs. 4.3.3.4) zu nennen. Neuere, vollständig relativistische Rechnungen [52] zeigen eine weitgehende Übereinstimmung mit den nichtrelativistischen Rechnungen von Stobbe [51] für nicht zu hochgeladene Ionen und nicht zu hohe Relativenergien. Für $Z=50$ und Elektronenenergien von 1000 eV geben Ichihara & Eichler Unterschiede zwischen relativistischer und nichtrelativistischer Rechnung der 1s-, 2p- und 3d-RR-Wirkungsquerschnitte von etwa 2, 7 und 4% an [52]. Im Gegensatz zu den schon vor neun Jahrzehnten begonnenen theoretischen Beschreibungen wurden die ersten hinreichend präzisen, experimentellen Untersuchungen zur RR erst etwa 70 Jahre später an den dann zur Verfügung stehenden experimentellen Anlagen mit kollinearen Ionen- und Elektronenstrahlen durchgeführt [53]. Dabei wurde schon bei einem der ersten Experimente [54] im Bereich kleiner Energien Ratenkoeffizienten gemessen, die etwa um den Faktor 5 größer waren als die theoretischen Vorhersagen. Dieser Effekt trat bei verschiedensten Messungen jeweils im niederenergetischen Bereich auf und blieb lange Zeit unverstanden, bis Hörndl *et al.* [55–58] ihn auf die Wechselwirkung der Ionen mit den Feldern der den Elektronenstrahl ein- und auslenkenden Magneten zurückführen konnte. Deutlich detailliertere Erläuterungen der hier nur als kurzer Anriss präsentierten radiativen Rekombination, insbesondere in Hinblick auf Experimente an Schwerionenspeicherringen, finden sich in [59].

1.3.3 Dielektronische Rekombination (DR)

Die dielektronische Rekombination (DR siehe Abb. 1.18(a) und Gl. 1.27) ist ein in Konkurrenz zur RR stehender, zweistufiger Rekombinationsprozess zwischen einem Ion und einem freien Elektron. Im Gegensatz zur radiativen Rekombination wird die beim Elektroneneinfang gewonnene Energie nicht direkt in Form eines Photons emittiert, sondern – durch Anregung eines gebundenen Elektrons – im Ion gespeichert. Diese erste Stufe des Prozesses wird dielektronischer Einfang (DE) genannt und ist zeitinvers zur Autoionisation (AI). In der zweiten Stufe des Prozesses wird die Energie des doppelt angeregten Ions durch Emissionen eines oder mehrerer Photonen unter die Ionisationsschwelle reduziert; dies wird als radiative Stabilisierung (RS) bezeichnet. Da sich die Anregungsenergie des rekombinierten, doppelt angeregten Ions nach



(a) Schematische Darstellung der dielektronischen Rekombination bestehend aus dielektronischem Einfang (DE) und anschließender radiativer Stabilisierung. Als resonanter Prozess ist die DR nur bei bestimmten Energien des Kontinuumselektrons möglich (waagrechte Linien im Kontinuum).



(b) DE-Resonanzenergien für $Xe^{51+} + e^{-} \rightarrow Xe^{50+} 2p_{j_1} n_{j_2}$. Energien nach Abschnitt 1.1.4 aus Gl. (1.4) und [1, 60].

Abbildung 1.18: Dielektronische Rekombination: Schematische Darstellung und Beispiel für Resonanzenergien.

dem dielektronischen Einfang als Folge der Energieerhaltung immer oberhalb der Reionisationsschwelle befindet, ist alternativ zur radiativen Stabilisation auch ein Autoionisationsprozess möglich. Im letztgenannten Fall gelangt eines der Elektronen erneut in das Kontinuum und das Ion befindet sich wieder im anfänglichen Ladungszustand.

$$A^{q+} + e^{-} \xrightleftharpoons[DE]{AI} A^{[(q-1)+]**} \xrightarrow{RS} A^{(q-1)+} + \gamma_1 \rightarrow \dots \rightarrow A^{(q-1)+} + \sum_{i=1}^n \gamma_i. \quad (1.27)$$

1.3.3.1 Resonante Struktur

Die im Rahmen des dielektronischen Einfangs (DE) vom einzufangenden Elektron abzugebende Energie muss – aus Gründen der Energieerhaltung – vollständig vom anzuregenden Elektron aufgenommen werden (Abb. 1.18(a)). Für jede Kombination aus möglicher Anregungsenergie eines gebundenen Elektrons (E_{ex}) und der Bindungsenergie des vom vormals freien Elektron zu besetzenden, gebundenen Zustandes ($E_B(n, l, j)$) gibt es (höchstens) eine (positive) Energie des Kontinuumselektrons (E_e), bei der der dielektronische Einfang möglich ist, wenn man von der natürlichen Breite der beteiligten Zustände absieht. Die folgende Gleichung entspricht dieser

Bedingung. Effekte der Wechselwirkung zwischen Rumpf- und Rydbergelktron bleiben hierbei unberücksichtigt, so dass die Gleichung nur gültig ist, solange diese Wechselwirkung klein ist:

$$E_e = E_{ex} - E_B(n, l, j) \quad (1.28)$$

Obige Gleichung führt zu einer Vielzahl von Resonanzen, doch sind diese nicht gleichmäßig über das Energiespektrum verteilt, sondern bilden für jede Anregungsmöglichkeit (E_{ex}) eine Rydbergresonanzserie, an deren Seriengrenzen sich die Zustände häufen. Dabei bleiben mehr oder weniger weite Bereiche des Kontinuums ohne DR-Resonanzen. Abb. 1.18(b) zeigt mögliche Resonanzenergien am Beispiel von Xe^{51+} .

Besonders deutlich wird die Größe des resonanzfreien Energiebereichs im Falle wasserstoffartiger Ionen. Hier muss dem gebundenen Elektron mindestens etwa 3/4 seiner K-Schalen-Bindungsenergie zugeführt werden, um es in den niedrigsten, angeregten Zustand anzuheben. Gleichzeitig beinhaltet die L-Schale die am stärksten gebundenen Zustände, in die das Kontinuum-Elektron eingefangen werden kann, ohne das anzuregende K-Schalenelektron seinerseits ins Kontinuum zu befördern. Der Einfang in die L-Schale setzt zusätzlich zur Kontinuumsenergie aber nur etwa 1/4 der K-Schalen Bindungsenergie frei. Somit ist der DE in wasserstoffartige Ionen bei Kontinuumsenergien unterhalb der halben K-Schalen Bindungsenergie grundsätzlich verboten, sofern man Hyperfeinaufspaltungen der K-Schale unberücksichtigt lässt. Im Fall wasserstoffartiger Uranionen bedeutet dies, dass Schwerpunktsenergien von mehr als 60 keV vorhanden sein müssen, damit die DR auftritt. Zu erwähnen ist, dass diese Notwendigkeit hoher Elektronenenergien nur für den Fall gilt, dass die nötigen Anregungsenergien groß gegenüber den möglichen Bindungsenergien sind. Dies gilt nur für Anregungen (aus einer niedrigen Schale) in eine andere Schale ($dn \geq 1$). Anregungen innerhalb einer nicht vollständig gefüllten Schale ($dn=0$), wie sie ab lithium- oder berylliumartigen Ionen möglich sind, erfordern deutlich geringere Anregungsenergien, die durch die Bindung des Kontinuumselektrons beinahe vollständig bereitgestellt werden können, so dass die DR hier auch bei extrem geringen Schwerpunktsenergien auftreten kann.

1.3.3.2 Wirkungsquerschnitt

Der Wirkungsquerschnitt $\sigma_{DE, j \rightarrow d}$ des dielektronischen Einfangs aus dem Anfangszustand j in den doppeltangeregten Zustand d bei Schwerpunktsenergie E lässt sich gemäß der folgenden Formel [61] auf die Autoionisationsrate $A_a(d \rightarrow j)$ des Zustands d in den Zustand j zurückführen:

$$\sigma_{DE, j \rightarrow d} = 7.88 \times 10^{-31} \text{cm}^2 \text{eV}^2 \text{s} \frac{g_d}{2g_j} \frac{1}{E} \frac{A_a(d \rightarrow j)\Gamma_d}{(E - E_d)^2 + \Gamma_d^2/4} \quad (1.29)$$

Hierbei bezeichnen g_d und g_j die statistischen Gewichte der Zustände d und j , E_d die Resonanzenergie und Γ_d die Breite des Zustandes d . Zur Bestimmung des DR-Wirkungsquerschnitts ist der Wirkungsquerschnitt des dielektronischen Einfangs noch mit der Wahrscheinlichkeit der radiativen Stabilisierung zu multiplizieren. Dabei steht die radiative Stabilisierung ($\sum_f d \rightarrow \dots \rightarrow f$) in Zustände unterhalb der Autoionisationsschwelle in Konkurrenz zur Autoionisation ($\sum_k d \rightarrow$

... $\rightarrow k$). Auf diesem Weg erhält man den DR-Wirkungsquerschnitt in der Näherung für unabhängige Rekombinationsprozesse [62]. Integriert man zusätzlich noch über die Schwerpunktsenergie E , so erhält man die DR-Resonanzstärke [61]:

$$\bar{\sigma}_{DR,j \rightarrow d} = 4,95 \times 10^{-30} \text{cm}^2 \text{eV}^2 \text{s} \frac{g_d}{2g_j} \frac{1}{E_d} \frac{A_a(d \rightarrow j) \sum_f A_r(d \rightarrow \dots \rightarrow f)}{\sum_k A_a(d \rightarrow \dots \rightarrow k) + \sum_{f'} A_r(d \rightarrow \dots \rightarrow f')} \quad (1.30)$$

Stark vereinfacht ergibt sich der Ausdruck 1.31, aus dem sich ableiten lässt, dass die DR-Resonanzstärke für hohe Autoionisationsraten von der radiativen Rate und für hohe radiative Raten von der Autoionisationsrate dominiert wird.

$$\bar{\sigma}_{DR} \propto \frac{1}{E_d} \frac{A_a \cdot A_r}{A_a + A_r} \approx \begin{cases} A_r/E_d & \text{für } A_a \gg A_r \quad \text{typisch für leichte Ionen} \\ A_a/E_d & \text{für } A_a \ll A_r \quad \text{typisch für schwere Ionen} \end{cases} \quad (1.31)$$

Der Ausdruck $\frac{A_r}{A_a + A_r}$ wird als Fluoreszenzausbeute bezeichnet, da er den Anteil der radiativen Stabilisierung an den Relaxationsprozessen des mittels dielektronischen Einfangs entstandenen, doppel angeregten Ions beschreibt.

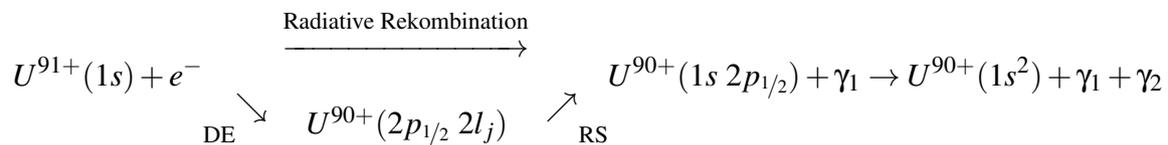
1.3.3.3 Experimenteller Zugang

Messungen zur dielektronischen Rekombination basieren entweder auf dem Nachweis der emittierten Photonen [63] oder — wie die im Rahmen dieser Arbeit ausgewerteten Experimente — auf dem Nachweis der umgeladenen Ionen und können an gekreuzten wie auch überlagerten Strahlen durchgeführt werden. Der Vorteil der Detektion der Photonen liegt in der Möglichkeit sowohl Photoneneigenschaften als auch Winkelverteilungen zu untersuchen. Die Emission der Photonen in potentiell alle Raumrichtungen führt allerdings dazu, dass der Anteil der nachgewiesenen Reaktionen an der Gesamtzahl der Reaktionen näherungsweise dem Anteil des von den Detektoren eingenommenen Raumwinkels entspricht. Bei einer Anordnung mit gekreuzten Strahlen können Photonen in verschiedenen Raumwinkeln untersucht werden, wobei eine Detektion aller Photonen nur mit einem 4π -Detektor möglich ist. Letzteres würde einen sehr hohen experimentellen Aufwand erfordern. Der Nachteil der gekreuzten Strahlen besteht in der kleinen Wechselwirkungszone, die die Untersuchung von Prozessen mit kleinem Wirkungsquerschnitt erschwert. Bei Experimenten mit parallel zueinander überlagerten Strahlen an Elektronenkühlern ist hingegen eine sehr viel größere Wechselwirkungszone gegeben. Allerdings ist es in der Regel nicht möglich, Detektoren innerhalb des Kühlers selbst zu platzieren, so dass bei Platzierung der Photodetektoren am Ein- bzw. Ausgang des Kühlers nur Photonen detektiert werden könnten, die nahezu parallel bzw. antiparallel zum Ionenstrahl emittiert werden. Entsprechend lassen sich Winkelverteilungen so nur sehr begrenzt untersuchen. Auch ist der experimentelle Zugang auf Prozesse mit geringen Wirkungsquerschnitten über dieses Verfahren nur eingeschränkt möglich. Zusätzlich führt die anisotrope Winkelverteilung bei auf einige wenige Raumwinkel reduzierten Messungen dazu, dass absolute Ratenkoeffizienten nicht direkt gemessen, sondern nur aus Vergleichen zu anderen Messungen oder unter Einbeziehung von Rechnungen zur Winkelverteilung abgeleitet werden können. Der Vorteil des Nachweises der rekombinierten Ionen an Speicherringen liegt in der nahezu 100%igen Nachweiswahrscheinlichkeit für fast alle Ionen. Dies

ermöglicht die Bestimmung absoluter Reaktionsraten mit vergleichsweise geringen systematischen Fehlern. Des Weiteren können auch Prozesse mit relativ geringen Wirkungsquerschnitten effizient untersucht werden oder Experimente bei sehr geringen Ionenströmen durchgeführt werden, wie sie z.B. bei im Flug produzierten Elementen herrschen [64]. Außerdem kann, bedingt durch die anfängliche Beibehaltung der Flugrichtung der rekombinierten Ionen, das große Reaktionsvolumen einer Experimentanordnung mit überlagerten Strahlen vollständig genutzt werden.

1.3.4 Interferenz zwischen DR und RR

In der klassischen Modellvorstellung sind dielektronische und radiative Rekombination getrennte Vorgänge. Betrachtet man allerdings Prozesse mit identischem Anfangs- und Endzustand, wie exemplarisch in folgender Gleichung dargestellt, dann ist dieser Ansatz nicht mehr vollständig korrekt, da diese Prozesse voneinander ununterscheidbar sind und deshalb interferieren.



Die Interferenzen führen zu asymmetrischen Linienprofilen und sind besonders stark ausgeprägt, wenn die Wirkungsquerschnitte der interferierenden Prozesse von ähnlicher Größenordnung sind

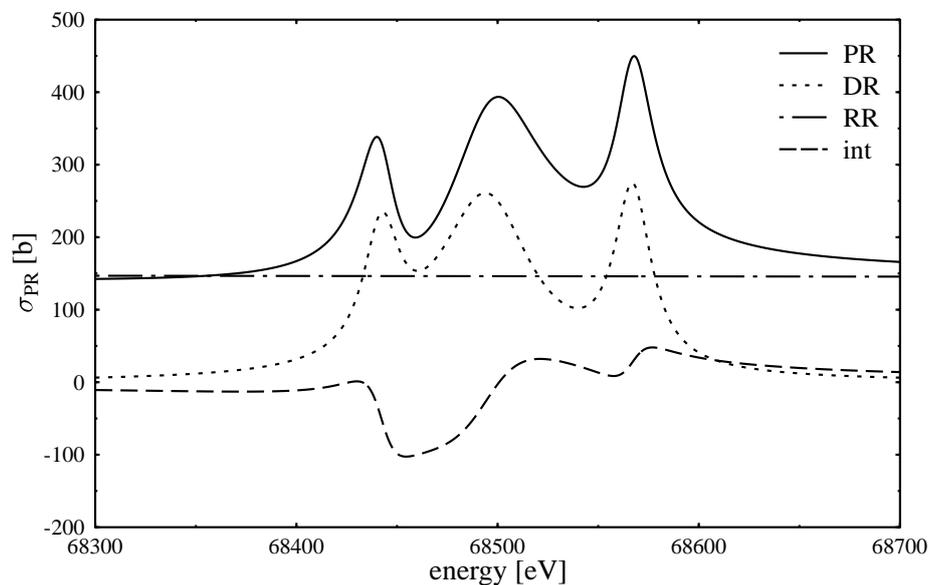


Abbildung 1.19: Wirkungsquerschnitt im Bereich der $KL_{1/2}L_{3/2}$ -DR-Resonanzgruppe bei Wasserstoffartigem Uran [65]. Zwischen radiativer (σ_{RR}) und dielektronischer Rekombination (σ_{DR}) kommt es zur Interferenz (σ_{int}) im Photorekombinationswirkungsquerschnitt ($\sigma_{PR} = \sigma_{RR} + \sigma_{DR} + \sigma_{int}$)

[65] (Abb. 1.19). Die Untersuchung der Formen der Resonanzen ist nur möglich, wenn die experimentelle Auflösung besser ist als die natürliche Linienbreite. Eine Möglichkeit hierzu ist die Untersuchung von Resonanzen mit sehr kurzer Lebensdauer des angeregten Zustandes, wie sie bei hochgeladenen Schwerionen vorkommen. In verschiedenen Experimenten [66–68] wurden schon asymmetrische Linienformen beobachtet. Häufig werden theoretische Rechnungen trotz grundsätzlich möglicher Interferenzeffekte in der Näherung unabhängiger Prozesse durchgeführt. Dies vermindert den numerischen Aufwand stark und ist statthaft, solange die Interferenzeffekte klein sind. Zu beachten ist, dass die radiative Rekombination eines Systems in verschiedene Zustände erfolgen kann, von denen nur eine Teil auch durch DR bevölkert werden kann. Da nur der auch durch DR erreichbare Anteil des RR-Wirkungsquerschnittes zur Interferenz beiträgt, hängt das Ausmaß der Interferenz stark von diesem Anteil am Gesamt-RR-Wirkungsquerschnitt ab. So tragen im Beispiel aus Gleichung 1.3.4 radiative Rekombinationsprozesse in Zustände außerhalb der L-Schale nicht zur Interferenz mit der KLL-DR bei.

1.3.5 Feldionisation hoher Rydbergzustände

Sowohl bei der radiativen Rekombination als auch bei der dielektronischen Rekombination werden hohe Rydbergzustände bevölkert. Die so entstandenen, angeregten Zustände der Hauptquantenzahl n weisen eine ausgesprochen niedrige Ionisierungsenergie auf, die sich mittels Gleichung 1.1 und einer um die Anzahl der Rumpfelektronen verminderten effektiven Kernladungszahl Z_{eff} bestimmen lässt. Im Beispiel berylliumartiger Xenonionen im Zustand $1s^2 2l_j n$ mit exemplarischen Hauptquantenzahlen des Rydbergzustandes von 10, 32, 100, 320 bzw. 1000 beträgt das Ionisationspotential 350, 35, 3.5, 0.35 bzw. 0.035 Volt. Befindet sich ein atomares Potential $U(R) = -a Z_{\text{eff}} e / R$ in einem äußeren Feld F , so ändert dieses Feld den Verlauf des Potentials zu $U'(R) = -a Z_{\text{eff}} e / R - F \cdot R$ bei Betrachtung in Feldrichtung [69]. Entsprechend existiert ein Sattelpunkt bei $r_s = \sqrt{a Z_{\text{eff}} e / F}$ mit $U(r_s) = -2 \cdot \sqrt{a Z_{\text{eff}} e F}$. Demzufolge sind hohe Rydbergzustände – mit einer (feldfreien) Bindungsenergie kleiner als das Schwellenpotential $U(r_s)$ – nicht mehr gebunden, sondern werden durch die Anwesenheit eines äußeren Feldes ionisiert. Folgt man diesem verhältnismäßig einfachen Sattelpunktmodell, setzt die Bindungsenergie der Rydbergzustände mit der Energie am Ort der Potentialschwelle gleich und löst den so erhaltenen Zusammenhang nach der Hauptquantenzahl auf, so erhält man Gleichung 1.32 [69]. Diese gibt die Hauptquantenzahl n_{FI} der gerade noch gebundenen Rydbergzustände bei effektiver Kernladung $Z_{\text{eff}} \cdot e$ in einem elektrischen Feld F an:

$$n_{\text{FI}} = \sqrt[4]{3.2 \cdot 10^{10} \text{V/m} \cdot \frac{Z_{\text{eff}}^3}{F}} \quad (1.32)$$

Falls magnetische statt elektrischer Felder vorliegen, gilt $F = |\vec{v} \times \vec{B}|$. Für den Fall eines Magneten mit konstantem Ablenkradius ρ ergeben sich F bzw. n_{FI} des Ions ${}^A X^q$ mit $|q| = |Z_{\text{eff}}| - 1$ und der

Geschwindigkeit β_i c über folgende Formeln

$$F = \frac{\gamma_i \beta_i^2 A u c^2}{q e \rho} \quad (1.33)$$

$$n_{\text{FI}} = \sqrt[4]{\frac{3.2 \cdot 10^{10}}{931 \cdot 10^6} \cdot \frac{Z_{\text{eff}}^3 q \rho/m}{\gamma_i \beta_i^2 A}} \underset{Z_{\text{eff}} \sim q}{\approx} 2.42 \cdot Z_{\text{eff}} \cdot \sqrt[4]{\frac{\rho/m}{\gamma_i \beta_i^2 A}} \quad (1.34)$$

Für die im Rahmen dieser Arbeit ausgewertete $^{136}\text{Xe}^{50+}$ -Messung bei einer Ionenenergie von 63 MeV/u ($\beta_i = 0.338$) am ESR ($\rho = 6.25$ m) ergibt sich aus Gleichung 1.34 eine Feldionisationsgrenze von etwa 94.

Eine deutlich ausführlichere Darstellung des Einflusses äußerer Felder auf die dielektronische Rekombination gibt [61, 5.5. bzw. C.2]. Durch Berücksichtigung der Stark-Verschiebung der Energieniveaus erhält man für die Feldionisationsgrenze folgende Gleichung:

$$n_{\text{FI}} = \sqrt[4]{5.7 \cdot 10^{10} \text{ V/m} \frac{q^3}{F}} \quad n_{\text{FI}} = 2.80 \cdot q \sqrt[4]{\frac{\rho/m}{\gamma_i \beta_i^2 A}} \quad (1.35)$$

Hieraus ergeben sich für $q = 50$ $n_{\text{FI}} = 110$ und für $q = 51$ $n_{\text{FI}} = 112$. Weitere Komplikationen ergeben sich durch unterschiedlich Feldionisationseffekte für die involvierten Starkzustände [69].

Bedingt durch die $Z_{\text{eff}}^{3/4}$ bzw. $Z_{\text{eff}}/\sqrt[4]{A}$ Abhängigkeit der Feldionisationsgrenze n_{FI} sind Rekombinationsprozesse hochgeladener Ionen weit weniger von Feldionisation betroffen als niedriggeladene Ionen. So liegt die Feldionisationsgrenze n_{FI} für C^{3+} -Messungen am CRYRING ($\rho = 1.2$ m) trotz typischerweise deutlich geringeren Ionengeschwindigkeiten ($\beta_i = 0.05$) bei $n = 18$ [61], was etwa einem Sechstel der oben für Xe^{50+} -Messungen berechneten Grenze entspricht.

Letztlich kann man die Feldionisationsgrenze n_{FI} durch eine Nachweiswahrscheinlichkeit für Rydbergzustände n ersetzen, die angibt, welcher Anteil der mit Besetzung des Zustandes n rekombinierten Ionen auch zum Detektor gelangen ohne zu ionisieren. Deutlich unterhalb der minimalen Feldionisationsschwelle aller beteiligten Felder ist diese Wahrscheinlichkeit 100% und fällt mit steigender Hauptquantenzahl ab, bis nahezu 0% erreicht werden. Dabei wird die Feldionisationswahrscheinlichkeit unter anderem von der Aufenthaltsdauer im Feld beeinflusst. Komplizierter ist der Einfluss der möglichen radiativen Abregung ($n \rightarrow n' + \gamma$) des Rydbergzustandes vor Eintritt in das ionisierende Feld auf Elektronen, die initial Rydbergzustände oberhalb der Feldionisationsschwelle bevölkern. Gelangt ein solches Elektron mit nicht vernachlässigbarer Wahrscheinlichkeit vor Eintritt in das Feld in einen hinreichend niedrigen Quantenzustand n' unterhalb der Feldionisationsschwelle, so bleibt es auch im Feld gebunden und trägt somit trotz seiner über der Feldionisationsschwelle gelegenen, initial bevölkerten Hauptquantenzahl zur Rekombinationsrate bei. Der Anteil der radiativen Abregung hängt vom Vergleich der Zeiten zwischen Rekombination und Feldeintritt bzw. Feldionisation und den 'Lebensdauern' der Zustände der radiativen Übergangskaskade ab. Letztere ist stark von der Drehimpulsquantenzahl bestimmt. Zustände mit initial niedrigen Drehimpulsen gehen, bedingt durch die radiativen Auswahlregeln, sehr schnell durch wenige Übergänge in stark gebundene Zustände über und können so der Feldionisation entgehen, während Zustände initial hoher Drehimpulse hierfür vielstufige

Übergangskaskaden benötigen, die entsprechend länger dauern, so dass diese Ionen länger in von externen Feldern ionisierenden Zuständen verharren.

1.4 Breit-Wechselwirkung

Die Breit-Wechselwirkung (V^{Br}) [71] stellt eine Korrektur zur Coulombwechselwirkung (V^C) zwischen zwei Elektronen dar und berücksichtigt relativistische und QED-Effekte niedriger Ordnung. Die Breit-Wechselwirkung stellt das quantenmechanische Pendant zum in Gleichung 1.36 dargestellten klassisch, relativistischen Darwin Term (V^D) [72] dar, der sowohl den Effekt der magnetischen Wechselwirkung zweier Elektronen als auch den Effekt der Retardierung berücksichtigt.

$$V_{12}^D \propto - \underbrace{\frac{\vec{v}_1 \cdot \vec{v}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}}_{\text{mag. Wechselwirkung}} - \underbrace{\frac{(\vec{v}_1 \cdot \vec{r}_1) \cdot (\vec{v}_2 \cdot \vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^3}}_{\text{Retardierung}} \quad (1.36)$$

Hierbei sind \vec{r}_i und \vec{v}_i der Ort- bzw. Geschwindigkeitsvektor des i -ten Elektrons. Betrachtet man nun die verschiedenen Beiträge der Wechselwirkung gebundener Elektronen in Hinblick auf ihre Abhängigkeit von der effektiven Kernladungszahl (Z_{eff}), so fällt auf, dass beide Teile des Darwin Terms eine stärkere Z Abhängigkeit haben als der Coulombterm, so dass man davon ausgehen

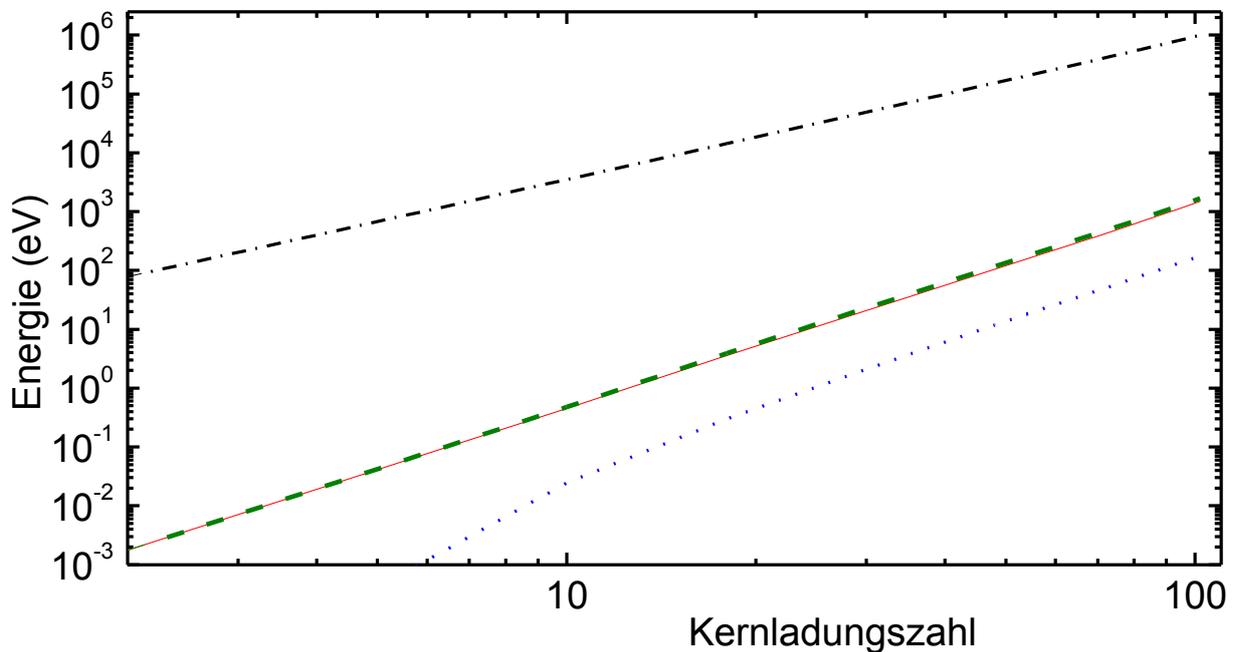


Abbildung 1.20: Korrektur der Breit-Wechselwirkung (—) zur K-Schalen Dirac-Hartree-Fock Bindungsenergie (· · · ·) in wasserstoffartigen Systemen nach [70] bestehend aus Beiträgen von Gaunt-Term (— — —) und Retardierung (· · · ·).

kann, dass der Effekt dieser Korrektur bei hoch geladenen Ionen sehr viel prominenter in Erscheinung tritt als bei wenig geladenen Ionen.

$$\begin{aligned} |\vec{r}_i| &\propto Z_{\text{eff}}^{-1} \Rightarrow \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \propto Z_{\text{eff}} \\ |\vec{v}_{i,j}| &\propto Z_{\text{eff}} \Rightarrow \frac{\vec{v}_i \cdot \vec{v}_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \propto Z_{\text{eff}}^3 \\ &\Rightarrow \frac{(\vec{v}_1 \cdot \vec{r}_1) \cdot (\vec{v}_2 \cdot \vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^3} \propto Z_{\text{eff}}^3 \end{aligned}$$

Äquivalent gilt auch für die Breit-Wechselwirkung V_{12}^{Br} , die in Gl. (1.39) in ihrer von Zimmerer [73] und Mann [70] verwendeten Form unter Nutzung atomarer Einheiten ($\hbar=m_e=c=e=1$) wiedergegeben wird, dass ihr Anteil an der Gesamtwechselwirkung V_{12} mit steigender, effektiver Kernladungszahl zunimmt.

$$V_{12} = V_{12}^{\text{C}} + V_{12}^{\text{Br}} \quad (1.37)$$

$$V_{12}^{\text{C}} = \frac{1}{R} \quad (1.38)$$

$$V_{12}^{\text{Br}} = - \sum_{i,j=1}^3 \alpha_{1i} \alpha_{2j} \left(\frac{\cos(\omega R)}{R} + \frac{\partial}{\partial R_i} \frac{\partial}{\partial R_j} \frac{\cos(\omega R) - 1}{\omega^2 R} \right) \quad (1.39)$$

Dabei ist R der Abstand zwischen den beiden Elektronen. R_i ist die i -te kartesische Komponente dieses Abstandes, während es sich bei α_{ki} um die i -te kartesische Komponente der Diracschen α -Matrix handelt, die auf das k -te Elektron einwirkt. Im quantenelektrodynamischen Modell erfolgt die Wechselwirkung über den Austausch eines Photons. Berücksichtigt man dessen Frequenz ω in der Gleichung, statt den Grenzfall $\omega \Rightarrow 0$ zu betrachten, so spricht man von der generalisierten Breit-Wechselwirkung.

Äquivalent zum Darwin Term beschreibt hier der erste Summand (Gaunt Term) die Wechselwirkung zwischen Diracströmen und der zweite Summand die retardierte Wechselwirkung zwischen Ladungen. Mann und Johnson [70] geben für den Beitrag von Gaunt- und Retardierungsterm zur Grundzustandsbindungsenergie jeweils eine genäherte $Z^{\sim 3,6}$ Abhängigkeit von der Kernladungszahl an, während der dominante Dirac-Hartree-Fock Beitrag nur mit $Z^{2,4}$ skaliert (Abb. 1.20). Anschaulich betrachtet lässt sich die 'nur' um eine Potenz stärkere Skalierung durch den Vergleich der Z_{eff}^3 -Abhängigkeit des Darwin-Term mit der Z_{eff}^2 -Abhängigkeit der Bindungsenergie erklären. Bedingt durch diese 'geringere' Zunahme ist die Energieverschiebung durch die Breitwechselwirkung relativ klein [74] und beträgt auch bei schweren Ionen weniger als ein Promille des dominanten Beitrags (Abb. 1.20).

1.4.0.1 Auger Raten

Deutlich größer ist der relative Beitrag der Breit-Wechselwirkung zu den Auger Raten (A_A).

$$A_A^{d \Rightarrow i} \propto |\langle d | V^{\text{C}} + V^{\text{Br}} | i \rangle|^2 \quad (1.40)$$

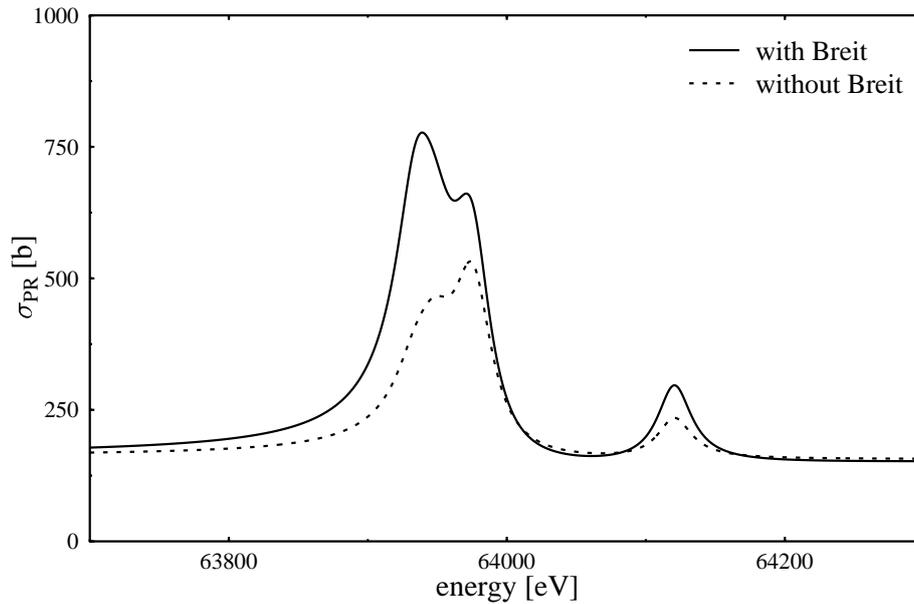


Abbildung 1.21: Einfluss der Breit Wechselwirkung auf den Photorekombinationswirkungsquerschnitt der $KL_{1/2}L_{1/2}$ -Resonanzgruppe nach Zimmermann *et al.* [65]

Hier konkurriert die Breit-Wechselwirkung der beiden Elektronen (V^{Br}) nicht mit der Elektron-Kern-Wechselwirkung ($\propto eZ/r \propto Z^2$) sondern mit der Elektron-Elektron Wechselwirkung ($V^C \propto e/r_{12} \propto Z^{-1}$). Folgt man auch hier wieder dem vereinfachten Erklärungsansatz des Darwinterts, so ist dessen Z -Abhängigkeit ($V^{Br} \propto Z^3$) um zwei Größenordnungen höher als die der Coulomb-Wechselwirkung. Berücksichtigt man nun noch, dass das Wechselwirkungspotential in die Auger-Raten quadratisch eingeht (siehe Gl. (1.40)), so erhält man für den Darwin-Anteil der Auger-Raten eine – im Vergleich zum Coulomb-Anteil – um vier Potenzen höhere Z -Abhängigkeit. Für eine weit detailliertere, theoretische Betrachtung siehe Zimmerer *et al.* [75], die die Z^4 Abhängigkeit belegt.

Da der Wirkungsquerschnitt der dielektronischen Rekombination (Gl. 1.31) für $A_A \gg A_R$ stark von Auger- bzw. Autoionisationsraten abhängt, bietet es sich an, den Einfluss der Breitwechselwirkung auf die DR an hochgeladenen Schwerionen zu untersuchen. Für die niederenergetischste $KL_{1/2}L_{1/2}$ -DR-Resonanzgruppe, d.h. für den Einfang in $n=2$ und $j=1/2$ bei gleichzeitiger Anregung eines K-Schalen Elektrons in $n=2$ und $j=1/2$, errechneten Zimmermann *et al.* [65] einen Anstieg des Wirkungsquerschnittes um bis zu 55% (Abb. 1.21) bei gleichzeitig deutlicher Änderung der relativen, einzelnen Beiträge zur Resonanzgruppe. Zu entsprechenden Messungen siehe Abschnitt 4.4 bzw. [76].

2 Experimentelle Grundlagen

Die im Rahmen dieser Arbeit behandelten Messungen zur dielektronischen Rekombination wurden am Experimentierspeicherring (ESR) der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) in Darmstadt durchgeführt. Mit Ausnahme des erst kürzlich fertig gestellten „experimental Cooler-Storage Ring“ (CSR_e) der „Heavy Ion Research Facility Lanzhou“ (HIRFL) [77, 78] ist der ESR der GSI der weltweit einzige Speicherring, der Rekombinationsexperimente auch an höchstgeladenen Schwerionen erlaubt. In den letzten 20 Jahren wurde dort eine Vielzahl von höchst erfolgreichen Messungen zur Rekombination hochgeladener Ionen durchgeführt [9, 10, 79–81]. Im Folgenden werden einige für die durchgeführten Experimente besonders relevante experimentelle Grundlagen erläutert. Auf eine ausführliche Darstellung des Beschleunigerkomplexes der GSI wird im Rahmen dieser Arbeit verzichtet. Weitere ausführliche Informationen zu Rekombinationsexperimenten am ESR geben unter anderem C. Brandau [59] und W. Spies [82].

2.1 Der Beschleunigerkomplex der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI)

In Abb. 2.1 ist der Beschleunigerkomplex der Gesellschaft für Schwerionenforschung dargestellt. Die in der *Ionenquelle* bzw. dem *Hochstrominjektor* erzeugten Ionen werden im **Universal Linear Accelerator (UNILAC)** bis auf $11,4 \text{ MeV/u}$ beschleunigt. Nach einer Erhöhung des Ladungszustandes (Abs. 2.1.1) werden die Ionen über den *Transferkanal* in das *Schwerionensynchrotron (SIS)* injiziert. Dieses erlaubt eine weitere Beschleunigung von Schwerionen bis auf $1,4 \text{ GeV/u}$. Eine weitere Umlademöglichkeit erlaubt die Produktion hochgeladener oder gar vollständig ionisierter Schwerionen. Anschließend folgt die Injektion der Ionen in den Experimentierspeicherring (ESR).

Der Beschleunigerkomplex der GSI ermöglicht vielfältige Experimente, die andere Elemente des Komplexes verwenden. Hierzu gehört *Niederenergie-Experimentierhalle*, *Fragmentseparator (FRS)* und *Hochenergie-Targetbereich*.

2.1.1 “Stripping“ der Ionen

Will man hochgeladene Ionen untersuchen, so müssen die von der Ionenquelle zur Verfügung gestellten Ionen weiter ionisiert werden. Dies geschieht, indem man schnelle Ionen durch eine

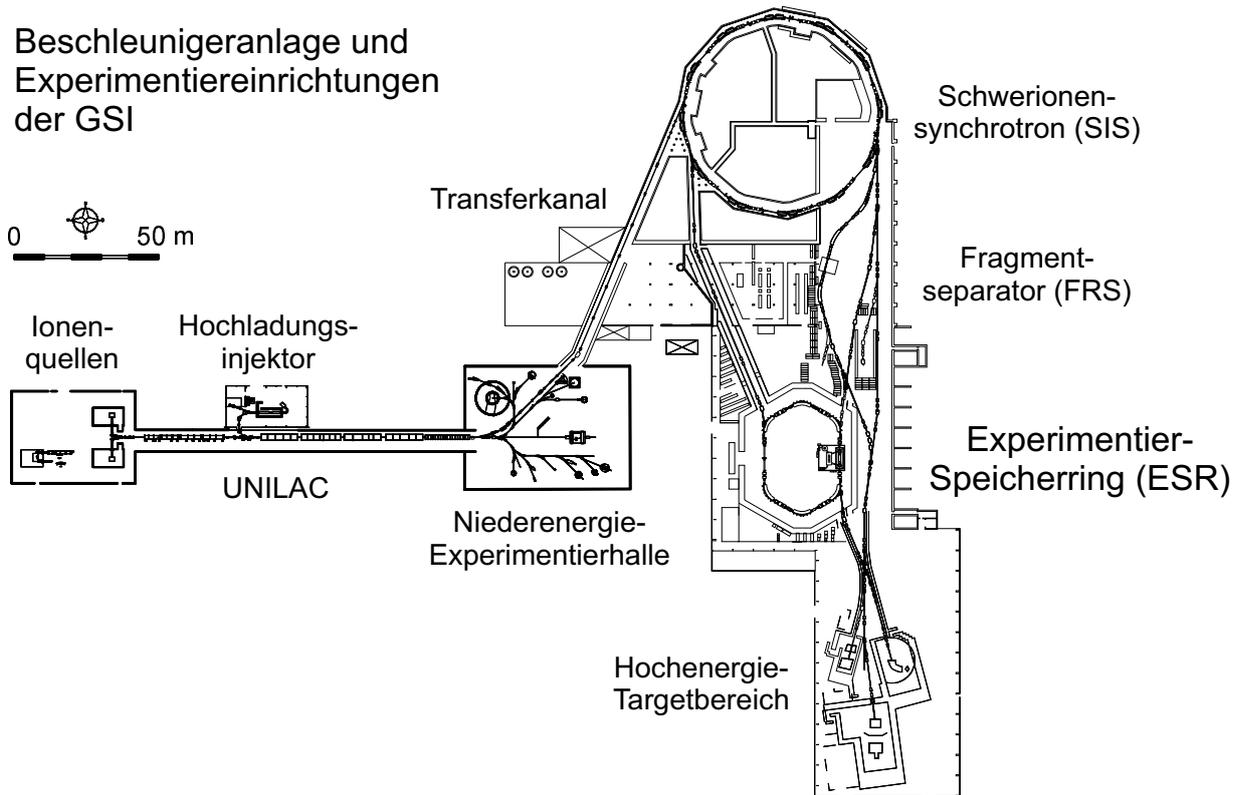


Abbildung 2.1: Der Beschleunigerkomplex der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI). Die im Rahmen dieser Arbeit ausgewerteten Experimente wurden am Experimentierspeicherring (ESR) durchgeführt.

dünne Folie oder einen Gasstrahl schießt. Dabei können die Schwerionen weiter ionisiert werden, wenn die Bindungsenergie ihrer Elektronen deutlich geringer ist als die Kollisionsenergie. Dieser Prozess wird als „Stripping“ bezeichnet. Das Kriterium für das effiziente Abstreifen eines mit der Energie I_B gebundenen Elektrons mit einer Bahngeschwindigkeit $v_e \approx \sqrt{\frac{2I_B}{m_e}}$, ist $v_{ion} > v_e$ mit der Ionengeschwindigkeit v_{ion} . Diesen Verlust von Elektronen beim Durchgang eines Ions durch Materie bezeichnet man als „Strippen“. Nach dem Erreichen des neuen Ionisationsgrads können die höher geladenen Ionen erneut beschleunigt werden. Am GSI-Beschleunigerkomplex ist ein Umladungstarget sowohl im UNILAC sowie zwischen UNILAC und SIS als auch zwischen SIS und ESR vorhanden. Bei der Untersuchung höchstgeladener Schwerionen werden die Strippingmöglichkeiten nacheinander genutzt. Sind höchste Ladungszustände nicht erforderlich, kann teilweise auf das finale Stripping verzichtet werden. Dies geschah bei den im Rahmen dieser Arbeit ausgewerteten Messungen mit lithium- bzw. berylliumartigen Xenonionen, deren finaler Ladungszustand ohne Nutzung der letzten Umladungsmöglichkeit erreicht werden konnte. Da Ionisation und Elektroneneinfang beim Strippen statistische Vorgänge sind, werden bei Umladungsprozessen verschiedene Zustände bevölkert. Ionen in unterschiedlichen Ladungszuständen haben in elektrischen und magnetischen Feldern abweichende Trajektorien. Dies wird zur Se-

paration der Ladungszustände genutzt. Der Verzicht auf 'unnötige' Umladeprozesse kann den effektiv zur Verfügung stehenden Ionenstrom deutlich erhöhen.

2.2 Experimentierspeicherring (ESR)

Nach der Beschleunigung im SIS werden die Ionen in den Experimentierspeicherring (Abb. 2.2) injiziert, der die Ionen für den Verlauf der weiteren Messung speichert. Der ESR ist aus zwei langen, geraden Teilstücken, sechs Dipolmagneten (*Ablenkdi- pol*) und den zugehörigen Quadru-

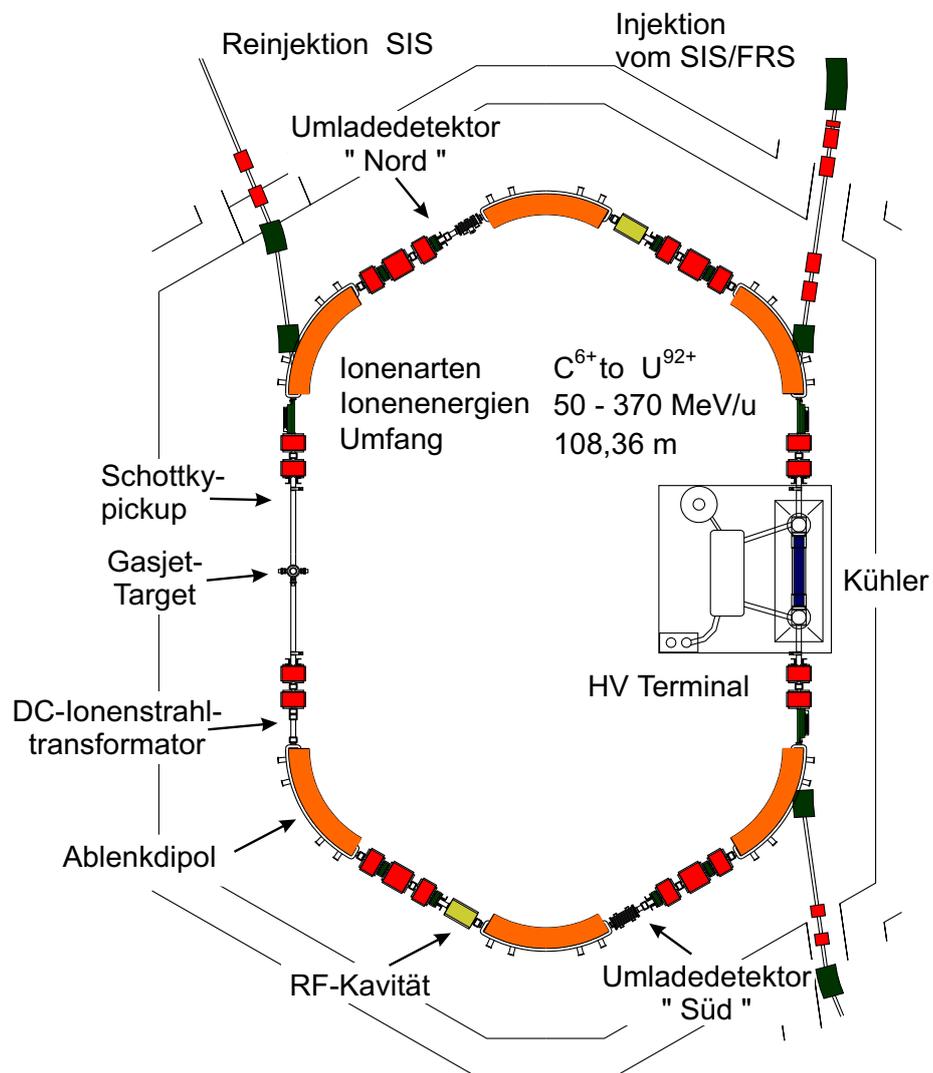


Abbildung 2.2: Der Experimentierspeicherring (ESR) der Gesellschaft für Schwerionenforschung. Zur Erläuterung siehe Text.

polmagneten aufgebaut. Sein Gesamtumfang beträgt 108,36 m. Es können Ionen von H^+ bis U^{92+} bei Ionenenergien von in der Regel 50 bis 370 MeV/u gespeichert werden. Mit Hilfe der Hochfrequenzkavität (*RF-Kavität*) können die Ionen im ESR beschleunigt oder abgebremst werden. Dies wird z.B. direkt nach der Injektion zur Verlagerung des Ionenstrahls genutzt, so dass die nun freie Injektionsbahn für einen weiteren Einschuss zur Verfügung steht.

Im ersten geraden Abschnitt nach der Injektion befindet sich der *Kühler* (Abs. 2.3.2), der in der Regel benutzt wird, um die Temperatur der in den Ring injizierten Ionen zu senken. Der Kühler dient aber auch als Target, das Elektronen einer sehr präzise definierten Energie für Rekombinationsexperimente zur Verfügung stellt. Nach der Rekombination besitzen die Ionen eine verminderte Ladung. Dies führt bei diesen Ionen in den Feldern der Dipolmagnete zu einer geringeren Lorentzkraft, die die Bahn der rekombinieren Ionen gegenüber dem Primärionenstrahl ändert. Hinter dem ersten Dipolmagneten nach dem Kühler befindet sich ein beweglicher Detektor (*Umladedetektor Süd*), der auf die Bahn der rekombinierten Ionen positioniert wird und so diese Ionen nachweist. Auf der dem Kühler gegenüberliegenden Seite des Rings befindet sich ein *Gasjet-Target*, welches vielfältige, winkelsensitive Studien der Wechselwirkungen zwischen hochgeladenen Ionen und Atomstrahlen ermöglicht. Bei den im Rahmen dieser Arbeit ausgewerteten Elektronen-Ionen-Stöße kam das Gasjet-Target nicht zum Einsatz.

Außerdem befinden sich im ESR noch umfangreiche Einrichtungen zur zerstörungsfreien Strahldiagnose. So wird der Ionenstrom mit Hilfe eines Gleichstrom-Ionenstrahltransformators bestimmt. Die Umlauffrequenz der Ionen kann mit Hilfe des *Schottkypickups* gemessen werden. Hieraus kann über den Umfang der Ionenbahn auf die Energie des Ionenstrahls geschlossen werden. Die Breite der Verteilung der Umlauffrequenzen ist dabei ein direktes Maß für die longitudinale Impulsunschärfe des Ionenstrahls.

2.3 Strahlkühlung

Bei der Bestimmung energieabhängiger Ratenkoeffizienten (zur Definition siehe Abschnitt 1.2) der Photorekombination an überlagerten Strahlen limitiert die energetische Verteilung der Stoßpartner die erreichbare Energieauflösung. Schon die injizierten Ionen haben eine relativ große initiale Energie- bzw. Impulsverteilung. Diese wird im Verlauf der Messung sowohl durch Ion-Ion-Stöße wie auch durch Stöße zwischen Ionen und Restgas weiter erhöht. Die Reduktion der Impuls- bzw. Energiebreite des Ionenstrahls wird als Kühlung bezeichnet.

2.3.1 Elektronenkühlung

Überlagert man zwei Teilchenstrahlen, so gleichen sich die Geschwindigkeitsverteilungen beider Strahlen im Laufe der Zeit durch Stöße an, wenn beide in geeigneter Weise gespeichert werden. Entsprechend kann ein heißer Ionenstrahl durch Überlagerung mit einem kälteren Elektronenstrahl gekühlt werden. Wird der Elektronenstrahl hierbei nicht gespeichert, sondern bei gleichbleibend niedriger Temperatur beständig neu erzeugt, so kann seine Temperatur durch den Ionenstrahl nicht dauerhaft beeinflusst werden. Im Gegensatz hierzu passt sich die Geschwindigkeitsverteilung des im Ring kreisenden Ionenstrahls bei jeder Passage etwas mehr der Verteilung

des Elektronenstrahls an. Im Laufe der Zeit erhält der Ionenstrahl durch diese Elektronenkühlung eine Geschwindigkeitsverteilung, welche der des Elektronenstrahls entspricht. Dabei gleicht sich natürlich auch die mittleren Geschwindigkeiten der Ionen der mittleren Elektronengeschwindigkeit an, bzw. wird während der Messung entsprechend stabilisiert.

2.3.2 Elektronenkühler

Im Elektronenkühler (Abb. 2.3) wird von der Elektronenkanone ein Elektronenstrahl bei einer Kathodentemperatur von 1300 K erzeugt. Die Energie des Elektronenstrahls kann im Bereich von 16,5 bis zu einem – bisher nicht erreichten – Designwert von 320 kV gewählt werden. Der Durchmesser des Elektronenstrahls beträgt 50,8 mm und die maximale Stromstärke 10 A. Der Elektronenstrahl wird mit einem Solenoidfeld geführt, das eine Strahlaufweitung verhindert. Das Ein- und Auslenken des Elektronenstrahls auf den Ionenstrahl geschieht mittels Toroidmagneten. Dabei werden die Ionen aufgrund ihres um drei bis vier Größenordnungen niedrigeren Ladungs- zu-Masseverhältnisses sehr viel weniger abgelenkt als die Elektronen. Die Überlappstrecke beider Strahlen beträgt dabei 2.5 Meter. Die Ziehelektroden ermöglichen es, Restgasionen zu entfernen, die im attraktiven Potenzial des Elektronenstrahls eingefangen werden können. Vor dem Auffangen der Elektronen im Kollektor werden diese wieder abgebremst, um die abzuführende Strahlleistung zu reduzieren.

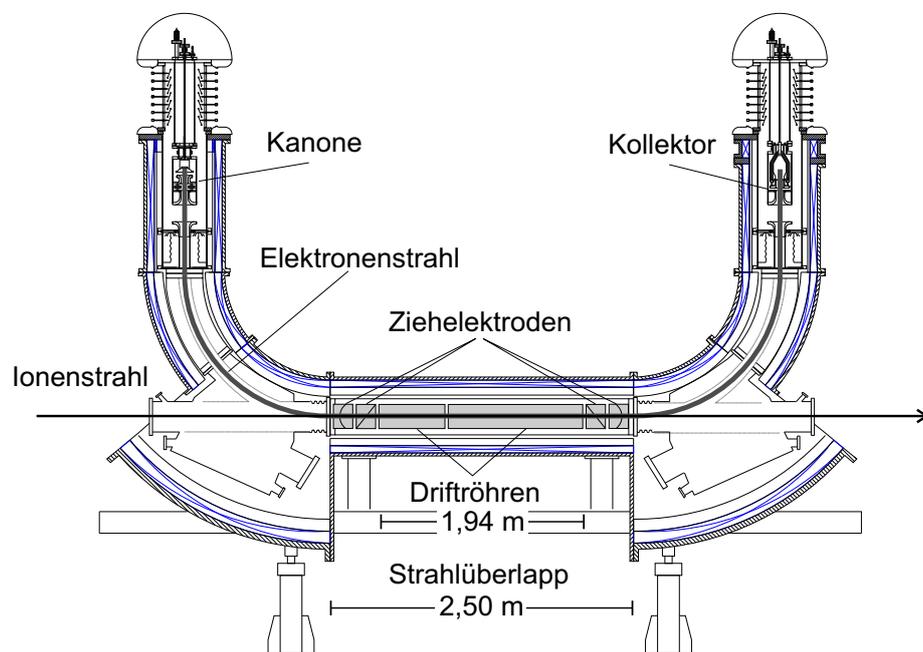


Abbildung 2.3: Der Elektronenkühler des ESR

2.3.3 Stochastische Kühlung

Die Grundlagen der stochastischen Kühlung lassen sich anhand eines relativ simplen Modells (Abb. 2.4) erklären. Dabei bewegt sich ein geladenes Teilchen auf einer Kreisbahn von der es – unerwünschterweise – mittels transversaler Schwingungen deren Parameter von der Strahlenergie und den im Ring herrschenden Feldern abhängen, abweicht. Diese Abweichung von der Sollbahn induziert in einem Kondensator (*Pickup*) eine Spannung, die umso größer ist, je stärker das Teilchen von der Sollbahn abweicht. Ein weiterer Kondensator (*Kicker*) ist so positioniert, dass das Teilchen ihn mit einer Phasenverschiebung von 90° passiert. Die im Pickup gemessene Spannung wird verstärkt und an den Kicker angelegt, so dass dieser die Amplitude der Schwingung senkt. Über viele Umläufe reduziert sich so die Transversaltemperatur stark. Das Verfahren funktioniert auch bei aus sehr vielen einzelnen Teilchen bestehenden Ionenstrahlen, solange die Phasenbeziehung zwischen den einzelnen Teilchen zufällig ist und sich die Einflüsse anderer Teilchen auf lange Sicht gegenseitig aufheben. Die stochastische Kühlung der Longitudinaltemperatur funktioniert ähnlich, nur wird die Abweichung der Strahlposition im Frequenzraum registriert und durch einen longitudinalen Kicker korrigiert. Das Prinzip der stochastischen

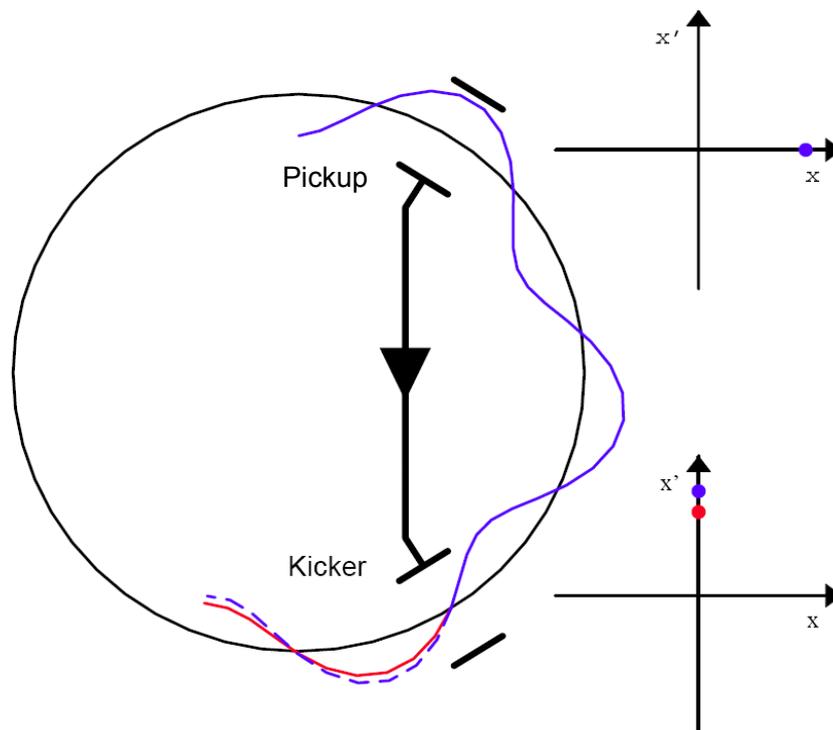


Abbildung 2.4: Prinzipskizze zur stochastischen Kühlung

Kühlung wurde von Simon van der Meer entwickelt [83]. Er erhielt 1984 gemeinsam mit Carlo Rubbia den Nobelpreis für Physik für die Beiträge zur Entdeckung der W- und Z-Bosonen, den Austauscheteilchen der schwachen Wechselwirkung.

2.4 Der Elektronenkühler als Elektronentarget

Durch die Kühlung (Abs. 2.3) steht ein energiescharfer Ionenstrahl zur Verfügung, dessen Wechselwirkung mit dem kalten Elektronenstrahl untersucht wird. Der Elektronenkühler (Abb. 2.3) stellt gleichzeitig auch ein Elektronentarget dar, das für experimentelle Untersuchungen von Elektron-Ion-Stoßprozessen verwendet werden kann. Das Hochspannungsnetzgerät der Kathode kann die Spannung nur langsam verändern, so dass diese Änderung nicht während einer Messung vorgenommen werden kann. Hierzu wird das Netzgerät der beiden insgesamt 1,94 Meter langen *Driftröhren* verwendet, deren Potential in einem Bereich von ± 5 kV schnell variiert werden kann. Dies ändert die Relativenergie zwischen Elektronen- und Ionenstrahl, da erstere aufgrund ihrer geringeren Masse viel stärker beschleunigt oder abgebremst werden als die Ionen ($a \approx q/mE$) und ermöglicht so die Messung energieabhängiger Rekombinationsratenkoeffizienten. Insgesamt stellt man den gewünschten Energiebereich der Rekombinationsmessung mit Hilfe beider Geräte ein. Das Driftrohrnetzgerät sorgt hierbei für die Abtastung des zu untersuchenden Energiebereichs. Der fixe Wert, der das Zentrum des Bereiches bildet, wird mit dem Hochspannungsnetzgerät der Kathode eingestellt.

2.4.1 Kühlung und Messung parallel

Für Messungen bei niedrigen Relativenergien kann der Elektronenkühler während einer Messung sowohl zur Strahlkühlung als auch als Elektronentarget verwendet werden. Die Messung beginnt mit einer längeren Kühlungsphase bei konstanter Elektronengeschwindigkeit und Driftrohrspannung 0, während der der Ionenstrahl gekühlt wird, bis die angestrebte, geringe Strahltemperatur erreicht ist. Dann ändert man das Potenzial der Driftröhren, so dass der Elektronenstrahl die für die gewünschte Relativenergie notwendige Geschwindigkeit erhält. Die Messzeit wird mit einigen Dutzend Millisekunden so kurz gehalten, dass sich die Temperatur des Ionenstrahls in dieser Zeit nicht signifikant erhöht. Anschließend wird erneut eine Kühlphase bei 0 Volt Driftrohrspannung eingelegt, deren Dauer in der Regel der Dauer des Messschritts entspricht. Im Folgenden wechseln sich die kurzen Kühl- und Messschritte ab, wobei die während der Messschritte angesteuerte Relativenergie von Mal zu Mal verändert wird, bis der gewünschte Messbereich in der angestrebten Schrittdichte abgedeckt ist. Abb. 2.5 zeigt als Skizze den üblichen Ablauf eines solchen – als 'Rampe' bezeichneten – Messbereiches.

Jede Ansteuerung einer Driftrohrspannung (Schritt) besteht aus 6 Unterschritten. Die Spannungswerte liegen nur etwa 6 ms an den Driftröhren an. Das Driftrohr erreicht die gewünschte Spannung nicht instantan, sondern erst (innerhalb einer vorgegebenen Genauigkeit) mit einer gewissen Zeitverzögerung. Während des ersten 2ms langen Unterschritts ist dabei die angestrebte Relativenergie noch nicht erreicht. Die Einteilung der Messschritte in Unterschritte erlaubt im

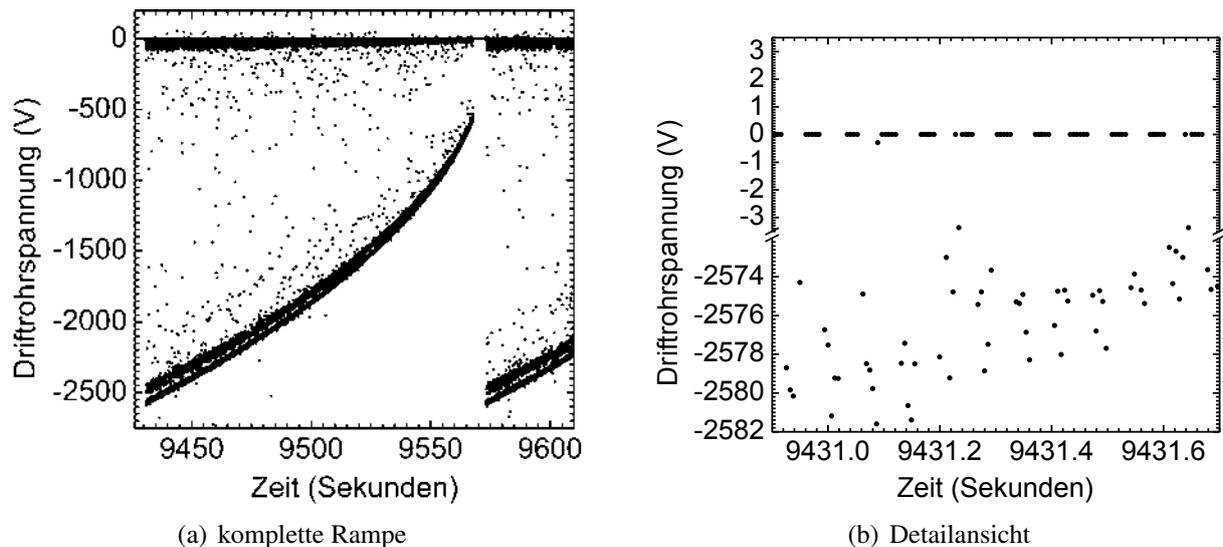


Abbildung 2.5: Zeitabhängige Variation des Driftröhrepotentials im Rohdatenspektrum. Nach der Injektion der Ionen und einer initialen Kühlungsphase (a) wechseln sich Kühl- und Messschritte ab (b). Erstere haben eine gleichbleibende Driftröhrespannung von 0 Volt. Die Spannung der Messschritte wird während der Messung von Schritt zu Schritt (leicht) verändert, bis der gewünschte Spannungsbereich abgedeckt ist, der in obigem Beispiel von -2500 bis -500 Volt reicht (a). Jeder der alternierenden Kühl- und Messschritte besteht hierbei aus sechs Teilschritten, von denen der erste eine Länge von 2 ms hat und die anderen eine Länge von 6 ms besitzen (b). Zur Verbesserung der Zählstatistik wird dieser Messzyklus viele Male hintereinander durchlaufen.

Die Streuung der Spannungen der Messschritte (b) ist auf den bei Verzicht auf Mittelungen auftretenden Fehler der Driftröhre Spannungsmessung von 4 Volt zurückzuführen. Einige der etwa 30000 Teilschritte des Übersichtsspektrums weisen eine deutlich fehlerhaftere Spannungsmessung auf (a). Diese Ereignisse werden gemeinsam mit z.B dem initialen Kühlschritt im Rahmen der Konsistenzprüfung (Siehe Abschnitt 3.1) identifiziert und nicht zur Analyse herangezogen.

Rahmen der Analyse den Grad der Abweichung zu ermitteln und nur solche Unterschritte in die Analyse einzubeziehen, bei denen die gewünschte Relativenergie auch wirklich anlag.

2.4.1.1 Erreichbare Relativenergien

Die Änderung der Driftröhre Spannung um ± 5 kV erlaubt die Variation der Relativenergien. Die maximal erreichbare Relativenergie hängt dabei gemäß folgender Gleichung von den Geschwindigkeiten von Elektronen und Ionen ab (siehe auch Abs. 3.2).

$$E_{CM} = \left(\gamma_e \cdot \gamma_i - 1 - \sqrt{(\gamma_e^2 - 1) \cdot (\gamma_i^2 - 1)} \cos(\Theta) \right) m_e c^2 \quad (2.1)$$

Hierbei ist γ_i bzw. γ_e der Lorentzfaktor der Ionen bzw. Elektronen und Θ der nahezu verschwindende Winkel zwischen den überlagerten Strahlen. Für Ionen, deren Energie einem relativisti-

schen Gammafaktor von 1.06 entspricht – wie er bei den Xe^{50+} - und Xe^{51+} -Messungen verwendet wurde – können bei voller Ausnutzung des Driftröhrenspannungsbereiches Relativenergien zwischen 0 und maximal etwa 200 eV abgedeckt werden (Abb. 3.1).

2.4.1.2 Messungen mit erweitertem Messbereich

Um Messungen bei höheren Relativenergien zu ermöglichen, können Kathoden- und Driftröhrenspannung bei Kühlung so eingestellt werden, dass die Kühlung nicht bei einer Driftröhrenspannung von 0 Volt, sondern bei einer stark negativen Driftröhrenspannung von z.B. -4.1 kV erfolgt. Dies erlaubt es, die maximale Differenz der Driftröhrenspannungen bei Kühlung und Messung von 5 auf 9 kV zu erweitern [10]. Somit erhöht sich der Bereich der den Messungen zugänglichen Relativenergien deutlich. Im Fall der Messung berylliumartiger Xenonionen wurden Relativenergien von bis etwa 550 eV erreicht (Abb. 4.17). Die durch dieses Verfahren mögliche Erweiterung des Messbereiches ist auf 1 keV beschränkt.

2.4.1.3 Messungen bei sehr hohen Relativenergien

Relativenergien von mehr als einem keV liegen außerhalb der bei alternierender Kühlung und Messung erreichbaren Bereiche. Dies gilt in ähnlicher Weise auch für andere Speicherringe. Sie lassen sich dennoch erreichen, wenn Kühlung und Messung voneinander entkoppelt werden. Am Heidelberger Testspeicherring (TSR) stehen hierfür zwei unabhängige Elektronenkühler zur Verfügung. Sie weisen gewisse Unterschiede auf und werden nach ihrem Designziel als “Kühler“ und “Target“ bezeichnet. Der ESR verfügt über einen Elektronenkühler, doch steht im Gegensatz zum TSR zusätzlich die Möglichkeit der stochastischen Kühlung (Abs. 2.3.3) zur Verfügung. Setzt man diese zur alleinigen Strahlkühlung ein, so kann der Elektronenkühler exklusiv als Elektronentarget genutzt werden. Dieses Messverfahren [76] erlaubt es, Relativenergien von bis zu $\sim 10^5$ eV zu erreichen und somit den zugänglichen Relativenergiebereich um 2 Größenordnungen zu erhöhen.

2.5 Detektion rekombinierter Ionen

In der 2,5 m langen Wechselwirkungszone, in der sich Ionen- und Elektronenstrahl überlappen, können freie Elektronen von den Ionen eingefangen werden. Nach dem Austritt aus dem Kühler fliegen sowohl die Primärionen als auch die umgeladenen Ionen gemeinsam weiter, bis der erste auf den Kühler folgende Dipolmagnet sie anhand ihrer unterschiedlichen Ladung-zu-Masse-Verhältnisse trennt. Die rekombinierten Ionen besitzen eine geringere Ladung und werden deshalb schwächer abgelenkt. Sie laufen weiter außen im Strahlrohr und treffen nahezu vollständig auf den Umladungsdetektor, der sie mit fast 100%-iger Effizienz nachweist und so die Messung absoluter Raten ermöglicht.

2.6 Datenaufnahme

Im Folgenden soll eine kurze Erläuterung der Datenaufnahme gegeben werden. Der grundsätzliche Ablauf der Datenaufnahme bei der Durchführung von Rekombinationsexperimenten wurde an anderer Stelle schon ausführlich dargestellt [59, 82, 84]. Abbildung 2.6 zeigt eine schematische Darstellung der Datenaufnahme als Blockschaltbild. Die Messung erfolgt im Eventmodus. Dieser teilt die Gesamtmesszeit in endlich viele, nicht notwendigerweise gleichlange, Events, während derer die einlaufenden Daten in Zählern (*scaler*) akkumuliert werden.

Eine Messung besteht aus dem mehrmaligen Durchlauf einer Rampe, die n Schritte unterschiedlicher Energie enthält. Der Start der Rampe (Abb. 2.5(a)) entspricht dem Signal *sync*, der Start eines Messschritts dem Signal *meas gate*. Jeder Messschritt startet 8 zeitlich jeweils etwas länger verzögerte Signale, die den Schritt in bis zu acht Teilschritte unterteilen (grüner Bereich). Bei der vorliegenden Messung wurden innerhalb der für einen Schritt zur Verfügung stehenden Zeit nur die ersten 6 Teilschritte zur Datenaufnahme genutzt. Die Ankunft eines solchen (Teil-)schrittsignals beendet ein Event mit dem Auslesen der *scaler*, währenddessen Teile der Datenaufnahme für andere Signale gesperrt werden. Statt durch die schnell aufeinander folgenden Teilschrittsignale kann das Ende des Events auch durch eine 1-Hz-Uhr oder durch Signale der „virtuelle Beschleuniger“ genannten Softwaremodule des ESR-Kontrollsystems (*VB4*, *VB5*, *VB6*) ausgelöst werden. Letztere stellen sicher, dass eine Änderung im ESR automatisch zu einer Beendigung des alten und Start eines neuen Events führt, so dass Ereignisse verschiedener Einstellungen nicht miteinander vermischt werden. Das 1-Hz-Signal sorgt dafür, dass auch außerhalb der Nutzung der Schrittabfolge der Energierampe zumindest jede Sekunde ein Auslesen der Daten erfolgt und diese nicht beliebig lange ohne Ausgabe gesammelt werden.

Hauptvorteil der Nutzung eines solchen Eventmodus ist, dass die während des Experimentes aufgenommenen Daten für jeden einzelnen Event gespeichert werden. Dies erlaubt im Verlauf der Datenauswertung unter anderem eine umfangreiche Konsistenzprüfung der Daten (Abs. 3.1).

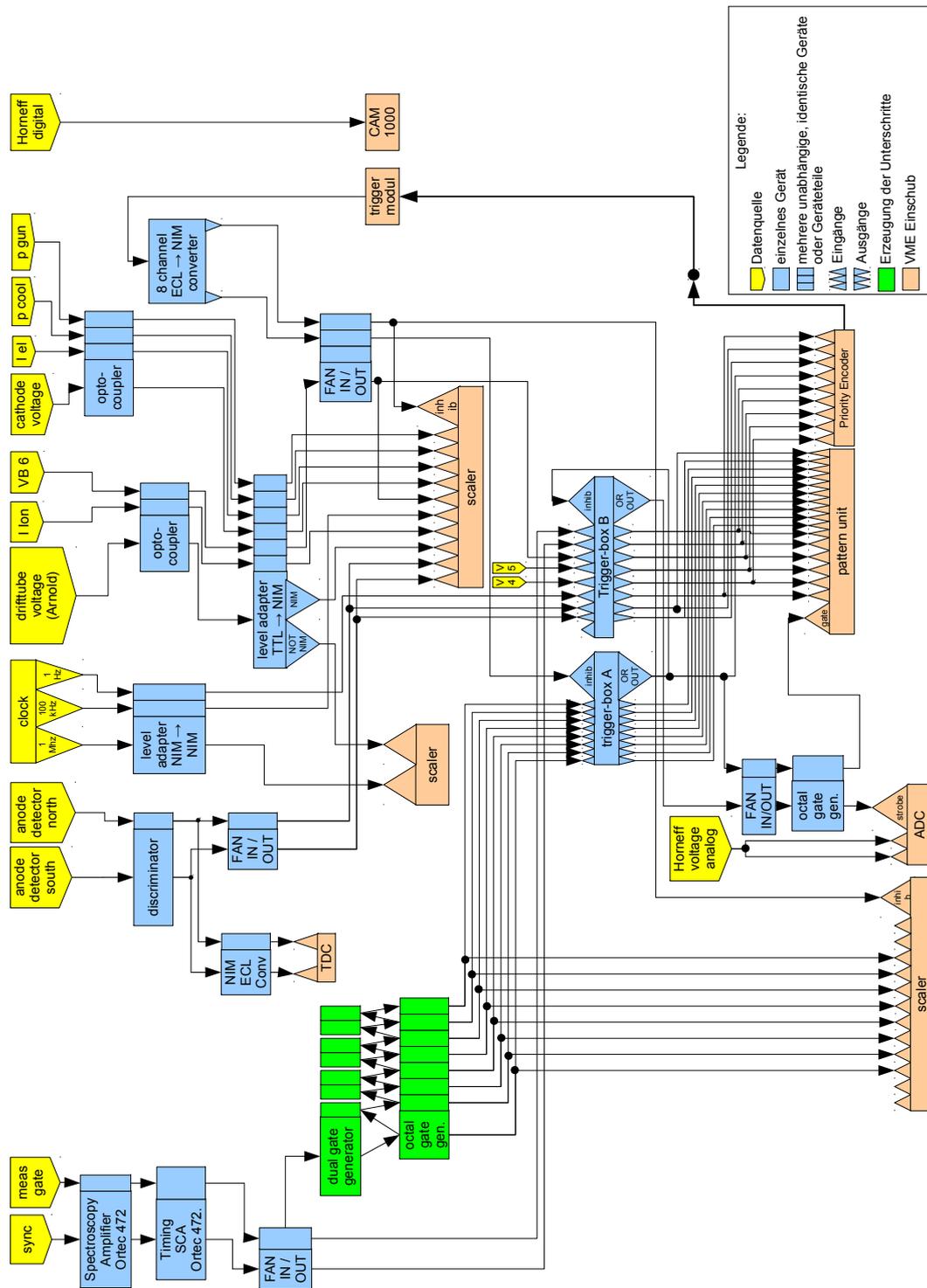


Abbildung 2.6: Blockschaltbild der Datenaufnahme bei Xe^{51+} - und Xe^{50+} -DR-Messungen (Siehe Text).

3 Datenauswertung

3.1 Konsistenzprüfung

Die Speicherung der Messergebnisse für jeden der typischerweise 6 ms langen Teilschritte erlaubt eine umfangreiche Konsistenzprüfung durchzuführen und inkonsistente Teilschritte oder Teilschritte, die nicht die Anforderungen an die Genauigkeit des Experimentes erfüllen, von der Analyse auszuschließen. Im Folgenden wird auf einige besonders relevante Kriterien eingegangen. So werden nur Teilschritte ausgewertet, die echten Mess- oder Kühschritten entsprechen, während (längere) Schritte der initialen Strahlkühlung von der Analyse ausgeschlossen werden. Des Weiteren wird die Konsistenz der gemessenen Spannung überprüft. So ist der Wechsel zwischen Kühl- und Messschritt innerhalb von Millisekunden mit sehr steilen Spannungsprüngen verbunden, bei denen die gewünschte Zielspannung asymptotisch erreicht wird (Abs. 2.4.1). Zur Konsistenzprüfung wurden die Teilschritte gleicher Sollspannung auf ihre Spannungsabweichung untersucht und nur jene (späteren) Teilschritte zur Auswertung herangezogen, die eine hinreichend kleine Abweichung aufwiesen.

Die Konsistenzprüfung erlaubte es auch, mit Artefakten durchsetzte Teilschritte zu identifizieren und aus der Analyse auszuschließen, die durch eine Aufhebung der festen zeitlichen Kopplung zwischen Injektion und Rampenstart verursacht waren. Diese Aufhebung der Kopplung blieb während der Messung bedauerlicherweise lange unentdeckt und konnte etwa ein Viertel der Messungen beeinflussen. Des Weiteren lassen sich auch Artefakte der Detektorzählrate identifizieren und ausschließen (Abs. 3.5.5).

3.2 Bestimmung der Elektron-Ion-Stoßenergie

Im Rahmen des Experimentes wurden Ratenkoeffizienten in Abhängigkeit von der Kollisionsenergie zwischen Elektron und Ion aufgenommen, wobei sich diese aus den Laborenergien von Ionen- und Elektronenstrahl ergibt. Insbesondere bei Experimenten, in denen der Fokus auf spektroskopischen Untersuchungen bzw. der Auflösung feiner Resonanzen liegt, ist eine möglichst präzise Bestimmung der Energie von großer Wichtigkeit.

Die Energie des Elektronenstrahls im Laborsystem (E_{Lab}) wird durch die Spannung der Kathode (U_{Kath}) und die an den Driftrohren angelegte Spannung (U_{DR}) bestimmt, wobei letztere Spannung in einem Bereich von ± 5 kV innerhalb von wenigen Millisekunden variiert wird, während die Kathodenspannung nur deutlich langsamer, dafür aber in einem sehr weiten Bereich

von etwa 16,5 bis 320 eV verändert werden kann. Bei der Ermittlung von U_{Kath} wird eine durch die Physikalisch Technische Bundesanstalt durchgeführte Kalibrierung der Spannungsmessung berücksichtigt. Für die effektive Elektronenenergie ist angesichts der durchaus recht hohen, erreichbaren Elektronenströme noch das Raumladungspotential der Elektronen (U_{RL}) zu beachten, das die Elektronenenergie reduziert. Letztlich ergibt sich folgende Formel:

$$E_{\text{Lab}} = e(U_{\text{Kath}} + U_{\text{DR}} + U_{\text{RL}}) \quad (3.1)$$

Das (negative) Raumladungspotential U_{RL} ergibt sich aus Elektronenstrom I_e und Elektronengeschwindigkeit v_e über die Formel 3.2 [45] unter Verwendung der Parameter klassischer Elektronenradius (r_e), Driftröhrenradius (R_{DR}) und Elektronenstrahlradius (R_e). Da das Raumladungspotential wiederum die Elektronengeschwindigkeit beeinflusst, ist eine iterative Rechnung durchzuführen, die aber – bedingt durch die hohe Kathodenspannung – schnell konvergiert, da eine Änderung des Raumladungspotentials eine deutlich kleinere relative Änderung der Elektronengeschwindigkeit bewirkt.

$$eU_{\text{RL}} = -\frac{I_e r_e m_e c^2}{e v_e} \left[1 + 2 \ln \left(\frac{R_{\text{DR}}}{R_e} \right) \right] \quad (3.2)$$

Zur Bestimmung der Driftröhrenspannung stehen im wesentlichen zwei unterschiedliche Messungen zur Verfügung. Dies ermöglicht es, die besonderen Vorteile beider Messgeräte zu kombinieren sowie durch Vergleich der Messungen die Konsistenz der Daten zu überprüfen und Fehler, wie sie z.B. durch das Rauschen der Elektronik entstehen, auszuschließen. Die erste Information über die Driftröhrenspannung stammt vom Driftröhrenspannungsnetzgerät (*Horneff digital*). Dieses Netzgerät setzt zu Beginn eines jeden vollen Messschrittes die gewünschte Spannung und gibt eine (vorzeichenbehaftete) Spannungsinformation zurück. Die zweite Information bietet ein 10-kV-Hochspannungsteiler mit Frequenzgang [85], der für jeden Teilschritt eine vorzeichenlose Spannungsmessung liefert. Die letztbeschriebene Spannungsmessung erweist sich insbesondere bei großen Spannungssprüngen zwischen Mess- und Kühlschritten als sehr verlässlich, da die teilschrittsensitive Messung erlaubt, einen etwas späteren Zeitpunkt für die Spannungsmessung auszuwählen. Zu diesem Zeitpunkt ist die asymptotische Annäherung der Spannung an ihren Zielwert schon deutlich weiter fortgeschritten als zum früheren Zeitpunkt der Messung des Driftröhrenspannungsnetzgerätes. Hingegen erlaubt das Netzgerät auch kleinere Spannungen mit gleichbleibender relativer Genauigkeit zu messen. Dies ist bei einer Messung mittels Frequenzzählung nicht der Fall. Um die Vorteile beider Verfahren zu vereinen, wurde die Ausgabe des Driftröhrenspannungsnetzgerätes für jeden einzelnen Messbereich auf die Ausgabe des Hochspannungsteilers normiert.

Die Ionenenergie lässt sich recht einfach aus dem relativistischen Gammafaktor der Ionen (γ_i) bestimmen, der mit dem relativistischen Gammafaktor der Elektronen bei Kühlung identisch ist. Dieser wird über den Zusammenhang $\gamma_i = 1 + \frac{E_{\text{Lab Cool}}}{m_e c^2}$ ermittelt, wobei die Laborenergie bei Kühlung $E_{\text{Lab Cool}}$ ebenfalls nach Formel 3.1 berechnet wird. Aus den relativistischen Gammafaktoren von Ionen (γ_i) und Elektronen ($\gamma_e = 1 + \frac{E_{\text{Lab}}}{m_e c^2}$) lässt sich nun die Relativenergie im Schwerpunktsystem über den folgenden, in Abb. 3.1 graphisch dargestellten Zusammenhang ermitteln.

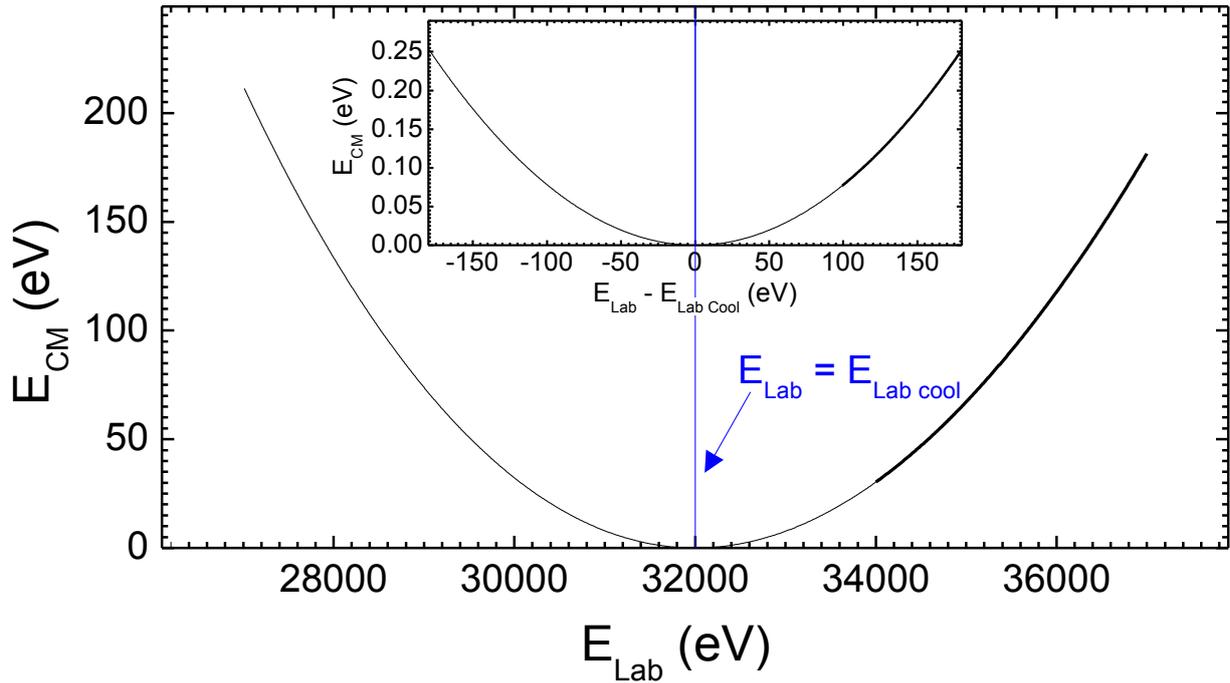


Abbildung 3.1: Transformation vom Labor- ins Schwerpunktsystem gemäß Gleichung 3.3. Schwerpunktsenergien nahe Null zeigen nur eine sehr geringe Abhängigkeit von der Laborenergie E_{Lab} und lassen sich deshalb besonders präzise bestimmen (siehe auch Abb. 3.3).

$$E_{\text{CM}} = \left(\gamma_e \cdot \gamma_i - 1 - \sqrt{(\gamma_e^2 - 1) \cdot (\gamma_i^2 - 1)} \cos(\Theta) \right) m_e c^2 \quad (3.3)$$

Hierbei wird der Winkel Θ zwischen den überlagerten Strahlen als Null angenommen.

Für niedrige Relativenergien führen die Eigenschaften dieser Transformation gemeinsam mit der für niedrige Resonanzenergien signifikant geringeren, temperaturbedingten Resonanzverbreiterung (Abs. 3.4.2) zu einer extrem hohen Energieauflösung. Beispielsweise konnten bei Messungen zur DR von lithiumartigem F^{6+} an TSR und Crying Resonanzen bei 7 meV mit einer Halbwertsbreite von 5 meV aufgelöst werden [86]. Die wohl präziseste aller Messung einer DR-Resonanzlage wurde mit lithiumartigem Sc^{18+} am Heidelberger Testspeicherring (TSR) von Lestinsky *et al.* [87] durchgeführt und weist einen Fehler von nur 200 μeV auf.

3.2.1 Energiekalibrierung

Mit der oben beschriebenen Methode zur Bestimmung der Elektron-Ion-Stoßenergie können nur Beiträge zur Schwerpunktsenergie berücksichtigt werden, deren Effekte sich klar quantifizieren lassen. Darüber hinaus existieren aber auch Beiträge, wie z.B. das partielle Auffüllen des Raumladungspotentials durch Restgasionen oder gewisse Abweichungen vom angenommenen

Stoßwinkel von 0° , die sich nicht vollständig quantifizieren lassen. Eine Berücksichtigung eines erheblichen Teils dieser Einflüsse ist möglich, wenn man eine Selbstkalibrierung der Energieachse über die energetischen Abstände der Rydbergzustände durchführt.

Sowohl die Rekombinationsmessungen von berylliumartigem Xe^{50+} als auch jene bei lithi-umartigem Xe^{51+} enthalten eine Vielzahl von Resonanzen verschiedener Rydbergserien (Abschnitte 1.1.4, 4.1.3, 4.1.4 und 4.2.2), deren energetische Resonanzlagen sich aus der Innerschalenanregungsenergie der jeweiligen Rydbergserie und der Dirac-Bindungsenergie des Rydberg-elektrons (Gl. 1.4) im Zustand nl_j ergibt (Gl. 1.28). Betrachtet man nun die Differenzen der Resonanzenergien zweier zur selben Rydbergserie gehörenden Resonanzen, dann ist diese Differenz nur noch von der Differenz der Rydbergbindungsenergien und nicht mehr von der Innerschalenanregungsenergie abhängig. Da sich die Bindungsenergie von Rydbergzuständen sehr gut durch das Modell eines wasserstoffartigen Ions beschreiben lässt (Abs. 1.1.4), dessen effektive Kernladungszahl dem Ladungszustand des Atoms vor der Rekombination entspricht, bietet die Forderung, dass gemessene Differenzen der Lage zweier Resonanzgruppen n_1 und n_2 den Differenzen ihrer berechneten Bindungsenergien entsprechen müssen (siehe Formel 3.4), einen vielversprechenden Ansatz zur Energiekalibrierung:

$$E_{\text{Mess}}(n_1) - E_{\text{Mess}}(n_2) \stackrel{!}{=} E_{\text{Bind}}(n_1) - E_{\text{Bind}}(n_2) \quad (3.4)$$

Zur Verwendung dieser Kalibrierung muss die bisher verwendete Formel zur Berechnung der Relativenergie um Parameter ergänzt werden, über deren Anpassung die Forderung möglichst genau erfüllt werden kann. Hierfür hat sich die Modifikation der Driftrohrspannung bei Messung (U_{DR}) mit einem (betraglich) additiven (P_0) und einem multiplikativen Parameter (P_1) gemäß Formel 3.5 als sinnvoll erwiesen. Es ist möglich, die Parameter als Offset bzw. als systematischer (relativer) Fehler der Driftrohrspannungsmessung zu interpretieren. Allerdings korrigiert die Energiekalibrierung Abweichungen von der ihr zu Grunde liegenden Forderung (Gl. 3.4) unabhängig von den physikalischen Ursachen einzelner Abweichungen. Zu den Effekten die zu Abweichungen führen, gehört u.a. das partielle Auffüllen des negativen Raumladungspotentials durch den Einfang positiver Restgasionen in den Elektronenstrahl.

Um mit einem erweiterten Messbereich messen zu können, wurden einige Messungen mit einer um ca. 4100 Volt erhöhten Kathodenspannung durchgeführt, wobei die Kühlung der Ionen nicht bei einer Driftrohrspannung von 0 Volt, sondern bei einer Driftrohrspannung von ca. -4100 V und damit gleichbleibender Laborenergie durchgeführt wurde (Abs. 2.4.1.2). Für diesen Messbereich wurde ein äquivalenter Parametersatz (P_2 und P_3) verwendet (siehe Gleichung 3.6) um die korrigierte Driftrohrspannung $U_{\text{DR kor jump}}$ zu bestimmen. Außerdem wurde ein ergänzender Parameter P_4 eingeführt, der im Fall des erweiterten Messbereiches die Driftrohrspannung bei Kühlung ($U_{\text{DR jump cool}}$) gemäß Gleichungen 3.7 und 3.8 korrigiert.

$$U_{\text{DR kor}} = P_1 \cdot U_{\text{DR}} + \text{sign}(U_{\text{DR}}) \cdot P_0 \quad (3.5)$$

$$U_{\text{DR kor jump}} = P_3 \cdot U_{\text{DR}} + \text{sign}(U_{\text{DR}}) \cdot P_2 \quad (3.6)$$

$$U'_{\text{DR jump cool}} = U_{\text{DR jump cool}} + P_4 \quad (3.7)$$

$$U_{\text{DR jump cool kor}} = P_1 \cdot \left(U'_{\text{DR jump cool}} \right) + \text{SIGN}(U'_{\text{DR jump cool}}) \cdot P_0 \quad (3.8)$$

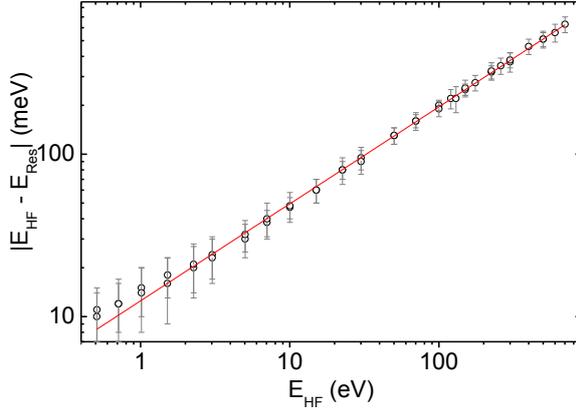
Für eine optimale Energiekalibrierung müssen die experimentellen Differenzen der Resonanzenergienlagen mit möglichst geringem Fehler ermittelt werden. Da gemäß Formel 3.4 nur die Differenzen der experimentellen Resonanzenergien zur Energiekalibrierung herangezogen werden, ist eine Minimierung des Fehlers dieser Differenzen wichtiger als eine möglichst exakte Bestimmung der absoluten Energie des Resonanzschwerpunktes*. Folglich müssen insbesondere jene Abweichungen möglichst vermieden werden, die unterschiedliche Resonanzen in verschiedener Weise betreffen. Um dies zu berücksichtigen, wurde in der Resonanzform eine besonders signifikante Stelle gewählt, deren relative Lage innerhalb einer Resonanz von der Hauptquantenzahl möglichst unabhängig ist. Besonders signifikant – im Sinne einer möglichst eindeutigen Identifizierung auf der Abszisse – sind Stellen mit maximaler Steigung (in der Regel Wendepunkte), da hier kleine Änderungen der Abszisse große Änderungen der Ordinate bewirken. Untersuchungen am Spektrum zeigen, dass die Änderungen der Struktur der niederenergetischen Resonanzflanke mit der Hauptquantenzahl sehr viel stärker ist als bei der hochenergetischen Resonanzflanke (Abschnitte 4.1.5 und 4.2.5). Primär liegt dies an der Änderung der Feinstrukturaufspaltung, die mit höheren Quantenzahlen kleiner wird und die zur niederenergetischen Flanke gehörenden Zustände kleiner Gesamtdrehimpulse stärker betrifft als jene höherer Gesamtdrehimpulse. Letztlich wurde als signifikante Energielage der Abfall der hochenergetischen Flanke auf die Hälfte des Ordinatenwertes gewählt. Diese Wahl weicht nicht allzu stark von der Stelle des Wendepunkts ab.

Die Differenz der berechneten Bindungsenergien wird mittels der Formel für Dirac-Bindungsenergien (Gl. 1.4) ermittelt. Um diese nutzen zu können, muss noch ein Wert für die Gesamtdrehimpulsquantenzahl j festgelegt werden. Wie im experimentellen Fall wird auch hier ein Wert auf der höherenergetischen Seite der Resonanzstruktur gewählt $j = n - 1/2$. Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass die konkrete Wahl dieses Gesamtdrehimpulses die Energiekalibrierung nur gering beeinflusst. (Wenn einzelne, höhere Feinstrukturkomponenten aufgelöst werden konnten, so wurde selbstverständlich auch für die Berechnung der Bindungsenergie-differenzen die korrekt identifizierte Feinstrukturkomponente gewählt.)

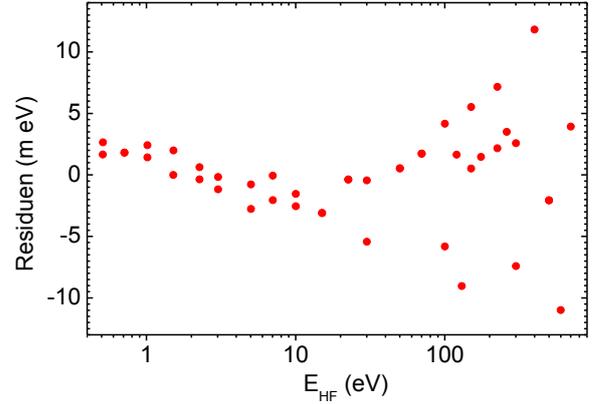
Letztlich werden die Parameter $P_{0,1,3,4}$ so lange variiert, bis die Summe über die Quadrate der Unterschiede zwischen den Differenzen von experimenteller Resonanzenergie und theoretisch berechneter Bindungsenergie minimal sind (Gl. 3.9). Dabei wurden Rydbergresonanzgruppen mit einem Hauptquantenzahlunterschied (dn) zwischen 0 und 4 berücksichtigt. Vergleiche einer Resonanz mit sich selbst ($dn=0$) wurden nur durchgeführt, wenn diese Resonanz auf unterschiedlichen Wegen gemessen wurde. Größere Hauptquantenzahlunterschiede als vier wurden nicht berücksichtigt, da der Unterschied in der Form der Resonanzgruppe umso größer wird, je stärker sich die Hauptquantenzahlen unterscheiden.

$$\sum_{n_1=n_{\min}}^{n_1=n_{\max}} \sum_{n_2=n_1}^{n_2=n_1+dn} ([E_{\text{Mess}}(n_1) - E_{\text{Mess}}(n_2)] - [E_{\text{Bind}}(n_1) - E_{\text{Bind}}(n_2)])^2 \stackrel{!}{=} \min \quad (3.9)$$

*Für eine feste Hauptquantenzahl n besteht die zugeordnete Resonanzgruppe aus einer Vielzahl einzelner Resonanzen. Diese unterscheiden sich anhand des Gesamtdrehimpulses des Rydbergelktrons j , des Drehimpulses des



(a) Verschiebung der hochenergetischen Resonanzflanke E_{HF} gegenüber der gegebenen Resonanzlage E_{Res} und Fit mit Potenzfunktion $a \cdot E_{\text{HF}}^b$ zu $(0.0124 \pm 0.0002) \cdot E_{\text{HF}}^{(0.598 \pm 0.004)}$ eV. Die Fehler entsprechen der Ungenauigkeit der Bestimmung der Hochenergie-resonanzflanke.



(b) Die Differenzen zwischen den einzelnen, simulierten Verschiebungen und der Fitfunktion stellen ein Maß für den Fehler der Temperaturverschiebung dar.

Abbildung 3.2: Abstand zwischen Resonanzlage und hochenergetischen Resonanzflanke. Die Verschiebung wurde mittels einer die experimentellen Gegebenheiten berücksichtigenden Simulation 3.3.4 von Resonanzen bei unterschiedlichen Energien gewonnen. Durch Berücksichtigung der Verschiebung kann der Unterschied zwischen der Differenz der Dirac-Bindungsenergien und der Differenz der experimentell ermittelten Hochenergieflanken kompensiert werden.

Ein weiterer noch zu berücksichtigender Effekt war die durch die Elektronenstrahltemperatur bedingte Verschiebung und Verbreiterung der Resonanzen gegenüber ihrer physikalischen Resonanzlage und natürlichen Breite. Diese Verschiebung ist für unterschiedliche Relativenergien verschieden groß. Um diesen Effekt zumindest teilweise zu kompensieren, wurden für angenommene deltaförmige Resonanzen bei verschiedenen Energien Simulationen mit den experimentellen Parametern durchgeführt. Hierbei wurden die durch die Temperatur verursachten Verschiebungen der rechten Flanken der Resonanzen gegenüber den in die Simulation eingesetzten Energielagen ermittelt (Abb. 3.2). Daraus wurde eine von der Energie abhängige Funktion der Energieverschiebung (E_{\rightarrow}) generiert (Gl. 3.10). Mit ihrer Hilfe konnte eine Resonanzenergie E_{Res} aus der Lage der Resonanzflanke E_{HF} ermittelt werden. Dies kompensiert bei der Energiekalibrierung die energieabhängige Verschiebung der hochenergetischen Resonanzflanken weitestgehend.

$$E_{\rightarrow} = (0.0124 \pm 0.0002) \text{ eV} \cdot \left(\frac{E_{\text{HF}}}{\text{eV}} \right)^{(0.598 \pm 0.004)} \quad (3.10)$$

$$E_{\text{Res}} = E_{\text{HF}} - E_{\rightarrow} \quad (3.11)$$

Rydbergelektrons 1 und des gekoppelten Gesamtdrehimpulses J . In der Regel sind die einzelnen Teilresonanzen experimentell nicht auflösbar so dass nur Schwerpunkt und Stärke der Resonanzgruppe sichtbar wird.

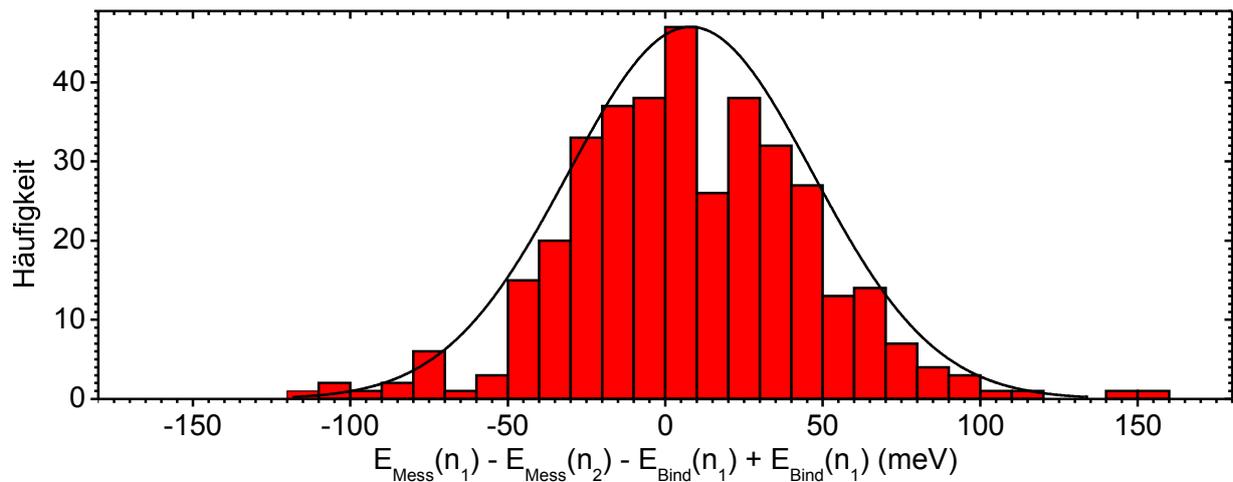
Letztlich ergaben sich aus der Energiekalibrierung die Parameter $P_0 = -0.04 \pm 0.17$ Volt, $P_1 = 0.994069 \pm 0.000033$, $P_2 = 0$ Volt (fixiert), $P_3 = 0.992677 \pm 0.000065$ und $P_4 = -6.61 \pm 0.42$ Volt. Der Parameter P_2 weist bei Einbeziehung in die Anpassung eine sehr hohe Korrelation mit Parameter P_4 bei kaum von 0 abweichendem Wert auf und wurde deshalb auf einen Wert von 0 fixiert. Die dominanten Terme sind die Änderung der Driftrohrspannung um 0.6 bzw. 0.8% und die Reduktion der Kühl-Driftrohrspannung bei erhöhter Kathodenspannung um 6.6 Volt. Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass für die Energiekalibrierung die verwendeten Parameter und ihre konkreten Werte im Vergleich zum Kalibrierungskriterium (Gl. 3.4) von nachrangiger Bedeutung sind.

3.2.2 Fehlerabschätzung

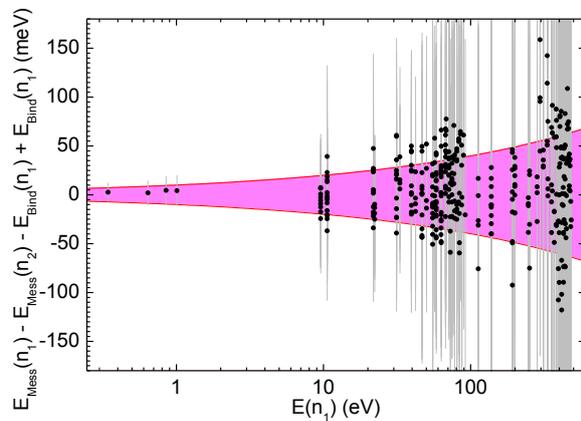
Zur Abschätzung der Fehler der Energiekalibrierung wurden verschiedene Untersuchungen vorgenommen: Zum einen lässt sich die Abweichung der für die Kalibration verwendeten Daten von der an die Energiekalibrierung gestellten physikalischen Forderung (Gl. 3.4) untersuchen. Abbildung 3.3(a) zeigt die Häufigkeitsverteilung der Differenz zwischen den Abständen gemessener Resonanzenergien der Rydbergzustände und den Abständen ihrer auf Basis des Diracmodells berechneten Bindungsenergien. Die Standardabweichung dieser Daten beträgt etwa ± 40 meV. Dies kann als Maß für den Fehler der Energiekalibrierung betrachtet werden. Eine signifikante Abhängigkeit der Streuungen von der Differenz der verglichenen Bindungsenergien ist nicht festzustellen (Abb. 3.3(c)). Hingegen fällt beim Studium der Abhängigkeit der Streuung von der Energie des niederenergetischsten der verglichenen Zustände auf, dass die Streuung bei hohen Energien deutlich größer ist als bei niedrigen Energien (vgl. Abb. 3.3(b)). Daraus ist zu folgern, dass unterschiedliche Relativenergien einen unterschiedlichen Fehler besitzen, den man demzufolge nicht mit einer Konstanten sondern mit einer energieabhängigen Funktion beschreiben sollte. Dass die Fehler bei niedrigen Relativenergien sehr viel kleiner sind als bei großen Relativenergien ist angesichts der spezifischen Transformationsfunktion beim Übergang vom Labor ins Schwerpunktsystem (Abb. 3.1) nicht verwunderlich. Zur Ermittlung einer die Unsicherheit der Energiekalibrierung beschreibenden Funktion wurde die in Abb. 3.3(a) zu sehende Häufigkeitsverteilung in sechs Häufigkeitsverteilungen für unterschiedliche disjunkte Energiebereiche aufgespalten. Aus den unterschiedlichen Standardabweichungen der verschiedenen Energiebereiche (Abb. 3.4(b)) konnte die folgende Formel als Maß für die Unsicherheit der Bestimmung der Energieachse ermittelt werden:

$$\Delta E = \pm 7.8 \text{ meV} \cdot E_{[\text{eV}]}^{0.32} \quad \frac{\Delta E}{E} = \pm 7.8 \cdot 10^{-3} \cdot E_{[\text{eV}]}^{-0.68} \quad (3.12)$$

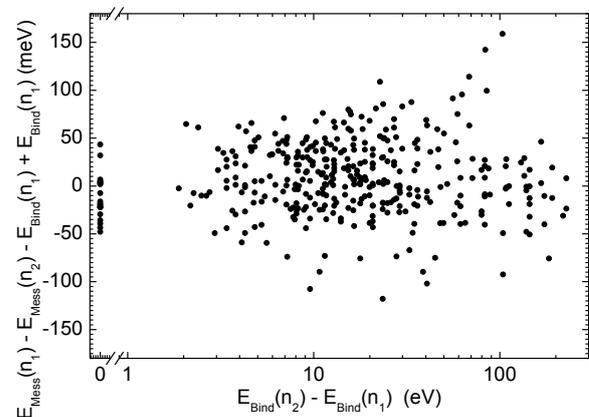
Diese Funktion wird im Rahmen dieser Arbeit als Fehler der Energiebestimmung im Bereich von 0 bis 600 eV verwendet. Die Unsicherheit der Energiekalibrierung nach obiger Funktion ist in Abb. 3.3(b) flächig dargestellt. Die so ermittelten Fehler der Energiekalibrierung werden in Tabelle 3.1 für einige Energien exemplarisch angegeben.



(a) Häufigkeitsverteilung der Fehler der Energiekalibrierung



(b) • Fehler der Energiekalibrierung in Abhängigkeit von der Energie des niederenergetischsten, verglichenen Rydbergzustandes. In Grau sind die Fehler aus der Bestimmung der hochenergetischen Resonanzflanke angegeben. Als cyan farbene Fläche ist die 1σ Unsicherheit der Energiekalibrierung gemäß Gleichung 3.12 dargestellt.



(c) • Fehler der Energiekalibrierung in Abhängigkeit von der Differenz der Energien verglichener Rydbergresonanzgruppen.

Abbildung 3.3: Streuung der Energiekalibrierungsfehler. Dargestellt ist der Unterschied zwischen den Differenzen der Dirac-Bindungsenergien [$E_{\text{Bind}}(n_1) - E_{\text{Bind}}(n_2)$] und den Differenzen der experimentell ermittelten, um die Temperaturverschiebung (Abb. 3.2) korrigierten Resonanzlagen [$E_{\text{Mess}}(n_1) - E_{\text{Mess}}(n_2)$] als Maß für die verbleibende Ungenauigkeit der Energiekalibrierung. Man erkennt, dass die Streuung der Fehler mit steigender Resonanzenergie zunimmt, während sie kaum von der Differenz der Energien der verglichenen Resonanzen abhängt.

Eine weitere, mögliche Fehlerquelle stellt die Wahl der eingeführten Kalibrationsparameter dar. Verwendet man an Stelle der oben erläuterten Parameter das folgende alternative Parametersystem zur Berechnung der Laborenergie (Gl. 3.1), so erhält man eine leicht abweichende

Tabelle 3.1: Absolute und relative Fehler der Energiekalibrierung für einige Energien von 0.3 bis 600 eV gemäß Gleichung 3.12.

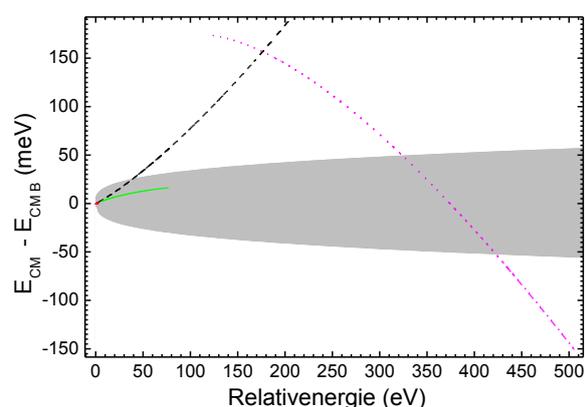
E_{CM}	[eV]	0.3	1	3	10	30	100	300	600
ΔE_{CM}	[meV]	5.3	7.8	11	16	23	34	48	60
$\Delta E_{CM}/E_{CM}$	$[10^{-4}]$	180	78	37	16	7.7	3.4	1.6	1.0

Energiekalibrierung.

$$E_{Lab} = e(U_{Kath} + P_0 + U_{DR} + U_{RL}) \quad (3.13)$$

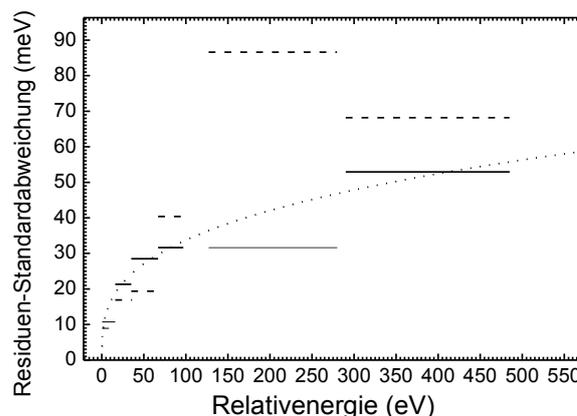
$$E_{Lab \text{ kath jump}} = e(U_{Kath \text{ jump}} + P_1 + U_{DR \text{ Kath jump}} + U_{RL})$$

In obiger Gleichung sind P_0 bzw. P_1 die Parameter des normalen bzw. erweiterten (Abs. 2.4.1.2) Messbereichs. Aus dieser alternativ parametrisierten, aber auf derselben Forderung (Gl. 3.4) aufbauenden Energiekalibrierung erhält man eine alternative Schwerpunktsenergie $E_{CM B}$, die von der oben ermittelten Schwerpunktsenergie (E_{CM}) abweicht. Abb. 3.4(a) stellt die Differenz beider Relativenergien energieabhängig dar. Wie man sieht, weichen die Parametrisierungen um maxi-



(a) Unterschied der Relativenergien nach Energiekalibrierung für verschiedene Messmodi.

— $\gamma_e > \gamma_i$; - - - - $\gamma_e < \gamma_i$; ····· erhöhte Kathodenspannung (erweiterter Messbereich). Flächig: Unsicherheit gemäß Gleichung 3.12.



(b) Vergleich der Standardabweichung der Residuen für verschiedene Energiebereiche;

— genutzte Parametrisierung;
- - - - alternative Parametrisierung;
· · · · · Unsicherheit gemäß Gleichung 3.12

Abbildung 3.4: Vergleich der Relativenergien sowie Residuen-Standardabweichungen der Energiekalibrierung bei genutzter (Gl. 3.5 f.) bzw. alternativer Parametrisierung (Gl. 3.13) für bei der DR-Messung lithiumartigen Xenons genutzten Energiebereiche. Die größere Diskrepanz der Relativenergien im Bereich zwischen 125 und 275 Volt geht einher mit einer deutlich höheren Standardabweichung der alternativen Parametrisierung in diesem Bereich. Dies zeigt, dass die gewählte gegenüber der alternativen Parametrisierung zu bevorzugen ist.

mal 200 meV voneinander ab. Die Abweichung im Bereich des Überlapps der beiden Messbereiche (120 bis 200 eV) stimmt für beide Messbereiche hinsichtlich Größe und Richtung überein. Demzufolge kommt es für keine der beiden Parametrisierungen zu größeren relativen Verschiebungen der Messbereiche gegeneinander. Ein Vergleich dieser Fehlerabschätzung mit dem oben ermittelten Fehler (Gl. 3.12) der Energiekalibrierung zeigt, dass die Größenordnungen der Fehlerabschätzungen übereinstimmen und die größeren Unterschiede im Bereich zwischen 100 und 300 eV auf die 'schlechtere' alternative Parametrisierung zurückzuführen sind (Abb. 3.4(a)).

3.3 Energieverteilung von Elektronen und Ionen

Der experimentell ermittelte Ratenkoeffizient stellt eine Faltung des energieabhängigen Wirkungsquerschnitts mit der Verteilung der Relativgeschwindigkeiten dar (Gl. 1.20), die von verschiedenen Faktoren beeinflusst wird. In diesem Abschnitt werden verschiedenen Einflüsse auf die Verteilung von Elektron-Ion-Stoßenergie diskutiert.

3.3.1 Impulsunschärfe des Ionenstrahls

Die Verteilung der Elektron-Ion-Stoßenergien hängt von der Impulsunschärfe des Ionenstrahls $\Delta p/p$ ab. Diese wird durch die Kühlung drastisch reduziert. Abb. 3.5 zeigt die Häufigkeitsverteilung der Umlauffrequenz für Xe^{53+} . Deren Breite steht in folgendem Zusammenhang [88] zur Impulsbreite:

$$\frac{\Delta f}{f} = \left(\frac{1}{\gamma_i^2} - \frac{1}{\gamma_t^2} \right) \frac{\Delta p}{p} \quad (3.14)$$

Hierbei ist $\gamma_i \sim 1.063$ der relativistische Gammafaktor der Ionen und γ_t der Gammafaktor der Transitionsenergie. Die Transitionsenergie ist jene Energie, bei der die Umlauffrequenz lokal

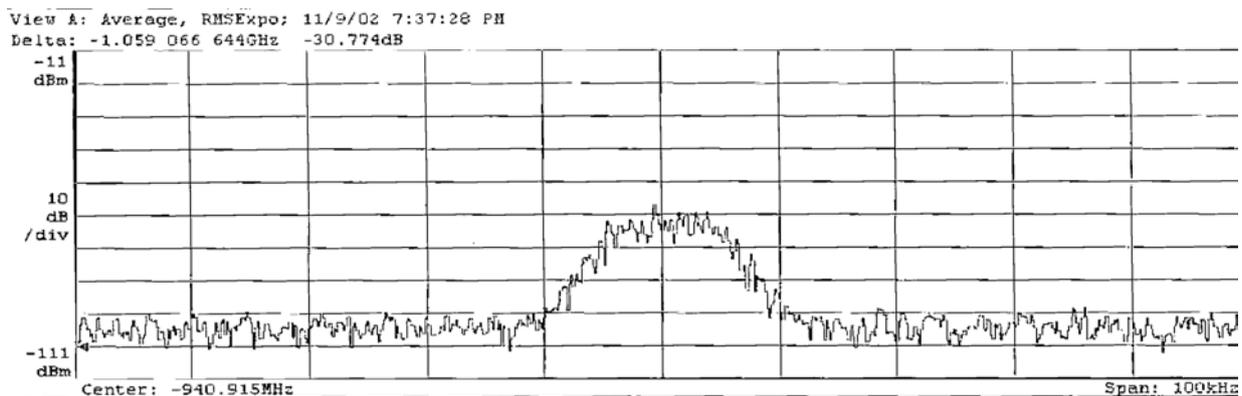


Abbildung 3.5: Häufigkeitsverteilung der Umlauffrequenzen der Ionen für Elektronenkühlung bei Xe^{51+} mit $\Delta f/f \sim 1 \cdot 10^{-5}$ als Maß für die Impulsbreite $\Delta p/p$

unabhängig von der Änderung des Ionenimpulses bzw. der Ionenenergie ist ($\frac{\partial f}{\partial p}|_{\gamma=\gamma_i} = 0$). Eine ausführliche Darstellung der Bedeutung dieser Energie und der Nutzung entsprechender Ringeinstellungen zur Massennmessung an höchst kurzlebigen Nukliden gibt Hausmann [89]. Für die Zwecke dieser Arbeit ist primär die Erkenntnis relevant, dass die hier genutzte Ionenenergie $\gamma_i \sim 1.063$ hinreichend weit von der üblichen Transitionsenergie $\gamma_t \sim 2.5$ [89, & Ref.] entfernt ist, um die Frequenzunschärfe als Maß für die Impulsunschärfe der Ionen ansehen zu können. Für eine ausgiebige Diskussion sei auf Brandau [59] verwiesen. Für die im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Experimente an elektronengekühltem Xenon ist der Einfluss der Impulsunschärfen der Größenordnung 10^{-5} auf die Verteilung der Relativenergien gegenüber dem Einfluss der Elektronenstrahltemperaturen (Abs. 3.3.2 vernachlässigbar (Abb. 3.7)).

3.3.2 Anisotrope Maxwellverteilung der Elektronen

Die Geschwindigkeitsverteilung der Elektronen des Elektronenstrahls hat einen großen Einfluss auf die Energieverteilung der Elektron-Ion-Stöße. Diese Maxwell-Boltzmann-Verteilung lässt sich wie folgt über T_{\parallel} (Temperatur in Strahlrichtung) und T_{\perp} (Temperatur in Richtung transversal zum Elektronenstrahl) parametrisieren, die der Varianz der zugeordneten Geschwindigkeitsverteilung entsprechen[45][†]:

$$f(v_0, \vec{v}) = \left(\frac{m_e}{2\pi k T_{\parallel}} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{m_e (v_{\parallel} - v_0)^2}{2k T_{\parallel}} \right] \times \frac{m_e}{2\pi k T_{\perp}} \exp \left(-\frac{m_e v_{\perp}^2}{2k T_{\perp}} \right) \quad (3.15)$$

$$k T_{\parallel} = m_e \langle (v_{\parallel} - \langle v_{\parallel} \rangle)^2 \rangle \quad k T_{\perp} = \frac{m_e}{2} \langle (v_{\perp} - \langle v_{\perp} \rangle)^2 \rangle \quad (3.16)$$

Die anfängliche Geschwindigkeits- bzw. Energieverteilung des Elektronenstrahls hängt maßgeblich von der Temperatur der verwendeten thermischen Kathode ab. Die Beschleunigung erhöht die mittlere Strahlenergie und verschiebt die Energieverteilung bei gleichbleibender Breite zu höheren Energien. Aufgrund der quadratischen Abhängigkeit der Energie von der Teilchengeschwindigkeit reduziert die Beschleunigung die Breite der Geschwindigkeitsverteilung in Strahlrichtung, während die Verteilung der transversalen Geschwindigkeitskomponente unverändert bleibt. Daher gilt für beschleunigte Teilchenstrahlen in der Regel $T_{\parallel} \ll T_{\perp}$ bzw. $\Delta v_{\parallel} \ll \Delta v_{\perp}$.

3.3.3 Elektronenenergieverteilung im Kühler

Die Änderung der Laborenergie (Gl. 3.1) erfolgt, wie in Abschnitt 2.4 beschrieben, mittels der beiden Driftröhren, die in ihrer Summe eine Länge von 1,94 Metern aufweisen. Der Strahlüberlapp zwischen Elektronen- und Ionenstrahl beträgt insgesamt 2,5 Meter. Die Änderung der Beschleunigungsspannung durch die Driftröhren betrifft nur den Bereich im Inneren der Driftröhren in vollem Umfang ($E_{\text{Lab}} \approx e(U_{\text{Kath}} + U_{\text{DR}})$). Deutlich außerhalb der Driftröhren bleibt die Laborenergie (E_{Lab}) von der Driftröhrenspannung (U_{DR}) nahezu unbeeinflusst ($E_{\text{Lab}} \approx eU_{\text{Kath}}$).

[†]Die unterschiedlichen Vorfaktoren m_e bzw. $m_e/2$ von T_{\parallel} und T_{\perp} gehen auf die unterschiedlichen Freiheitsgrade longitudinaler (zwei) und transversaler Temperatur (eins) zurück (Vgl. [59]).

Im Ein- und Ausgangsbereich der Driftröhren haben die Elektronen nur einen Teil der Driftröhrenspannung durchlaufen, so dass dort für positive Driftröhrenspannungen der Zusammenhang $eU_{\text{Kath}} < E_{\text{Lab}} < e(U_{\text{Kath}} + U_{\text{DR}})$ gilt. Dieser Effekt wurde von Spies [82] und Brandau [59] schon ausführlich behandelt, so dass hier auf eine ähnlich detaillierte Darstellung verzichtet werden soll. Es bleibt festzuhalten, dass die Stoßenergie zwischen Ionen und Elektronen E'_{CM} auf dem längsten Abschnitt des Strahlüberlapps dem von Kathoden- und Driftröhrenspannung definierte Wert E_{CM} gemäß Gleichung 3.3 entspricht, wobei die Strahltemperatur für eine Verbreiterung sorgt. Weit außerhalb der Driftröhren herrscht – im normalen Messmodus (Abs. 2.4.1) – eine Stoßenergie von $E'_{\text{CM}} \sim 0$ eV. Der Übergangsbereich zu den Driftröhren sorgt dafür, dass Sto-

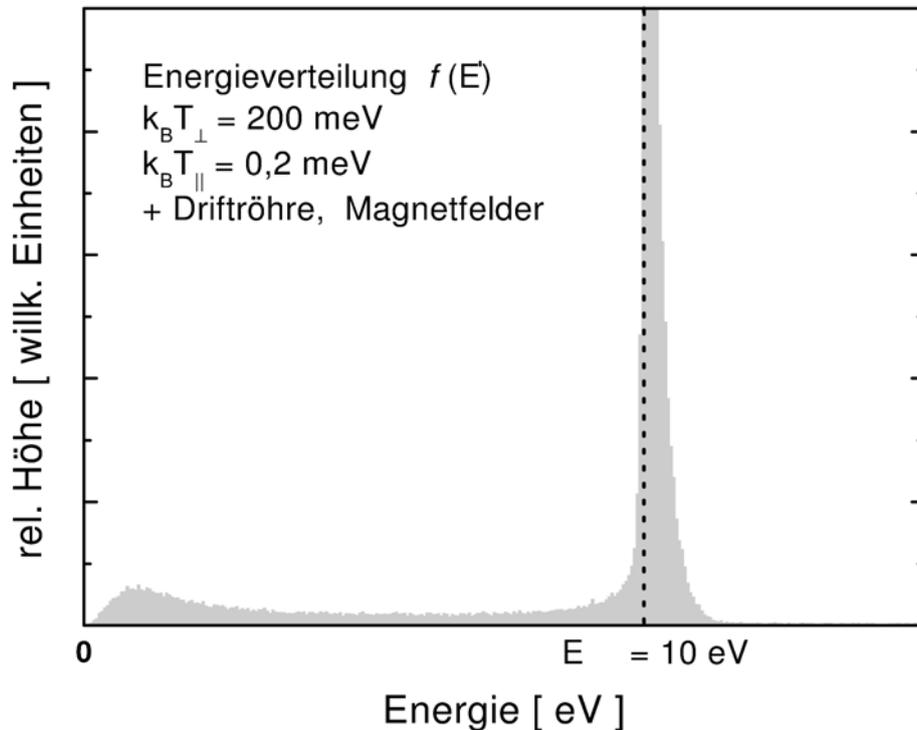


Abbildung 3.6: Exemplarische Häufigkeitsverteilung der Elektron-Ion-Stoßenergien $f(E')$ bei einer durch die Driftröhrenspannung definierten Relativenergie zwischen Elektronen- und Ionenstrahl E von 10 eV und einer Kathodenspannung von 50 keV. Berücksichtigt sind neben Strahltemperaturen ($T_{\parallel} = 200 \mu\text{eV}$, $T_{\perp} = 200 \text{ meV}$) und Winkelverteilung insbesondere der Einfluss des Driftröhrepotentials im Strahlüberlapp. Der Abfall des Potentials außerhalb der Driftröhren verursacht den signifikante Anteil kleinerer Energien E' ($0 < E' < E$) an der Häufigkeitsverteilung. Der Anstieg der Häufigkeitsverteilung für sehr kleine Energien wird durch den flachen (verschwindenden) Einfluss des Driftröhrepotentials auf Bereiche des Strahlüberlapps weit außerhalb der Driftröhren verursacht. In diesen Bereichen signifikanter Größe wird die Stoßenergie von den Driftröhren kaum beeinflusst, so dass dort stattfindende Rekombinationsereignisse im normalen Messmodus eine Stoßenergie nahe Null aufweisen. Weit außerhalb der Driftröhren sorgen die Toroidmagnetfelder für ansteigende Relativwinkel und Stoßenergien, so dass $f(E' = 0)$ nur mehr geringe Beiträge liefert. (Die Abbildung ist nahezu unverändert [59] entnommen)

ßenergien E'_{CM} zwischen 0 und E_{CM} mit einem geringen, aber nicht vernachlässigbaren Anteil vorkommen. Abbildung 3.6 zeigt die Häufigkeitsverteilung der Stoßenergien E'_{CM} für eine gegebene Sollenergie E_{CM} von 10 eV. Messungen der Ratenkoeffizienten bei einer durch Driftröhre- und Kathodenspannung gesetzten Relativenergie E_{CM} stellen also in Wirklichkeit eine mit der Häufigkeitsverteilung der Stoßenergien E'_{CM} gewichtete Mittelung der Ratenkoeffizienten im Bereich von etwa 0 bis E_{CM} dar.

Zusätzlich zu den Effekten der Driftröhren führen die im Kühler herrschenden Magnetfelder zu einer Änderung der Relativenergieverteilung im Inneren der Driftröhren. Dies geschieht über die Änderung des Stoßwinkels zwischen Elektronen und Ionen (Gl. 3.3). Der Effekt ist im Bereich der zum Ein- und Auslenken des Elektronenstrahls genutzten Toroide am stärksten und wird in Abb. 3.6 ebenfalls berücksichtigt. Dieser Effekt wird in [59] ausführlicher diskutiert.

3.3.4 Monte-Carlo-Simulation

Wie in den Abschnitten 3.3.1, 3.3.2 und 3.3.3 erläutert, wird die Verteilung der Relativgeschwindigkeiten zwischen Ionen und Elektronen von transversaler (T_{\perp}) und longitudinaler (T_{\parallel}) Temperatur des Elektronenstrahls, Impulsunschärfe ($\Delta p/p$), der Verteilung des Driftröhrepotentials entlang der Strahlachse sowie dem Einfluss der Magnetfelder des Kühlers beeinflusst. Um theoretische DR-Wirkungsquerschnitte mit experimentellen Ratenkoeffizienten der Photorekombination vergleichen zu können, muss zusätzlich der RR-Wirkungsquerschnitt berücksichtigt werden. Anschließend erfolgt die Faltung des Photorekombinationswirkungsquerschnittes mit der Verteilung der Relativgeschwindigkeiten (Gl. 1.20). Hierzu wurde von C. Brandau ein c++ Programm 'VDISTRIB' [90] entwickelt, das auf Basis experimenteller Parameter die angesprochene Faltung der DR-Wirkungsquerschnitte mittels einer Monte-Carlo-Simulation durchführt. Zusätzlich wird der radiative Anteil des Photorekombinationswirkungsquerschnittes auf semiklassischer Basis [51] berechnet.

Über den Vergleich mit Theoriedaten hinaus kann das Programm auch genutzt werden, um experimentelle Parameter oder DR-Resonanzstärken zu bestimmen. Hierzu werden die entsprechenden Parameter solange variiert, bis die auf ihrer Basis simulierten Spektren mit dem gemessenen DR-Ratenkoeffizienten übereinstimmen. Dies ist natürlich nur dann möglich, wenn die entsprechenden Parameter einen signifikanten Einfluss auf das DR-Ratenkoeffizientenspektrum haben, bzw. die DR-Resonanzstärken einzeln aufgelöst werden können. Eine Dokumentation und Anleitung zur Verwendung des Programms findet sich im Anhang (Abs. 6.1).

3.4 Experimentelle Resonanzlinienform

Die experimentelle Breite einer Resonanz ist von der natürlichen Linienbreite Γ des DR-Wirkungsquerschnittes abhängig, wird aber bei üblichen, natürlichen Linienbreiten stärker von der Verteilung der Relativgeschwindigkeiten dominiert. Im Folgenden sollen verschiedene Einflüsse auf die Resonanzlinienform diskutiert werden.

3.4.1 Impulsunschärfe des Ionenstrahls

Einer der Einflussfaktoren auf die Form der Resonanzlinien ist die Impulsunschärfe $\Delta p/p$, die bei Messungen an elektronengekühlten Xenonionen in der Größenordnung 10^{-5} liegt. Untersuchungen an simulierten Spektren (Abb. 3.7) zeigen, dass die Impulsunschärfe erst ab $\Delta p/p \gtrsim 1 \cdot 10^{-4}$ einen merklichen Einfluss auf die Resonanzform erlangt. Bei geringeren Impulsunschärfen wird die Resonanzform von den anisotropen Temperaturen des Elektronenstrahls dominiert. Entsprechend kann der Einfluss der Impulsunschärfe des Ionenstrahls bei elektronengekühlten Strahlen häufig vernachlässigt werden.

Für stochastisch gekühlte Strahlen treten in der Regel höhere Impulsunschärfen von typischerweise einigen 10^{-4} (Abs. 5.2) auf. Entsprechend wird die Form der Resonanzen in diesem Fall stark von der nicht mehr vernachlässigbaren Impulsunschärfe beeinflusst.

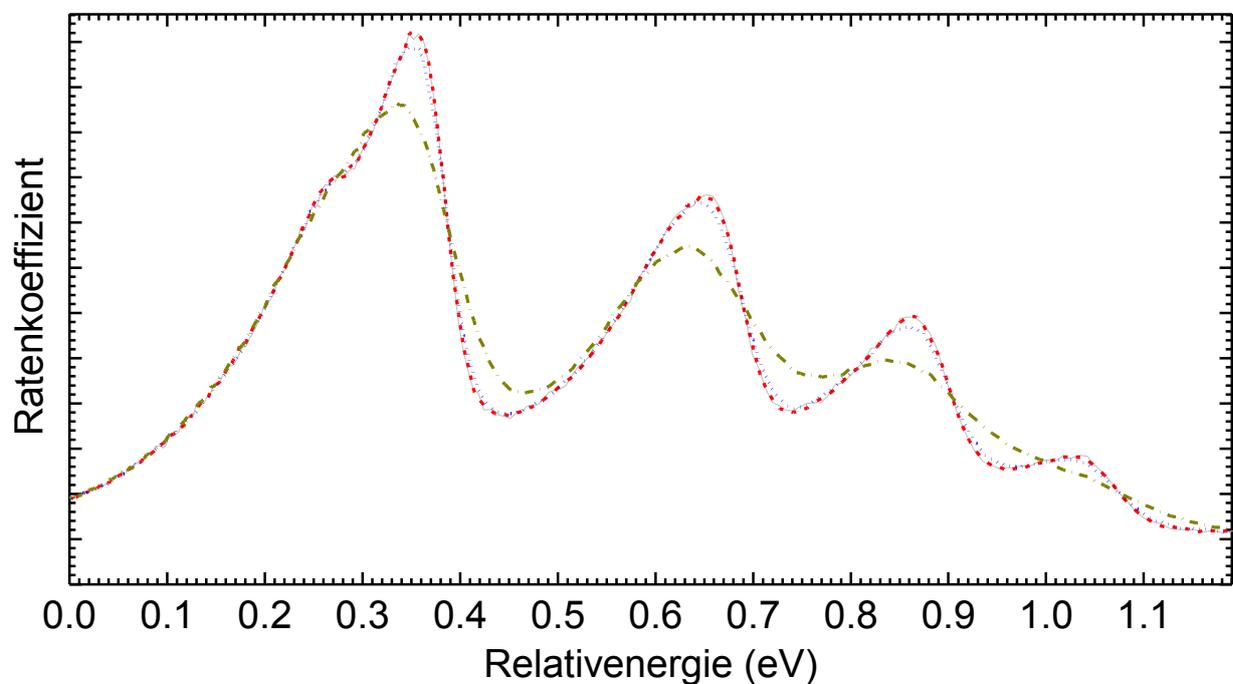


Abbildung 3.7: Vergleich simulierter (Abs. 3.3.4) Ratenkoeffizientenspektren für Ionenstrahl-Impulsunschärfen $\Delta p/p = 1 \cdot 10^{-5}$ —, $3 \cdot 10^{-5}$ - - -, $1 \cdot 10^{-4}$ ···· und $3 \cdot 10^{-4}$ ·-·-· bei experimentellen Elektronenstrahltemperaturen ($T_{\perp} = 120$ meV, $T_{\parallel} = 200$ μ eV). Die Resonanzform wird von Impulsunschärfen $< 1 \cdot 10^{-4}$ nicht signifikant beeinflusst. Hingegen dominiert die Impulsunschärfe die Resonanzform für $\Delta p/p \geq 3 \cdot 10^{-4}$.

3.4.2 Anisotrope Maxwellverteilung

Wie in Abschnitt 3.3.2 beschrieben, lässt sich die Verteilung der Elektronengeschwindigkeiten mittels einer Maxwell-Boltzmann-Verteilung ausdrücken. Als Parameter werden hierzu die Temperaturen parallel (T_{\parallel}) und transversal (T_{\perp}) zur Strahlrichtung verwendet, wobei für beschleunigte Teilchenstrahlen in der Regel $T_{\parallel} \ll T_{\perp}$ bzw. $\Delta v_{\parallel} \ll \Delta v_{\perp}$ gilt. Für niedrige Relativenergien (E_{rel}) ist der Einfluss von T_{\parallel} auf die Resonanzbreiten gegenüber T_{\perp} vernachlässigbar. Für hohe Relativgeschwindigkeiten \tilde{v} und somit $\tilde{v}_{\parallel} \gg \tilde{v}_{\perp}$ dominiert hingegen die kleinere Geschwindig-

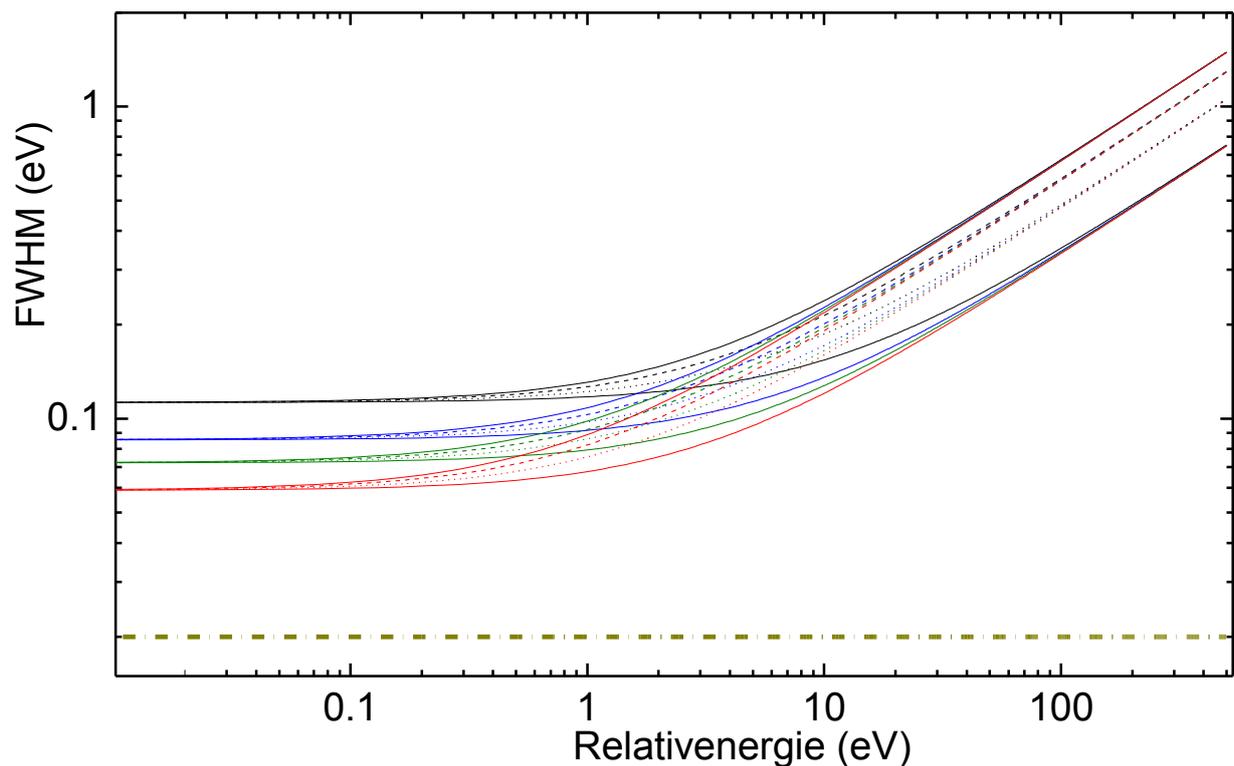


Abbildung 3.8: Halbwertsbreite (FWHM) von DR-Resonanzen in Abhängigkeit von der Relativenergie für verschiedene transversale und longitudinale Temperaturen bei angenommener natürlicher Linienbreite von 0.02 eV nach [91] bzw. Gl. 3.18. Die verschiedenen Farben rot, grün, blau und schwarz kennzeichnen transversale Temperaturen (T_{\perp}) von 80, 100, 120 und 160 meV. Die verschiedenen Linienstile —, \cdots , - - - und — kennzeichnen longitudinale Temperaturen (T_{\parallel}) von 100, 200, 300 und 400 μeV . Der Beitrag einer angenommenen, natürlichen Linienbreite von 20 meV ist als strichpunktierte Linie ($\cdot - \cdot$) dargestellt. Wie man sieht, dominiert T_{\perp} für kleine und T_{\parallel} für hohe Relativenergien die Halbwertsbreite (Erläuterung siehe Text).

keitsunschärfe Δv_{\parallel} die Energieunschärfe (siehe auch folgende Berechnungsskizze).

$$\begin{aligned}
 E(v_{\parallel}, v_{\perp}) &\propto \tilde{v}^2 = \tilde{v}_{\perp}^2 + \tilde{v}_{\parallel}^2 \\
 \Delta E &\propto E(\tilde{v}_{\parallel} + \Delta v_{\parallel}, \tilde{v}_{\perp} + \Delta v_{\perp}) - E(v_{\parallel}, v_{\perp}) \\
 &\equiv \left(2\tilde{v}_{\parallel}\Delta v_{\parallel} + (\Delta v_{\parallel}^2) + 2\tilde{v}_{\perp}\Delta v_{\perp} + (\Delta v_{\perp}^2) \right) m_e \approx 2\tilde{v}_{\parallel}\Delta v_{\parallel}m_e \quad (3.17)
 \end{aligned}$$

Eine detailliertere Darstellung hierzu findet sich bei Müller [91], wo sich auch der folgende, explizite Zusammenhang der Abhängigkeit der Resonanzbreite ΔE_{FMHM} von den Strahltemperaturen T_{\perp} und T_{\parallel} sowie der natürlicher Linienbreite Γ findet:

$$\Delta E_{\text{FWHM}} = \sqrt{(kT_{\perp}\ln 2)^2 + 16 \cdot \ln 2 \cdot kT_{\parallel} \cdot E_{\text{CM}} + \Gamma^2} \quad (3.18)$$

Abbildung 3.8 zeigt die hiermit berechneten Halbwertsbreiten in Abhängigkeit von der Relativenergie für verschiedene, transversale und longitudinale Temperaturen. Aus dem Vergleich gemessener Spektren mit Simulationen (Abs. 3.3.4) bezüglich ihrer Resonanzbreiten konnten die Strahltemperaturen zu $T_{\parallel} = 200 \mu\text{eV}$ und $T_{\perp} = 120 \text{meV}$ bestimmt werden. Dies ist konsistent mit anderen elektronengekühlten DR-Messungen [10, 59] bei Nutzung elektronengekühlter Ionenstrahlen.

3.4.3 Relativenergieverteilung im Kühler

Die in Abschnitt 3.3.3 erläuterte Häufigkeitsverteilung der Relativenergien E' im Kühler besitzt starke Flanken hin zu niedrigen Energien. Diese werden durch die Bereiche des Strahlüberlapps verursacht, die sich außerhalb der Driftröhren befinden. Für die Messung von Ratenkoeffizienten führt dies im Umkehrschluss dazu, dass Resonanzen einen ausgedehnten Verlauf zu höheren Energien besitzen (Abs. 3.3.4). Ursächlich hierfür ist, dass für alle angesteuerten Relativenergien $E \geq E_{\text{Res}}$ ein kleiner Teil des Strahlüberlapps eine Relativenergie E' besitzt, die der Resonanzenergie E_{Res} entspricht. Je näher die Resonanzenergie E_{Res} an 0 eV liegt, desto größer ist – für alle durch die Driftröhrenspannung gegebenen Relativenergien $E > E_{\text{Res}}$ – der Anteil des Strahlüberlapps L , innerhalb dessen die Elektron-Ion-Stoßenergie E' mit der Resonanzenergie E_{Res} unter Berücksichtigung der Resonanzbreite übereinstimmt. Entsprechend führt eine Resonanz der Lage $E_{\text{Res}} \sim 0 \text{eV}$ auch für Energien $E \gg E_{\text{Res}}$ zu signifikanten Ratenkoeffizienten die einen Untergrund bilden. Für Messungen, bei denen die Relativenergie E innerhalb der Driftröhren der Resonanzenergie $E_{\text{Res}} \pm \Delta E_{\text{FMWH}}$ entspricht, liegen die Energien einzelner Elektron-Ion-Stöße E' in signifikanten Teilen des Strahlüberlapps nicht in Bereich der Resonanz $E_{\text{Res}} \pm \Delta E_{\text{FWHM}}$. Dies hat eine Verringerung der Zählrate und damit ein Absinken des der Relativenergie $E \in E_{\text{Res}} \pm \Delta E_{\text{FMWH}}$ zugeordneten Ratenkoeffizienten zur Folge. Abbildung 3.9 zeigt den Einfluss u.a. des Driftröhreffekts auf die Maxwell-Boltzmann-Verteilungen ($T_{\parallel} = 200 \mu\text{eV}$, $T_{\perp} = 120 \text{meV}$) einer simulierten Resonanz bei 1 eV.

Beim Vergleich von experimentell bestimmten Ratenkoeffizienten mit theoretischen Wirkungsquerschnitten müssen Driftröhreffekte berücksichtigt werden. Im Rahmen dieser Arbeit

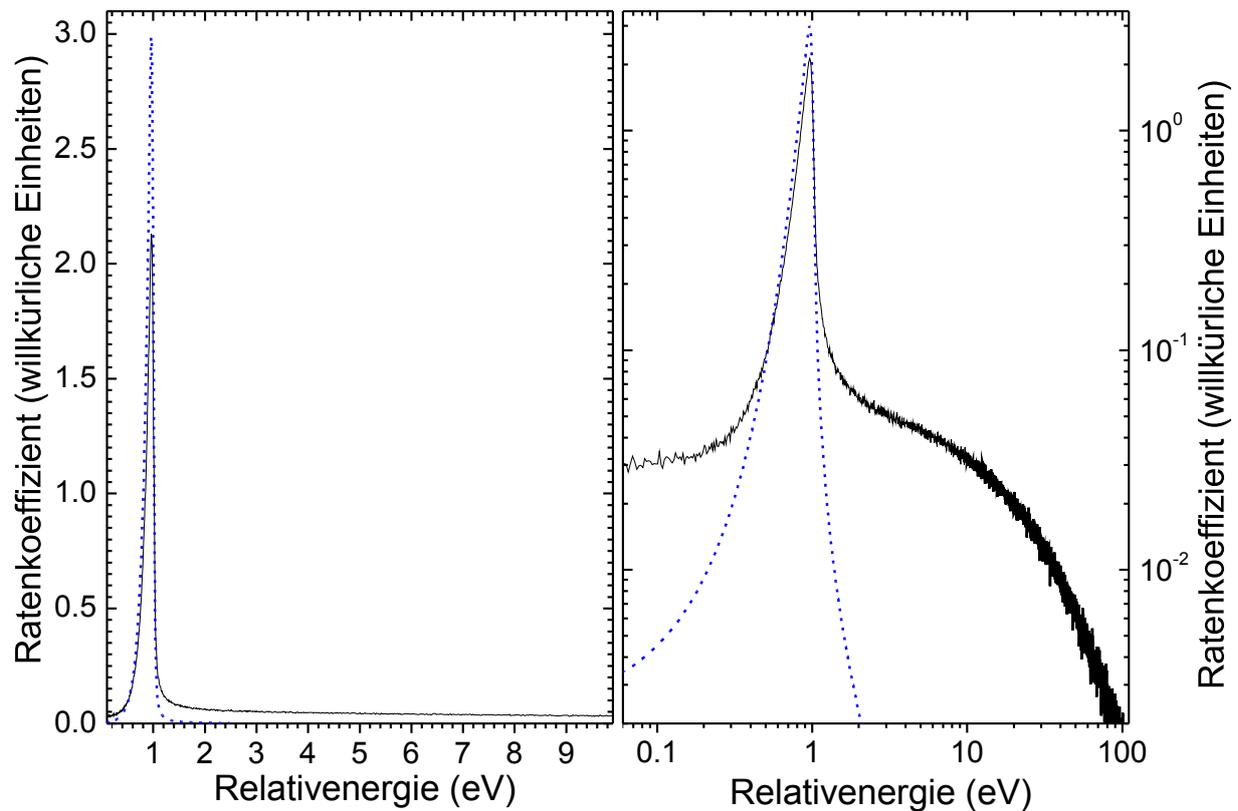


Abbildung 3.9: Vergleich des Ratenkoeffizienten einer DR-Resonanz bei 1 eV unter abgeflachter Maxwell-Boltzmann-Verteilung (---) mit einer Simulation (Abs. 3.3.4), die zusätzlich die Driftröhrensparnungsverteilung berücksichtigt (—). Dies führt zu einer deutlichen Reduktion des Ratenkoeffizienten im Zentralbereich der Resonanz bei gleichzeitigem Erscheinen starker Hochenergieflanken. In logarithmischer Darstellung (rechts) erkennt man, dass sich diese Flanken bis zu höchsten Energien erstrecken. In beiden Fällen wurden identische Strahltemperaturen ($T_{\parallel} = 200 \mu\text{eV}$, $T_{\perp} = 120 \text{ meV}$) verwendet.

geschieht dies zum einen, indem bei der Faltung von Wirkungsquerschnitten die Potentialverteilung im Bereich des Strahlüberlapps berücksichtigt wird (Abs. 3.3.4). Zum anderen wird die Reduktion des Ratenkoeffizienten im Zentralbereich der Resonanz durch die Einführung einer effektiven Wechselwirkungslänge L_{eff} kompensiert (Abs. 3.5.2). Es sei angemerkt, dass die Effekte der Driftröhrepotentialverteilung den RR-Ratenkoeffizienten ebenfalls stark betrifft.

3.5 Bestimmung des Ratenkoeffizienten

Wie in Abschnitt 1.2 beschrieben, entspricht der Ratenkoeffizient α dem über die Geschwindigkeitsverteilung gemittelten Produkt aus Geschwindigkeit und Wirkungsquerschnitt.

$$\alpha = \langle v \cdot \sigma \rangle$$

Experimentell lässt sich der Ratenkoeffizient aus der Detektorzählrate R , der Anzahl der im Ring zirkulierenden Ionen N_i , der Elektronendichte n_e und dem Quotient aus Länge der Wechselwirkungszone L und Speicherringumfang U bestimmen.

$$\alpha = \frac{1}{1 - \beta_e \beta_i} \frac{R}{N_i n_e L / U} \quad (3.19)$$

Dabei muss für hohe Geschwindigkeiten eine relativistische Korrektur $1/(1 - \beta_e \beta_i)$ berücksichtigt werden, die auf die relativistische Subtraktion von Geschwindigkeiten zurückgeht. Poth *et al.* [92] und Parkhomchuk [93] zeigen, wie die relativistische Geschwindigkeitsdifferenz und somit auch der obige, relativistische Korrekturfaktor in die Berechnung der Luminosität l eingeht, die ihrerseits über $R = l \cdot \sigma$ mit Rate und Wirkungsquerschnitt in Zusammenhang steht.

In der Vergangenheit wurde häufig [45, 80, 94–102] der relativistische Faktor $1/(1 - \beta_e \beta_i)$ durch die Näherung γ_i^2 ersetzt. Für die in nahezu allen Fällen bei sehr geringen Geschwindigkeitsdifferenzen ($\beta_e \approx \beta_i$) durchgeführten DR-Messungen ist diese Näherung korrekt. Bei hohen Relativenergien, wie sie u.a. durch Messung bei stochastischer Kühlung erreicht werden können (Abs. 2.4.1.3), gilt $\beta_e \not\approx \beta_i$. Entsprechend ist in diesem Fall auch die Näherung $1/(1 - \beta_e \beta_i) \approx \gamma_i^2$ nicht mehr zulässig und liefert falsche Ergebnisse.

Im Experiment werden Elektronen- und Ionenstrom (I_e bzw. I_i) bestimmt, woraus sich unter Verwendung von Elektronenstrahlradius ($r_e = 25.4$ mm), Ionenladungszustand (q) und Elektronen- bzw. Ionengeschwindigkeit ($v_e = \beta_e c$ bzw. $v_i = \beta_i c$) Elektronendichte und Ionenzahl über folgenden Zusammenhang ergeben:

$$n_e = \frac{I_e}{e \pi r_e^2 \beta_e c} \quad \text{bzw.} \quad N_i = \frac{I_i U}{q e \beta_i c} \quad (3.20)$$

Setzt man dies in Gleichung 3.19 ein, so erhält man:

$$\alpha = \frac{1}{1 - \beta_e \beta_i} \frac{q e^2 \beta_i \beta_e \pi r_e^2 c^2 R}{I_i I_e L} \quad (3.21)$$

bzw. (bei Ausdruck über die Elektronendichte)

$$\alpha = \frac{1}{1 - \beta_e \beta_i} \frac{q e \beta_i c R}{I_i n_e L} \quad (3.22)$$

3.5.1 Rekombinationsuntergrund durch Stöße mit Restgasmolekülen

Der Einfluss des Untergrundes lässt sich am besten an Energien bestimmen, bei denen RR- und DR-Ratenkoeffizient klein sind. Der RR-Wirkungsquerschnitt weist eine E^{-1} -Abhängigkeit auf (Gl. 1.25) und ist demzufolge erst für hohe Energien verschwindend klein. Des Weiteren zeigen DR-Resonanzen im Experiment ausgeprägte Verläufe hin zu hohen Energien, die auf die spezielle Situation innerhalb der Driftröhren zurückzuführen sind (Abs. 3.3.3). Beide Effekte sorgen dafür, dass die einzelnen Messbereiche nur sehr selten über Bereiche mit vernachlässigbarem DR-Ratenkoeffizient verfügen.

Um trotzdem eine Abschätzung des Untergrundes vornehmen zu können, wurde der RR für den Einfang in eine durch die Feldionisation (Abs. 1.3.5) begrenzte Hauptquantenzahl theoretisch ermittelt. Zusätzlich wurde ein Satz von Resonanzlagen und -stärken so an die Struktur einzelner Resonanzen angepasst, dass das sich hieraus ergebende simulierte Spektrum (Abs. 3.3.4) an den Resonanzpositionen möglichst gut mit dem experimentell bestimmten Spektrum übereinstimmt. An der Position der DR-Resonanzen selbst ist der relative Einfluss des Untergrundes auf die Rekombinationszählrate naturgemäß am geringsten. Entsprechend enthält das simulierte Spektrum nun die Summe aus RR- und DR-Ratenkoeffizient, während die Untergrundzählrate nicht enthalten ist. Die Subtraktion von simulierten und experimentellen Spektren führt zu einem Spektrum, in dem die Untergrundbeiträge dominieren. An diese Untergrundspektren jeder Messung wurde nun eine lineare Funktion angepasst, die den Untergrund beschreibt.

Der absolute, so ermittelte Untergrund kann sich von Messung zu Messung unterscheiden. Der Untergrundabzug sorgt dafür, dass die Ratenkoeffizienten von Messungen mit unterschiedlichem Untergrund wieder vergleichbar sind. Der höchste, relative Anteil des Untergrundes am Ratenkoeffizient tritt für hohe Relativenergien und entsprechend geringere Wirkungsquerschnitte der radiativen Rekombination außerhalb der Bereiche von DR-Resonanzen auf und beträgt in diesem Fall bis zu 50% des gemessenen Signals. Bei starken DR-Resonanzen sinkt der Anteil auf 10%. Bei schwachen DR-Resonanzen beträgt er immerhin noch 30%. Nimmt man für die Bestimmung des Untergrundes einen Fehler von $1/3$ an, so ergibt sich für den Ratenkoeffizienten im Bereich von DR-Resonanzen ein maximaler Fehler von 10%.

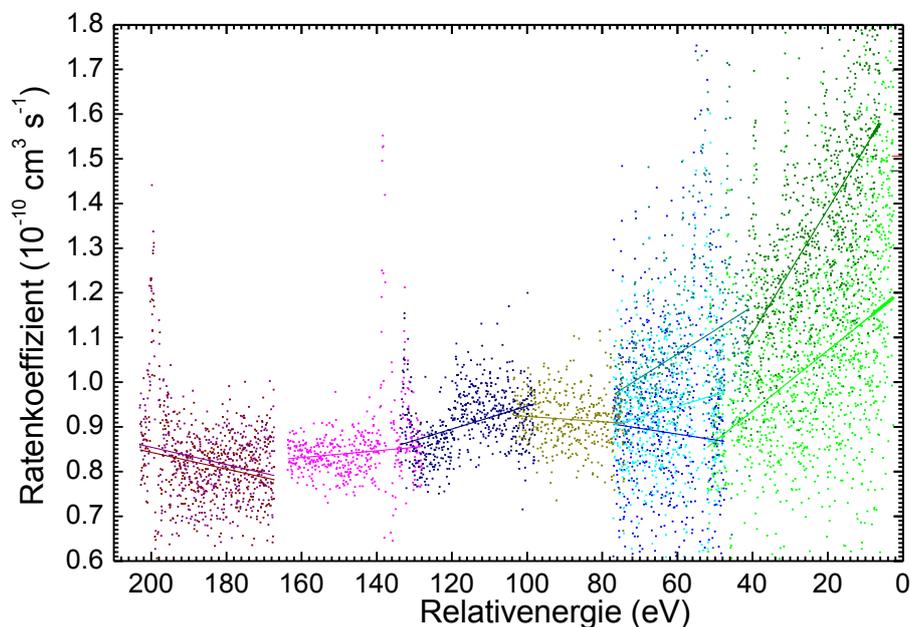
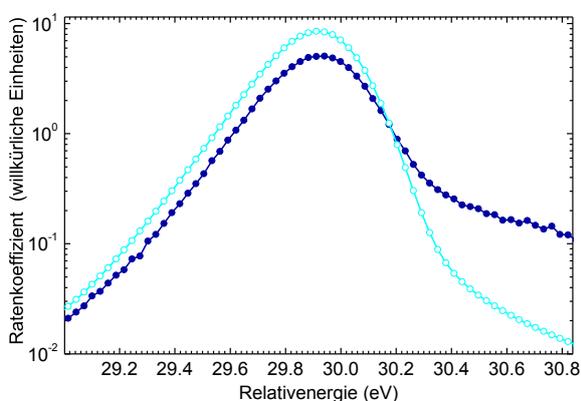


Abbildung 3.10: Bestimmung des Restgasuntergrundes (—) durch linearen Fit an die Differenz zwischen gemessenem und simuliertem Spektrum (·····) für verschiedene Messungen bei lithiumartigem Xenon

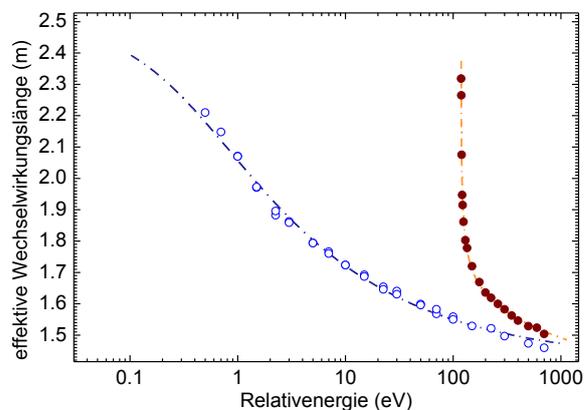
3.5.2 Effektive Wechselwirkungslänge

Der Strahlüberlapp zwischen Ionen- und Elektronenstrahl beträgt 2.5 m. Hiervon befinden sich allerdings nur 1.94 m innerhalb der Driftröhren, mittels derer die Energie variiert wird. Legt man im normalen Messmodus (Abs. 2.4.1) an die Driftröhren eine Spannung an, die einer Relativenergie von z.B. 50 eV entspricht, so beträgt die Relativenergie nur im Inneren, wie gewünscht, 50 eV. Außerhalb der Driftröhren sinkt das Potential auf 0 V ab. Dies entspricht einem Absinken der Relativenergie auf 0 eV. (Eine ausführliche Darstellung dieses Effektes findet sich in [59] Kapitel 4.1.2) Somit lassen sich zwei unterschiedliche Wechselwirkungslängen L und L_{eff} definieren. L ist dabei die reale Länge des Strahlüberlapps von 2.5 Meter, während L_{eff} jenen Anteil des Strahlüberlapps beschreibt, in dem die Relativenergie dem Wert innerhalb der Driftröhre entspricht.

Soll das Driftröhropotential mit einer absoluten Genauigkeit von z.B. ± 2 V erreicht werden, so erfolgt dies bei kleinen Potentialdifferenzen deutlich weiter außerhalb der Driftröhren als bei großen Potentialdifferenzen. Dieser Effekt wird noch dadurch verstärkt, dass eine Potentialdifferenz ΔU bei niedrigen Relativenergien einer deutlich geringeren Energiedifferenz ΔE entspricht als bei höheren Relativenergien (Abb. 3.1). Entsprechend verläuft die effektive Wechselwirkungslänge zwischen 2.5 m bei 0 eV Relativenergie und einem unterhalb der Driftröhrlänge liegenden Wert für hohe Relativenergien.



(a) Ratenkoeffizienten einer fiktiven Resonanz mit Stärke S und Lage E (30 eV) bei anisotroper Maxwell-Boltzmann-Verteilung der Elektronenenergie (\circ) und Experimentsimulation (\bullet)



(b) effektive Wechselwirkungslängen (L_{eff}) für verschiedene Resonanzenergien E_{Res} für normalen \circ und erweiterten Messmodus (\bullet) samt zugehörigen Fits $- \cdot -$ mit Kühlung bei $U_{\text{DR}} = 0$ bzw. -4100 eV.

Abbildung 3.11: Ermittlung der effektiven Wechselwirkungslänge L_{eff} aus den Quotienten der Integrale von simulierten experimentellen Resonanzen und anisotropen Maxwell-Boltzmann-Verteilungen für die verschiedenen Messmodi. Bei verschwindender Driftröhrenspannung ($U_{\text{DR}} = 0$ bzw. 119 eV) erreicht L_{eff} fast die Länge des Strahlüberlapps. Im erweiterten Messmodus ($- \cdot -$) wurden keine Messungen bei $U_{\text{DR}} < 0$ V bzw. $E < 119$ eV durchgeführt, weshalb auf eine Ermittlung entsprechender, effektiver Wechselwirkungslängen verzichtet wird.

Tabelle 3.2: Parametersätze des Fits der effektiven Wechselwirkungslänge nach Gl. 3.24.

Messmodus	L_{\min}	L_{\max}	E_0	P_1	c
Kühlen bei $U_{\text{DR}} \approx 0 \text{ V}$	1.414	2.5	0.0	0.7071	-0.3582
Kühlen bei $U_{\text{DR}} \approx -4100 \text{ V}$	1.224	2.5	118.7	0.8986	-0.1786

Um die effektive Wechselwirkungslänge zu quantifizieren, wird eine deltaförmige Resonanz einmal mit einer anisotropen Maxwell-Boltzmann-Verteilung (MBV) und zum anderen unter Berücksichtigung der vollständigen experimentellen Energieverteilung im Kühler – bei $L = 2.5$ Metern – gefaltet (Abb. 3.11(a)). Dieses Verfahren wird für verschiedene Resonanzpositionen E_{Res} durchgeführt. Durch die Berücksichtigung der Relativenergieverteilung wird ein signifikanter Teil der Resonanzstärke vom Zentralbereich der Resonanz in einen sehr flachen Verlauf zu hohen und höchsten Energien umverteilt. Somit wird der Ratenkoeffizient α_{sim} im Bereich der Resonanz erniedrigt und der Untergrund erhöht. $L_{\text{eff}}(E_{\text{Res}})$ wird nun so gewählt, dass dieser Parameter die experimentell bedingte Reduktion des Ratenkoeffizienten im Bereich der Resonanz $[a_{E_{\text{Res}}}, b_{E_{\text{Res}}}]$ über folgende Forderung kompensiert:

$$\frac{L}{L_{\text{eff}}(E_{\text{Res}})} \int_{a_{E_{\text{Res}}}}^{b_{E_{\text{Res}}}} \alpha_{\text{sim}}(E_{\text{Res}}, E) dE \stackrel{!}{=} \int_{a_{E_{\text{Res}}}}^{b_{E_{\text{Res}}}} \alpha_{\text{MBV}}(E_{\text{Res}}, E) dE \quad \forall E_{\text{Res}} \quad (3.23)$$

Die Resonanzgrenzen $a_{E_{\text{Res}}}$, $b_{E_{\text{Res}}}$ wurden so gewählt, dass 99% der Gesamtresonanzstärke der Maxwell-Boltzmann-Verteilung innerhalb dieser Grenzen liegen, d.h., dass $\int_a^b \alpha_{\text{MBV}}(E) dE \stackrel{!}{\approx} 0.99 \int_{-\infty}^{+\infty} \alpha_{\text{MBV}}(E) dE$ gilt und die Ratenkoeffizienten der MBV beider Grenzen näherungsweise identisch sind $\alpha_{\text{MBV}}(a) \approx \alpha_{\text{MBV}}(b)$.

Das oben beschriebene Verfahren wurde für Resonanzen verschiedener Energien E_{Res} und für beide Messmodi (Abs. 2.4.1 bzw. 2.4.1.2) durchgeführt. An die so gewonnenen, effektiven Wechselwirkungslängen $L_{\text{eff}}(E_{\text{Res}})$ lässt sich die folgende, energieabhängige Funktion mit einem für jeden Messmodus unterschiedlichen Parametersatz anpassen (Abb. 3.11(b)). Die sich dabei ergebenden Parametersätze finden sich in Tabelle 3.2.

$$L_{\text{eff}} = L_{\min} + P_1 \cdot \left(|E - E_0| + \sqrt[3]{\frac{L_{\max} - L_{\min}}{P_1}} \right)^c \quad (3.24)$$

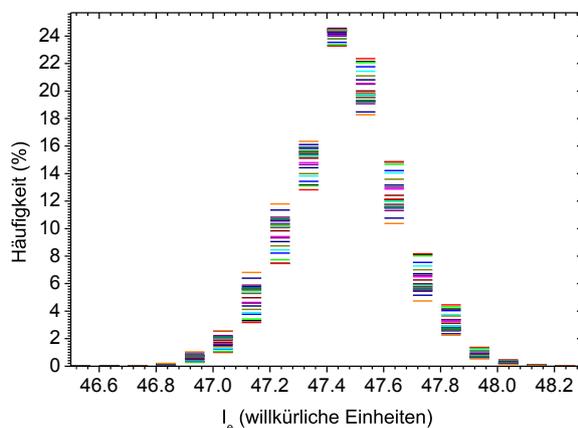
Aus dem Vergleich der gefitteten, effektiven Wechselwirkungslängen $L_{\text{eff}}(E)$ mit den ermittelten effektiven Wechselwirkungslängen einzelner Resonanzen $L_{\text{eff}}(E_{\text{Res}})$ kann der Fehler der so bestimmten effektiven Wechselwirkungslängen zu 4% abgeschätzt werden. Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass ein Vergleich zwischen Theorie und Experiment unter Nutzung des Simulationsprogramms und Faltung theoretischer Wirkungsquerschnitte mit experimentellen Bedingungen komplett ohne Berücksichtigung der effektiven Wechselwirkungslänge möglich ist. Eine ausführliche Darstellung der hier verwendeten Methode findet sich in [59] Abschnitt 4.1.3, wo diese Methode entwickelt wurde.

3.5.3 Elektronendichte

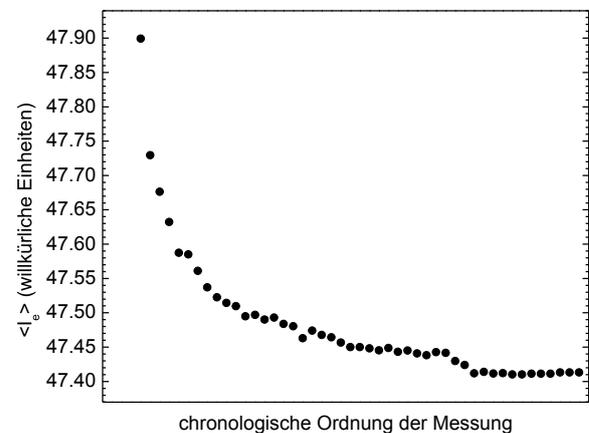
Im Falle einer homogenen Verteilung der Elektronen innerhalb des Elektronenstrahls hängt die Elektronendichte n_e über folgenden Zusammenhang vom Elektronenstrom I_e ab:

$$n_e = \frac{I_e}{e\pi R_e^2 v_e} \quad (3.25)$$

Aufgrund der kurzen Messzeit (6 ms) der einzelnen Ereignisse ist die Unsicherheit der zählerbasierenden Messung des Elektronenstroms deutlich größer als die reale Abweichung des Elektronenstroms vom eingestellten Sollwert. Aus diesem Grund wurde äquivalent zu [59] der Sollwert von 100 mA an Stelle des auf kurzer Zeitskala gemessenen Wertes verwendet. Die Häufigkeitsverteilung der Messergebnisse für einen fest vorgegebenen Sollwert (Abb. 3.12(a)) zeigt eine volle Halbwertsbreite (FWHM) von etwa 1% des Elektronenstromes. Gleichermäßen fällt über die Experimentierdauer eine zeitliche Drift von ebenfalls $\sim 1\%$ auf (Abb. 3.12(b)). Maßgeblich für die Unsicherheit der Elektronendichte ist aber letztlich nicht dieser Unterschied, sondern die räumliche Inhomogenität des Elektronenstrahls. Der in Gl. 3.25 aufgezeigte Zusammenhang zwischen Elektronenstrom und Elektronendichte gilt nur für homogene Elektronenverteilungen. Da die vom Radius des Ionenstrahls begrenzte Wechselwirkungszone einen deutlich geringeren Radius aufweist als der Elektronenstrahl, kann die mittlere Elektronendichte der Wechselwirkungszone von der mittleren Elektronendichte des Elektronenstrahls abweichen. Hierzu trägt insbesondere eine radiale Abhängigkeit der Elektronendichte bei. Dieser schwer bezifferbare Fehler wird konservativ zu 10% abgeschätzt.



(a) Häufigkeitsverteilung der gemessenen Elektronenströme für Messungen mit lithiumartigem Xe^{51+} . Die relative Halbwertsbreite $\Delta I_e/I_e$ beträgt 1%.



(b) Mittlere Elektronenströme verschiedener Messungen für Xe^{51+} und Xe^{50+} in chronologischer Ordnung. Im zeitlichen Verlauf ist ein Abfall von 1% festzustellen.

Abbildung 3.12: Untersuchung der gemessenen Elektronenströme, sowohl die volle Halbwertsbreite als auch die zeitliche Änderung betragen etwa 1% des mittleren Elektronenstroms.

3.5.4 Ionenstrom

Abschätzungen möglicher Fehler der Ionenstrommessung lassen sich am besten aus der Betrachtung von Messungen mit konstanten Bedingungen gewinnen. Da während der Messung des Spektrums Schritte unterschiedlicher Energie und somit unterschiedlicher Ratenkoeffizienten angefahren werden, bietet es sich nicht an, diese Messungen zur Bestimmung des Fehlers heran zu ziehen. Stattdessen werden die Kühlschritte verwendet. Diese werden im Wechsel zu den Messschritten angesteuert und zeichnen sich dadurch aus, dass ihre Relativenergie durch den Prozess der Kühlung selbst auf einen Wert von ~ 0 eV festgelegt ist. Entsprechend besitzt auch der Rekombinationswirkungsquerschnitt bei Kühlung für einen Ladungszustand immer dieselbe Größe. Man erwartet, dass die Zählrate bei Kühlung proportional zum Ionenstrom ist und demzufolge der Quotient aus Zählrate und Ionenstrom von diesem unabhängig sein sollte. Abb. 3.13(a) zeigt, dass dies nicht der Fall ist. Je niedriger der Ionenstrom, desto größer die Abweichung vom erwarteten konstanten Quotienten. Dies wird durch einen Ionenstromoffset verursacht. Der größte Teil dieses Offset wurde im Experiment bewusst eingestellt. Hintergrund ist, dass die Ionenstrommessung in eine – vorzeichenlose – Frequenz umgewandelt und von einem Zähler registriert wird. Bei niedrigen Ionenströmen könnten schon geringe absolute Messfehler zu negativen Ionenstrommessungen führen, die von der Elektronik nicht richtig verarbeitet würden. Die Zugabe eines Ionenstromoffsets beugt diesem Problem vor und verhindert gleichzeitig, dass Fehler der Ionenstrommessung für Messereignisse mit kleine Ionenströmen zu beliebig großen Ratenkoeffizienten führen.

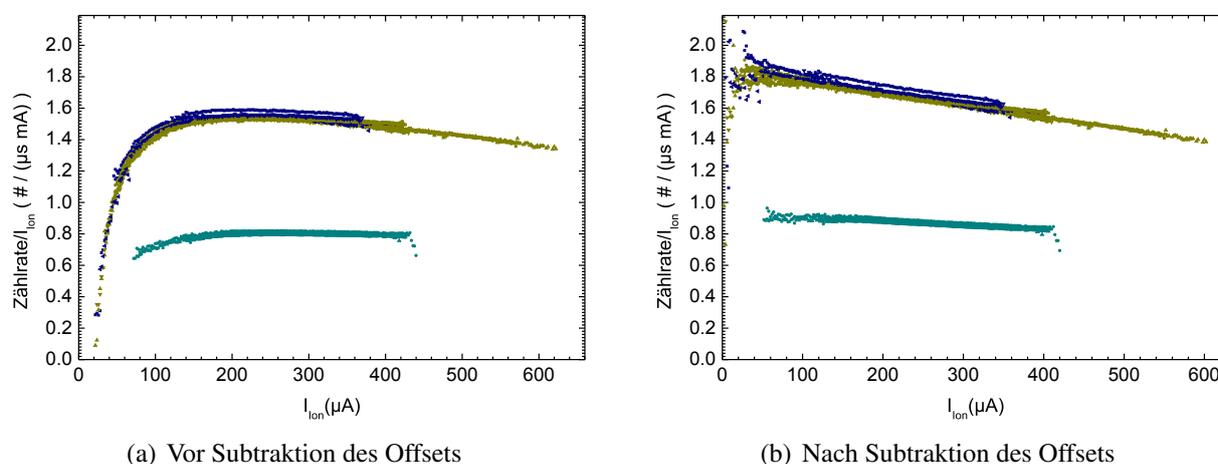


Abbildung 3.13: Quotient aus Zählrate und Ionenstrom während Kühlung für berylliumartiges Xe^{50+} vor bzw. nach Korrektur des Ionenstromoffsets von $20 \mu\text{A}$ für verschiedene Messungen. Im Gegensatz zum normalen Modus beträgt die Kühlenergie im erweiterten Messmodus (cyan Abs. 2.4.1.2) nur innerhalb der Driftröhren ~ 0 eV. Die außerhalb höhere Relativenergie, die in diesem Fall niedrigere Wirkungsquerschnitt und die somit kürzere effektive Wechselwirkungslänge sorgt für eine reduzierte Zählrate bei Kühlung.

Fordert man, dass die Korrektur des Offsets für niedrige Ionenströme die Abweichung vom linearen Verhalten beseitigt und nimmt für alle Messungen einen einheitlichen Ionenstromoffset an, so ergibt sich aus dieser Bedingung ein Ionenstromoffset von $20 \mu\text{A}$. Abb. 3.13(b) zeigt die Erfüllung der Forderung durch die Korrektur dieses Offsets. Das verbleibende, leichte Absinken mit steigendem Ionenstrom lässt sich auf die bei höherem Ionenstrom etwas schlechtere Kühlung zurückführen. Diese erhöht die Strahltemperatur und damit die Abweichung der Relativenergie von 0 leicht. Bei den somit angesteuerten, etwas höheren Relativenergien, ist der RR-Wirkungsquerschnitt etwas niedriger. Dies führt zu einer etwas niedrigeren Zählrate.

Zur Abschätzung des Fehlers wurde die in Abb. 3.13(a) zu beobachtende Abweichung für verschiedene, hierfür sensitive Messungen untersucht und der zur Korrektur nötige Offset über die Untersuchung der Ionenstromabhängigkeit der Zählrate bei Kühlung wie oben beschrieben ermittelt. Der erhaltene Offset liegt für alle hinreichend sensitiven Messungen im Bereich von $20 \mu\text{A} \pm 5 \mu\text{A}$. Mit wenigen Ausnahmen liegen die gemessenen Ionenströme zwischen 150 und $400 \mu\text{A}$ (Xe^{50+}) bzw. zwischen 300 und $750 \mu\text{A}$ (Xe^{51+}). Nimmt man einen Fehler des Ionenstromes von weniger als $10 \mu\text{A}$ an, so ergeben sich für die typischen Ionenströme relative Fehler von weniger als 7% .

3.5.5 Zählrate

Aus der Zahl der Rekombinationsereignisse N und der zugeordneten Messzeit t ergibt sich die Zählrate $R = N/t$. Zum Fehler der Zählrate R tragen verschiedene Faktoren bei:

Hier ist zuerst der statistische Fehler der Zahl der Detektorereignisse mit $\Delta N = \sqrt{N}$ zu nennen. Der hieraus resultierende Anteil des relativen Fehlers der Zählrate $\Delta N/N$ nimmt mit der Wurzel der Zahl der Detektorereignisse ab ($\propto 1/\sqrt{N}$). Es sei angemerkt, dass sich die in der weiteren Auswertung angegebenen statistischen Fehler einzelner Datenpunkte der Ratenkoeffizienten primär aus dieser Fehlerquelle über den Zusammenhang $\Delta\alpha = \alpha \cdot \Delta N/N$ ergeben.

Zweitens trägt die Detektoreffizienz von $100_{-5}^{+0}\%$ eine systematischen Unsicherheit von etwa 5% zum relativen Fehler der Zählrate bei. Des Weiteren sorgen Rekombinationen durch Stöße mit dem Restgas für einen zum Ionenstrom proportionalen Beitrag zur Zählrate, der von der Relativenergie unabhängig ist. Durch die spätere Normierung auf den Ionenstrom liefern die Stöße mit dem Restgas einen näherungsweise konstanten Beitrag zum Ratenkoeffizienten. Dieser wird teilweise durch den späteren Abzug eines konstanten Untergrundes des Ratenkoeffizienten kompensiert. Darüber hinaus besitzt das Detektionssystem eine gewisse, vom Ionenstrom unabhängige Dunkelzählrate, zu der z.B. das Rauschen der Elektronik beiträgt. Der relative Einfluss dieses Effekts ist bei ansonsten kleinen Zählraten entsprechend größer. Bedingt durch die spätere Normierung der Zählrate auf den Ionenstrom ist im Fall besonders kleiner Ionenströme der Einfluss der Dunkelzählrate überproportional groß, liefert also einen reziprok zum sinkenden Ionenstrom ansteigenden Beitrag zum Untergrund des Ratenkoeffizienten. Äußere Störeinflüsse auf die Elektronik können falsche, übergroße Zählratensignale verursachen, die als 'Spark' bezeichnet werden. Bedingt durch ihre hohe Zählrate können einzelne, seltene Sparks das Spektrum an den mit ihnen verbundenen Energiepositionen dominieren. Die im Vergleich zum Mittel anderer Ereignisse sehr viel höherer Zählrate erlaubt aber auch Ereignisse als Sparks zu identifizieren. In der vorgelegten Arbeit werden zur Identifikation zwei Methoden verwendet.

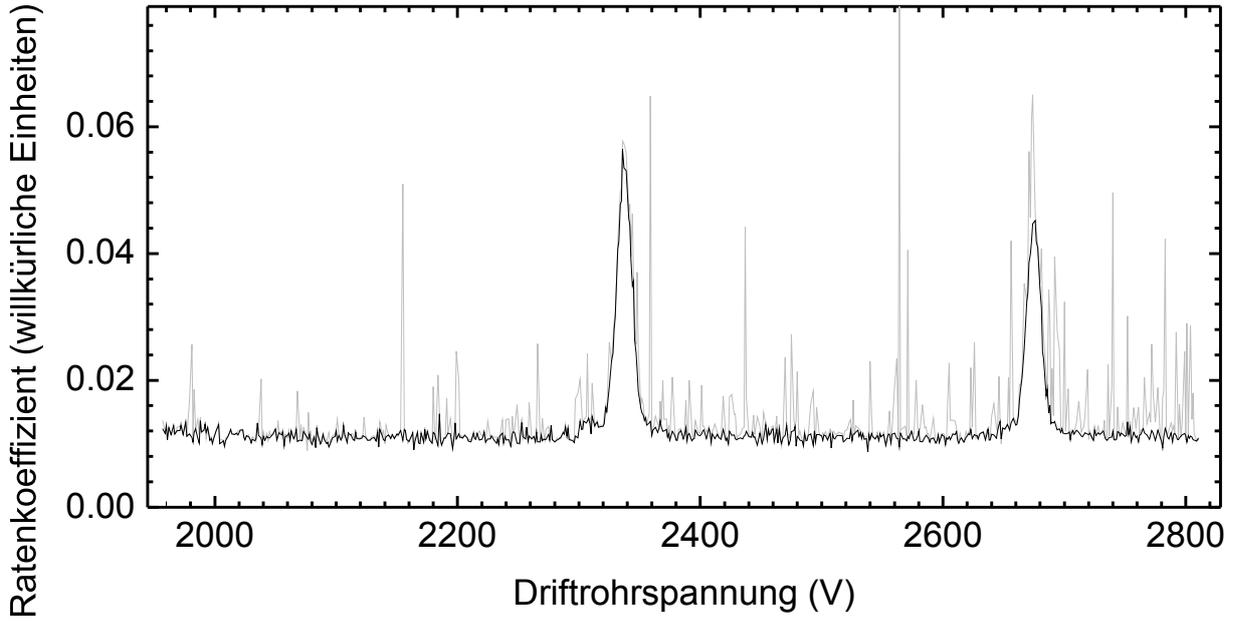


Abbildung 3.14: Ratenkoeffizientenspektrum eines besonders von Sparks betroffenen Spektrums ohne (grau) bzw. mit (schwarz) Nutzung robuster Methoden zur Ermittlung des Ratenkoeffizienten.

Der Ratenkoeffizient ist proportional zu dem Quotienten aus Zählrate und Ionenstrom. Für feste Relativenergien und damit fixe Ratenkoeffizienten weist die Häufigkeitsverteilung der Quotienten aus Zählrate und Ionenstrom aufgrund konstanter Elektronenströme eine verhältnismäßig enge Verteilung auf, die für abweichende Quotienten rasch auf Null abfällt. Treten im Experiment einzelne deutlich höhere Quotienten weit jenseits der dominanten Verteilung auf, so handelt es sich um Sparks, die nicht zur Bestimmung des Ratenkoeffizienten herangezogen werden sollten. Auch der Rückgriff auf robustere statistische Methoden erlaubt den Einfluss der Sparks drastisch zu reduzieren. Gegeben seien hier für die konstante Relativenergie E i_{\max} Messungen von u. a. Ionenstrom I_i , Messzeit t_i und Detektorrekombinationsereignissen N_i . Diese seien nach aufsteigendem Ratenkoeffizienten geordnet ($\frac{N_i}{I_i \cdot t_i} \leq \frac{N_{i+1}}{I_{i+1} \cdot t_{i+1}} \forall i \in [1, i_{\max}]$). Statt einer normalen Akkumulation der Ereignisse $\alpha(E) \propto \frac{\sum_{i=1}^{i_{\max}} N_i}{\sum_{i=1}^{i_{\max}} I_i \cdot t_i}$ wird hierbei ein robuster Mittelwert $\alpha'(E) \propto \frac{\sum_{i=2.5\% i_{\max}}^{97.5\% i_{\max}} N_i}{\sum_{i=2.5\% i_{\max}}^{97.5\% i_{\max}} I_i \cdot t_i}$ gebildet. Dieses Vorgehen schließt für jede Relativenergie E die Ereignisse mit den 2.5% niedrigsten und den 2.5% höchsten Ratenkoeffizienten aus. Da gleichermaßen die höchsten wie die niedrigsten Ratenkoeffizienten ausgeschlossen werden und der Ausschluss insgesamt nur einen kleinen Teil der Verteilung betrifft, gilt bei einer 'gutartigen' Verteilung ohne Sparks $\alpha(E) \approx \alpha'(E)$. Falls in den i_{\max} Ereignissen Sparks enthalten sind, gehen sie nicht in $\alpha'(E)$ ein. Somit handelt es sich bei α' um den von Einflüssen der Sparks befreiten Ratenkoeffizienten. Abb. 3.14 zeigt ein besonders von Sparks betroffenes Spektrum vor bzw. nach der Verwendung solcher Methoden zur Reduktion des Einflusses der Sparks. Gegenüber den Fehlern der Zahl der Detektorereignisse ist der Fehler der zur Normierung verwendeten Messzeit vernachlässigbar.

Letztlich wird der verbleibende systematische, relative Fehler der Zählrate aufgrund der Detektoreffizienz zu 5% abgeschätzt.

3.5.6 Gesamtfehler des Ratenkoeffizienten

Aus den in den vorangegangenen Abschnitten ausführlich diskutierten Fehlern der in die Berechnung des Ratenkoeffizienten α gemäß Gl. 3.21 eingehenden Größen x_i ergibt sich der Fehler des Ratenkoeffizienten wie folgt:

$$\Delta\alpha = \sqrt{\sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial\alpha}{\partial x_i} \Delta x_i \right)^2} \quad (3.26)$$

Dabei sind die relativen Fehler der Geschwindigkeiten $\beta_e \cdot c$ und $\beta_i \cdot c$ signifikant kleiner als die der anderen Einflussfaktoren. Entsprechend werden im Folgenden nur die Fehler von R (Abs. 3.5.5), I_i (Abs. 3.5.4), n_e (Abs. 3.5.3) und L_{eff} (Abs. 3.5.2) betrachtet. Entsprechend ergibt sich der relative Fehler des Ratenkoeffizienten ($\Delta\alpha/\alpha$) über das Fehlerfortpflanzungsgesetz und die oben ermittelten relativen Fehler der einzelnen Beiträge folgendermaßen:

$$\frac{\Delta\alpha}{\alpha} = \sqrt{\left(\frac{\Delta R}{R}\right)^2 + \left(\frac{\Delta I_i}{I_i}\right)^2 + \left(\frac{\Delta n_e}{n_e}\right)^2 + \left(\frac{\Delta L_{\text{eff}}}{L_{\text{eff}}}\right)^2} \quad (3.27)$$

$$= \sqrt{(5\%)^2 + (7\%)^2 + (10\%)^2 + (4\%)^2} = 14\%. \quad (3.28)$$

Berücksichtigt man zusätzlich einen maximal 10%-igen relativen systematischen Fehler der Bestimmung des Untergrundes im Bereich von DR-Resonanzen, so erhält man bei quadratischer Addition einen resultierenden relativen Fehler des Ratenkoeffizienten von **17%**.

4 Resultate

4.1 Lithiumartiges Xenon

Im Rahmen dieser Arbeit wurden die absoluten Ratenkoeffizienten der dielektronischen Rekombination lithiumartiger Xenonionen bei Relativenergien zwischen 0 und 500 eV untersucht. Die Messungen (Abb. 4.2) deckten alle Resonanzen der zwei existierenden Rydbergresonanzserien ab. Jede dieser beiden Resonanzserien ist einer der beiden möglichen Anregungen des 2s-Elektrons in den $2p_{1/2}$ - bzw. $2p_{3/2}$ -Zustand zugeordnet. Die Resonanzpositionen entsprechen näherungsweise der Differenz aus Anregungs- und Rydbergbindungsenergie (Gl. 1.28). Für höchste Rydbergzustände ($n \rightarrow \infty$) ergibt sich ein Häufungspunkt der Resonanzen bei der der Serie zugeordneten Anregungsenergie, welcher die Seriengrenze bildet. Wie in Abschnitt 1.3.5 beschrieben, fallen die gemessenen Ratenkoeffizienten bei Energien etwas unterhalb der Seriengrenze auf Null ab, da schwach gebundene, hohe Rydbergzustände vor Erreichen des Detektors in den Feldern der Magneten ionisiert werden.

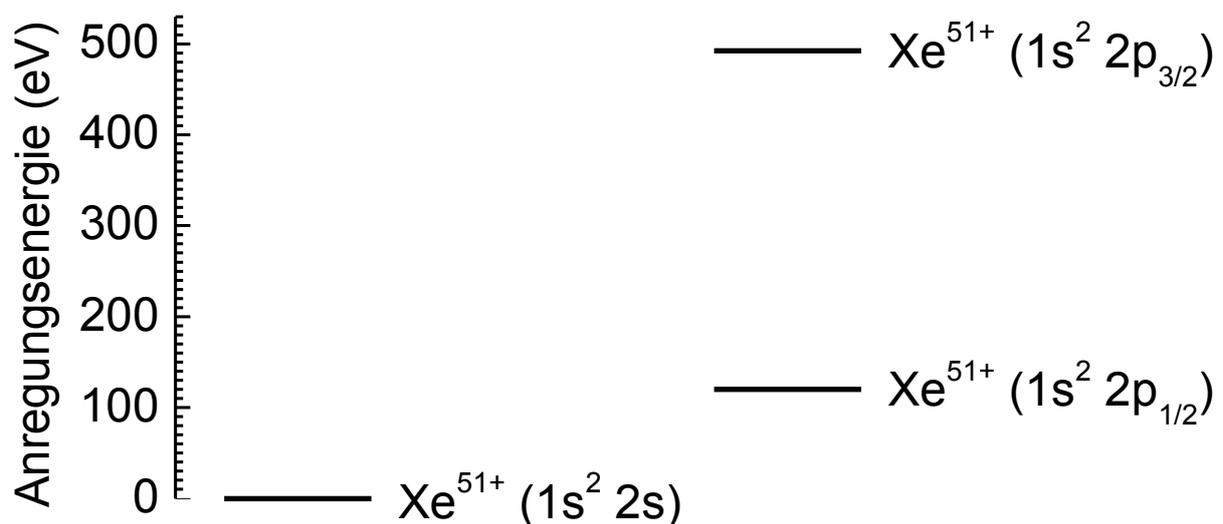


Abbildung 4.1: Termschema für lithiumartiges Xe^{51+} auf Basis von Literatur-Anregungsenergien [1, 60]

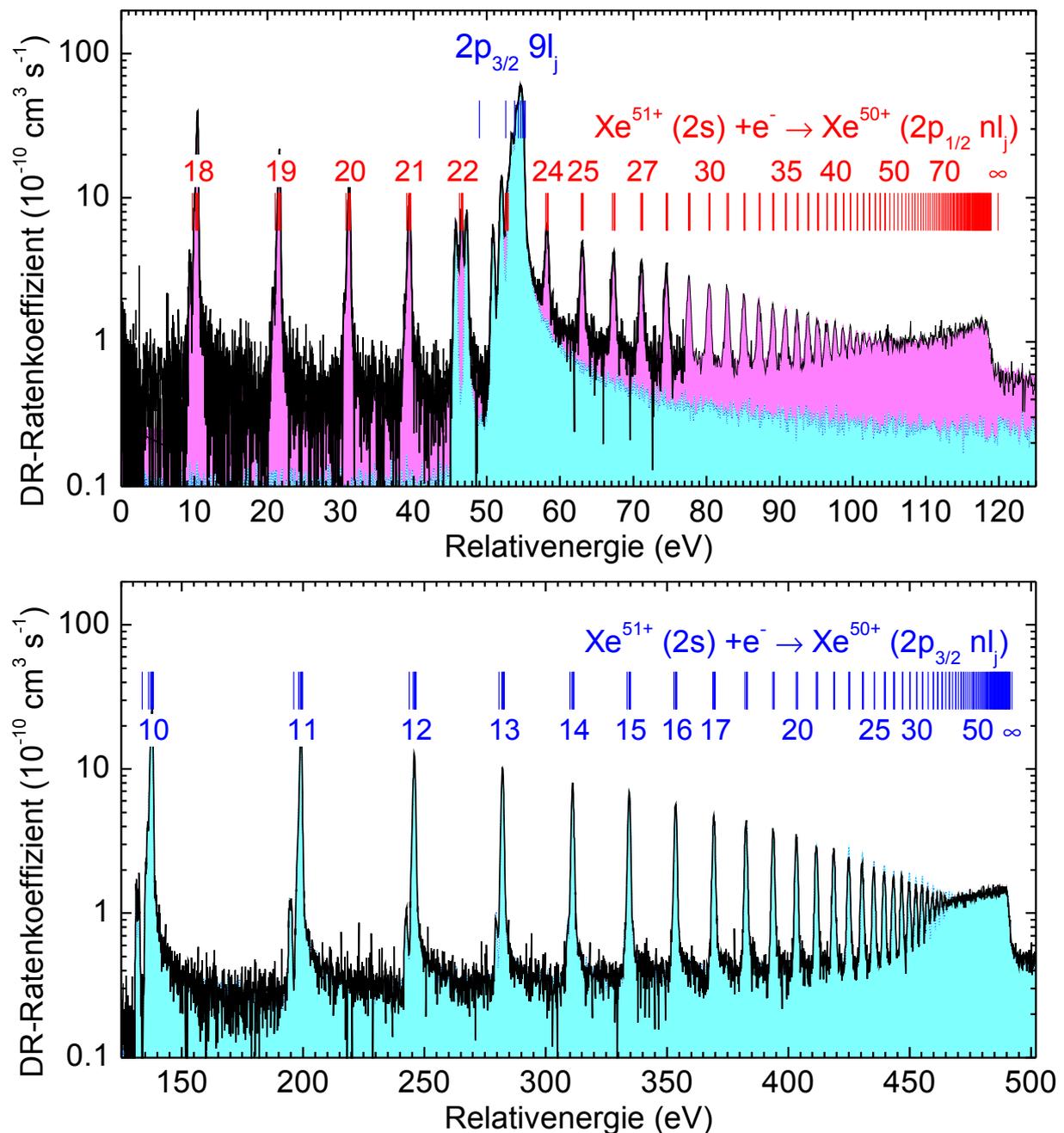


Abbildung 4.2: — Gemessene absolute DR-Ratenkoeffizienten lithiumartiger Xenonionen nach Abzug des radiativen Untergrundes mit vollständigen $(2s + e^- \rightarrow 2p_{1/2} nl_j)$ - und $(2s + e^- \rightarrow 2p_{3/2} nl_j)$ -Rydbergresonanzserien; Resultate für normalen (oben) und erweitertem (unten) Messbereich (Abs. 2.4.1.2); Flächig die (simulierten) separierten Beiträge beider Serien (berechnet siehe Abschnitt 4.1.6); Resonanzpositionen (I bzw. I) nach Gleichung 1.28 unter Verwendung von Anregungsenergien [1, 60] und Diracbindungsenergien (Gl. 1.4) bei $Z_{\text{eff}} = 51$.

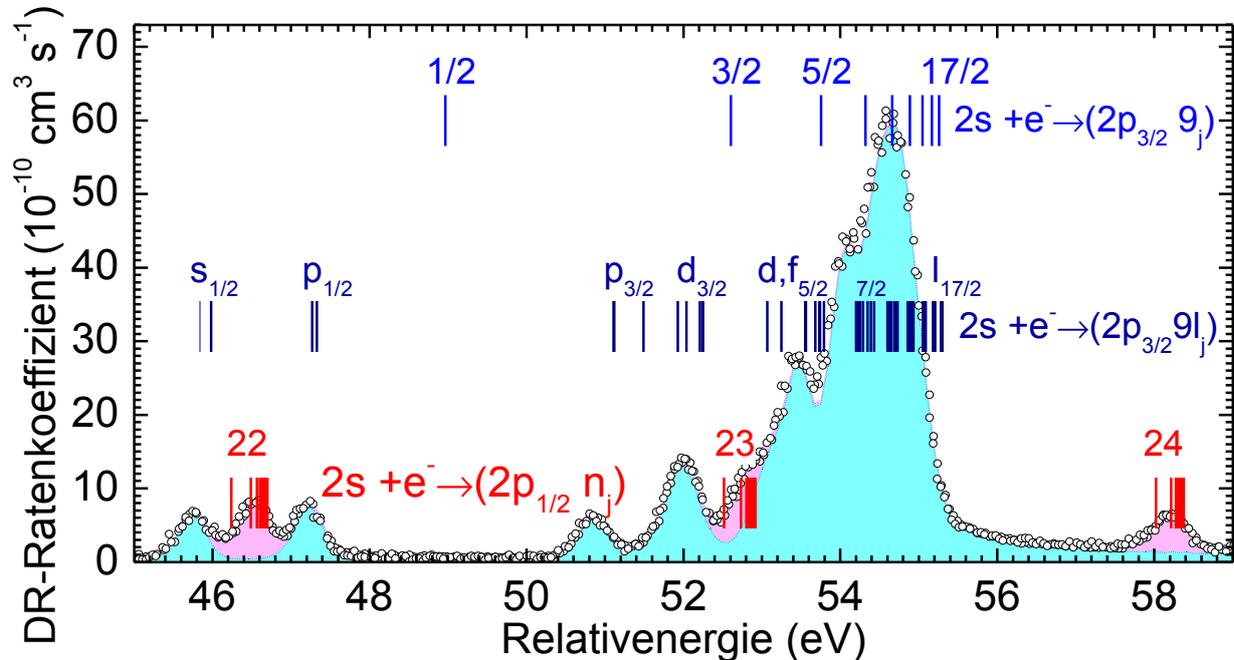
4.1.1 $2p_{3/2} 9l_j$ -Resonanzgruppe

Abbildung 4.3: Absoluter DR-Ratenkoeffizient lithiumartiger Xenonionen bei Relativenergien von 44 bis 59 eV. Resonanzen der $(2s + e^- \rightarrow 2p_{3/2} 9l_j)$ -Resonanzgruppe sind durch helle/cyanfarbene flächige Darstellung hervorgehoben. Dunkel/magentafarben hervorgehoben wurden Resonanzen der $(2s + e^- \rightarrow 2p_{1/2} n)$ -Resonanzserie. Resonanzpositionen (l, l bzw. l) aus Literatur-Anregungsenergien [1, 60] und wasserstoffartiger Näherung der Rydbergbindungsenergien (obere und untere Serie siehe Gl. 1.4). Für die mittigen Resonanzpositionen wurde die Bindungsenergie der Rydbergelektronen mittels des LANL [103–105] Programmpaketes berechnet, wobei zusätzlich die Kopplung beider Elektronen berücksichtigt wird. Zu Fehlern siehe Abschnitt 3.2.2 bzw. 3.5.6. Weitere Erläuterungen siehe Text.

Exemplarisch für die meisten Resonanzgruppen der $\Delta n = 0$ -DR bei lithiumartigem Xenon ist in Abb. 4.3 die Struktur der $(2s + e^- \rightarrow 2p_{3/2} 9l_j)$ -Resonanzgruppe dargestellt. Gegenüber der aus Literaturanregungsenergien [60] bei Annahme einer wasserstoffartigen Bindungsenergie des Rydbergelektrons (Abs. 1.1.4) erhaltenen Näherung, weist die experimentell bestimmte Resonanzgruppe eine höhere Feinstrukturaufspaltung auf. Diese ist primär durch die – bei Rydbergelektronen niedrigen Gesamtdrehimpuls – verminderte partielle Abschirmung der Kernladung durch die Rumpfelektronen zu erklären. Mit zunehmendem Gesamtdrehimpuls j liegen die einzelnen Resonanzen immer dichter beieinander. Somit formen die nicht separat auflösbaren Resonanzen einen gemeinsamen Peak, der den größten Teil der Stärke der Resonanzgruppe in sich vereint. Für die $p_{3/2} 9l_{1/2}$ -Resonanz ist aufgrund des unterschiedlichen Drehimpulses l eine Aufspaltung in die Resonanzen $p_{3/2} 9s_{1/2}$ und $p_{3/2} 9p_{1/2}$ zu erkennen. Eine ähnliche Aufspaltung ist auch für die $2p_{3/2} 9l_{3/2}$ -Resonanz zu erkennen, doch spielt hier auch die Elektron-Elektron-

Wechselwirkung eine größere Rolle. Mittig in Abb. 4.3 sind Positionen der $(2p_{3/2} 9l_j)^{2s+1}L_J$ -Resonanzen gemäß Gleichung 1.28 dargestellt. Hierbei wurden die Rydbergbindungsenergien mit dem LANL-Programmpaket [103–105] berechnet. Für die $(2s - 2p_{3/2})$ -Anregungsenergien wurden an Stelle berechneter Werte die deutlich präziseren experimentellen Werte von Martin *et al.* [60] verwendet. Wie man sieht, stimmen die so berechneten Resonanzpositionen sehr gut mit den gemessenen Resonanzlagen überein.

4.1.2 Bestimmung von Seriegrenzen – Methodik

In diesem Abschnitt soll die im Rahmen dieser Arbeit verwendete Methodik zur Bestimmung von Seriegrenzen vorgestellt werden. Mit ihr gewonnene Seriegrenzen werden in den Abschnitten 4.1.3, 4.1.4 und 4.2.2 ausführlich diskutiert.

Die energetische Position jeder DR-Resonanz hängt über Gleichung 1.28 von der Anregungsenergie der zugeordneten Serie ab. Demzufolge lässt sich aus jeder Resonanzenergie $E_e(n)$ bei Kenntnis der Bindungsenergie $E_B(n)$ die Anregungsenergie E_{ex} über die folgende Formel berechnen:

$$E_{ex} = E_e(n) + E_B(n) \quad (4.1)$$

Die simultane Bestimmung der Anregungsenergie aus verschiedenen Resonanzen verringert die Fehler signifikant. Eine ausführliche Beschreibung dieser Methode geben Braundau *et al.* [10]. Ihnen gelang unter Verwendung von Multikonfigurations-Dirac-Fock-DR-Rechnungen für die 'Form' der Resonanzgruppen die Bestimmung der $(2s-2p_{1/2})$ -Lamb-Verschiebung für Au^{76+} , Pb^{79+} und U^{89+} zu 216.134(96), 230.650(81) bzw. 280.516(99) eV. Dies entspricht relativen Fehlern von von $4.4 \cdot 10^{-4}$ für Au^{76+} bzw. $3.5 \cdot 10^{-4}$ für Pb^{79+} und U^{89+} . Grundsätzlich lässt sich mit dieser Methode aus jeder Rydbergresonanzserie die zugeordnete Anregungsenergie bestimmen. Die Ermittlung der Anregungsenergie aus der Resonanzlage erfordert eine möglichst genaue Kenntnis der Bindungsenergie der Resonanzgruppe. Dabei spiegelt sich die Feinstrukturaufspaltung der Rydbergzustände (Abbildung 4.4 und Abschnitt 4.1.1) in der Struktur der Resonanzen. Mit Ausnahme der Fälle besonders niedriger Rydbergzustände und niedriger Gesamtdrehimpulse lassen sich einzelne Feinstrukturkomponenten der Rydbergresonanzen nicht auflösen. Für den in der Regel schon nicht mehr aufgelösten $j=5/2$ -Zustand beträgt die reine Dirac-Feinstrukturaufspaltung zwischen 20 meV ($n \sim 45$) und einem eV ($n=9$). Demzufolge wird die Energie des nicht mehr separat aufgelösten Teils der Resonanzgruppe mit hohen Gesamtdrehimpulsen ($j > j_{Grenz}$) von der verbleibenden Feinstrukturaufspaltung immer noch in signifikantem Umfang beeinflusst. Entsprechend erfordert die Ermittlung der Anregungsenergie E_{ex} aus der Energie des Schwerpunktes der Resonanzgruppe $E_e(n)$ (Abs. 4.1.6) eine genaue Kenntnis der mittleren Bindungsenergie $E_B(n)$, die man als Mittelung über die mit den Resonanzstärken $S(n, j)$ gewichteten Feinstrukturbindungsenergien $E_B(n, j)$ gemäß folgender Formel erhält:

$$E_B(n) = \frac{\sum_{j=1/2}^{j=n-1/2} E_B(n, j) \cdot S(n, j)}{\sum_{j=1/2}^{j=n-1/2} S(n, j)} \quad (4.2)$$

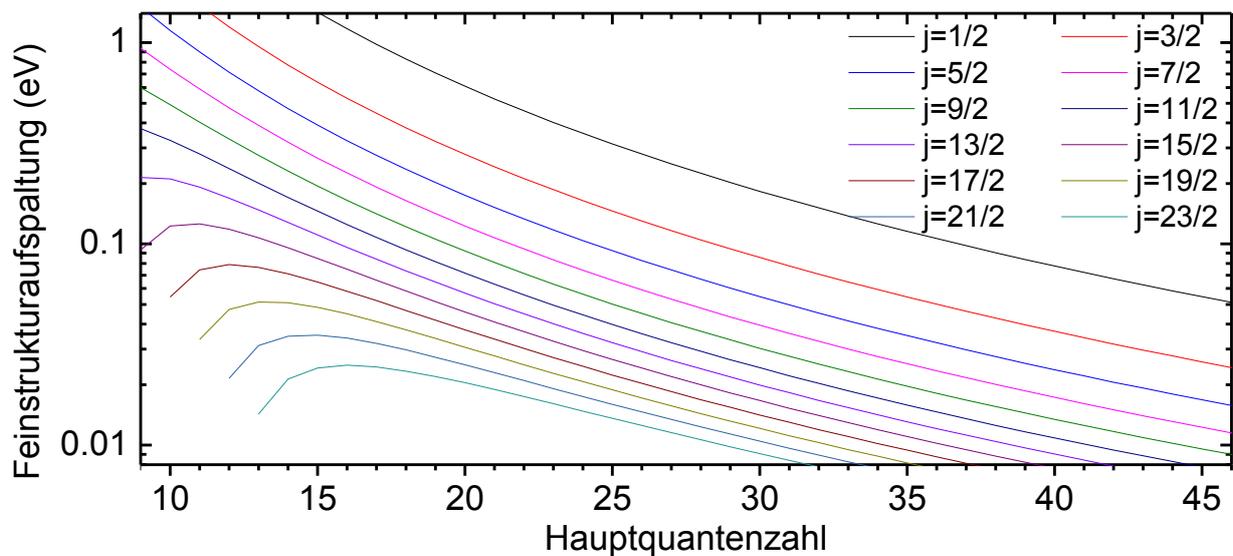


Abbildung 4.4: Feinstrukturaufspaltung ($E_{\text{Dirac}}(n, j, Z_{\text{eff}}) - E_{\text{Dirac}}(n, n-1/2, Z_{\text{eff}})$) der verschiedenen Feinstrukturkomponenten einer Rydbergresonanz in Abhängigkeit von der Hauptquantenzahl in Diracnäherung (Gl. 1.4) für $Z_{\text{eff}} = 51$. Die Aufspaltung ist für niedrigere Gesamtdrehimpulse relativ groß, für höhere hingegen signifikant kleiner. Die Wechselwirkung zwischen Rydberg- und Rumpfelektron führt zu einer weiteren Aufspaltung. Die Stärke der Wechselwirkung hängt vom Überlapp der Wellenfunktionen ab und nimmt mit steigender Hauptquantenzahl des Rydbergzustands ab.

Bedingt durch die fehlende Auflösung einzelner Feinstrukturkomponenten erfordert die Berechnung der mittleren Bindungsenergie einer Resonanzgruppe ($E_B(n)$) die Verwendung theoretischer Daten zur Resonanzstärke der Unterzustände ($S(n, j)$) und ist somit nicht theorieunabhängig.

Stattdessen wurde ein Verfahren gewählt, das den Einfluss der Feinstrukturaufspaltung der Rydbergzustände auf die Bestimmung der Seriegrenze minimiert. Wie man Abbildung 4.4 bzw. Gleichung 1.4 entnehmen kann, ist die Dirac-Feinstrukturaufspaltung bei niedrigem j überproportional stärker als bei hohem j . Dieser Effekt wird noch dadurch verstärkt, dass Rydbergelektronen mit niedrigem Gesamtdrehimpuls eine deutlich höhere Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Kernnähe haben. Dies führt zu einer geringeren Abschirmung der Kernladung durch die Rumpfelektronen und damit zu einer Erhöhung der effektiven Kernladungszahl Z_{eff} . Gegenüber der Dirac Näherung hat dies eine anwachsende Bindungsenergie niedriger Feinstrukturkomponenten und somit eine Reduktion der Relativenergien ihrer DR-Resonanzen gemäß Gleichung 1.28 zur Folge (Abs. 4.1.1). Bedingt durch die geringere Relativenergie beeinflussen die Teilresonanzen niedriger Feinstrukturkomponenten primär die Niederenergieflanke der jeweils betrachteten Rydbergresonanzgruppe. Entsprechend ist die Hochenergieflanke einer Resonanzgruppe sehr viel weniger von der Feinstrukturaufspaltung beeinflusst als die Niederenergieflanke, so dass sich eine Bestimmung der Seriegrenze eher auf den erstgenannten Teil der Resonanz beziehen sollte.

Zur Feststellung der Anregungsenergie $E^{g \rightarrow k}$ wurden die Driftrohrspannungen der Hochenergieflanken ($U_{HF}^{g \rightarrow k}(n)$) der zugeordneten Rydbergresonanzen n bestimmt. Explizit wurde hierbei

die Spannung des Abfalls des Ratenkoeffizienten auf die Hälfte des Maximalwertes gewählt. Hieraus wurde mittels der Kalibrationsparameter (Abs. 3.2.1) die Position der Hochenergieflanke $E_{HF}^{g \rightarrow k}$ im Schwerpunktssystem ermittelt. Anschließend wurde die sich aus den Bedingungen des Experimentes (primär der Elektronenstrahltemperatur) ergebende energieabhängige Verschiebung der Hochenergieflanke einer deltaförmigen Resonanz gegenüber der Resonanzposition (E_{\rightarrow}) korrigiert (Gl. 3.10). Mit Hilfe dieser Korrektur konnte aus der Position der rechten Flanke $E_{HF}^{g \rightarrow k}$ eine 'Resonanzlage' bestimmt werden, die von den Feinstrukturkomponenten niedrigen Gesamtdrehimpulses deutlich weniger beeinflusst ist als der Schwerpunkt der Resonanz. Nun wird zu der Lage der Rydbergresonanz des Zustands n der Mittelwert $\langle E_B(n) \rangle$ der Dirac-Bindungsenergien ($E_D(n, j, Z_{\text{eff}})$) addiert:

$$E^{g \rightarrow k} = \left(E_{HF}^{g \rightarrow k}(U_F(n), P_0, \dots, P_4) - E_{\rightarrow} \right) + |\langle E_B(n) \rangle| \quad (4.3)$$

Dabei werden bei der Bestimmung von $\langle E_B(n) \rangle$ nur jene Unterzustände des 'Gesamtdrehimpulses' des Rydbergelektrons $j \geq j_{\min}$ berücksichtigt, die von der Bindungsenergie des höchsten j ($j_{\max} = n - 1/2$) nicht deutlich mehr als um die Größenordnung der experimentellen Resonanzbreite abweichen.

$$\langle E_B(n) \rangle = \frac{\sum_{j=j_{\min}}^{j=j_{\max}} E_D(n, j, Z_{\text{eff}})}{j_{\max} - j_{\min} + 1} \quad (4.4)$$

Zur Beschränkung der zu berücksichtigten Feinstrukturkomponenten wird der Parameter $m^{g \rightarrow k}$ eingeführt.

$$j_{\min} = \min j \text{ mit: } |E_D(n, j, Z_{\text{eff}}) - E_D(n, j_{\max}, Z_{\text{eff}})| < \frac{m^{g \rightarrow k}}{2} \cdot FWHM(E_{\text{Res}}(n)) \quad (4.5)$$

Die kombinierte Analyse einer Vielzahl von Resonanzen reduziert die Unsicherheit der anzupassenden Parameter P_i , $m^{g \rightarrow k}$ und Anregungsenergien $E_{g \rightarrow k}$ beträchtlich. Letztlich erhält man hieraus einen Wert für die Anregungsenergie $E^{g \rightarrow k}$, der von den mit größeren Unsicherheiten behafteten Feinstrukturkomponenten niedriger Gesamtdrehimpulse weitestgehend unabhängig ist.

4.1.2.1 Fitergebnisse

Die obige Anpassung wurde für die im Rahmen dieser Arbeit untersuchte Resonanzserien bei lithium- $[(2s-2p_{1/2} n), (2s-2p_{3/2} n)]$ und berylliumartigen Xenonionen $[(2s^2 \ ^1S_0 - 2s2p \ ^3P_1)n, (2s^2 \ ^1S_0 - 2s2p \ ^3P_2 n), (2s^2 \ ^1S_0 - 2s2p \ ^1P_1)n]$ gemeinsam durchgeführt. Die Ergebnisse des Fits sind in Tab. 4.1 dokumentiert. Die Diskussion der Seriengrenzen erfolgt in den Abschnitten 4.1.3, 4.1.4 und 4.2.2.

4.1.2.2 Fehlerabschätzung – Methodik

Die Unsicherheiten einer so bestimmten Seriengrenze setzen sich maßgeblich aus zwei Komponenten zusammen:

1. Position der Hochenergieflanken.

Dieser Fehler beträgt in der Regel ein bis zwei eV im Laborsystem und besitzt sowohl eine statistische als auch eine systematische Komponente. Erstere beruht auf statistischen Fehlern der Ratenkoeffizienten und zufallsverteilten Ablesefehlern. Der Zweite folgt aus der nur unzureichend möglichen Trennung der Resonanz vom Untergrund sowie systematischen Ablesefehlern und systematischen Fehlern der Korrektur der experimentellen Verschiebung der Resonanzen (Abb. 3.2(b)). Aus den Fehlern im Laborsystem von 1-2 eV ergeben sich über die in Abschnitt 3.2 beschriebene Transformation (Abb. 3.1) die deutlich geringeren Fehler im Relativsystem. Aufgrund der Nichtlinearität der Transformation fallen die Fehler im Relativsystem umso kleiner aus, je kleiner die Relativenergien der zugeordneten Resonanzen sind. Die n zur Bestimmung einer Seriegrenze herangezogenen Einzelresonanzen befinden sich bei sehr unterschiedlichen Energien und haben demzufolge im Relativenergiesystem deutlich unterschiedliche Fehler.

Für eine konservative Abschätzung des Fehlers werden die Fehler im Relativenergiesystem als systematisch angenommen und ihr Mittelwert als Komponente des systematischen Fehlers der Seriegrenze verwendet.

2. Mittlere Bindungsenergien der Rydbergresonanzgruppe.

Dieser Fehler ist systematischen Ursprungs. Er wird durch Vergleich verschiedener, möglicher Grenzen der Mittelung der Feinstrukturkomponenten für einzelne Resonanzen abgeschätzt. Auch hier verfügen die verschiedenen Rydbergresonanzen aufgrund der Abhängigkeit der Feinstrukturaufspaltung von der Hauptquantenzahl (Abb. 4.4) über deutlich unterschiedliche Unsicherheiten in der Bestimmung ihrer Bindungsenergie. Der Mittelwert der so abgeschätzten Fehler der Resonanzen einer Serie wird als Komponente des systematischen Fehlers der Seriegrenze genutzt.

Die für jede Serie leicht unterschiedlichen Resultate dieser Fehlerabschätzung finden sich in den die verschiedenen Aufspaltungen behandelnden Abschnitten 4.1.3, 4.1.4 und 4.2.2.

Tabelle 4.1: Fitergebnisse der kombinierten Bestimmung von Seriegrenzen in lithium- und berylliumartigem Xenon. Angegeben sind für jede Serie der zur Begrenzung des Einflusses niedriger Feinstrukturkomponenten eingeführte Parameter m (siehe Text) sowie die Seriegrenze E samt in Klammern angegebenen auf die letzten zählenden Stellen bezogenen Fitfehlern. Diese Fehler beinhalten noch nicht die dominanten, in Abs. 4.1.2.2 diskutierten, systematischen Fehler.

Serie (k):	$2p_{1/2} n$	$2p_{3/2}$	$2s2p \ ^3P_1 n$	$2s2p \ ^3P_2$	$2s2p \ ^1P_1$
Z_{eff}	51	51	50	50	50
E_k [eV]	119.793(5)	492.188(12)	127.262(5)	469.010(54)	532.800(2)
$m^{g \rightarrow k}$	1.5	3	1.5	3	3

4.1.3 $2s-2p_{1/2}$ -Aufspaltung

Wie in Abb. 4.5 dokumentiert, konnte mit dem oben beschriebenen Verfahren die $(2s-2p_{1/2})$ -Aufspaltung in Xenon zu 119.793 ± 0.056 eV ermittelt werden. Maßgebliche Fehlerquelle ist die Bestimmung der Hochenergieflanken der Resonanz mit 56 meV. Die Verteilung der Resonanzstärken der Feinstrukturkomponenten mit höherem Gesamtdrehimpuls trägt zum Fehler mit 5 meV bei. Die Ermittlung beider Fehlerquellen wurde ausführlich in Abschnitt 4.1.2.2 erläutert.

Einen Überblick über bisherige experimentelle und theoretische Arbeiten zur $(2s-2p_{1/2})$ -Übergangsenergie in lithiumartigem Xenon gibt Abbildung 4.6. Die theoretische Arbeit von Kozhedub *et al.* [33] basiert auf der „large-scale configuration-interaction Dirac-Fock-Sturm“-Methode (CI-DFS) von Tupitsyn *et al.* [123] und enthält im Unterschied zu den meisten anderen theoretischen Beschreibungen (siehe Tab. 4.2) eine Fehlerabschätzung, weshalb sie hier als exemplarisches Beispiel herangezogen wurde. Für Xe^{51+} kommt Kozhedub zu einer $(2s-2p_{1/2})$ -Übergangsenergie von 119.831 ± 0.006 eV, die sich aus den folgenden Beiträgen zusammensetzt: 126.1471 ± 0.0031 eV (elektronische Struktur, hierin enthalten sind Diracenergien, endliche Kernaussdehnung sowie Ein- und Mehrphotonenwechselwirkung); -6.6851 eV (Selbstenergie und Vakuumpolarisation); 0.3773 ± 0.0032 eV (abgeschirmte QED); -0.0257 eV (Rückstoß); 0.0175 ± 0.0040 eV (QED Beiträge zweiter Ordnung SEVP, VPVP, S(VP)E) (Siehe auch Abschnitte 1.1.1.2 und 1.1.2.1 bzw. [33]). Abbildung 4.7 zeigt die Größe der verschiedenen Beiträge samt ihrer Unsicherheiten im Vergleich zu verschiedenen Messungen bei unterschiedlichen

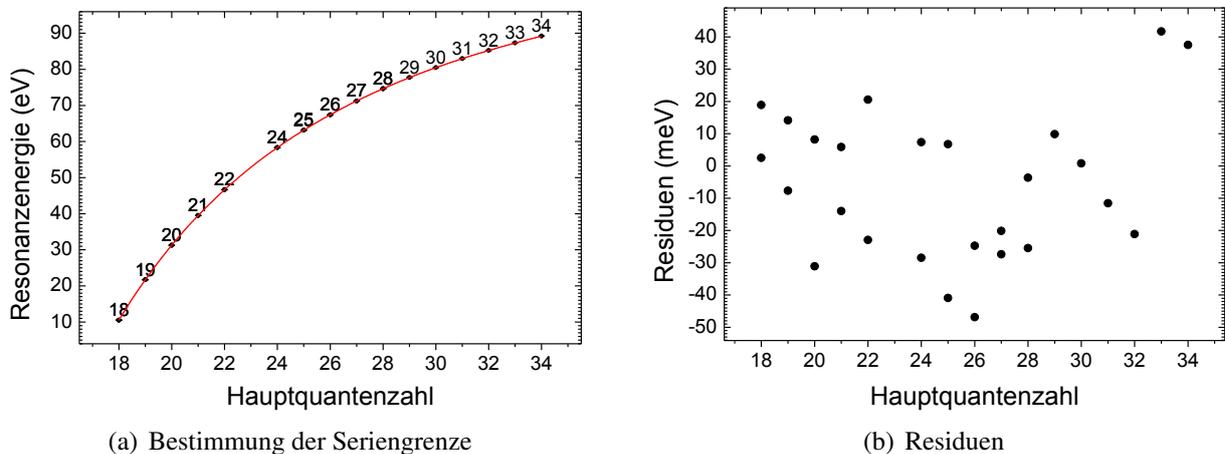


Abbildung 4.5: (a) Bestimmung der $(2s-2p_{1/2})$ -Aufspaltung in lithiumartigem Xenon durch Fit (—) der Seriengrenze nach Gleichung 4.3 an die aus Hochenergiepeakflanken und experimentellen Resonanzbreiten gewonnenen 'Resonanzpositionen' • zu 119.793 ± 0.056 eV. Die $2p_{1/2}$ 23-Resonanz wird von der stärkeren $2p_{3/2}$ 9_j -Resonanzgruppe (Abb. 4.3) überlagert. Abbildung (b) zeigt die verbleibenden, von systematischen Fehlern dominierten Residuen.

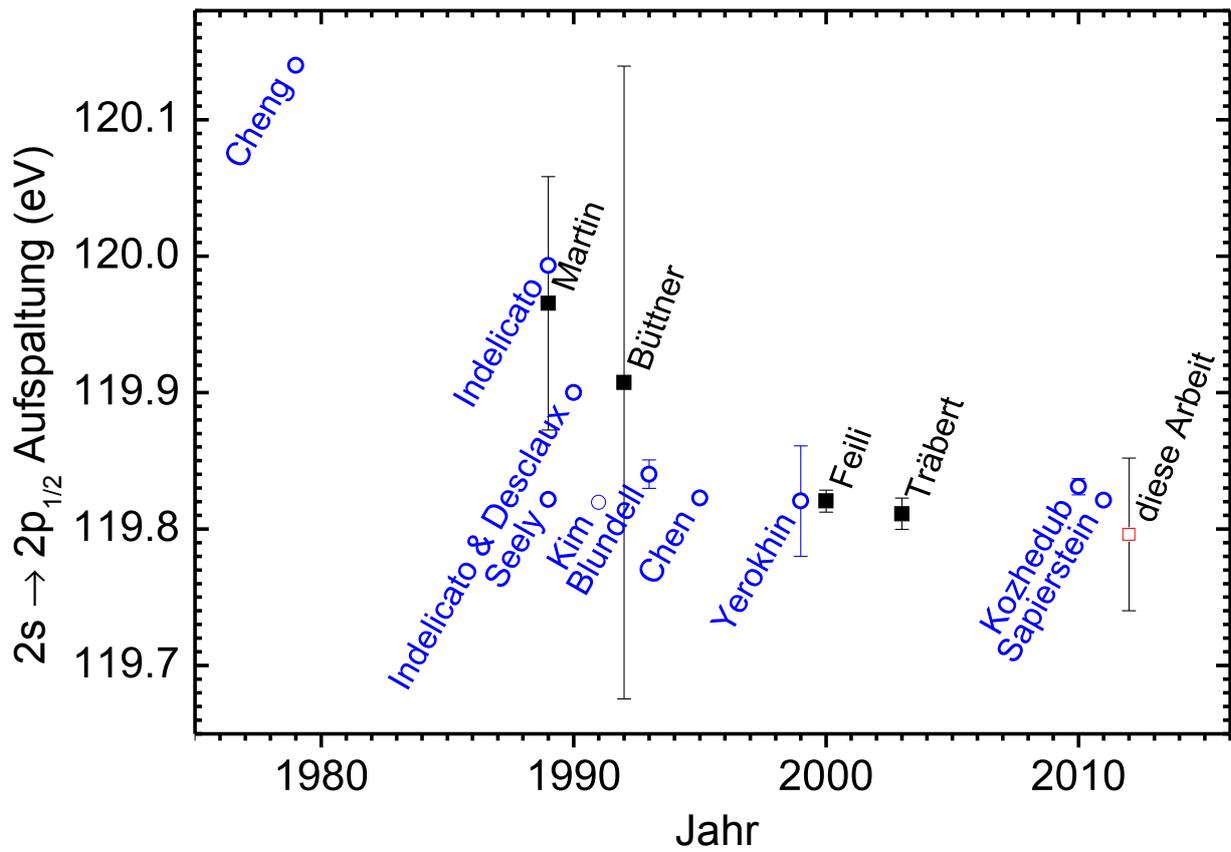


Abbildung 4.6: ■ Experimentelle [1, 2, 60, 106] und ○ theoretische Arbeiten [32, 33, 107–114] zur $(2s-2p_{1/2})$ -Übergangsenergien in lithiumartigem Xe^{51+} . Das hier präsentierte Ergebnis □ zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit aktuellen theoretischen und experimentellen Resultaten.

Kernladungszahlen. Mit einer Unsicherheit von 56 meV bei $Z=54$ ist die vorliegende Messung sensitiv für QED-Effekte erster Ordnung sowie für die Abschirmung der QED.

Wie in Abbildung 4.6 zu erkennen, stimmt die in dieser Arbeit für lithiumartiges Xenon ermittelte Lamb-Verschiebung von 119.796 ± 0.056 eV im Rahmen der Messunsicherheiten sowohl mit den theoretischen Rechnungen [32, 33, 107–114] als auch mit anderen verfügbaren experimentellen Daten [1, 2, 60, 106] gut überein. Tabelle 4.2 bietet eine Übersicht zu den Ergebnissen vorliegender Messungen und Rechnungen der Übergangsenergien innerhalb der L-Schale von Xe^{51+} .

Die mit Abstand präziseste Messung zur $(2s-2p_{1/2})$ -Aufspaltung stammt von Feili *et al.* [1]. Hierbei wurde $^{124}Xe^{17+}$ bei Energien von ~ 13.4 MeV/u durch eine $590 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ Kohlenstoffolie geschossen. Die von den angeregten, hochgeladenen Xenonionen emittierte UV-Strahlung wurde spektroskopisch untersucht. Über einen Vergleich mit einem simultan gemessenen Referenzspektrum gelang es, die Energie des $(2s-2p_{1/2})$ -Übergangs zu 119.820 ± 0.008 eV zu ermitteln. Dies entspricht einem relativen Fehler von weniger als 10^{-4} . Eine derart präzise Messung ist sensitiv

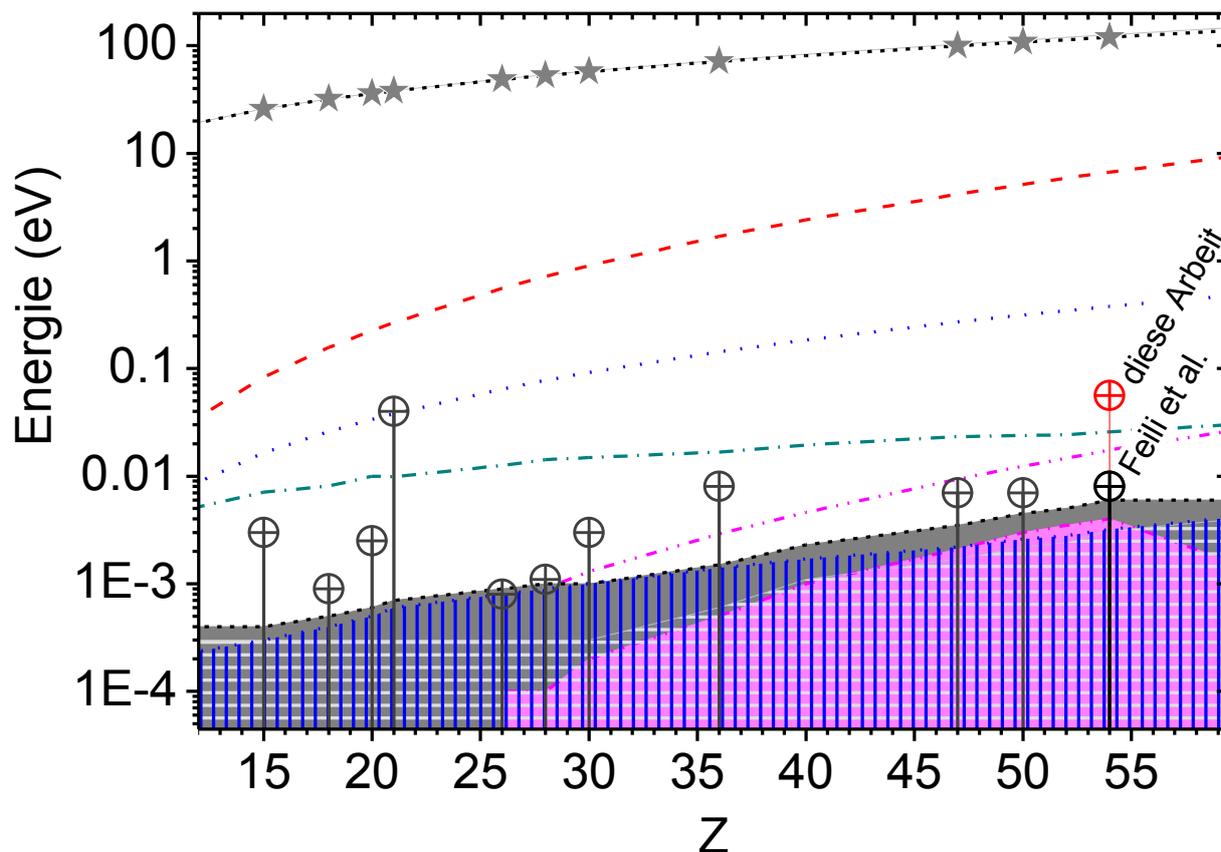


Abbildung 4.7: Kernladungsabhängige ($2s-2p_{1/2}$)-Aufspaltung bei lithiumartigen Ionen (---) als Funktion der Kernladungszahl nach Kozhedub *et al.* [33] mit den Beiträgen von:

— elektronischer Struktur; --- Selbstenergie und Vakuumpolarisation (negativ); abgeschirmter QED; -.-.- relativistischem Rückstoß (negativ); -.-.- QED höherer Ordnung.

Fehler der Aufspaltung (dunkelgraue Fläche) mit Beiträgen von:

elektronische Struktur (hellgrau waagrecht schraffiert) abgeschirmte QED (blau senkrecht schraffiert)

Fehler von QED-Beiträgen höherer Ordnung (magentafarbene Fläche)

Zum Vergleich verschiedene Messungen ★ [1, 115–122] und ihre Fehler ⊕.

für Beiträge von Selbstenergie, Vakuumpolarisation, Zweiphotonen-Elektron-Elektron-Wechselwirkung, der Kernaussdehnung, der abgeschirmten QED, des Rückstoßes, QED Einflüssen zweiter Ordnung (SEVP, VPVP und S(VP)E) und der relativistischen Korrektur des Rückstoßes sowie der Dreiphotonen-Elektron-Elektron-Wechselwirkung.

Tabelle 4.2: Überblick über bisherige experimentelle und theoretische Arbeiten mit Angaben zur ($2s-2p_{1/2}$)- bzw. ($2s-2p_{3/2}$)-Übergangsenergie in Xe^{51+} ; Abkürzungen der verwendete Methodik: DR (Dielektronische Rekombination), Beam-Foil (Beam-Foil-Spectroscopy), SuperEBIT (Elektron-Beam-Ion-Trap-Spectroscopy) CI-DFS (configuration-interaction Dirac-Fock-Sturm)), QED-PT (QED perturbation theory), RMBPT (relativistic many-body perturbation theory), RCI (relativistic configuration interaction), MCDF (multiconfiguration Dirac-Fock), MBPF (many-body perturbation theory)

Arbeit	Jahr	Methode	$2s \rightarrow 2p_{1/2}$ (eV)	$2s \rightarrow 2p_{3/2}$ (eV)
Experimentel				
Diese Arbeit	2012	DR	119.796 ± 0.056	492.19 ± 0.13
Träbert <i>et al.</i> [2]	2003	SuperEBIT	119.811 ± 0.012	—
Feili <i>et al.</i> [1]	2000	Beam-Foil	119.820 ± 0.008	—
Büttner <i>et al.</i> [106]	1992	Beam-Foil	119.91 ± 0.23	492.20 ± 0.98
Martin <i>et al.</i> [60]	1989	Beam-Foil	119.965 ± 0.093	492.39 ± 0.59
Theorie				
Sapirstein <i>et al.</i> [114]	2011	S-Matrix	119.821	492.206
Kozhedub <i>et al.</i> [33]	2010	CI-DFS	119.831 ± 0.006	492.225 ± 0.006
Yerokhin <i>et al.</i> [32]	2007	QED-PT	119.820 ± 0.04	—
Chen <i>et al.</i> [113]	1995	RCI	119.82	492.21
Blundell <i>et al.</i> [112]	1993	RMBPT	119.84 ± 0.01	492.22
Kim <i>et al.</i> [111]	1991	RMBPT & MCDF	119.82	492.18
Indelicato & Desclaux [110]	1990	MCDF	119.9	492.21
Indelicato [109]	1989	RMBPT & MCDF	119.993	492.281
Seely [108]	1989	MBPT & MCDF	119.822	492.22
Cheng <i>et al.</i> [107]	1979	MCDF	120.1	492.2

4.1.4 $2s-2p_{3/2}$ -Aufspaltung

Für die durch die $(2s-2p_{3/2})$ -Feinstrukturaufspaltung bestimmte $(2s + e^- \rightarrow 2p_{3/2} n)$ -Rydbergresonanzserie gelang die Auflösung aller Resonanzen von der niedrigsten existierenden $n=9$ (Abb. 4.2) bis zur höchsten, vollständig separierten Resonanz bei $n=28$ (Abb. 4.13(b)). Aus der Position dieser Resonanzen lässt sich, wie in Abschnitt 4.1.3 beschrieben, die Seriengrenze und damit die $(2s-2p_{3/2})$ -Übergangsenergie im lithiumartigem Xenon zu 492.19 ± 0.13 eV bestimmen (Abb. 4.8). Maßgebliche Fehlerquellen sind die Bestimmung der Hochenergieflanken der Resonanz mit 127 meV und die Verteilung der Resonanzstärken der Feinstrukturkomponenten bei höherem Gesamtdrehimpuls mit 31 meV.

Auch für die $(2s-2p_{3/2})$ -Übergangsenergie bieten Kozhedub *et al.* [33] eine theoretische Rechnung auf Basis der „large-scale configuration-interaction Dirac-Fock-Sturm“-Methode (CI-DFS), die die einzelnen Beiträge zur Aufspaltung aufschlüsselt und, im Unterschied zu den meisten anderen verfügbaren Rechnungen (siehe Tab. 4.2), Fehler für die Mehrzahl dieser Beiträge angibt. Die von ihnen berechnete $(2s-2p_{3/2})$ -Übergangsenergie beträgt 492.225 ± 0.006 eV und setzt sich aus den folgenden, individuellen Beiträgen zusammen: 497.8958 ± 0.0031 eV (elektronische Struktur, hierin enthalten sind Diracenergien, Effekte der endlichen Kernausdehnung sowie der Ein- und Mehrphotonenwechselwirkung); -5.9880 eV (Selbstenergie und Vakuumpolarisation); 0.3303 ± 0.0031 eV (abgeschirmte QED); -0.0278 eV (Rückstoß); 0.0152 ± 0.0040 eV (QED Beiträge zweiter Ordnung SEVP, VPVP, S(VP)E) (Siehe auch Abschnitte 1.1.1.2 und 1.1.2.1 bzw. [33]). Mit einer Unsicherheit von 130 meV ist die vorliegende Messung sensitiv für QED-Effekte erster Ordnung sowie die Abschirmung der QED.

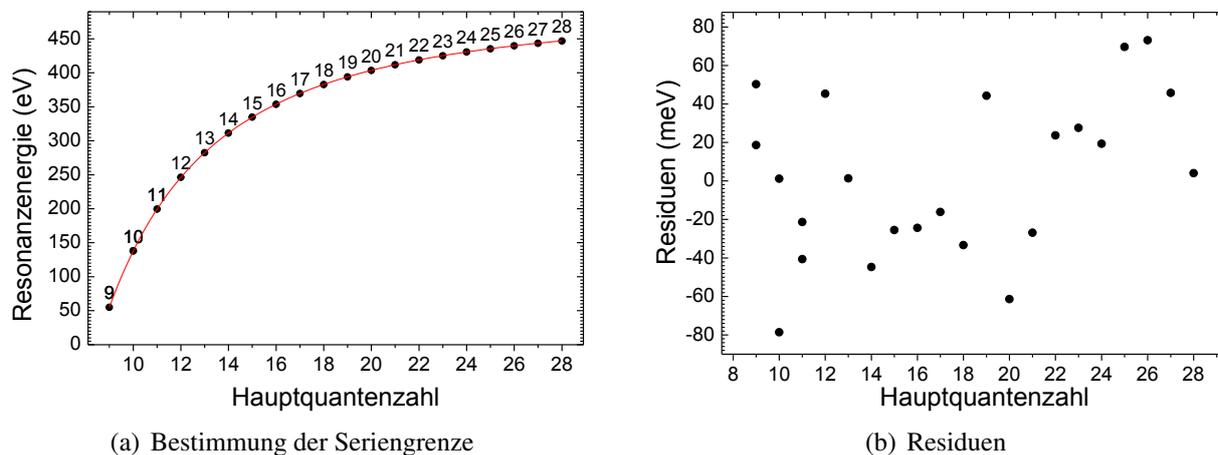


Abbildung 4.8: (a) Bestimmung der $1s^2 2s \rightarrow 1s^2 2p_{3/2}$ Feinstrukturaufspaltung in lithiumartigem Xenon durch Fit (—) der Seriengrenze nach Gleichung 4.3 an die aus Hochenergiepeakflanken und experimentellen Resonanzbreiten gewonnenen 'Resonanzpositionen' • zu 492.19 ± 0.13 . Abbildung (b) zeigt die verbleibenden, von systematischen Fehlern dominierten Residuen.

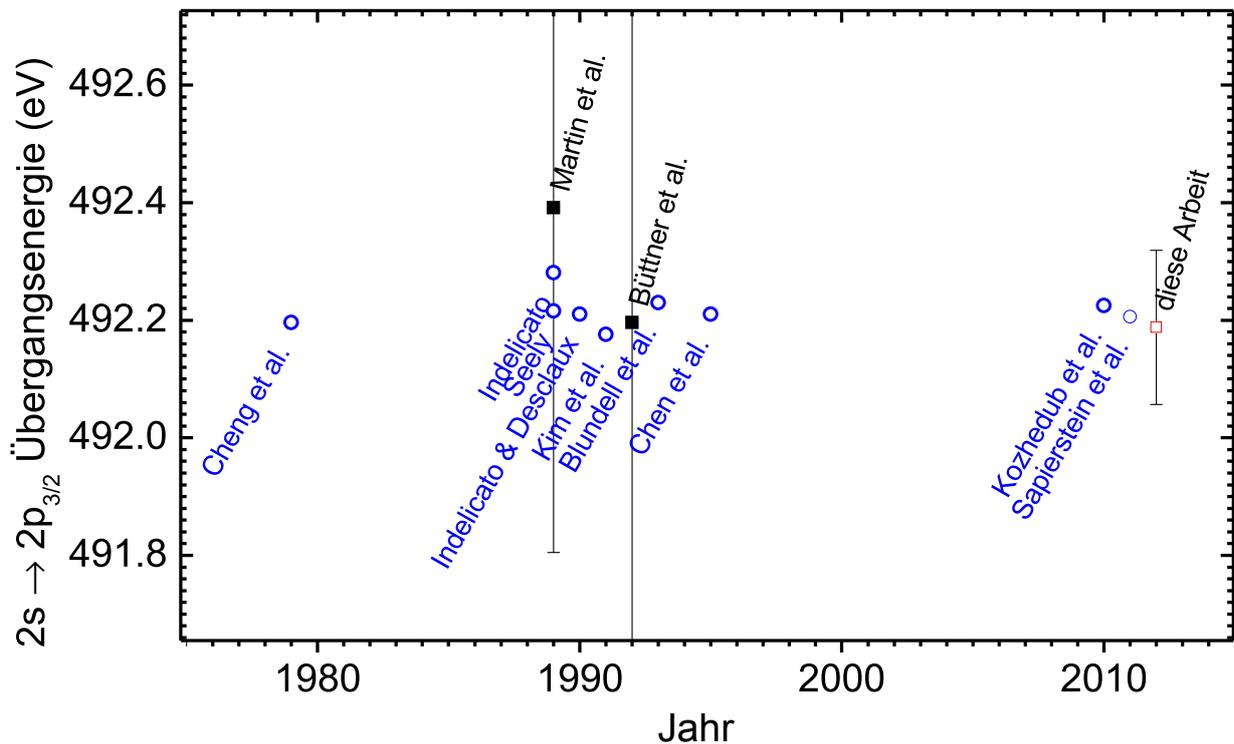


Abbildung 4.9: ■ experimentelle [60, 106] und ○ theoretische [33, 107–114] Arbeiten zur $(2s \rightarrow 2p_{3/2})$ -Übergangsenergien in lithiumartigem Xe^{51+} . Das hier vorgestellte Ergebnis □ zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit verfügbaren Literaturwerten und stellt das bisher präziseste experimentelle Ergebnis dar.

Die bisher präziseste Messung der $(2s-2p_{3/2})$ -Übergangsenergie in lithiumartigem Xenon bieten Martin *et al.* [60]. Dabei wurde an der „Ligne d’Ions Super Epluchés“ (LISE) des „Grand Accélérateur National d’Ions Lourds“ (GANIL) in Caen ein 27 MeV/u , 50 nA Xe^{35+} Strahl beim Durchgang durch eine Kohlenstoff- bzw. Berylliumfolie ionisiert. Nach magnetischer Selektion des gewünschten Xe^{51+} Ladungszustandes wurde der Strahl in eine dünne Kohlenstoff- bzw. Berylliumfolie geleitet. Die bei der Abregung des durch die Kollision angeregten Hüllenelektrons freiwerdende UV-Strahlung wurde im Folgenden mittels eines Monochromators und eines positionssensitiven Detektors registriert. Über Kalibration mittels bekannter He, Ne und Beryllium Linien wurde hieraus die $(2s-2p_{3/2})$ -Anregungsenergie zu $492.39 \pm 0.59 \text{ eV}$ ermittelt. Somit ist die Unsicherheit der hier vorgelegten Messung etwa vier- bis fünfmal geringer als die Unsicherheit der bisher genauesten Messung. Vergleicht man beide Messungen mit den theoretischen Rechnung von Kozhedub *et al.* [33], so stellt man fest, dass die Unsicherheit der hier vorgelegten Arbeit kleiner ist als der dort angegebene Beitrag der abgeschirmten QED, während der Fehler der bisher präzisesten Arbeit größer als dieser Beitrag ist. Ein Vergleich mit anderen experimentellen und theoretischen Arbeiten zur $(2s-2p_{3/2})$ -Übergangsenergie in lithiumartigem Xenon (Abb. 4.9 und Tab. 4.2) zeigt, dass die vorgelegte Messung gut mit diesen Arbeiten übereinstimmt

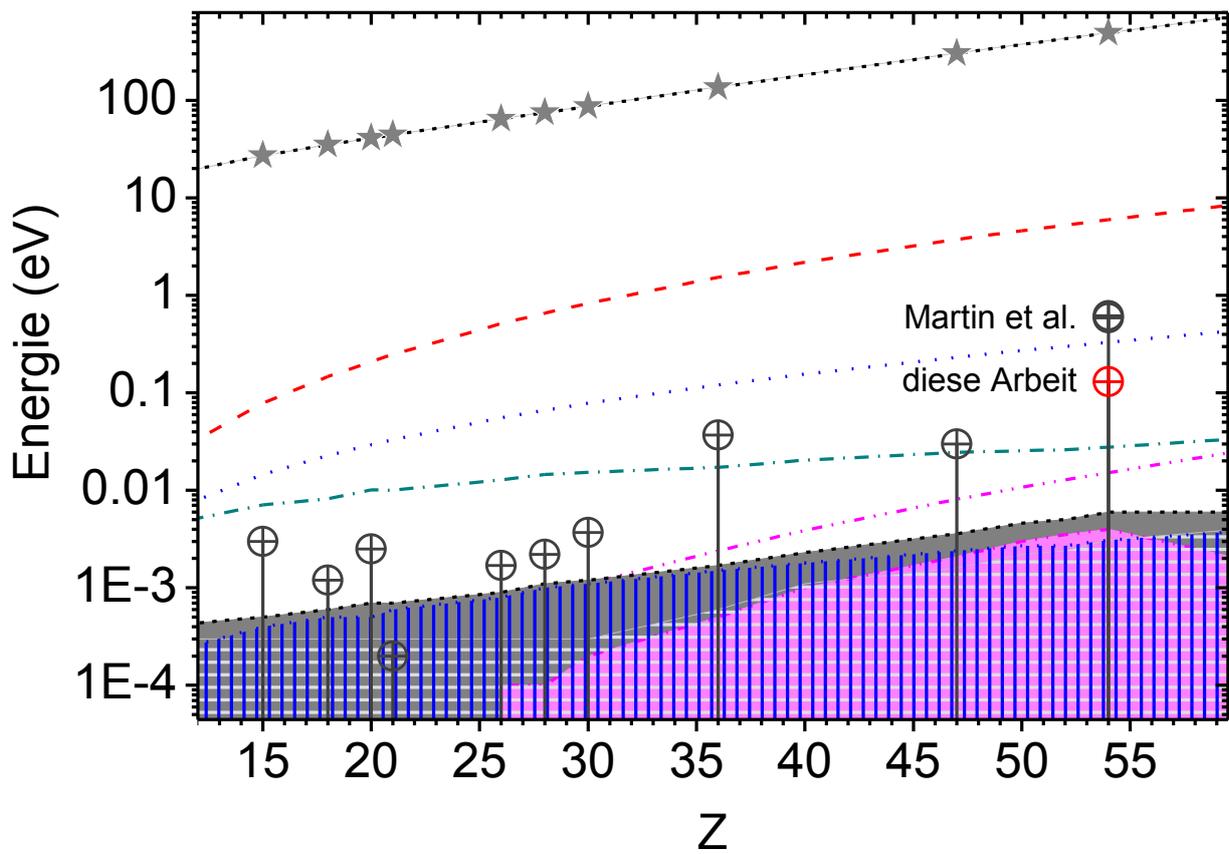


Abbildung 4.10: kernladungsabhängige $2s \rightarrow 2p_{3/2}$ Übergangsenergie bei lithiumartigen Ionen (---) nach Kozhedub *et al.* [33] für den dort angegebenen Kernladungsbereich von 10 bis 60 mit den Beiträgen der einzelnen Beiträge:

— elektronische Struktur; - - - |Selbstenergie und Vakuumpolarisation!; abgeschirmte QED; - - - relativistischer Rückstoß!; - - - QED höherer Ordnung.

Fehler der Aufspaltung (dunkelgraue Fläche) mit Beiträgen von:

elektronische Struktur (hellgrau waagrecht schraffiert) abgeschirmte QED (blau senkrecht schraffiert)

Fehler von QED-Beiträgen höherer Ordnung (magentafarbene Fläche)

Zum Vergleich sind verschiedene Messungen ★ [60, 87, 115–117, 119–121, 124–126] und ihre Fehler ⊕ dargestellt.

und damit die experimentelle Arbeit mit den geringsten Unsicherheiten darstellt.

Abbildung 4.10 zeigt die Serie der $(2s-2p_{3/2})$ -Übergangsenergien in lithiumartigen Ionen und die von Kozhedub *et al.* [33] berechneten Beiträge für den dort betrachteten Kernladungsbereich von ~ 10 bis ~ 60 im Vergleich mit einigen Messungen. Dieser Vergleich zeigt, dass die angegebenen, theoretischen Unsicherheiten in den meisten Fällen kleiner sind als die experimentellen Werte. Das Ende des Vergleiches bei $Z = 60$ ist dem Fehlen von aufgeschlüsselten Einzelbeiträgen für $Z > 60$ bei Kozhedub *et al.* geschuldet.

4.1.5 Rydbergresonanzgruppenentwicklung

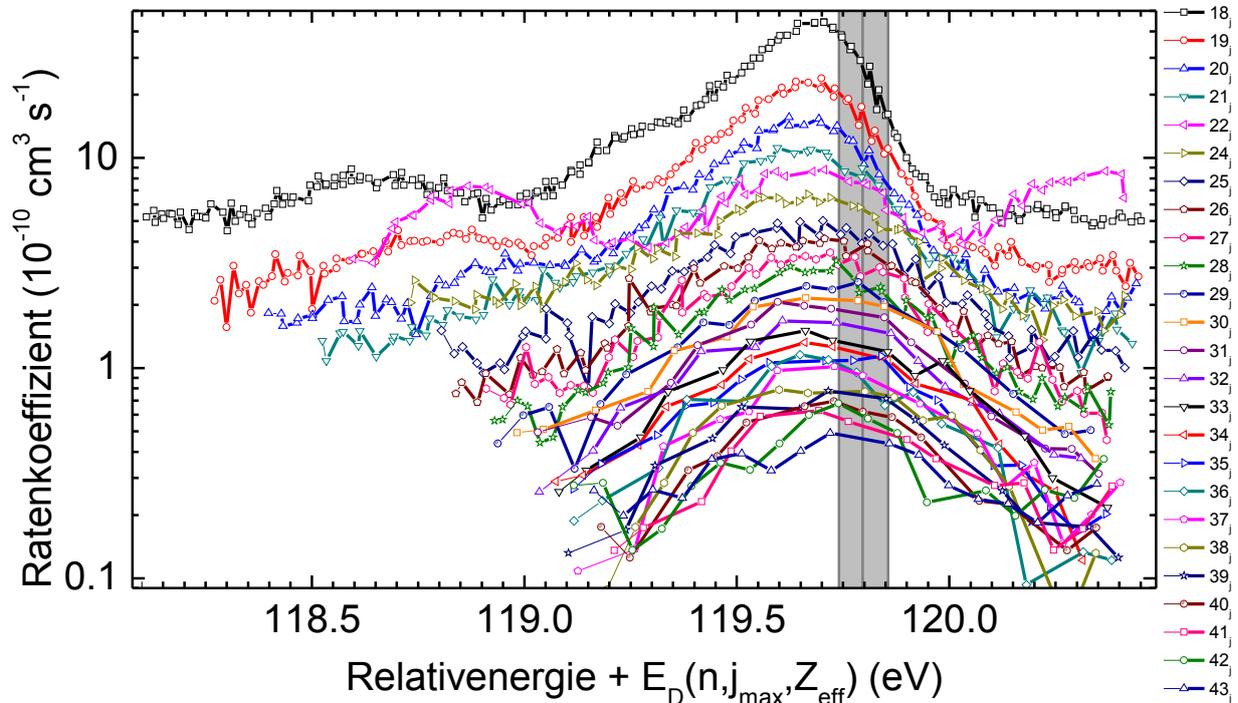


Abbildung 4.11: Absolute Ratenkoeffizienten (DR und RR) der $(2s) + e^- \rightarrow 2p_{1/2} n_j$ -Resonanzserie für $n=18$ bis 43 , aufgetragen gegen die Summe aus Relativenergie und jeweiliger Dirac-Bindungsenergie (Gl. 1.4) des höchsten Unterzustandes $j_{\max} = n - 1/2$ bei $Z_{\text{eff}} = 51$. Zur verbesserten Darstellung wurde vom Ratenkoeffizienten ein Offset von $4.1 \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{s}$ subtrahiert. Der grau schraffierte Bereich entspricht Seriengrenze und Fehlern (Abs. 4.1.3). Weitere Erläuterung siehe Text.

Die Auflösung von etwa 25 einzelnen Rydbergresonanzen jeder Resonanzserie erlaubt neben dem Studium der Seriengrenzen (Abschnitte 4.1.3 und 4.1.4) und der Entwicklung der Resonanzstärken (Abs. 4.1.6) auch eine Untersuchung der Form und (soweit zugänglich) Substruktur der Resonanzen. Abb. 4.11 zeigt die entsprechende Entwicklung der $(2s + e^- \rightarrow 2p_{1/2} n_j)$ -Rydbergresonanzserie von der niederenergetischsten ($n=18$) bis zur höchstenergetischen, noch aufgelösten Resonanzgruppe ($n=43$) mit Ausnahme der vollständig von der stärkeren $2p_{3/2} 9_j$ -Resonanzgruppe überlagerten $n=23$ Resonanz. Man erkennt die Verminderung sowohl der Resonanzstärken als auch der Feinstrukturaufspaltung der Resonanzgruppen mit steigender Hauptquantenzahl. Während für hohe Rydbergzustände die verschiedenen Feinstrukturkomponenten zu einer einzigen Resonanz verschmelzen, lassen sich für niedrigere Rydbergzustände einzelne Feinstrukturkomponenten auflösen. Für $n=20$ ist die $j=1/2$ -Teilresonanz als Schulter zu erkennen und wird für $n=18$ vollständig aufgelöst. Für diese niedrigste Resonanzgruppe ist zusätzlich noch eine der $j=3/2$ Feinstruktur zuzuordnende Schulter zu erkennen. Die abweichende Struktur der $n=22$ Resonanz (Abb. 4.11) wird von den beiden zur $2p_{3/2}$ -Serie gehörenden Resonanzen

$2p_{3/2} 9s_{1/2}$ und $2p_{3/2} 9p_{1/2}$ verursacht (siehe auch Abb. 4.3).

Äquivalent lässt sich die Entwicklung der $(2s + e^- \rightarrow 2p_{3/2} n_j)$ -Rydbergresonanzserie untersuchen (Abb. 4.12). Bedingt durch die im Vergleich zur $2p_{1/2}$ -Serie deutlich höhere Anregungsenergie ist hier $n=9$ (statt $n=18$) der niedrigste Zustand, in den ein Einfang aus Gründen der Energieerhaltung möglich ist. Bedingt durch die für niedrigere Hauptquantenzahlen höhere Feinstrukturaufspaltung sind für die $n=9$ Resonanzgruppe deutlich mehr Unterzustände auflösbar. Hierzu gehören die $(2p_{3/2} 9s_{1/2}, 2p_{3/2} 9p_{1/2})$ -Doppelresonanz (mit dazwischen liegender $2p_{1/2} 22$ Resonanz), wie auch weitere Zustände etwas höheren Gesamtdrehimpulses j . Entsprechend der Entwicklung der $2p_{1/2} n_l j$ -Resonanzserie zeigt auch die $2p_{3/2} n_l j$ -Resonanzserie mit zunehmender Hauptquantenzahl sowohl eine abnehmende Feinstrukturaufspaltung als auch eine Abnahme der Ratenkoeffizienten, wobei letztere trotz weiter sinkender Resonanzstärken (Abb. 4.13(b)) ein 'Plateau' erreichen, welches von den Ausläufern der zunehmend dichter beieinander liegenden Resonanzen gebildet wird.

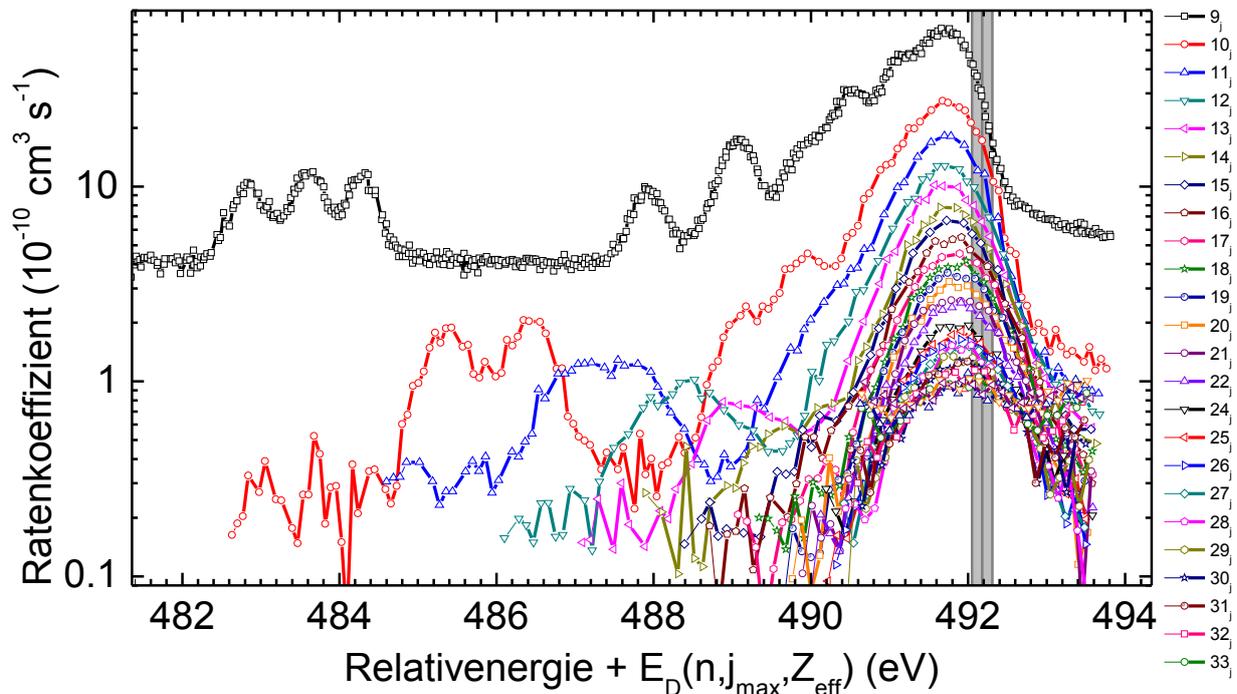


Abbildung 4.12: Absolute Rekombinationsratenkoeffizienten (DR und RR) der $(2s + e^- \rightarrow Xe^{50+} 2p_{3/2} n_l j)$ Rydbergserie für $n=9$ bis 34 aufgetragen gegen die Summe aus Relativenergie und jeweiliger Dirac-Bindungsenergie (Gl. 1.4) des höchsten Unterzustandes $j_{\max} = n - 1/2$ bei $Z_{\text{eff}} = 51$; Zur Verbesserung der Darstellung wurde von den Ratenkoeffizienten ein Offset von $10^{-10} \text{ cm}^3/\text{s}$ subtrahiert. Der grau schraffierte Bereich entspricht der in Abschnitt 4.1.3 ermittelten Seriengrenze samt Fehler. Weitere Erläuterungen finden sich im Text.

4.1.6 Resonanzstärken

Die Resonanzen der beiden Rydbergserien $2s + e^- \rightarrow 2p_{1/2} n_l j$ und $2s + e^- \rightarrow 2p_{3/2} n_l j$ lassen sich bis etwa $n=43$ ($2p_{1/2}$) bzw. $n=36$ ($2p_{3/2}$) einzeln auflösen (Abb. 4.13). Die Messung absoluter Ratenkoeffizienten erlaubt es, die absoluten Resonanzstärken der separierten Resonanzen zu extrahieren, wobei die experimentellen Gegebenheiten (z.B. die Energieverteilung der Elektronen) berücksichtigt werden. Hierbei wurde eine anfängliche Liste von Resonanzlagen und Resonanzstärken solange variiert, bis das hieraus unter Verwendung der experimentellen Antwortfunktion erhaltene Spektrum mit dem experimentellen Spektrum sowohl in der Lage als auch in der Stärke der Resonanzen übereinstimmte. Die so ermittelten Resonanzstärken sind in Tabelle 4.3 mit ihrer Schwerpunktenenergien gelistet und in Abbildung 4.14 graphisch dargestellt. Der relative Fehler der so ermittelten Resonanzstärken entspricht dem in Abschnitt 3.5.6 zu 17% abgeschätzten Fehler des Ratenkoeffizienten. Auch für die nicht mehr aufgelösten, höheren Rydbergresonanzen lässt sich aus den Ratenkoeffizienten noch ein ungefährer Verlauf der Resonanzstärken extrahieren. Die entsprechenden Ergebnisse finden sich gleichfalls in Abb. 4.14. Es sei angemerkt, dass diese Ergebnisse insbesondere jenseits von $n \sim 114$ zusätzliche, hohe systematische Fehler durch die dann einsetzende, partielle Feldionisation aufweisen (Abs. 1.3.5).

Für relativ niedrige Rydbergzustände sind auch Teile der Feinstrukturaufspaltung der Ryd-

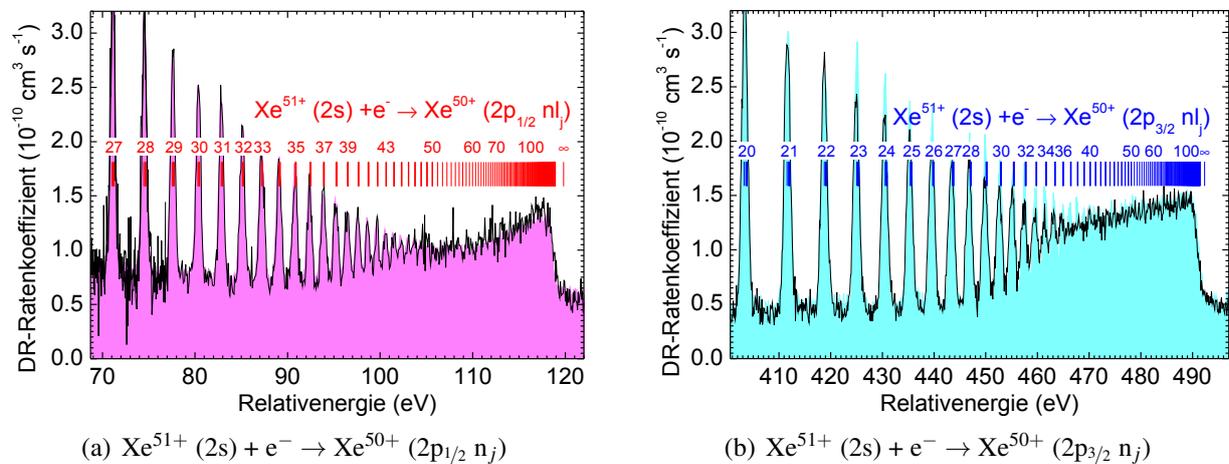


Abbildung 4.13: Absolute DR-Ratenkoeffizienten der Rydbergresonanzserien lithiumartiger Xenonionen; Für die $2s \rightarrow 2p_{1/2}$ bzw. $2p_{3/2}$ Anregungen konnten Einfänge bis $n=43$ bzw. 36 separat aufgelöst werden. Der auf Basis der gewonnenen Resonanzstärken (Abb. 4.14 und Tab. 4.3) und den bekannten experimentellen Parametern simulierte Ratenkoeffizient ist flächig dargestellt. Wie man sieht, sind Messung und Simulation konsistent. Zum Vergleich sind Resonanzlagen auf Basis von Literaturwerten [1, 60] und Dirac Bindungsenergie (Gl. 1.4) durch vertikale Striche markiert. Zu Fehlern siehe Abschnitt 3.2.2 bzw. 3.5.6.

bergresonanzen dem Experiment zugänglich (Abs. 4.1.1 und 4.1.5). Zum Zwecke einer einheitlichen Darstellung wurden in Abb. 4.14 die summierten Stärken aller Einzelresonanzen gegen den Schwerpunkt ihrer Energien aufgetragen. Zur Abnahme der Resonanzstärke mit steigender Energie trägt die E^{-1} Abhängigkeit des DR-Wirkungsquerschnitts (Gl. 1.30 bzw. 1.31) bei. Ein weiterer Einflussfaktor ist die n^{-3} -Abhängigkeit der Augerraten. Zusätzlich erfolgt die radiative Stabilisierung (Abs. 1.3.3) eines höheren Rydbergelektrons unter die Autoionisationsschwelle langsamer, wenn beim Einfang ein Zustand mit höherem Gesamtdrehimpuls j besetzt wird. Dies liegt daran, dass (einzelne) elektrische Dipolübergänge den Gesamtdrehimpuls j maximal um 1 ändern können. So sind z.B. aus dem Rydbergzustand $n_{21/2}$ elektrische Dipolübergänge in $n'_{j'}$ mit $j' < 19/2$ verboten so dass ein E1-Übergang in $n' < 10$ nicht möglich ist. Entsprechend erfolgt die radiative Stabilisierung eines Rydbergelektrons mit höherem j über einen mehrstufigen Prozess, während Rydbergelektronen mit niedrigerem j direkt in Zustände mit niedrigerer Hauptquantenzahl übergehen können. Dieser Effekt wird dadurch verstärkt, dass die Übergangsrate stark von der Übergangsenergie abhängt (Gl. 1.6). Diese ist ihrerseits näherungsweise proportional zu $1/n'^2 - 1/n^2$, so dass Übergänge in niedrige Hauptquantenzahlen n' deutlich höhere Übergangsenergien haben, die zu höheren Übergangsraten führen. Somit stabilisieren Zustände niedrigeren Gesamtdrehimpulses j nicht nur über weniger Zwischenstationen, sondern die einzelnen Übergänge sind auch signifikant schneller als bei Zuständen höheren Gesamtdrehimpulses.

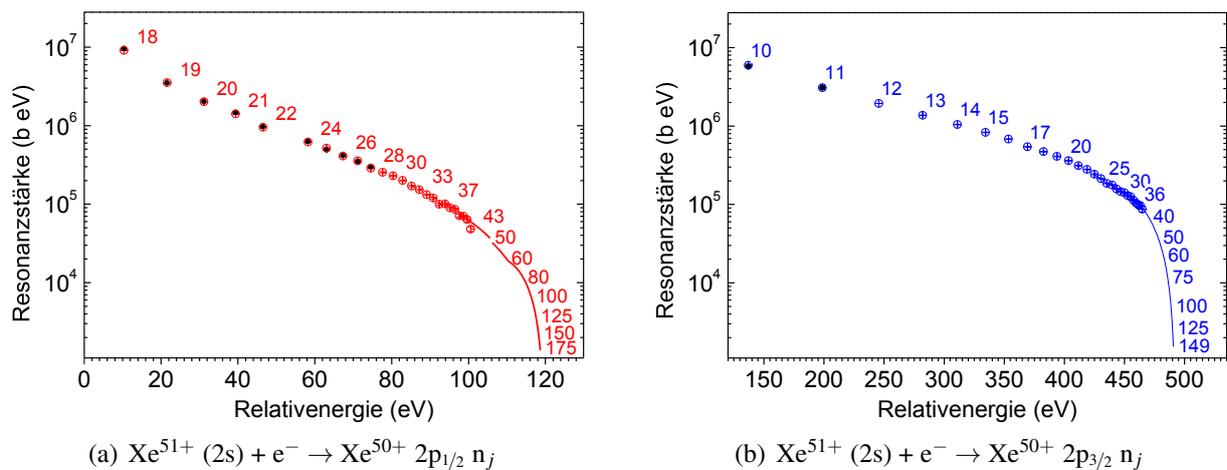


Abbildung 4.14: Resonanzstärke und Lage des Resonanzschwerpunktes der separierten Resonanzen der dielektronischen Rekombination. Für die $2s \rightarrow 2p_{1/2}$ bzw. $2p_{3/2}$ Anregungen konnten Einfänge bis $n = 43$ bzw. 36 aufgelöst werden (siehe auch Tab. 4.3). Eine Ausnahme stellt die $2s + e^- \rightarrow 2p_{1/2}$ 23-Resonanz dar, die vom Einfang in $n = 9$ der $2s \rightarrow 2p_{3/2}$ Anregung überlagert wird (Abb. 4.3). Der systematische Fehler der Resonanzstärken beträgt 17% (Abs. 3.5.6). Verschiedene Symbole (\bullet , \oplus) kennzeichnen verschiedene Messmodi (Tab. 4.3). Der Verlauf der Resonanzstärken für höhere, nicht mehr separierbare Rydbergzustände, ist als durchgezogene Linie eingezeichnet und weist für $n \gtrsim 100$, bedingt durch die Feldionisation (Abs. 1.3.5), sehr viel höhere, systematische Fehler auf.

Tabelle 4.3: Gemessene Energien (E [eV]) und Resonanzstärken (S [b eV]) für Resonanzen der beiden Rydbergresonanzserien $2s + e^- \rightarrow 2p_{1/2} nl_j$ bzw. $2p_{3/2} nl_j$ (siehe auch Abb. 4.14) für die Messsituationen: 1. normaler Messmodus & Elektronenenergie $>$ Ionenenergie ($\gamma_e > \gamma_i$); 2. normaler Messmodus & Elektronenenergie $<$ Ionenenergie ($\gamma_e < \gamma_i$); 3. erweiterter Messbereich (Abs. 2.4.1.2) & Elektronenenergie $>$ Ionenenergie ('jump'). Auflösbare Resonanzen einzelner Drehimpulscomponenten wurden aus Platzgründen nur für $n=9$ und $j \leq 5/2$ separat ausgewiesen, während für andere Resonanzen summierte Resonanzstärken und gewichtet gemittelte Resonanzpositionen angegeben sind. Der relative, systematische Fehler der Resonanzstärken beträgt 17% (Abs. 3.5.6).

nl_j	$2s + e^- \rightarrow 2p_{1/2} n$				$2s + e^- \rightarrow 2p_{3/2} n$					
	$E_{\gamma_e > \gamma_i}$	$S_{\gamma_e > \gamma_i}$	$E_{\gamma_e < \gamma_i}$	$S_{\gamma_e < \gamma_i}$	$E_{\gamma_e > \gamma_i}$	$S_{\gamma_e > \gamma_i}$	$E_{\gamma_e < \gamma_i}$	$S_{\gamma_e < \gamma_i}$	$E_{\text{jump}'}$	$S_{\text{jump}'}$
9s _{1/2}					45.82	7.3E5	45.83	7.3E5		
9p _{1/2}					47.29	8.1E5	47.32	8.5E5		
9p _{3/2}					50.93	6.7E5	50.95	6.6E5		
9d _{3/2}					52.07	2.0E6	52.08	2.0E6		
9 _{5/2}					53.41	4.2E6	53.42	3.9E6		
9 _{j>5/2}					54.56	1.44E7	54.58	1.46E7		
10							136.98	5.79E6	136.99	5.9E6
11							198.60	3.10E6	198.66	3.1E6
12									245.60	1.9E6
13									282.09	1.4E6
14									311.04	1.0E6
15									334.39	8.3E5
16									353.51	6.8E5
17									369.37	5.4E5
18	10.35	9.5E6	10.36	9.1E6					382.64	4.7E5
19	21.57	3.5E6	21.60	3.5E6					393.83	4.1E5
20	31.15	2.0E6	31.18	2.0E6					403.45	3.6E5
21	39.43	1.5E6	39.41	1.4E6					411.71	3.1E5
22	46.50	9.7E5	46.54	9.6E5					418.86	2.8E5
23									425.05	2.4E5
24	58.20	6.3E5	58.26	6.2E5					430.55	2.1E5
25	63.08	4.9E5	63.07	5.2E5					435.40	1.9E5
26	67.35	4.2E5	67.36	4.1E5					439.65	1.8E5
27	71.19	3.5E5	71.15	3.6E5					443.50	1.6E5
28	74.56	3.0E5	74.58	2.9E5					446.90	1.5E5
29			77.62	2.5E5					449.97	1.4E5
30			80.38	2.3E5					452.73	1.3E5
31			82.85	2.0E5					455.21	1.3E5
32			85.19	1.7E5					457.57	1.1E5
33			87.19	1.5E5					459.61	1.0E5
34			89.09	1.3E5					461.52	9.9E4
35			90.80	1.2E5					463.32	9.6E4
36			92.39	1.0E5					464.86	8.7E4
37			93.91	1.0E5						
38			95.21	9.0E4						
39			96.46	8.6E4						
40			97.60	7.1E4						
41			98.70	7.0E4						
42			99.68	6.3E4						
43			100.57	4.8E4						

4.1.7 Plasmaratenkoeffizient

Für die Beschreibung von Rekombinationsprozessen in Plasmen werden Plasmaratenkoeffizienten verwendet, die nur von der Temperatur des Plasmas abhängen, da die Temperatur die Verteilung der Relativgeschwindigkeiten bzw. Relativenergien vollständig beschreibt (Abs. 1.2 & Gl. 1.22). Aufgrund der in der Regel breiten Geschwindigkeitsverteilung ist der Plasmaratenkoeffizient nahezu vollkommen unabhängig von der natürlich Breite der Resonanzen. (Eine Ausnahme stellen kalte Plasmen bei gleichzeitiger Existenz äußerst niederenergetischer DR-Resonanzen mit natürlichen Breiten nahe der Größenordnung der Resonanzenergie dar.)

Zur Ermittlung des Plasmaratenkoeffizienten wurden die in Abschnitt 4.1.6 gewonnenen Resonanzlagen und -stärken, soweit möglich unter Berücksichtigung ihrer Feinstrukturaufspaltung, samt ihrer in Abb. 4.14 gezeigten Fortsetzung zu größeren Hauptquantenzahlen verwendet. Unter der für die Extraktion der Plasmaratenkoeffizienten zulässigen Näherung deltaförmiger Resonanzen wurde gemäß Gleichung 1.22 der Plasmaratenkoeffizient ermittelt. Abb. 4.15 zeigt den $\Delta n = 0$ -DR-Plasmaratenkoeffizienten für lithiumartiges Xe^{51+} . Enthalten sind die DR-Resonanzstärken des gemessenen Energiebereiches (0 bis ~ 500 eV), bestehend aus der ($2s +$

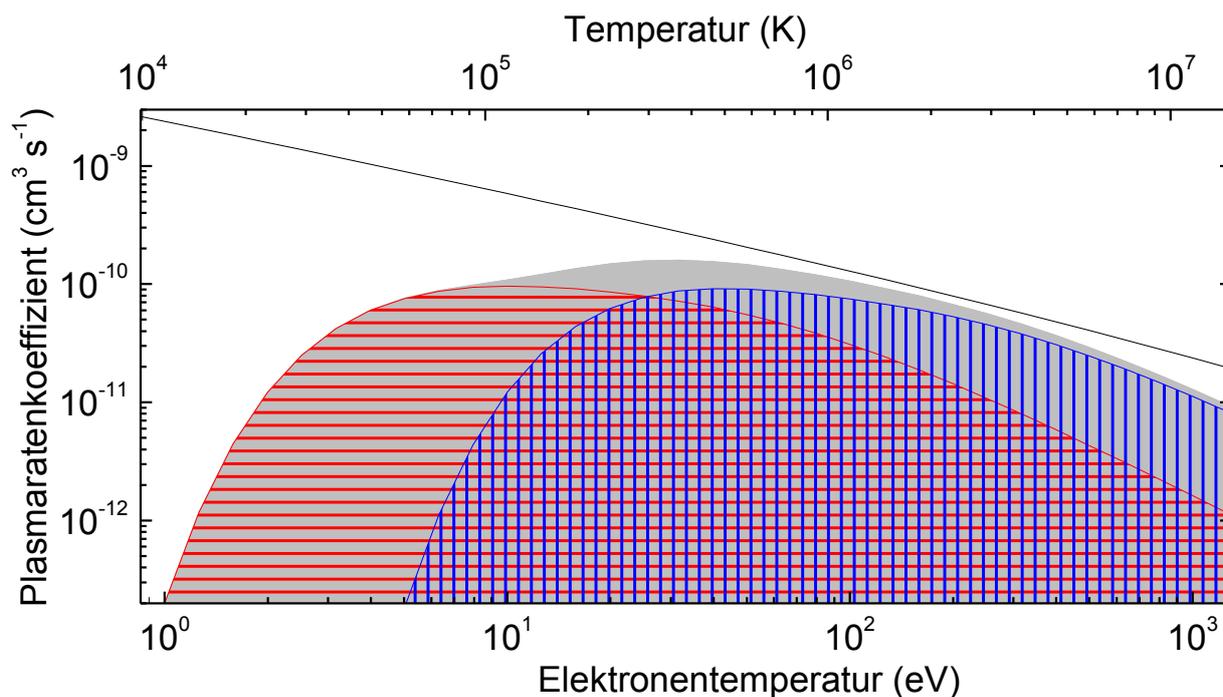


Abbildung 4.15: Dargestellt ist der Xe^{51+} - $\Delta n = 0$ -DR-Plasmaratenkoeffizient (grau) bestehend aus den Beiträgen der ($2p_{1/2} n$)- und ($2p_{3/2} n$)-DR-Resonanzserien (horizontal bzw. vertikal schraffiert), deren Resonanzstärken in Abschnitt 4.1.6 experimentell bestimmt wurden. Zum Vergleich ist der berechnete Ratenkoeffizient der radiativen Rekombination angegeben (durchgezogene Linie, zur Berechnung siehe Text). Der Fehler des DR-Plasmaratenkoeffizienten beträgt 17% (Abs. 3.5.6). Weitere Erläuterungen siehe Text.

$e^- \rightarrow 2p_{1/2} n$ - und der $(2s + e^- \rightarrow 2p_{3/2} n)$ -Resonanzserie. Nach Abschnitt 3.5.6 beträgt der Fehler des DR-Plasmaratenkoeffizienten etwa 17%. Als durchgezogene Linie dargestellt ist der RR-Anteil des Plasmaratenkoeffizienten, welcher gemäß Gl. 1.25 und 1.22 für Einfänge in $n_{\max} < 1000$ berechnet wurde. Nicht im DR-Plasmaratenkoeffizient enthalten sind Beiträge von $\Delta n \geq 1$ -DR-Resonanzen, die oberhalb des gemessenen Energiebereiches [0 – 500 eV] liegen. Gemäß dem LANL-Programmpaket [103–105] ist die niederenergetischste $\Delta n \geq 1$ Resonanz ($2s + e^- \rightarrow 3s^2$) bei etwa 1.3 keV zu erwarten und sollte bei Plasmatemperaturen (kT) oberhalb einiger hundert eV berücksichtigt werden. Da sich die niederenergetischste DR-Resonanz bei etwa 10 eV befindet, ist der Einfluss der Ratenüberhöhung (Abs 1.3.2) auf den DR-Plasmaratenkoeffizienten vernachlässigbar.

Im Gegensatz zum berylliumartigen Xenon (Abb. 4.39) stellt die DR bei lithiumartigem Xenon nicht den dominanten Beitrag zum Photorekombinationsratenkoeffizient dar. Ursächlich hierfür ist, dass sich die niederenergetischste Xe^{51+} -DR-Resonanz 'erst' bei 10 eV befindet (Abb. 4.2) und deutlich geringere Resonanzstärken aufweist als die ersten Xe^{50+} -DR-Resonanzen. Aufgrund der im Vergleich zu leichten Ionen sehr viel höheren Feldionisationsgrenze (Abs. 1.3.5) entgeht der Messung nur ein unwesentlicher Anteil des Plasmaratenkoeffizienten. Extrapoliert man exemplarisch die $2p_{3/2}n$ -Resonanzstärken für Hauptquantenzahlen jenseits der Feldionisationsgrenze durch Anpassung einer Funktion $S(n) = a \cdot n^b/E$ an den Resonanzstärkenverlauf (Abs. 4.1.6) der n diesseits der Feldionisationsgrenze und bildet – unter Berücksichtigung dieser Resonanzstärken – einen Plasmaratenkoeffizienten, so unterscheidet sich dieser vom angegebenen Plasmaratenkoeffizienten um weniger als 2%. Dies liegt innerhalb der angegebenen Fehler.

Für eine bessere, weitere Nutzbarkeit der ermittelten Plasmaratenkoeffizienten wurde der DR-Anteil des Plasmaratenkoeffizienten ($\alpha_p^{(DR)}$) in Abhängigkeit von der Elektronentemperatur, wie z.B. in [7] beschrieben, mit folgender Funktion parametrisiert:

$$\alpha_p^{(DR)}(T) = (T)^{-3/2} \sum_{i=1}^{i_{\max}} c_i \exp\left(-\frac{E_i}{k_b T}\right) \quad (4.6)$$

Dabei wurden für $i_{\max} = 4$ die in Tabelle 4.4 angegebenen Parameter ermittelt. Für Temperaturen zwischen $3 \cdot 10^4$ und 10^8 Kelvin, in deren Bereich die $\Delta n = 0$ -DR einen signifikanten Beitrag zum Plasmaratenkoeffizienten der Photorekombination leistet (Abb. 4.15), beträgt die Abweichung zwischen gemessenem und parametrisiertem DR-Plasmaratenkoeffizienten maximal 5%.

Tabelle 4.4: Parameter der Kurvenanpassung des Xe^{51+} - $\Delta n = 0$ -DR-Plasmaratenkoeffizienten gemäß Gleichung 4.6. Abweichung der Parametrisierung gegenüber dem Plasmaratenkoeffizienten $\leq 5\%$ für $3 \cdot 10^4 \text{ K} < T < 10^8 \text{ K}$.

i:	1	2	3	4
c_i [$\text{cm}^3 \text{ s}^{-1} \text{ K}^{3/2}$]	$9.06 \cdot 10^{-3}$	$7.92 \cdot 10^{-2}$	$1.37 \cdot 10^{-1}$	$3.93 \cdot 10^{-1}$
E_i [eV]	10.8	41.9	90.1	321

4.2 Berylliumartiges Xenon

Im Rahmen dieser Arbeit wurden absolute Ratenkoeffizienten der dielektronischen Rekombination berylliumartiger Xenonionen bei Relativenergien zwischen 0 und etwa 550 eV gemessen (Abb. 4.17). Die Messung deckte den Energiebereich aller $\Delta n = 0$ -DR-Rydbergresonanzserien des $\text{Xe}^{50+}(2s^2 \ ^1S_0)$ -Grundzustandes ab. Über die das Spektrum dominierenden $(2s2p \ ^1P_1)nl_j$ - und $(2s2p \ ^3P_1)nl_j$ -Rydbergresonanzserien sind auch die deutlich schwächeren Resonanzen der $(2s2p \ ^3P_2)nl_j$ -Serie klar zu erkennen, so sie nicht von stärkeren Resonanzen überlagert sind. Ebenfalls sichtbar sind vier nicht dem initialen $2s^2 \ ^1S_0$ -Grundzustand zuzuordnende Resonanzen zwischen 1 und 2 eV. Diese Resonanzen gehören zum – während der Ladungspräparation bevölkerten – $2s2p \ ^3P_0$ -Zustand, der nur durch E1M1-Zweiphotonenübergänge entvölkert werden kann. Die extrem lange Lebensdauer (Abb. 1.13) sorgt dafür, dass sich bei Beginn der Messung, einige Sekunden nach Bevölkering des metastabilen Zustandes, noch immer ein Teil der Ionen in diesem Zustand befinden und damit im Experiment Signaturen der $(2s2p \ ^3P_0 + e^- \rightarrow (2p^2 \ ^3P_1)8_j)$ -Rydbergresonanzgruppe sichtbar werden.

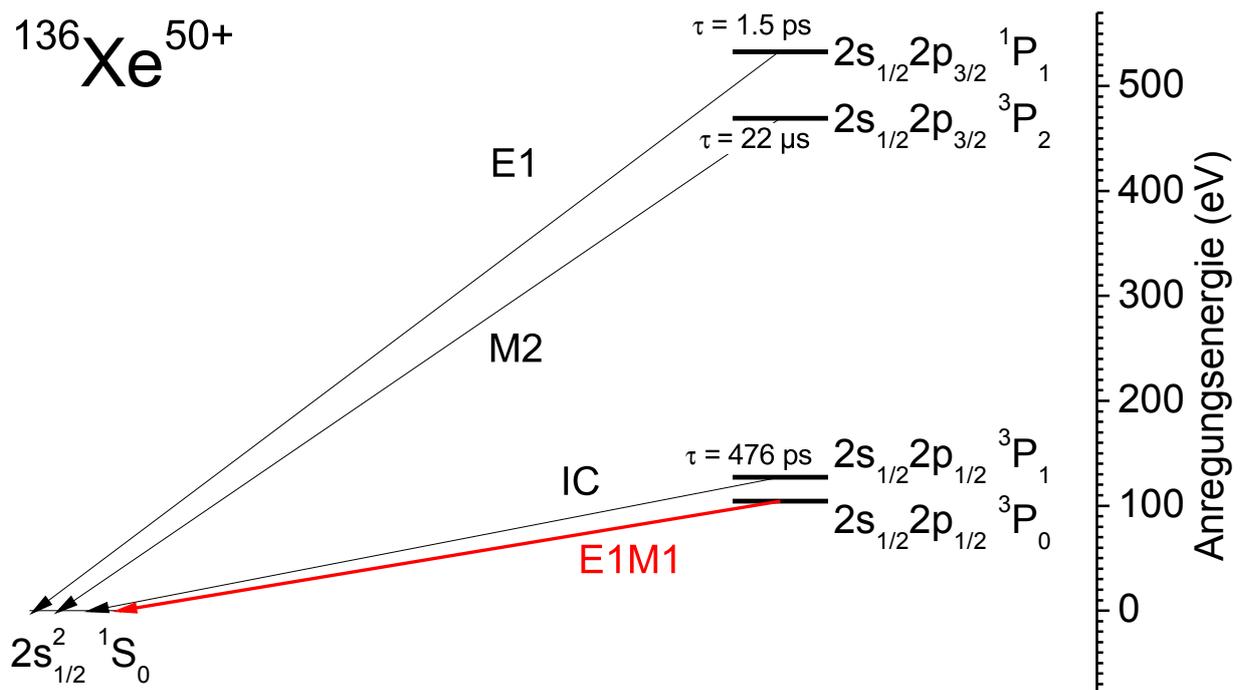


Abbildung 4.16: Vereinfachtes Termschema für Xe^{50+} nach Safronova *et al.* [34] mit Ein-Photon-Übergangslbensdauern nach Cheng *et al.* [43].

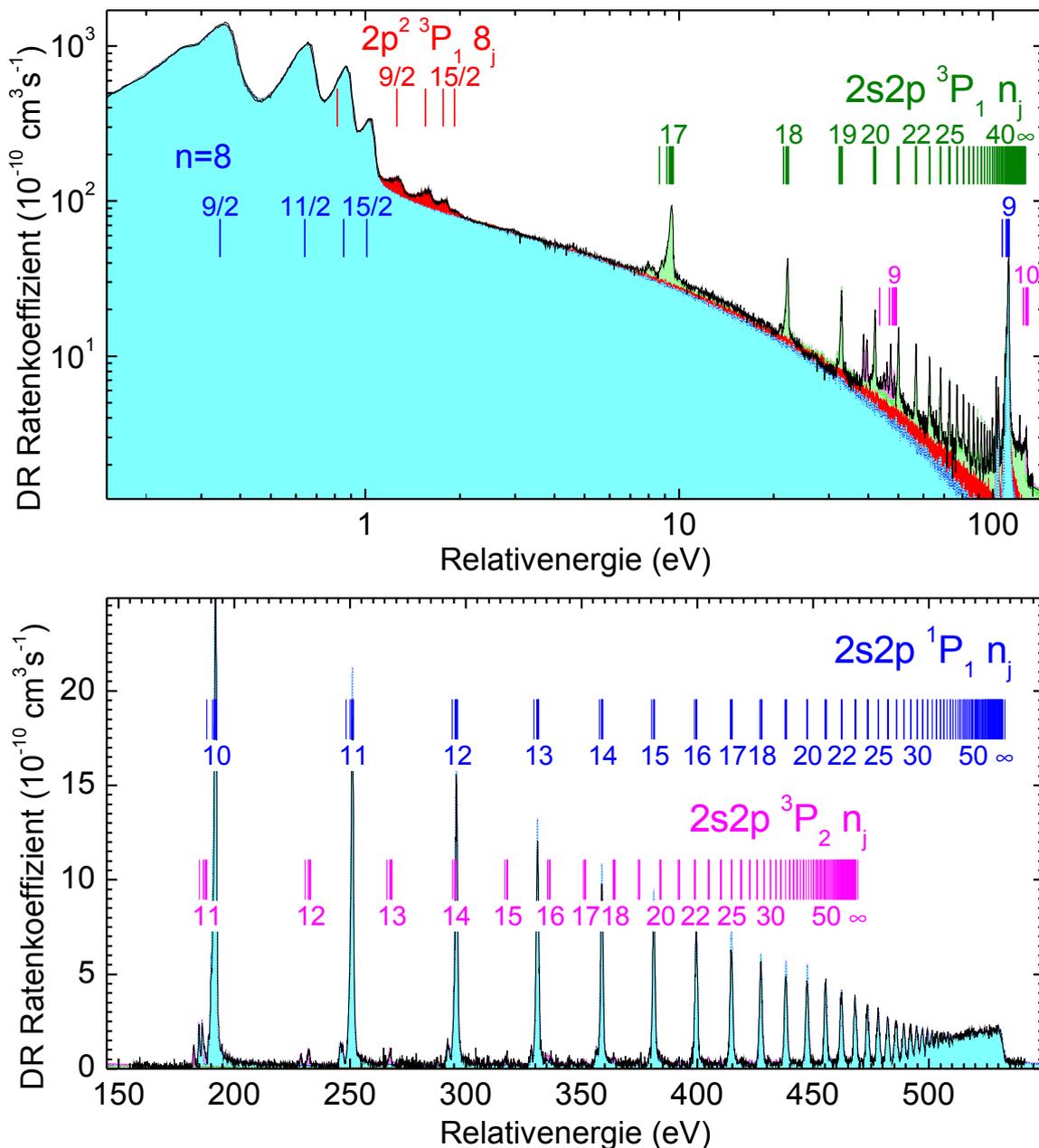


Abbildung 4.17: Absolute Xe^{50+} -DR-Ratenkoeffizienten nach Abzug des radiativen Untergrundes. Fast alle sichtbaren Resonanzen lassen sich den drei DR Rydbergresonanzserien des Grundzustandes $2s^2 1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p^3 P_1)n_j$ bzw. $(2s2p^1 P_1)n_j$ oder $(2s2p^3 P_2)n_j$ [absteigende Reihenfolge] zuordnen. Resonanzen der $2s2p^3 P_0$ -Anregung sind zu schwach, um nachgewiesen zu werden. Zwischen 1 und 2 eV sind zusätzlich DR-Resonanzen der $(2p^2 3P_1)8_j$ -Resonanzgruppe des initial bevölkerten metastabilen $2s2p^3 P_0$ -Zustandes zu erkennen. Diese sind aufgrund des kleinen initialen $2s2p^3 P_0$ -Strahlanteils verhältnismäßig schwach ausgeprägt. Zu Fehlern siehe Abschnitt 3.2.2 bzw. 3.5.6.

4.2.1 $(2s2p\ ^1P_1)9_j$ -Resonanzgruppe

Exemplarisch für die meisten Resonanzgruppen der $\Delta n=0$ -DR bei berylliumartigem Xenon ist in Abb. 4.18 die Struktur der $2s^2\ ^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p\ ^1P_1)9_j$ -Resonanzgruppe dargestellt. Gegenüber der aus Literaturanregungsenergien [34] bei Annahme einer wasserstoffartigen Bindungsenergie des Rydbergelektrons (Abs. 1.1.4) erhaltenen Näherung, weist die experimentell bestimmte Resonanzgruppe eine höhere Feinstrukturaufspaltung auf. Diese ist primär durch die – bei Rydbergelektronen niedrigen Gesamtdrehimpulses – verminderte partielle Abschirmung der Kernladung durch die Rumpfelektronen zu erklären. Mit zunehmendem Gesamtdrehimpuls j liegen die einzelnen Resonanzen immer dichter beieinander. Somit formen die nicht separat auflösbaren Resonanzen einen gemeinsamen Peak, der den größten Teil der Stärke der Reso-

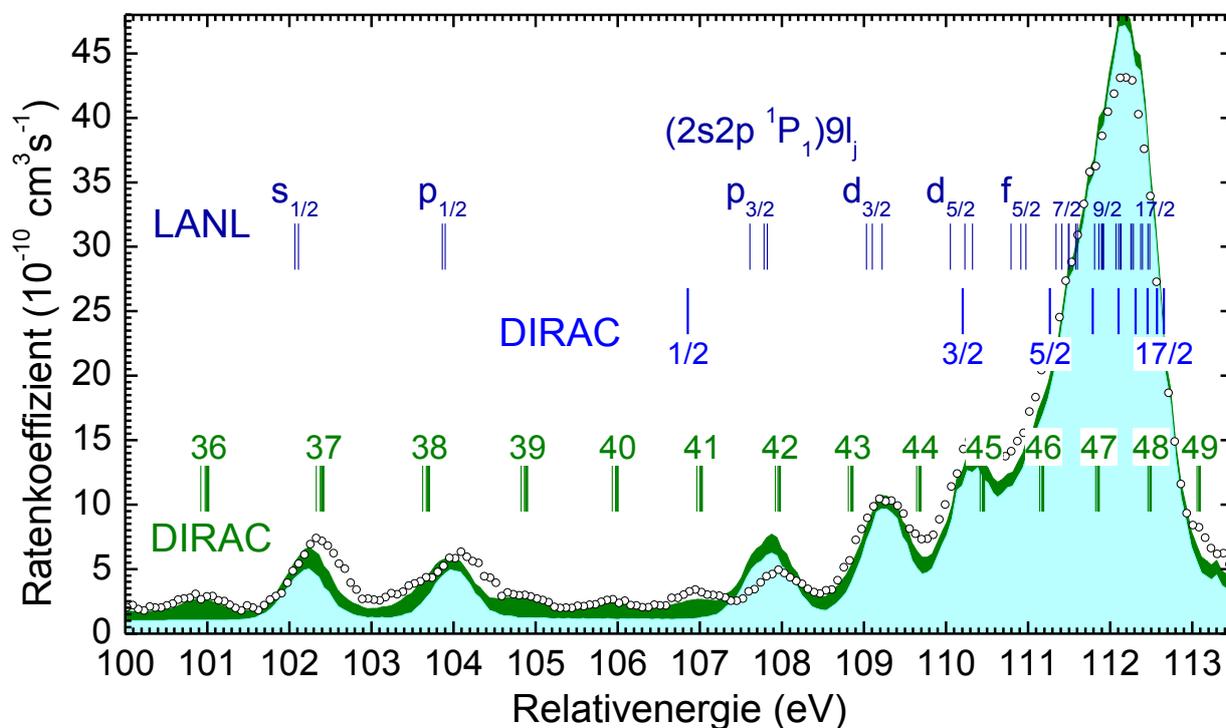


Abbildung 4.18: Absoluter DR-Ratenkoeffizient berylliumartiger Xenonionen bei Relativenergien von 100 bis 114 eV. Resonanzen der $2s^2 + e^- \rightarrow (2s2p\ ^1P_1)9_j$ -Resonanzgruppe sind hell cyanfarben hervorgehoben. Dunkelgrün hervorgehoben wurden Resonanzen der $2s^2 + e^- \rightarrow (2s2p\ ^3P_1)n$ -Resonanzserie. Dargestellte Resonanzpositionen (l) ergeben sich aus der Literatur-Anregungsenergien [34] und wasserstoffartiger Dirac-Näherung der Rydbergbindungsenergien (Gl. 1.4) mit $Z_{\text{eff}} = 50$. Alternativ wurden die 'Bindungsenergien' der Rydbergelektronen der $((2s2p\ ^1P_1)9_j)_J$ -Zustände mittels des LANL-Programmpaketes [103–105] berechnet, die die Wechselwirkung zwischen Rumpf- und Rydbergelektronen berücksichtigt. Die LANL-Näherung gibt die Resonanzpositionen für niedrige j sehr viel besser wieder (Weitere Erläuterungen siehe Text). Die Fehler werden in den Abschnitten 3.2.2 und 3.5.6 diskutiert.

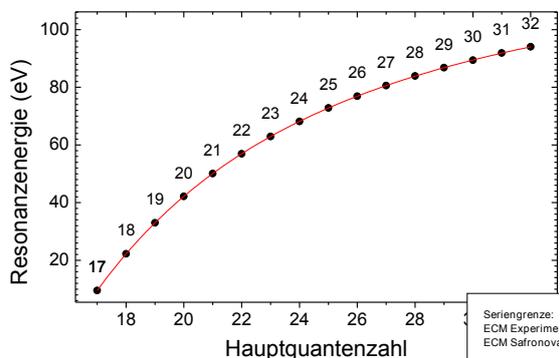
nanzgruppe in sich vereint. Für die $(2s2p\ ^1P_1)9_{1/2}$ -Resonanz ist aufgrund des unterschiedlichen Drehimpulses l eine Ausspaltung in die Resonanzen $(2s2p\ ^1P_1)9_{s_{1/2}}$ und $(2s2p\ ^1P_1)9_{p_{1/2}}$ zu erkennen. Eine ähnliche Aufspaltung ist auch für die $(2s2p\ ^1P_1)9_{3/2}$ -Resonanz sichtbar, doch spielt hier die Elektron-Elektron-Wechselwirkung eine größere Rolle. Mittig in Abb. 4.18 sind Positionen der $((2s2p\ ^1P_1)9_l)_J$ -Resonanzen unter Verwendung von Dirac-Bindungsenergien gemäß Gleichung 1.28 dargestellt. Bei den oben durch vertikale Striche markierten Resonanzenergien wurden die Rydbergbindungsenergien mit dem LANL-Programmpaket [103–105] berechnet. Für die $(2s^2\ ^1S_0 - 2s2p\ ^1P_1)$ -Anregungsenergien wurden – in allen Fällen – anstelle der LANL-Näherung (526.89 eV) die deutlich präzisere Rechnung (532.759 eV) von Safronova *et al.* [34] verwendet (Tab. 4.7). Wie man sieht, stimmen die so berechneten Resonanzpositionen sehr gut mit den gemessenen Resonanzlagen überein.

4.2.2 Bestimmung von Intra-L-Schalen Anregungsenergien

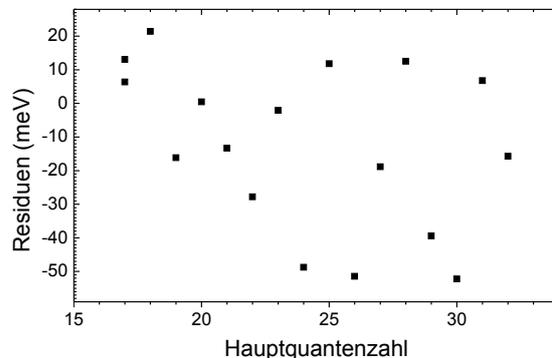
Äquivalent zu dem für lithiumartiges Xenon in den Abschnitten 4.1.3 und 4.1.4 gewonnenen Anregungsenergien lassen sich diese auch für berylliumartiges Xenon aus den gemessenen Rydbergresonanzserien bestimmen. Abbildung 4.19 zeigt die Resonanzenergien, die hieraus mittels Kurvenanpassung (Gl. 4.3) ermittelten Anregungsenergien und die Residuen dieser Anpassung, die ein Maß für den Fehler der Anregungsenergien darstellen. Die Vorgehensweise entspricht hierbei in allen Einzelheiten der in Abschnitt 4.1.2 beschriebenen Methodik und wird deshalb an dieser Stelle nicht wiederholt.

Für die niederenergetischste Resonanzserie $2s^2\ ^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p\ ^3P_1)n$ konnten die DR-Resonanzen von der niedrigsten erlaubten Resonanz ($n=17$) bis zur Hauptquantenzahl 32 klar aufgelöst werden. Aus den so ermittelten Resonanzpositionen konnte die $(2s^2\ ^1S_0 \rightarrow 2s2p\ ^3P_1)$ -Anregungsenergie zu 127.262 ± 0.051 eV bestimmt werden (Abb. 4.19(a) und 4.19(b)). Maßgebliche Fehlerquellen sind die Bestimmung der Hochenergieflanken der Resonanz mit 51 meV Unsicherheit und die Verteilung der Resonanzstärken der Feinstrukturkomponenten mit höherem Gesamtdrehimpuls mit 5 meV Unsicherheit, die, wie in Abschnitt 4.1.2.2 beschrieben, ermittelt wurden.

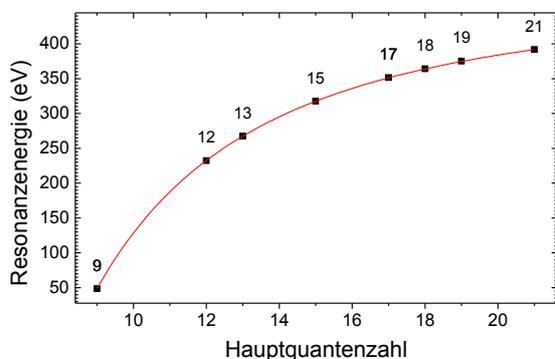
Die $2s^2\ ^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p\ ^3P_2)n$ -Resonanzserie weist im Vergleich zur $(2s2p\ ^3P_1)n$ - wie auch der $(2s2p\ ^1P_1)n$ -Resonanzserie sehr viel schwächere Resonanzen auf (Abb. 4.17). Zusätzlich kommt es zu einer stärkeren Unterdrückung der höheren Drehimpulskomponenten innerhalb der Resonanzgruppe (Abs. 4.2.6). Beide Effekte erschweren die korrekte Ermittlung der Hochenergieflanke beträchtlich und führen zu größeren (systematischen) Fehlern. Somit kann auch die Energie der $(2s^2\ ^1S_0 \rightarrow 2s2p\ ^3P_2)$ -Anregung nur mit, im Vergleich zu den $(2s^2\ ^1S_0 \rightarrow 2s2p\ ^1P_1)$ und $(2s^2\ ^1S_0 \rightarrow 2s2p\ ^3P_1)$ Anregungen, deutlich geringerer Präzision bestimmt werden. Abbildung 4.19(d) stellt die Residuen der Ermittlung der $(2s^2\ ^1S_0 \rightarrow 2s2p\ ^3P_2)$ -Anregungsenergie dar. Dabei zeigt sich die geringere Präzision der Messung in der im Vergleich zu den Residuen der Ermittlung der $(^1P_1)n$ - bzw. $(^3P_1)n$ -Seriengrenzen (Abb. 4.19(f) bzw. 4.19(b)) sehr viel höheren Streuung der Residuen. Die aus den Messungen letztlich ermittelte Anregungsenergie beträgt 469.01 ± 0.39 eV. Maßgebliche Fehlerquellen sind die Bestimmung der Hochenergieflanken der Resonanz mit 390 meV Unsicherheit und die Verteilung der Resonanzstärken der Feinstruk-



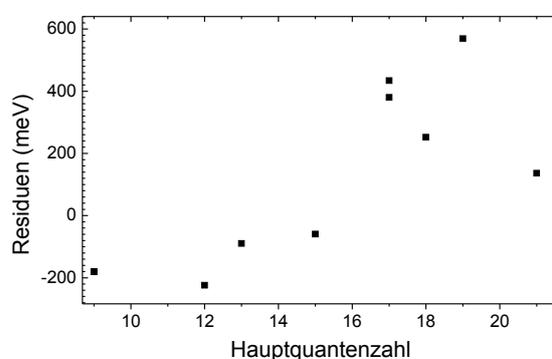
(a) Bestimmung der $2s^2 \ ^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p \ ^3P_1)nl_j$
 Seriengrenze zu 127.262 ± 0.051 eV



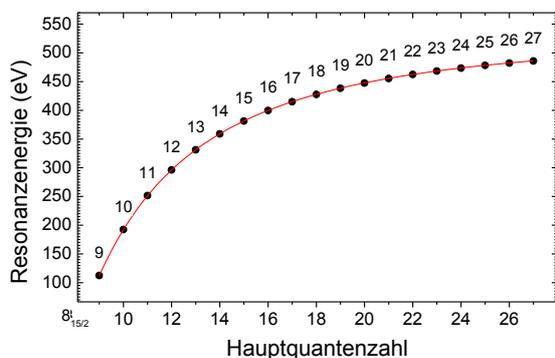
(b) Residuen



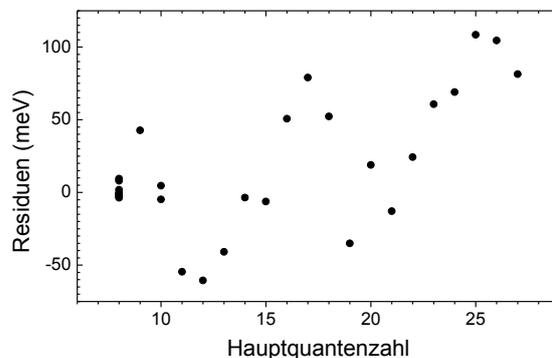
(c) Bestimmung der $2s^2 \ ^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p \ ^3P_2)nl_j$
 Seriengrenze zu 469.01 ± 0.39 eV



(d) Residuen



(e) Bestimmung der $2s^2 \ ^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p \ ^1P_1)nl_j$
 Seriengrenze zu 532.800 ± 0.093 eV



(f) Residuen

Abbildung 4.19: Bestimmung der $2s^2 \ ^1S_0 \rightarrow 2s2p \ ^3P_1, ^3P_2$ und 1P_1 Anregungsenergie in berylliumartigem Xenon aus Hochenergiepeakflanken und experimentellen Resonanzbreiten durch Fit der Seriengrenze nach Abs. 4.1.2 zu 127.262 ± 0.051 (3P_1), 469.01 ± 0.39 (3P_2) bzw. 532.800 ± 0.093 (1P_1). Die Residuen sind nicht statistisch verteilt, da systematische Fehlerquellen dominieren (Abs. 4.1.2.2). Ihre Streuung bestätigt allerdings die angegebenen Unsicherheiten.

turkomponenten höheren Gesamtdrehimpulses mit einer Unsicherheit von 32 meV, die, wie in Abschnitt 4.1.2.2 beschrieben, genähert wurden.

Für die $(2s2p\ ^1P_1)n$ -Resonanzserie sind vollständige Resonanzgruppen für Hauptquantenzahlen zwischen 9 und 32 aufgelöst. Aus der Lage dieser Resonanzen lässt sich die $Xe^{50+} (2s^2\ ^1S_0) \rightarrow Xe^{50+} (2s2p\ ^1P_1)$ -Anregungsenergie zu 532.800 ± 0.093 eV ermitteln (Abb. 4.19(f) bzw. 4.19(f)). Maßgebliche Fehlerquellen sind die Bestimmung der Hochenergieflanken der Resonanz mit 89 meV Unsicherheit und die Verteilung der Resonanzstärken der Feinstrukturkomponenten höheren Gesamtdrehimpulses mit einer Unsicherheit von 27 meV (Abs.4.1.2.2).

4.2.3 Präzisionsmessungen der Anregungsenergien

Die experimentelle DR-Resonanzbreite hängt bei Messungen an Speicherringen stark von der untersuchten Relativenergie ab (Gl. 3.18). Die beste Energieauflösung ist hierbei bei minimalen Relativenergien zu erreichen (Gl. 3.12). Somit lassen sich die Positionen von Resonanzen bei niedriger Relativenergie sehr viel präziser messen als jene bei höheren Relativenergien. Aus den so hochpräzise ermittelbaren Resonanzlagen lässt sich bei Kenntnis der Bindungsenergie des Rydbergelektrons die Energie der zugeordneten Anregung bestimmen.

Ein Beispiel für die Möglichkeiten dieser Präzisionspektroskopie geben Lindroth *et al.* [127]. Ihnen gelang in Pb^{53+} mittels einer auflösbaren $4s_{1/2} + e^- \rightarrow (4p_{1/2}\ 18l_{21/2})_J$ -DR-Resonanz bei 1 meV die $Pb^{53} (4p_{1/2} - 4s_{1/2})$ -Aufspaltung zu 118.010 ± 0.001 eV zu bestimmen. Maßgeblich hierfür waren auf experimenteller Seite die für DR-Experimente ideale Lage der niedrigsten Resonanzen bei minimalen Relativenergien von 10^{-4} bzw. 10^{-3} eV und die Reduktion der Elektronenstrahltemperatur durch adiabatische Expansion [128] auf $T_{\perp} = 1$ meV bzw. $T_{\parallel} = 0.08$ meV. Auf theoretischer Seite erlaubte die relativ hohe Haupt- und Gesamtdrehimpulsquantenzahl des Rydbergzustands $18l_{21/2}$ eine besonders akkurate Beschreibung durch Atomstrukturtheorie. Weitere Beispiele für diese Methode ist die Bestimmung der $(2s-2p_{3/2})$ -Anregungsenergie in Sc^{18+} durch Kieslich *et al.* zu $44.3107(19)$ eV [101] bzw. Lestinsky *et al.* zu $44.30943(20)$ eV [87] aus der Lage der Resonanzen $(2p_{3/2}10d_{5/2})_{J=4}$, $(2p_{3/2}10d_{3/2})_{J=2}$ und $(2p_{3/2}10d_{3/2})_{J=3}$ bei 30, 35 und 68 meV.

4.2.3.1 $2s^2\ ^1S_0 - 2s2p\ ^1P_1$ -Anregungsenergie

Im Unterschied zu anderen Resonanzen wird für die $(2s2p\ ^1P_1)n_j$ -Resonanzserie im Falle der 8_j -Resonanzgruppe die Feinstruktur der Resonanzgruppe bis zum höchsten Gesamtdrehimpuls des Rydbergelektrons ($j = 15/2$) einzeln aufgelöst (Abb. 4.21). Im Vergleich zu dem in Abschnitt 4.1.2 beschriebenen, allgemeinen Fall entfallen so Unsicherheiten, die von einer mangelnden Auflösung unterschiedlicher Feinstrukturkomponenten verursacht werden. Für die Bestimmung der Anregungsenergie aus der Position der DR-Resonanzen $E_{Res}(i)$ und der Bindungsenergie $E_B(i)$ der Rydbergzustände i wurden im Folgenden zwei verschiedene Ansätze parallel durchgeführt. Es sei schon einmal angemerkt, dass die Unsicherheit der Bestimmung der Rydberg-Bindungsenergie den Fehler der Anregungsenergie dominiert, so dass sich die hieraus extrahierte Anregungsenergie bei Vorliegen einer genaueren Theorie signifikant verbessern würde.

Wasserstoffnäherung Ein Ansatz der Bestimmung der Anregungsenergie stellt die Verwendung einer wasserstoffartigen Näherung mit – durch die Rumpfelektronen verminderter – effektiver Kernladungszahl $Z_{\text{eff}} = 50$ für die Rydbergbindungsenergie dar (Gl. 1.4). Diese Näherung geht davon aus, dass sich der Einfluss der Rumpfelektronen auf das Rydbergelektron auf die partielle Abschirmung des Kerns beschränkt. Die Gültigkeit dieser Annahme bzw. die Güte der Näherung hängt stark vom Zustand des Rydbergelektrons ab. Je höher Haupt- und Gesamtdrehimpulsquantenzahl des Rydbergzustands sind, desto besser ist diese Näherung. Hauptquantenzahlen, die dem untersuchten $8_{j \geq 9/2}$ -Rydbergzustand benachbart sind, zeigen für niedrige Gesamtdrehimpulse ($j \leq 5/2$) starke Abweichungen von der Dirac-Näherung (Abb. 4.18). Die Abnahme dieses Fehlers für höhere j lässt für den $8_{15/2}$ -Zustand den geringsten Einfluss dieser Unsicherheit

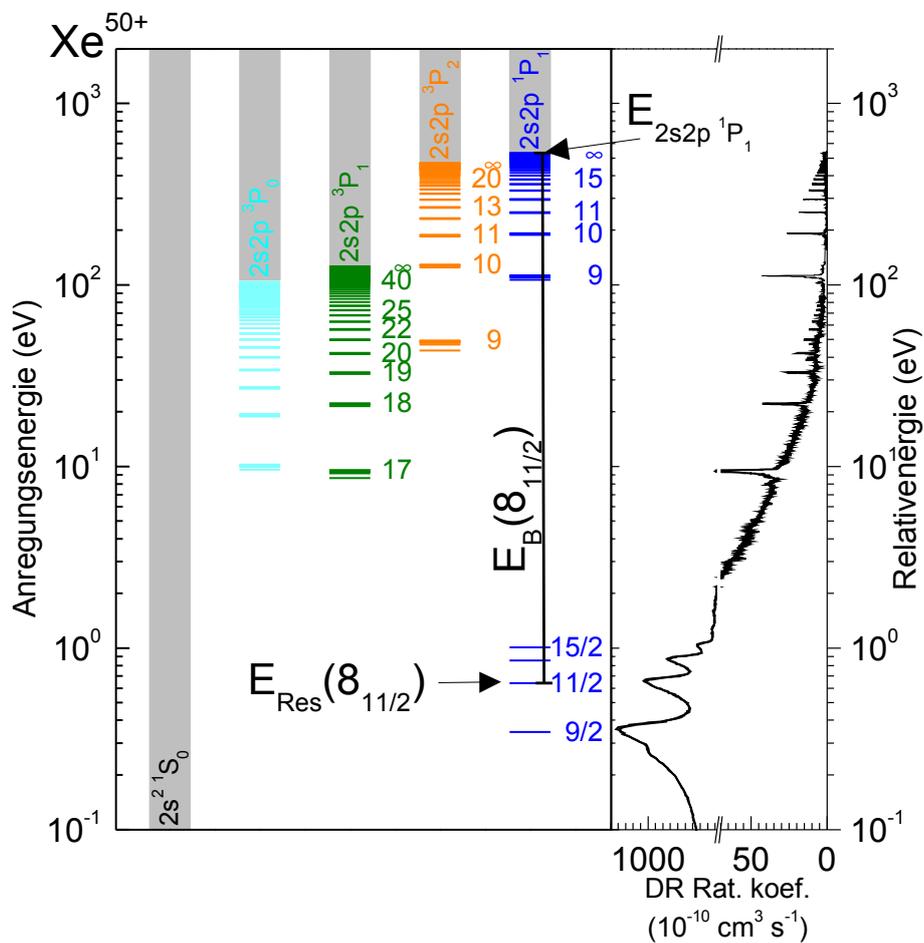


Abbildung 4.20: Schema der Bestimmung von Anregungsenergien ($E_{2s2p^1P_1}$) als Summe der DR-Resonanzlagen ($E_{\text{Res}}(n_j)$) und Rydbergbindungsenergien ($E_B(n_j)$); Zum Vergleich: Gemessenes DR-Spektrum und Xe^{50+} -Energieschema mit $(2s2p^3P_0)n_j$ -, $(2s2p^3P_1)n_j$ -, $(2s2p^3P_2)n_j$ - und $(2s2p^1P_1)n_j$ -DR-Resonanzserien angegeben; — Resonanzpositionen nach Gl. 1.28 unter Verwendung von Anregungsenergien [34] und Diracbindungsenergien (Gl. 1.4) bei $Z_{\text{eff}} = 50$.

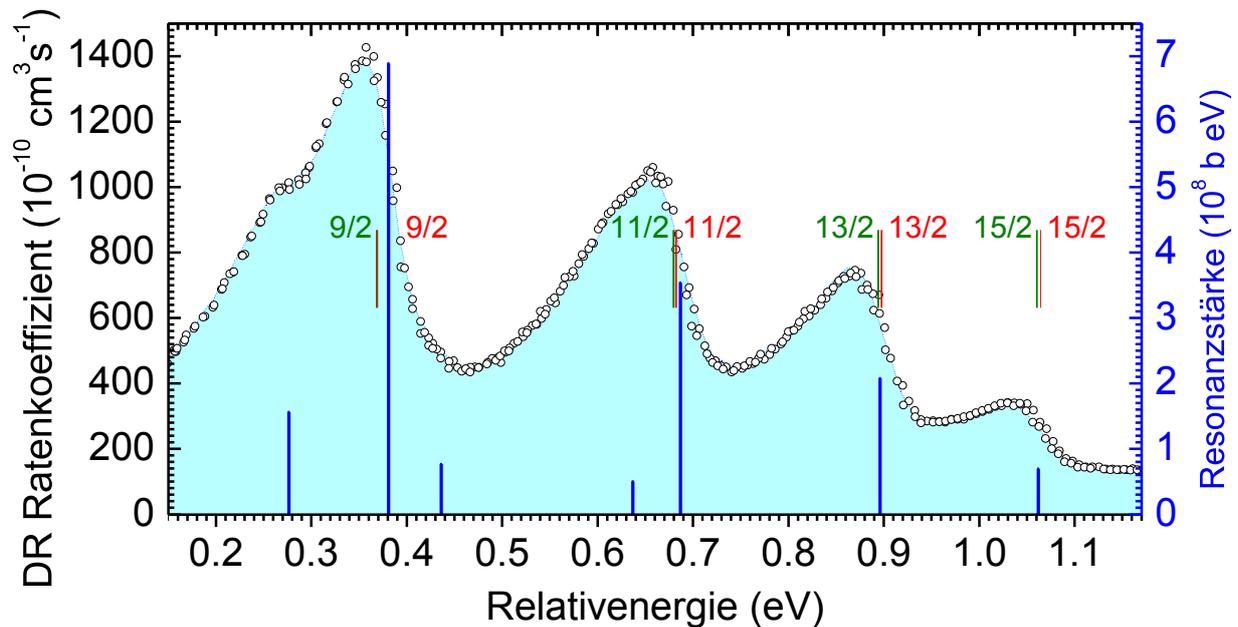


Abbildung 4.21: \circ Gemessene, absolute Xe^{50+} -DR-Ratenkoeffizienten für Relativenergien zwischen 0 und 1.1 eV. Im Vergleich hierzu ist ein auf Basis von Resonanzstärken I und -lagen simulierten Spektrum (cyanfarbene Fläche) dargestellt. Die vier sichtbaren Resonanzen gehören zur $2s^2 \ ^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p \ ^1P_1)8l_j \ ^2L_J$ -Resonanzgruppe mit den Feinstrukturkomponenten $j = 9/2, 11/2, 13/2$ und $15/2$. Zwischen den Resonanzlagen verschiedener Messmodi ($\gamma_e > \gamma_i$ bzw. $\gamma_e < \gamma_i$) ist kein signifikanter Unterschied festzustellen. Für die $9/2$ -Resonanz ist die Aufspaltung festzustellen. Zu Fehlern siehe Abschnitt 3.2.2 bzw. 3.5.6.

auf die $(2s^2 \ ^1S_0 - 2s2p \ ^3P_0)$ -Anregungsenergie erwarten. Gleichzeitig bietet der Vergleich der aus verschiedenen 8_j -Unterzuständen erhaltenen Anregungsenergien einen Hinweis auf den Fehler der Näherungen.

Zur Ermittlung der Anregungsenergie E_{1P_1} musste zuerst die experimentelle Resonanzlage bestimmt werden. Da die Elektronenstrahltemperatur nicht nur zu einer Resonanzverbreiterung sondern auch zu einer Resonanzverschiebung führt ist es nicht sinnvoll die Resonanzlage aus dem Schwerpunkt des experimentellen Spektrums zu bestimmen. Stattdessen wurde ein simuliertes (Abs. 3.3.4) Spektrum erzeugt. Die diesem zugrunde liegenden Resonanzpositionen und -stärken ($E(j,i)$, $S(j,i)$) wurden variiert bis simuliertes und experimentelles Spektrum in Übereinstimmung waren. Nun wurde aus den so erhaltenen Resonanzlagen und -stärken jeder $(2s2p \ ^1P_1)8_j$ -Resonanzgruppe eine Resonanzlage wie folgt zugeordnet:

$$E_{\text{Res}}^{\text{exp}}(j) = \frac{\sum_i E(j,i) \cdot S(j,i)}{\sum_i S(j,i)} \quad (4.7)$$

Dieses Verfahren lässt sich für die zwei Messmodi ($\gamma_e > \gamma_i$ bzw. $\gamma_e < \gamma_i$) getrennt durchführen. Die so erhaltenen Resonanzpositionen sind in Abb. 4.21 als vertikale Striche eingetragen. Die Addition der Dirac-Näherung der Bindungsenergie des Rydbergelektrons (Gl. 1.4) ergibt aus je-

der der so ermittelten 8_j -Resonanzposition ($E_{\text{Res}}^{\text{exp}} \gamma_{e \leq \gamma_i}$) einen unabhängigen Wert der ($2s^2 \ ^1S_0 \rightarrow 2s2p \ ^3P_0$)-Anregungsenergie (Tab. 4.5). Abbildung 4.23 zeigt diese Anregungsenergien in Abhängigkeit von der Resonanzlage. In der Abnahme der Anregungsenergien für kleiner werdende j erkennt man die zunehmende Überschätzung ihrer Bindungsenergien durch die Dirac-Näherung.

LANL-Programmpaket In einem zweiten Ansatz wurde das LANL-Programmpaket [103–105] zur Bestimmung der Bindungsenergien herangezogen. Dieses berücksichtigt die Kopplung zwischen Atomrumpf und Rydbergelektronen, so dass jeder $((2s2p \ ^1P_1)8l_j)_J$ -Unterzustand eine (leicht) unterschiedliche Bindungsenergie erhält. Entsprechend müssen zur Bestimmung der Anregungsenergie für jeden dieser Zustände Resonanzlagen ($E_{\text{Res}}^{\text{exp}}(j,l,J)$) ermittelt werden.

Hierzu wird erneut ein auf Basis von Resonanzlagen ($E(j,l,J)$) und -stärken ($S(j,l,J)$) simuliertes (Abs. 3.3.4) Spektrum an das Experimentelle Spektrum angepasst. Die hierzu verwendeten Energien und Resonanzstärken werden wie folgt berechnet (vgl. Gl. 1.31):):

$$E(j,l,J) = E(j) + \Delta E(l,J) \quad S(j,l,J) = c \cdot \frac{(2J+1)}{E(j,l,J)} \cdot \frac{A_a(j,l,J) \cdot A_{\Gamma}(l)}{A_a(j,l,J) + A_{\Gamma}(l)} \quad (4.8)$$

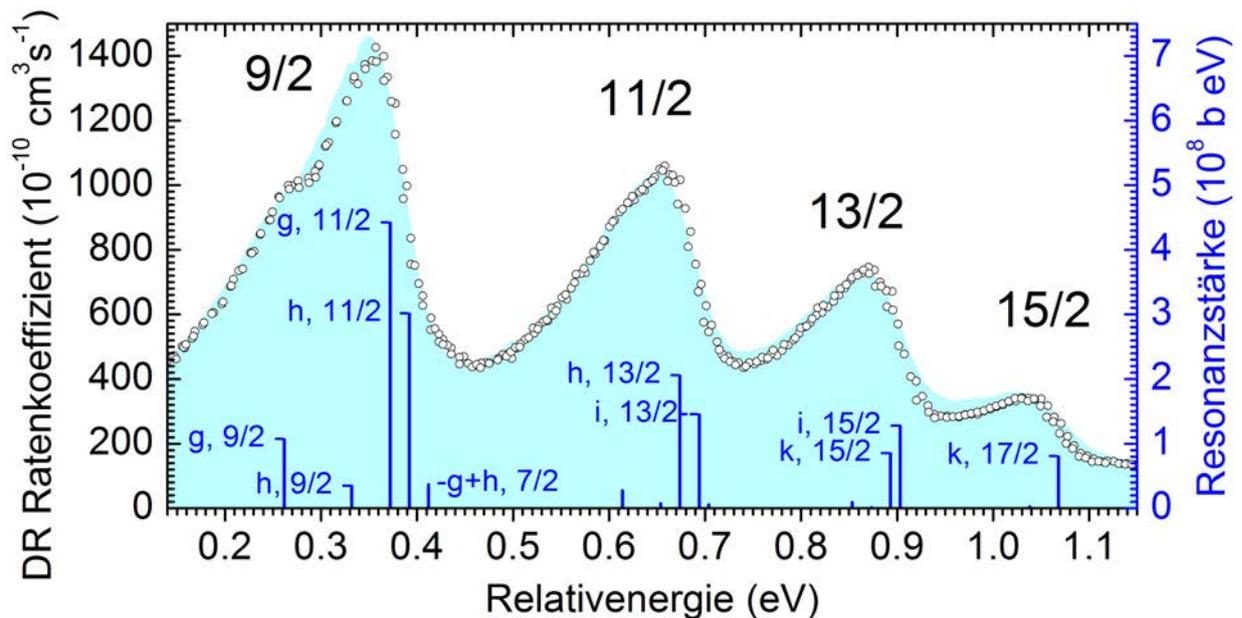


Abbildung 4.22: \circ Gemessene absolute Xe^{50+} -DR-Ratenkoeffizienten für Relativenergien zwischen 0 und 1.1 eV im Vergleich mit einem auf Basis von Resonanzstärken l und -lagen (Gl. 4.8) simulierten Spektrum (cyanfarbene Fläche). Die vier sichtbaren Resonanzen gehören zur $2s^2 \ ^1S_0 + e^- \rightarrow ((2s2p \ ^1P_1)8l_j)_J$ -Resonanzgruppe mit den Feinstrukturkomponenten $j = 9/2, 11/2, 13/2$ und $15/2$. Ihre weitere Aufspaltung gemäß Rydbergdrehimpulsquantenzahl l und totalem Gesamtdrehimpuls J ist für stärkere Resonanzen angegeben (LANL-Programmpaket [103–105]). Für die energetisch und bezüglich j niedrigste Feinstrukturkomponente zeigt sich die Aufspaltung auch im gemessenen Spektrum. Zu Fehlern siehe Abschnitt 3.2.2 bzw. 3.5.6.

Tabelle 4.5: Bestimmung der $(2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^1P_1)$ -Anregungsenergie ($E_{1P_1}^{\gamma_e \lesseqgtr \gamma_i}$) aus den $(2s2p\ ^1P_1)8l_j$ -DR-Resonanzlagen ($E_{\text{Res}}^{\text{exp } \gamma_e \lesseqgtr \gamma_i}$) und der Rydbergbindungsenergie E_B . Letztere wurde entweder in Diracnäherung gemäß Gleichung 1.28 oder mittels LANL-Programmpaket [103–105] bestimmt. In Klammern ist die Unsicherheit der Energieachse gemäß Gl. 3.12 aufgetragen. Der Vergleich der Analysevarianten, 8_j -Unterkontinua und Messmodi ($\gamma_e > \gamma_i$ bzw. $\gamma_e < \gamma_i$) erlaubt Rückschlüsse auf systematische Fehler der so extrahierten Anregungsenergie (Abb. 4.23). In der LANL-Näherung wurden statt aller 21 $((2s2p\ ^1P_1)8l_j)_J$ -Zustände die gewichtet gemittelten Resonanzpositionen und Bindungsenergien angegeben.

Anmerkung: Die jeweiligen angegebene Lagen der Resonanzschwerpunkte in Dirac- und LANL Näherung unterscheiden sich bei identischem j minimal. Ursache hierfür ist der Unterschied in der gewählten Kurvenanpassung. In der Dirac-Näherung wurden an die 4 klar auflösbaren j -Resonanzgruppen insgesamt 7 Sätze aus Resonanzlage und -stärke (14 freie Parameter) angepasst (Abb. 4.21). In LANL-Näherung wurden alle 21 Zustände berücksichtigt (Abb. 4.22), wobei der Rückgriff auf l- und J-Energieaufspaltung sowie Autoionisations- und radiativen Raten es erlaubte, die Zahl der freien Parametern auf 5 zu reduzieren. Es bleibt festzuhalten, dass diese Unterschiede innerhalb der angegebenen Fehler der experimentellen Resonanzlage liegen.

Methode	Resonanzgruppe	$E_{\text{Res}}^{\text{exp } \gamma_e > \gamma_i}$	$E_{\text{Res}}^{\text{exp } \gamma_e < \gamma_i}$	E_B	$E_{1P_1}^{\gamma_e > \gamma_i}$	$E_{1P_1}^{\gamma_e < \gamma_i}$
Dirac	$8_{9/2}$	0.368(6)	0.369(6)	532.415	532.783(6)	532.784(6)
	$8_{11/2}$	0.680(7)	0.682(7)	532.119	532.798(7)	532.801(7)
	$8_{13/2}$	0.894(8)	0.898(8)	531.907	532.802(8)	532.805(8)
	$8_{15/2}$	1.061(8)	1.064(8)	531.749	532.810(8)	532.813(8)
LANL	$8_{9/2}$	0.367(6)	0.368(6)	532.515	532.882(6)	532.883(8)
	$8_{11/2}$	0.678(7)	0.681(7)	532.186	532.864(7)	532.867(8)
	$8_{13/2}$	0.897(8)	0.899(8)	531.955	532.852(8)	532.854(8)
	$8_{15/2}$	1.067(8)	1.071(8)	531.788	532.855(8)	532.859(8)

Hierbei ist $E(j)$ ein Parameter zur Anpassung des 8_j -Resonanzgruppenschwerpunktes an das gemessene Spektrum, $\Delta E(I, J)$ die durch den LANL-Programmcode gegebene Aufspaltung der Einzelresonanzen der 8_j -Resonanzgruppe, c ein Parameter zur Absolutskalierung der Resonanzstärken und $2J+1$ die Multiplizität der $((2s2p\ ^1P_1)8l_j)_J$ -Unterkontinua. Die Autoionisationsraten $A_a(j, l, J)$ des Zustandes $((2s2p\ ^1P_1)8l_j)_J$ wurden durch Anwendung der Skalierungsregel $A_a \propto 1/n^3$ aus den LANL-Autoionisationsraten des $((2s2p\ ^1P_1)9l_j)_J$ -Zustandes gewonnen*. Die radiative Rate A_Γ entspricht der Summe der Raten aller erlaubten radiativen Stabilisierungen von Rumpf- oder Rydbergelektron.

*Der LANL-Programmcode ist nicht in der Lage, die $(2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^3P_0)$ -Aufspaltung mit einer an Safronova *et al.* [34] bzw. Cheng *et al.* [43] heranreichenden Güte zu berechnen. Die Unterschätzung der Anregung führt dazu, dass der Programmcode die $(2s2p\ ^1P_1)8_j$ -Zustände als gebunden ansieht und demzufolge keine Autoionisationsraten berechnet. Aus diesem Grund mussten diese Raten aus den Zuständen höherer Hauptquantenzahl hergeleitet werden.

$$A_{\Gamma}(l) = A_{\gamma}(^1P_1 \rightarrow ^1S_0) + \sum_n A_{\gamma}(8l \rightarrow n(l-1)) + A_{\gamma}(8l \rightarrow n(l+1)) \quad (4.9)$$

Hierbei wurde für die Rumpfabregung $A_{\gamma}(^1P_1 \rightarrow ^1S_0)$ ein Literaturwert [43] genutzt und die Abregung des Rydbergelektrons $A_{\gamma}(8l \rightarrow n(l'))$ in Wasserstoffnäherung berechnet. Es sei darauf hingewiesen, dass die Abregung der Rydbergelektronen die radiative Stabilisierung dominiert. Im Rahmen der Anpassung des simulierten Spektrums an das experimentell bestimmte Spektrum wurden die Parameter c , $E(9/2)$, $E(11/2)$, $E(13/2)$ und $E(15/2)$ variiert. Abbildung 4.22 zeigt die so gewonnenen Resonanzlagen und Stärken sowie einen Vergleich des aus ihnen simulierten Spektrums mit dem gemessenen DR-Spektrum. Nach Addition der mit dem LANL-Code berechneten Bindungsenergien $E_B(j, l, J)$ ergibt sich hieraus die Anregungsenergie.

$$E_{1P_1}(j) = E_{\text{Res}}^{\text{exp}}(j, l, J) + E_B(j, l, J) \quad (4.10)$$

Tabelle 4.5 enthält die so aus jeder Feinstrukturkomponente unabhängig ermittelte ($2s^2 \ ^1S_0$ -

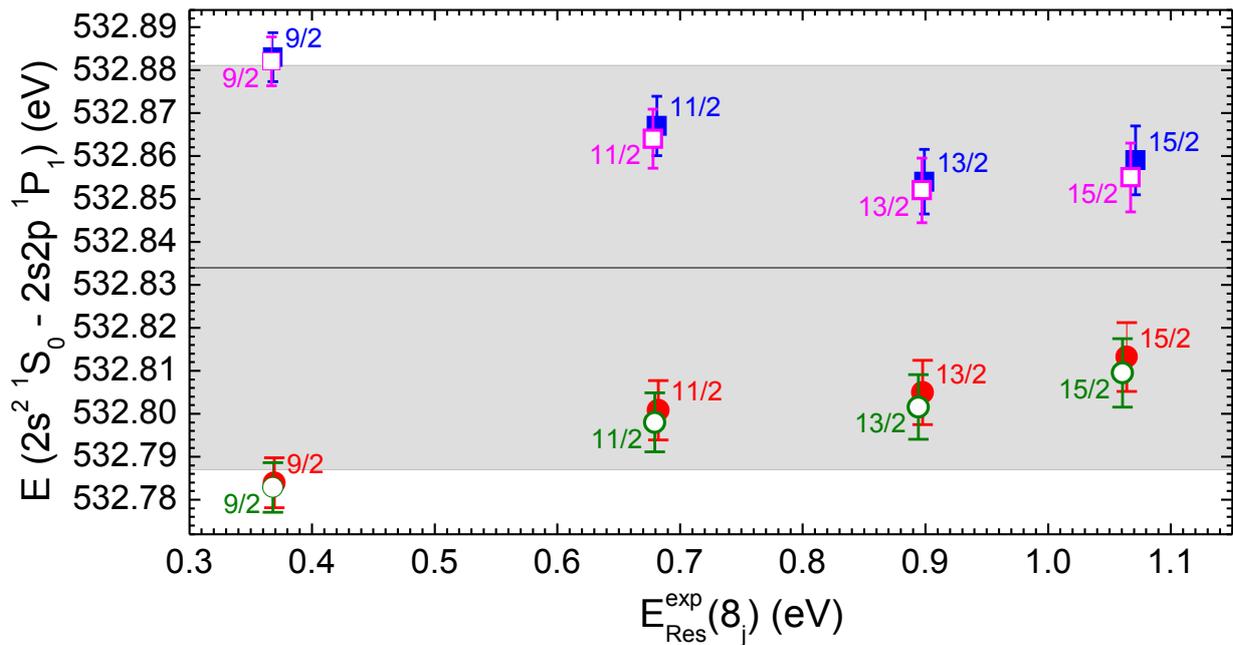


Abbildung 4.23: Bestimmung der ($2s^2 \ ^1S_0 - 2s2p \ ^1P_1$)-Anregungsenergie aus der Lage der ($2s2p \ ^1P_1$) $8l_j$ -DR-Resonanzen ($E_{\text{Res}}^{\text{exp}}$) und Dirac- \circ , \bullet bzw. LANL-Bindungsenergien (\blacksquare , \square) gemäß Gl. 1.28 (Tab. 4.5). Für niedrige j unterschätzt die Dirac-Näherung die Bindungsenergie, was zu einer zu niedrigen Anregungsenergie führt. Die Unterschiede zwischen verschiedenen Messmodi $\gamma_e > \gamma_i$ bzw. $\gamma_e < \gamma_i$ (offene bzw. gefüllte Symbole) sind klein und liegen innerhalb der Unsicherheiten der Energieachse (Gl. 3.12). Die final ermittelte Anregungsenergie ist als durchgezogene Linie angegeben (Unsicherheit in grau).

$2s2p^3P_0$)-Anregungsenergie[†]. Statt der Resonanzenergien aller 21 existierenden $((2s2p^1P_1)8l_j)_J$ -Zustände wurde dort als $(2s2p^1P_1)8l_j$ -Resonanzlage ein mit den Resonanzstärken gewichteter Mittelwert angegeben. Ein Vergleich mit den Ergebnissen der Diracnäherung findet sich auch in Abbildung 4.23.

Vergleich und Schlussfolgerung Wie man Tabelle 4.5 entnehmen kann, entsprechen die Unterschiede zwischen den Resonanzpositionen der verwendeten Näherung bzw. Messmodi wie erwartet der Unsicherheit der Energieachse von hier etwa 10 meV.

Hingegen unterschieden sich die Dirac- und LANL-Bindungsenergie für $j=9/2, 11/2, 13/2$ und $15/2$ um 100, 67, 48 bzw. 39 meV. Dies gilt äquivalent auch für die mittels der Bindungsenergie extrahierten Anregungsenergien (Abb. 4.23). Diese Unterschiede werden maßgeblich von der Wechselwirkung zwischen Rydbergelektron und Atomrumpf verursacht, so dass es nicht verwunderlich ist, dass sie für höhere Drehimpulse des Rydbergelektrons geringer ausfallen. Entsprechend ist es sinnvoll, die Anregungsenergie aus dem $8_{15/2}$ -Zustand zu extrahieren. Wählt man als $(2s^2^1S_0 \rightarrow 2s2p^3P_0)$ -Anregungsenergie den Mittelwert der Ergebnisse in Dirac- und LANL-Näherung und als systematischen Fehler ihren Unterschied, so erhält man:

$$E(2s^2^1S_0 \rightarrow 2s2p^1P_1) = (532.834 \pm 0.008 \pm 0.046) \text{ eV} \quad (4.11)$$

Die erste Fehlerangabe entspricht der systematischen Unsicherheit der Bestimmung der Resonanzposition. Die zweite Angabe bezieht sich auf die systematische Unsicherheit der Bestimmung der Bindungsenergie des Rydbergelektrons.

Von Kieslich *et al.* [101] wurde für die $Sc^{17+}(2p_{3/2}10l_j)_J$ -Resonanzen ein ausführlicher Vergleich zwischen Wasserstoffnäherung und exakter, relativistischer Vielteilchen-Störungstheorie (RMBPT) des lithiumartigen Systems durchgeführt (Eine vergleichbar präzise Theorie ist für berylliumartige Systeme nicht verfügbar.). Kieslich *et al.* stellten fest, dass die Differenzen beider Ansätze für niedrige Gesamtdrehimpulse j des Rydbergelektrons drastisch sind (127 meV bei $(2p_{3/2}10d_{3/2})_3$ -Zustand) während sie für alle $j \geq 11/2$ weniger als 11 meV betragen. Angesichts der Unterschiede zum vorliegenden Fall in Hinblick auf effektive Kernladung, Hauptquantenzahl des betrachteten Rydbergzustands, Zahl der L-Schalen-Elektronen und Rydbergbindungsenergie lassen sich diese Zahlenwerte nicht auf den hier betrachteten $Xe^{49+}((2s2p^1P_1)8l_j)_j$ -Zustand übertragen.

4.2.3.2 $2s2p^3P_0 - 2p^2^3P_1$ -Anregungsenergie

Bei der Erzeugung des gewünschten berylliumartigen Ladungszustands mittels 'Stripping' wird nicht nur der $2s^2^1S_0$ -Grundzustand, sondern auch eine Vielzahl angeregter Zustände bevölkert. Bis auf den $2s2p^3P_0$ -Zustand – den niedrigsten, angeregten Zustand – sind dabei alle in relevanter Häufigkeit bevölkerten Zustände so kurzlebig, dass sie vor Beginn der Messung entvölkert sind. Der $(2s2p^3P_0 - 2s^2^1S_0)$ -Übergang kann nur mittels E1M1-Zweiphotonenabregung (Abb.

[†]Da die l- und J-Aufspaltung $\Delta E(l,J)$ ebenso wie die l- und J-abhängige Bindungsenergie $E_B(j,l,J)$ dem LANL-Code entnommen wurden, heben sich diese bei der Ermittlung der Anregungsenergie auf.

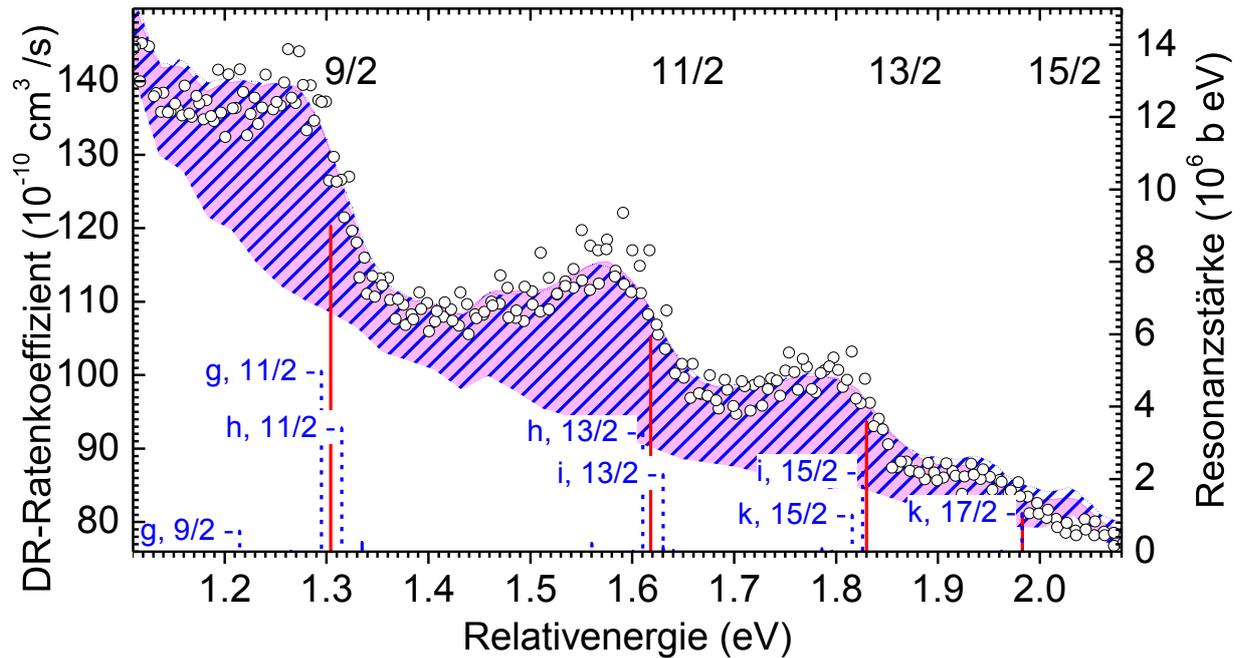


Abbildung 4.24: \circ Gemessene, absolute Xe^{50+} -DR-Ratenkoeffizienten. Die sichtbaren Resonanzen gehören zur $2s2p\ ^3P_0+e^- \rightarrow ((2p^2\ ^3P_1)8l_j)_J$ -DR mit $j=9/2, 11/2, 13/2$ und $15/2$. Zum Vergleich sind simulierte Spektren (flächig bzw. schraffiert) angegeben, die auf Basis von Resonanzstärken und Lagen (l bzw. l) in Wasserstoff- bzw. LANL-Näherung der Bindungsenergie (Abs. 4.2.3.1) gewonnen wurden. In letzterem Fall ist die l- bzw. J-Aufspaltung angegeben. Resonanzstärken beziehen sich auf das gemessene Spektrum, in dem diese gemäß des nur 4.5%-igen $2s2p\ ^3P_0$ -Strahlanteils (Abs. 4.13) auf $4.5/100$ ihrer 'realen' Werte vermindert sind.

1.13) oder durch noch langsamere Abregungen wie z.B. $3E1$ -Übergänge [42] erfolgen. Somit verfügt er über eine hinreichend lange Lebensdauer, um während der Messung mit einem relevantem Anteil im Strahl präsent zu sein (Abs. 1.1.3.1). Abbildung 4.24 zeigt Resonanzen, die diesem initial metastabilen Zustand zuzuordnen sind. Dabei konnten Resonanzen der $2s2p\ ^3P_0 + e^- \rightarrow (2p^2\ ^3P_1)8_j$ -Resonanzgruppe für $j=9/2$ bis $15/2$ klar aufgelöst werden. Aus der Lage von DR-Resonanzen einzelner Gesamtdrehimpulscomponenten des Rydbergelektrons lässt sich, äquivalent zu Abschnitt 4.2.3.1, bei Kenntnis der Bindungsenergie, die $(2s2p\ ^3P_0-2s2p\ ^3P_1)$ -Anregung bestimmen. Auch hier kann die Bindungsenergie entweder in Wasserstoffnäherung (Gl. 1.4) oder unter Verwendung des LANL-Programmpaketes [103–105] ermittelt werden.

Abbildung 4.25 zeigt die aus den Resonanzen gewonnenen Anregungsenergien für verschiedene Methoden der Bestimmung der Bindungsenergien sowie Messmodi ($\gamma_e > \gamma_i$ bzw. $\gamma_e < \gamma_i$), die in Tabelle 4.6 dokumentiert sind. Wie man in Abb. 4.25 sieht, stimmen aus für $j=13/2$ und $15/2$ ermittelten Seriengrenzen im Rahmen der Fehler der Energieachse überein. Ihre Mittelung liefert das Ergebnis für die $(2s2p\ ^3P_0-2s2p\ ^3P_1)$ -Anregungsenergie von 533.735 eV. Angesichts des hohen systematischen Fehlers der Bindungsenergie der $(2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^1P_1)$ -Anregungen (Abs. 4.2.3.1) erscheint auch hier eine konservative Fehlerabschätzung geboten. Entsprechend wird die

Hälfte der Differenz der aus $j = 9/2$ in Dirac- bzw. LANL-Näherung ermittelten Bindungsenergien (26 meV) als systematischer Fehler mit großer Konfidenz abgeschätzt. Somit ergibt sich für die $(2s2p\ ^3P_0 - 2p^2\ ^3P_1)$ -Anregungsenergie in berylliumartigem Xenon folgender Wert:

$$E(2s2p\ ^3P_0 - 2p^2\ ^3P_1) = 533.735 \pm 0.009 \pm 0.026 \text{ eV} \quad (4.12)$$

Die erste Fehlerangaben entspricht der systematischen Unsicherheit der Bestimmung der Resonanzposition. Die zweite Angabe bezieht sich auf die systematische Unsicherheit der Bestimmung der Bindungsenergie des Rydbergelektrons.

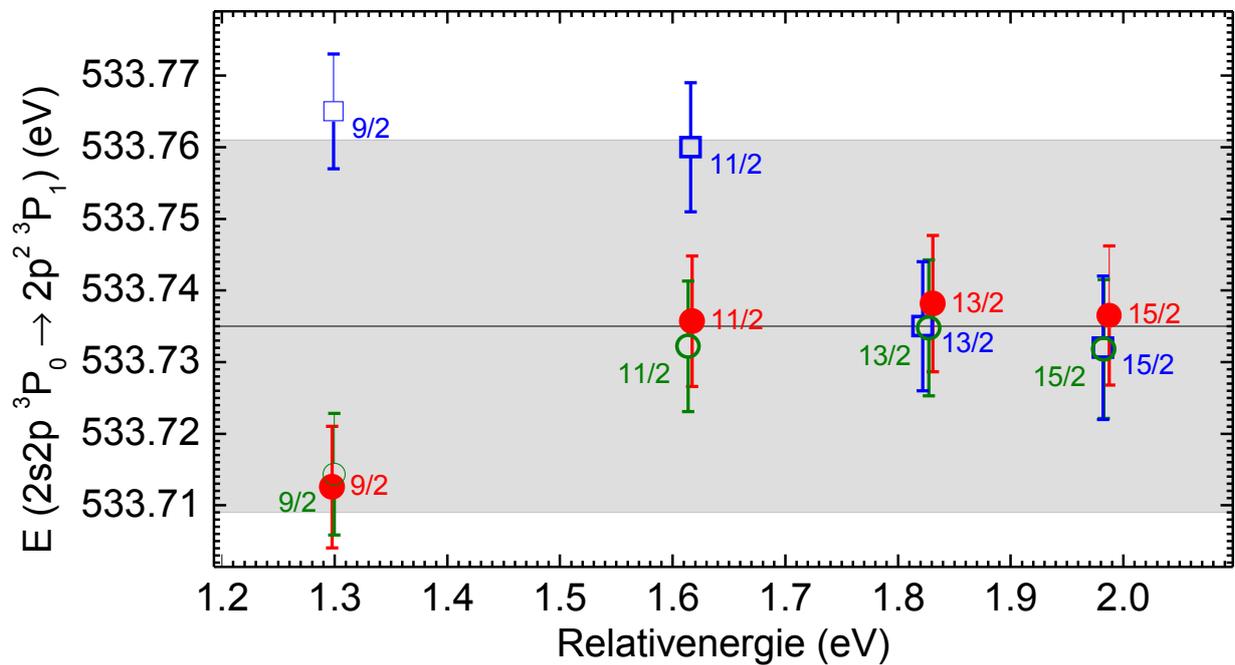


Abbildung 4.25: Bestimmung der $(2s2p\ ^3P_0 - 2p^2\ ^3P_1)$ -Anregungsenergie aus der Lage der $2s2p\ ^3P_0 + e^- \rightarrow (2p^2\ ^3P_1)8l_j$ -DR-Resonanzen ($E_{\text{Res}}^{\text{exp}}$) und Dirac- (\circ , \bullet) bzw. LANL[103–105]-Bindungsenergien \square gemäß Gl. 1.28 (siehe Tab. 4.6). Insbesondere für niedrige j unterschätzt die Dirac-Näherung die Bindungsenergie. Dies führt zu einer zu niedrigen Anregungsenergie. Die Unterschiede verschiedener Messmodi ($\gamma_e > \gamma_i$ \circ bzw. $\gamma_e < \gamma_i$ \bullet) sind im Vergleich hierzu klein und liegen innerhalb der zuvor bestimmten Unsicherheiten der Energieachse (Gl. 3.12). Als durchgezogene Linie ist die final ermittelte Anregungsenergie angegeben. Ihr Fehler ist grau dargestellt.

Tabelle 4.6: Bestimmung der $(2s2p\ ^3P_0 \rightarrow 2p^2\ ^3P_1)$ -Anregungsenergie ($E_{3P_0-3P_1}^{\gamma_e \leq \gamma_i}$) aus den Lagen der $(2p^2\ ^3P_1)8_j$ -DR-Resonanzen ($E_{\text{Res}}^{\text{exp } \gamma_e \leq \gamma_i}$) und der Rydbergbindungsenergie (E_B) gemäß Gleichung 1.28. Letztere wurde entweder in Diracnäherung gemäß Gleichung 1.28 oder mittels des LANL-Programmpakets [103–105] bestimmt. In Klammern ist die Unsicherheit der Energieachse gemäß Gl. 3.12 angegeben. Der Vergleich der Analysevarianten, 8_j -Unterezustände und Messmodi ($\gamma_e > \gamma_i$ bzw. $\gamma_e < \gamma_i$) erlaubt Rückschlüsse auf systematische Fehler der so extrahierten Anregungsenergie (Abb. 4.23). In der LANL-Näherung wurden statt aller 21 $((2p^2\ ^3P_1)8l_j)_J$ -Zustände die gewichtet gemittelten Resonanzpositionen und Bindungsenergien der vier 8_j -Resonanzgruppen angegeben.

Methode	Zustand	$E_{\text{Res}}^{\text{exp } \gamma_e > \gamma_i}$	$E_{\text{Res}}^{\text{exp } \gamma_e < \gamma_i}$	E_B	$E_{3P_0-3P_1}^{\gamma_e > \gamma_i}$	$E_{3P_0-3P_1}^{\gamma_e < \gamma_i}$
Dirac	$8_{9/2}$	1.300(8)	1.298(8)	532.415	533.714(8)	533.713(8)
	$8_{11/2}$	1.614(9)	1.617(9)	532.119	533.732(9)	533.736(9)
	$8_{13/2}$	1.828(9)	1.831(9)	531.907	533.735(9)	533.738(9)
	$8_{15/2}$	1.983(10)	1.988(10)	531.749	533.732(10)	533.737(10)
LANL	$8_{9/2}$		1.299(8)	532.466		533.765(8)
	$8_{11/2}$		1.616(9)	532.144		533.760(9)
	$8_{13/2}$		1.822(9)	531.914		533.736(9)
	$8_{15/2}$		1.982(10)	531.750		533.732(10)

4.2.4 Vergleich mit Literaturwerten

4.2.4.1 $2s^2\ ^1S_0 - 2s2p\ ^3P_1$ -Aufspaltung

Vergleicht man die oben ermittelte $(2s^2\ ^1S_0 - 2s2p\ ^3P_1)$ -Anregungsenergie in berylliumartigem Xenon von 127.262 ± 0.051 eV mit Theorie-Literaturwerten (siehe Tab. 4.7 bzw. Abb. 4.26), so stimmt die Messung im Rahmen der angegebenen Unsicherheiten mit den mit der Methode der relativistischen Konfigurationswechselwirkung (RCI) ermittelten Werten von Cheng *et al.* (2008) [43] 127.282 eV und Chen & Cheng (1997) [133] 127.301 eV überein. Gleiches gilt auch für Rechnungen von Safronova (1996) [34] in relativistischer Vielteilchenstörungstheorie (RMBPT) zu 127.267 eV. Starke Unterschiede ergeben sich zu den sehr viel älteren Rechnungen von Cheng *et al.* (1979) [107] 126.846 eV und Armstrong *et al.* [135] 134.9 eV, die in Multikonfiguration-Dirac-Fock- bzw. Mulikonfiguration-Dirac-Hartree-Fock berechnet wurden. Das ebenfalls ältere – und primär auf die Ermittlung von Übergangsraten optimierte – Ergebnis von Goett *et al.* (1980) [136] liefert aufgrund der Zusammensetzung der 0-ten Ordnungs-Wellenfunktion des Targets aus Wasserstofforbitalen ein sehr schlechtes Resultat für die Anregungsenergie von 122.6 eV, dessen geringe Genauigkeit von den Autoren auch selbst eingeräumt wird. Im Vergleich des Experimentes zum Ergebnis der RMBPT Rechnung von Safronova (2000) [134] von 127.168 eV ist eine Abweichung festzustellen, die dem doppelten des experimentellen Fehlers entspricht.

In ihrer Arbeit aus dem Jahre 1996 schlüsseln Safronova *et al.* [34] die Beiträge zur theoretischen $(2s^2\ ^1S_0 - 2s2p\ ^3P_1)$ -Übergangsenergie folgendermaßen genauer auf:

$E^{0+1} = E^{(0)} + E^{(1)} + B^{(1)}$	E^2	B^2	E_{Lamb}	E_{tot}
134.139	- 0.686	- 0.182	- 6.004	= 127.267

Hierbei sind $E^{(i)}$ bzw. $B^{(i)}$ der Coulomb- bzw. Breit-Beitrag zur Anregungsenergie in i -ter Ordnung, während E_{Lamb} den QED-Beitrag zur Anregungsenergie enthält. Aufgrund der geringen Unsicherheit von nur 51 meV, die einer relativen Genauigkeit von $4 \cdot 10^{-4}$ entspricht, ist das experimentelle Ergebnis sensitiv für jeden dieser Beiträge. Bei einer genaueren Aufschlüsselung theoretischer Beiträge wären weitergehende Aussagen zur experimentellen Sensibilität bezüglich einzelner QED Beiträge äquivalent zur Diskussion in Abb. 4.7 möglich.

Die bisher präziseste vorliegende Messung zur $(2s^2 \ ^1S_0 - 2s2p \ ^3P_1)$ -Anregungsenergie liefern Träbert *et al.* [2] mit 127.262 ± 0.012 eV. Im Rahmen des Experimentes wurde Xenon in der Lawrence Livermore Super-Elektronenstrahlionenfalle (EBIT) [137] durch Elektronenbeschuss bis zum Erreichen des berylliumartigen Ladungszustandes ionisiert. Dabei bevölkert

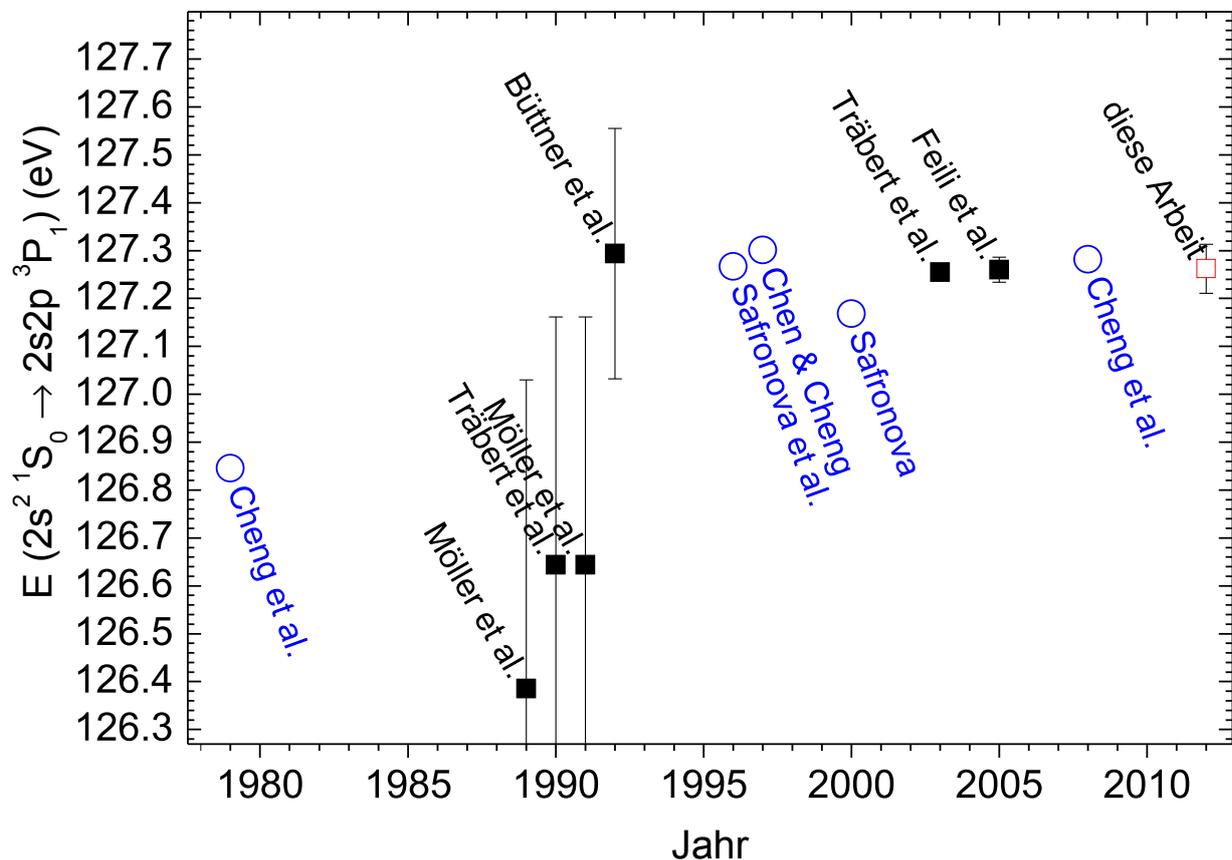


Abbildung 4.26: \square im Rahmen dieser Arbeit ermittelte $(2s^2 \ ^1S_0 - 2s2p \ ^3P_1)$ -Anregungsenergie in berylliumartigem Xe^{50+} im Vergleich mit experimentellen \blacksquare [2, 106, 129–132] und theoretischen \circ [34, 43, 107, 133, 134] Literaturwerten. Das vorliegende Ergebnis zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit den präzisesten experimentellen sowie dem aktuellsten theoretischen Ergebnis.

die beständige Elektronenstoßanregung den $2s2p\ ^3P_1$ -Zustand, der durch Photonenemission in den Grundzustand relaxiert. Die Wellenlänge der so erzeugten Photonen wurden mittels eines „flat-field spectrometers“ [138] festgestellt und entspricht einer Energie von 127.262 eV. Das so gewonnene Ergebnis stimmt im Rahmen der hier bestimmten Fehlergrenzen exzellent mit den Ergebnissen des vorliegenden Experimentes überein, weist aber eine um den Faktor 4 geringere Unsicherheit auf. Es sei darauf hingewiesen, dass die Übereinstimmung der Experimente bei – vollkommen unterschiedlicher Messmethodik – die Existenz bisher unerkannter systematischer Fehlerquellen nahezu ausschließt.

4.2.4.2 $2s^2\ ^1S_0 - 2s2p\ ^1P_1$ -Aufspaltung

Betrachtet man aktuelle theoretische Rechnungen zur $(2s^2\ ^1S_0 - 2s2p\ ^1P_1)$ -Aufspaltung (Abb. 4.27 und Tab. 4.7) und vergleicht diese mit dem Ergebnis der vorgelegten Messung von 532.834 ± 0.047 eV, so fällt auf, dass das experimentelle Ergebnis inmitten der theoretischen Ergebnisse liegt. Im Gegensatz zu lithiumartigen Ionen [33] gibt keine der Rechnungen für berylliumartige Ionen explizite Fehler für die Anregungsenergien an.

Die höchsten Abweichungen (3.9 bzw. 6.5 eV) treten bezüglich der älteren Vorhersagen von

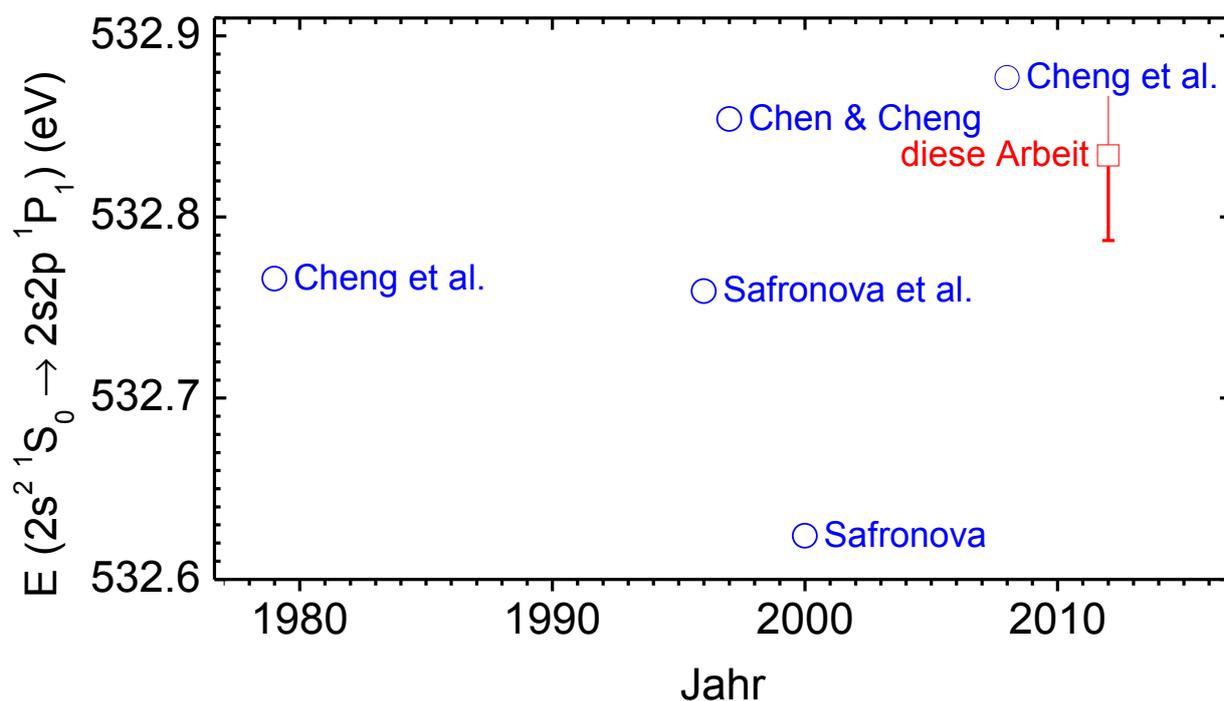


Abbildung 4.27: \square im Rahmen dieser Arbeit ermittelte $(2s2p\ ^1S_0 \rightarrow 2s2p\ ^1P_1)$ -Anregungsenergien in berylliumartigem Xe^{50+} im Vergleich mit theoretischen Arbeiten \circ [34, 43, 107, 133, 134]. Wie man sieht, ist die Unsicherheit des experimentellen Ergebnisses kleiner als die Streuung der theoretischen Resultate. Weitere publizierte experimentelle Ergebnisse liegen nicht vor.

Goett *et al.* (1980) [136] 528.9 eV und Armstrong *et al.* (1976) [135] 539.3 eV auf. Ähnliche Abweichungen wurden schon für die ($2s^2\ ^1S_0 - 2s2p\ ^3P_1$)-Anregung festgestellt (Abs 4.2.4.1). Die absoluten Abweichungen von den Rechnungen von Cheng *et al.* (MCDF 1979) [107], Safronova *et al.* (RMBPT 1996) [34], Chen & Cheng (RCI 1997) [133] und Cheng *et al.* (RCI 2008) [43] sind mit 68, 75, 20 und 43 meV deutlich geringer. Dies entspricht relativen Abweichungen von 13, 14, 4 bzw. $8 \cdot 10^{-5}$ und ist mit der Größenordnung der relativen Abweichungen der ($^1S_0 - ^3P_1$)-Anregung identisch. Bezüglich der RMBPT Rechnung von Safronova [134] aus dem Jahr 2000 ist mit 210 meV bzw. $39 \cdot 10^{-5}$ eine relativ große Abweichung festzustellen. Doch weist letztgenannte Arbeit auch für die ($2s^2\ ^1S_0 - 2s2p\ ^3P_1$)-Anregung relative Abweichungen von $74 \cdot 10^{-5}$ zu den in Abschnitt 4.2.3.1 vorgelegten Resultaten und den Präzisionsmessungen von Träbert *et al.* [2] auf. Auch im Vergleich mit anderen aktuellen Rechnungen fallen die durchgehend etwas niedrigere Anregungsenergie dieser Rechnung auf. Somit kann davon ausgegangen werden, dass die Ursache für die besonders hohe Abweichung auf theoretischer Seite zu finden ist. Letztlich kann festgestellt werden, dass die Streuung der verschiedenen Rechnungen mit ~ 0.2 eV deutlich größer ist als die Unsicherheit der vorgelegten Messung von 43 meV bzw. 0.008%. Andere experimentelle Messungen zur Energie der ($2s^2\ ^1S_0 - 2s2p\ ^1P_1$)-Aufspaltung liegen für berylliumartiges Xenon im Gegensatz zum ($2s^2\ ^1S_0 - 2s2p\ ^3P_1$)-Übergang nicht vor.

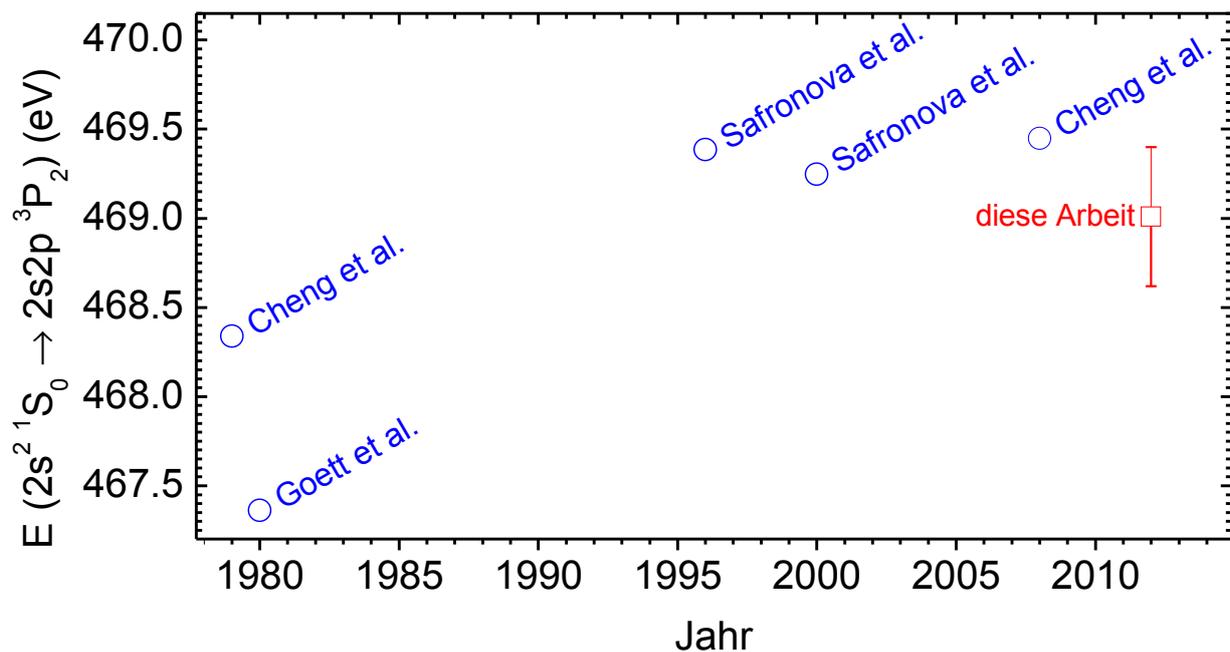


Abbildung 4.28: \square im Rahmen dieser Arbeit ermittelte ($2s2p\ ^1S_0 \rightarrow 2s2p\ ^3P_2$) Anregungsenergien in berylliumartigem Xe^{50+} im Vergleich mit Theorie-Literaturwerten \circ [34, 43, 107, 134, 136]. Weitere publizierte experimentelle Ergebnisse liegen nicht vor. Der im Vergleich zu den anderen Anregungen (Abb. 4.27 & 4.26) etwas größere Fehler beruht auf den geringen Resonanzstärken dieser Serie (Abs. 4.2.6)

4.2.4.3 $2s^2\ ^1S_0 - 2s2p\ ^3P_2$ -Aufspaltung

Der Vergleich des experimentellen Wertes der ($2s^2\ ^1S_0 - 2s2p\ ^3P_2$)-Aufspaltung von 469.01 ± 0.39 eV mit aktuellen theoretischen Rechnungen (Abb. 4.28 und Tab. 4.7) zeigt Übereinstimmung im Rahmen der angegebenen experimentellen Fehler. Hauptursache der mit $8 \cdot 10^{-4}$ im Vergleich zu den anderen Resonanzserien größeren (relativen) Unsicherheit sind die geringen Resonanzstärken der ($2s2p\ ^3P_2$)n-Rydbergresonanzserie und die von den anderen Serien abweichende Verteilung der Resonanzstärke auf die j-Unterstufen der Rydbergresonanzgruppe (Abs. 4.2.6).

Außer dem hier vorgelegten Ergebnis existieren keine weiteren experimentellen Resultate zur ($2s^2\ ^1S_0 - 2s2p\ ^3P_2$)-Aufspaltung in berylliumartigem Xenon, so dass sich der Vergleich auf Werte theoretischer Arbeiten beschränken muss. Beim ($2s2p\ ^3P_2 \rightarrow 2s^2\ ^1S_0$)-Übergang handelt es sich (dominant) um einen M2 Übergang mit – im Vergleich zu elektrischen Dipolübergängen – deutlich verminderter Rate, was spektroskopische Untersuchungen erschwert.

4.2.4.4 $2s2p\ ^3P_0 - 2p^2\ ^3P_1$ -Aufspaltung

Vergleicht man die in Abschnitt 4.2.3.2 ermittelte ($2s_{1/2}2p_{1/2}\ ^3P_0 - 2p_{1/2}2p_{3/2}\ ^3P_1$)-Anregungsenergie in berylliumartigem Xenon von 533.735 ± 0.028 eV mit theoretischen Arbeiten (Tab. 4.7 bzw. Abb. 4.29), so fällt auf, dass die Unterschiede der verfügbaren theoretischen Werte deut-

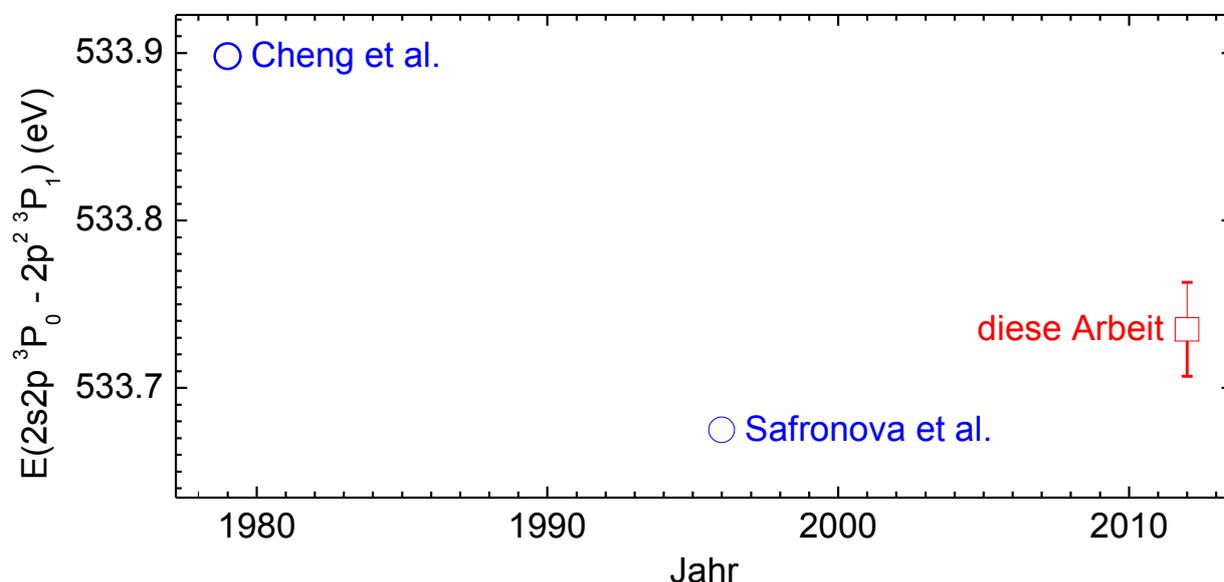


Abbildung 4.29: \square im Rahmen dieser Arbeit ermittelte ($2s_{1/2}2p_{1/2}\ ^3P_0 - 2p_{1/2}2p_{3/2}\ ^3P_1$)-Anregungsenergie in berylliumartigem Xe^{50+} im Vergleich mit theoretischen \circ [34, 107] Arbeiten. Der Fehler des vorliegenden Ergebnisses von 533.735 ± 0.028 eV ist deutlich kleiner als die Streuung der verfügbaren theoretischen Ergebnisse.

lich größer sind als der experimentelle Fehler. Bedauerlicherweise sind für diese Anregung nur wenige Rechnungen verfügbar, wobei der aktuellste Wert (533.675 eV [34]) aus dem Jahre 1996 stammt. Für die mit äquivalenter Methodik gewonnene ($2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^1P_1$)-Anregungsenergie sind hingegen deutlich mehr Arbeiten, darunter auch solche neueren Datums, verfügbar. Wie in Abschnitt 4.2.4.2 gezeigt, ist auch für diese Messung der experimentelle Fehler deutlich geringer als die Streuung der Literaturwerte. Dies unterstreicht die These, dass die Unsicherheiten der theoretischen Rechnungen deutlich über der Unsicherheit der vorgelegten experimentellen Ergebnisse liegen. Leider sind keine anderen experimentellen Daten zur ($2s2p\ ^3P_0 - 2p12\ ^3P_1$)-Anregungsenergie in berylliumartigem Xenon verfügbar.

Tabelle 4.7: Überblick über experimentelle und theoretische Arbeiten mit Angaben zur Intra-L-Schalen-Anregungsenergie in berylliumartigem Xenon (alle Angaben in eV). Sofern sich die Anregungsenergie auf den Grundzustand bezieht, ist dies angegeben. In Klammern sind experimentelle Unsicherheiten angegeben, die sich auf die letzten Stellen des Ergebnisses beziehen. Abkürzungen der jeweils verwendeten Methodik: DR (Dielektronische Rekombination), Beam-Foil (Beam-Foil-Spectroscopy), SuperEBIT (Elektron-Beam-Ion-Trap-Spectroscopy), RMBPT (relativistic many-body perturbation theory), RCI (relativistic configuration interaction), MCDF (multiconfiguration Dirac-Fock), MCDHF (multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock), 'CHO' (composed hydrogenic orbitals)
Die ($2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^3P_0$)-Anregungsenergie konnte, aufgrund der zu geringen Stärke der zugeordneten DR-Resonanzen, nicht aus dem ausgewerteten Experiment bestimmt werden.

Arbeit	Jahr	Methode	$2s2p\ ^3P_1$	$2s2p\ ^3P_2$	$2s2p\ ^1P_1$	$2s2p\ ^3P_0$ $-2p^2\ ^3P_1$
Experiment						
diese Arbeit	2012	DR	127.262(51)	469.01(39)	532.834(47)	533.735(28)
Feili <i>et al.</i> [132]	2005	Beam-Foil	127.260(26)	–	–	
Träbert <i>et al.</i> [2]	2003	SuperEBIT	127.262(12)	–	–	
Büttner <i>et al.</i> [106]	1992	Beam-Foil	127.3(3)	–	–	
Möller <i>et al.</i> [131]	1991	Beam-Foil	126.6(5)	–	–	
Träbert <i>et al.</i> [130]	1990	Beam-Foil	126.6(5)	–	–	
Möller <i>et al.</i> [129]	1989	Beam-Foil	126.39(64)	–	–	
Theorie						
Cheng <i>et al.</i> [43]	2008	RCI	127.282	469.449	532.877	
Safronova [134]	2000	RMBPT	127.168	469.246	532.624	
Chen & Cheng [133]	1997	RCI	127.301	–	532.854	
Safronova <i>et al.</i> [34]	1996	RMBPT	127.267	469.386	532.759	533.675
Goett <i>et al.</i> [136]	1980	'CHO'	122.6	467.4	528.9	529.650
Cheng <i>et al.</i> [107]	1979	MCDF	126.846	468.338	532.766	533.898
Armstrong <i>et al.</i> [135]	1976	MCDHF	134.9	–	539.3	

4.2.5 Rydbergresonanzgruppenentwicklung

Die Auflösung von etwa 20 einzelnen Rydbergresonanzgruppen, sowohl der $(2s2p\ ^3P_0)n$ - als auch der $(2s2p\ ^1P_1)n$ -Resonanzserie, erlaubt neben dem Studium der Seriengrenzen (Abschnitt 4.2.2) und der Entwicklung der Resonanzstärken (Abs. 4.2.8) auch eine Untersuchung der Form und (soweit zugänglich) Substruktur der Resonanzen. Abb. 4.30 zeigt die entsprechende Entwicklung der $2s^2\ ^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p\ ^3P_1)nl_j$ -Rydbergresonanzserie von $n = 17$ bis $n = 34$. Höhere Rydbergzustände werden von der stärkeren $(2s2p\ ^1P_1)9l_j$ -Resonanzgruppe überlagert oder sind nicht mehr auflösbar. Man erkennt die Verminderung sowohl der Resonanzstärken als auch der Feinstrukturaufspaltung der Resonanzgruppen mit steigender Hauptquantenzahl. Während für hohe Rydbergzustände die verschiedenen Feinstrukturkomponenten zu einer einzigen Resonanz verschmelzen, lassen sich für niedrigere Rydbergzustände einzelne Feinstrukturkomponenten auflösen. Für $n = 18$ ist dies die Doppelstruktur der $(2s2p\ ^3P_1)18s_{1/2^-}$, bzw. $(2s2p\ ^3P_1)18p_{1/2^-}$ -Teilresonanz bei 125.6 bzw. 125.9 eV, sowie die gerade noch aufgelöste $j = 3/2$ Resonanz bei

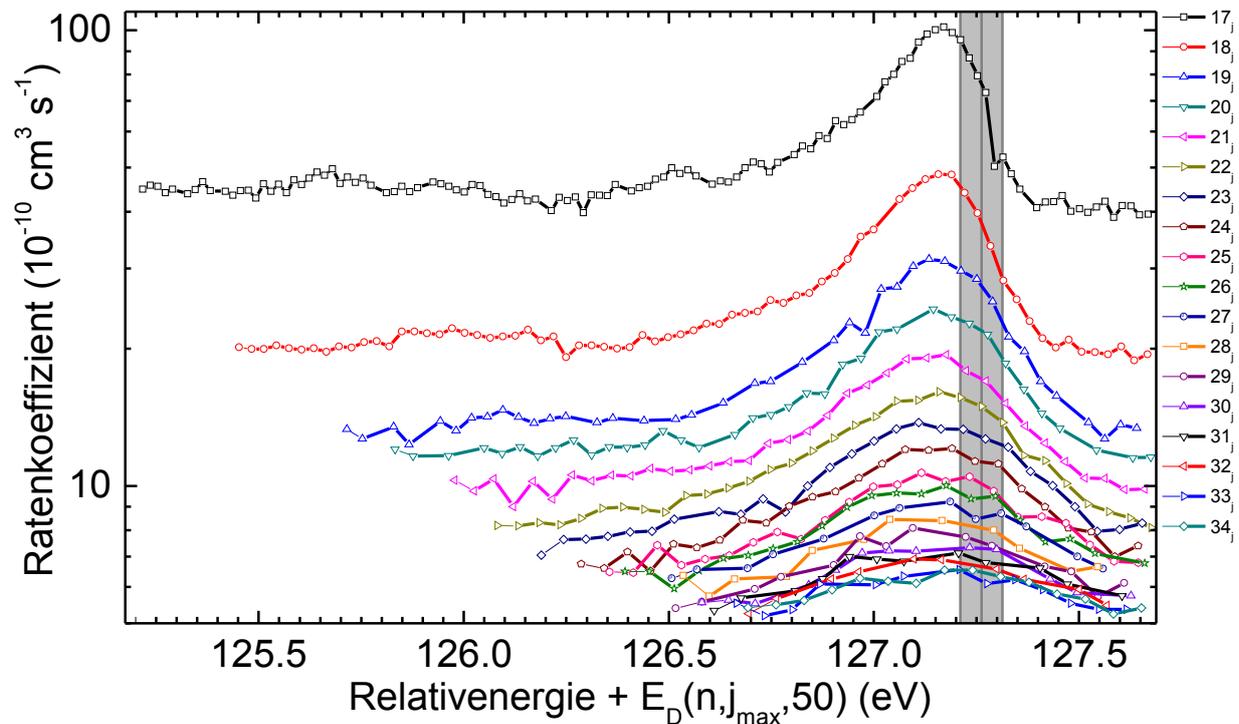


Abbildung 4.30: Absolute Ratenkoeffizienten (DR und RR) der $2s^2 + e^- \rightarrow (2s2p\ ^3P_1)n_j$ -Resonanzserie für $n = 17$ bis 34 aufgetragen gegen die Summe aus Relativenergie und jeweiliger Dirac-Bindungsenergie (Gl. 1.4) des höchsten Unterzustandes $j_{\max} = n - 1/2$ bei $Z_{\text{eff}} = 50$. Man erkennt die Abnahme der Resonanzstärken mit steigender Hauptquantenzahl. Zusätzlich ist bei niedrigen Hauptquantenzahlen die Doppelstruktur der stärker gebundene $(2s2p\ ^3P_1)ns_{1/2^-}$ bzw. $(2s2p\ ^3P_1)np_{1/2^-}$ -Resonanz schwach zu erkennen. Der grau schraffierte Bereich entspricht der in Abschnitt 4.2.2 ermittelten Seriengrenze samt Unsicherheit.

126 eV. Für höhere Hauptquantenzahlen nimmt sowohl die energetische Aufspaltung als auch die Resonanzstärke des $j = 1/2$ -Unterzustandes ab, so dass dessen Teilresonanz bei $n = 19$ bzw. $n = 20$ nicht mehr zu identifizieren ist.

Äquivalent lässt sich die Entwicklung der $2s^2 \ ^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p \ ^1P_1)n$ -Rydbergresonanzserie untersuchen (Abb. 4.31). Diese Serie besitzt, im Vergleich zur $(2s2p \ ^3P_1)n$ -Serie, eine etwa viermal höhere Anregungsenergie. Mit Gleichung 1.1 ist deshalb die minimale Quantenzahl n der $(2s2p \ ^1P_1)n$ -Serie, in den ein Einfang aus Gründen der Energieerhaltung möglich ist, nur etwa halb so hoch ($n=8$) wie im Fall der $(2s2p \ ^3P_1)n$ -Serie ($n=17$). Der enorm hohe Ratenkoeffizient der $(2s2p \ ^1P_1)8l_j$ -Resonanzgruppe geht dabei maßgeblich auf die E^{-1} -Abhängigkeit des DR-Wirkungsquerschnittes (Gl. 1.31) und die Lage der Resonanzen bei äußerst geringen Relativenergien (Abb. 4.21) zurück. Dabei sind für die $(2s2p \ ^1P_1)8l_j$ -Resonanzgruppe bei positiven Relativenergien nur Einfänge in $j \geq 9/2$ erlaubt, während Unterzustände kleineren Gesamtdrehimpulses aus Gründen der Energieerhaltung nicht bevölkert werden können.

Bedingt durch die bei niedrigen Energien bessere Energieauflösung (Abs. 3.2.2) sind für

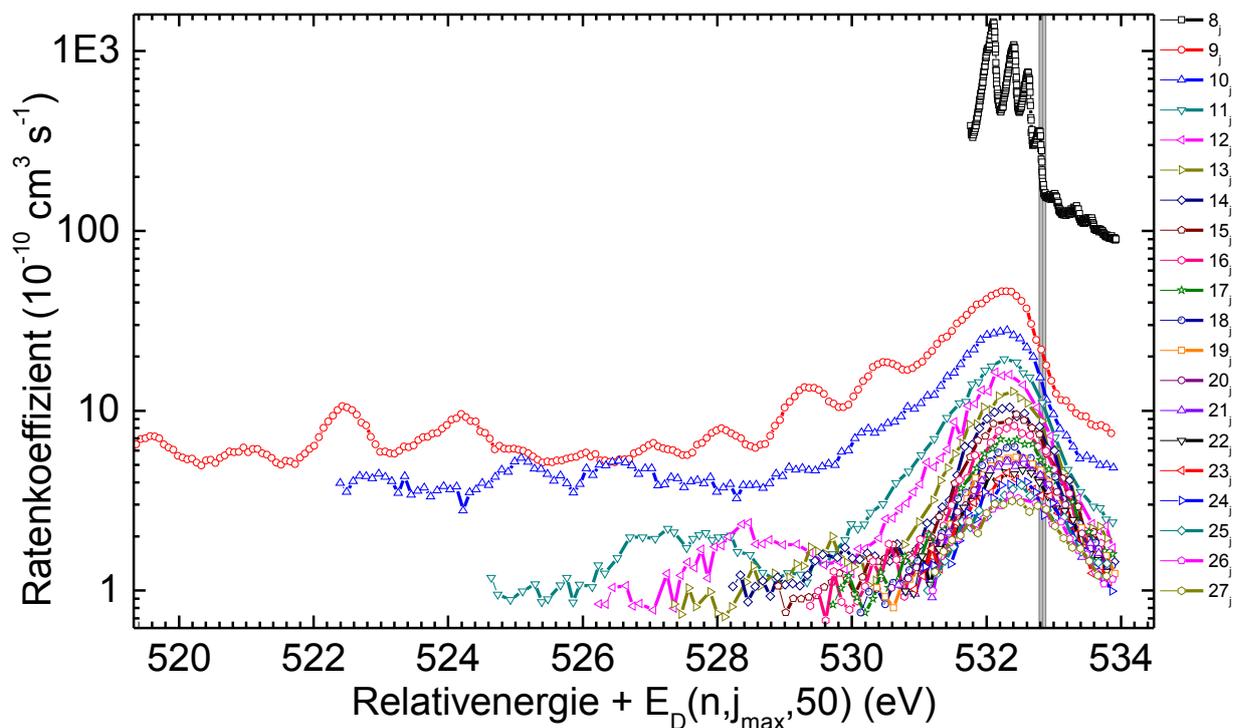


Abbildung 4.31: Absolute Ratenkoeffizienten (DR und RR) der $2s^2 + e^- \rightarrow (2s2p \ ^1P_1)n_j$ -Resonanzserie für $n=8$ bis 27 aufgetragen gegen die Summe aus Relativenergie und der jeweiligen Dirac-Bindungsenergie (Gl. 1.4) des am schwächsten gebundenen Unterzustandes ($j_{\max} = n - 1/2$) bei $Z_{\text{eff}} = 50$. Der grau schraffierte Bereich entspricht Seriengrenze und Fehlern (Abs. 4.2.2). Der extrem hohe Ratenkoeffizient der 8_j -Resonanzgruppe ist auf die E^{-1} -Abhängigkeit des DR-Wirkungsquerschnittes zurückzuführen. Weitere Erläuterung siehe Text.

die $(2s2p\ ^1P_1)8l_j$ -Resonanzgruppe alle (existierenden) Feinstrukturkomponenten einzeln aufgelöst. Auch für die $(2s2p\ ^1P_1)9l_j$ -Resonanzgruppe sind verschiedene Resonanzen niedrigen Gesamtdrehimpulses einzeln aufgelöst. Allerdings befinden sich die schwächeren Resonanzen der $(2s2p\ ^3P_1)n$ -Resonanzserie für $36 < n < 50$ in demselben Energiebereich wie die $(2s2p\ ^1P_1)9_j$ -Resonanzgruppe. Entsprechend sind einige der im Energiebereich dieser Gruppe zu beobachtenden Resonanzen (Abb. 4.31) auf die $(2s2p\ ^3P_1)n$ -Resonanzserie zurückzuführen. Für höhere Hauptquantenzahlen ist nur noch die $(2s2p\ ^1P_1)n_{1/2}$ -Resonanz – bei mit steigender Hauptquantenzahl abnehmender Aufspaltung – separiert. Für niedrige Gesamtdrehimpulse j und Hauptquantenzahlen n ist zusätzlich eine Aufspaltung der nl_j -Resonanz festzustellen, die maßgeblich auf den Drehimpuls l zurückzuführen ist. Für die $(2s2p\ ^1P_1)nl_{1/2}$ -Resonanz ist die Aufspaltung in $(2s2p\ ^1P_1)ns_{1/2}$ und $(2s2p\ ^1P_1)np_{1/2}$ für Hauptquantenzahlen von 9 bis 11 sichtbar.

4.2.6 Struktur der $(2s2p\ ^3P_2)n_j$ -Resonanzgruppen

In Abschnitt 4.1.5 wurde die Struktur der $(2s)+e^- \rightarrow (2p_{1/2}\ nl_j)$ - bzw. $(2p_{3/2}\ nl_j)$ -Resonanzgruppen in lithiumartigem Xenon samt ihrer Entwicklung bei steigender Hauptquantenzahl untersucht. Äquivalent wurde in Abschnitt 4.2.5 die Struktur der $2s^2 + e^- \rightarrow (2s2p\ ^3P_1)nl_j$ - bzw. $(2s2p\ ^1P_1)nl_j$ -Resonanzgruppe in berylliumartigem Xenon betrachtet. In allen vier Fällen bilden die Resonanzen höherer Rydberggesamtdrehimpulse j und entsprechend geringer Feinstrukturaufspaltung eine gemeinsame Resonanz, die den größten Teil der Resonanzstärke der Resonanzgruppe in sich vereint. Unterzustände geringeren Gesamtdrehimpulses ($j = 1/2$ bzw. $j = 3/2$) sind bei ausreichender Aufspaltung als separierte Resonanz zu erkennen, verfügen aber nur über einen Bruchteil der Resonanzstärke der Hauptresonanz. Exemplarisch zeigt Abb. 4.3 die Struktur einer typischen Resonanzgruppe der Serien die das Spektrum dominieren.

Betrachtet man Resonanzgruppen der $Xe^{50+}(2s^2\ ^1S_0) + e^- \rightarrow Xe^{49+}(2s2p\ ^3P_2)n_j$ -Resonanzserie (Abb. 4.32), so fällt auf, dass sich die Struktur der Resonanzgruppen dieser Serie sehr deutlich von der Struktur der Resonanzgruppen anderer Serien (z.B. Abb. 4.3) unterscheidet. Gemeinsam ist beiden Fällen noch die gegenüber der Näherung wasserstoffartiger Bindungsenergien der Rydbergzustände erhöhte Bindungsenergie für Rydbergelektronen in Zuständen mit niedrigem Gesamtdrehimpuls j des Rydbergzustandes. Außerdem ist ebenfalls in beiden Fällen eine Aufspaltung der Resonanz des niedrigsten $j = 1/2$ -Zustands des Rydbergelektrons durch den Drehimpuls l in zwei separierte Resonanzen $2p_{3/2}\ 9s_{1/2}$ und $2p_{3/2}\ 9p_{1/2}$ bzw. $(2s2p\ ^3P_2)9s_{1/2}$ und $(2s2p\ ^3P_2)9p_{1/2}$ festzustellen. Drastische Unterschiede treten allerdings in der Verteilung der Resonanzstärken auf. Während bei anderen Resonanzgruppen die kumulierte Resonanz aus höheren Gesamtdrehimpulsbestandteilen des Rydbergelektrons den dominanten Teil der Resonanzstärke in sich vereint, sind bei der $(2s2p\ ^3P_2)n_j$ -Resonanzserie diese Beiträge sehr stark unterdrückt.

Vergleicht man im Detail die $(2s2p\ ^3P_2)9l_j$ -DR-Resonanzgruppe bei Xe^{50+} mit der $2p_{3/2}\ 9l_j$ -DR-Resonanzgruppe bei Xe^{51+} , die vergleichbare Relativenergien haben und zu identischen Rydbergzuständen gehören, so fällt auf, dass für die Zustände niedrigsten Gesamtdrehimpulses des Rydbergelektrons ($j = 1/2$) die Höhen der Ratenkoeffizienten ($6 \cdot 10^{-10}\ \text{cm}^3/\text{s}$ bzgl. Untergrund) bei vergleichbarer Resonanzbreite näherungsweise übereinstimmen (Abb. 4.33(a) und 4.33(b)).

Im Gegensatz hierzu unterscheiden sich die Ratenkoeffizienten bzw. Stärken der Resonanzen mit höherem Gesamtdrehimpuls des Rydbergelektrons ($j \geq 5/2$) um etwa eine Größenordnung (Abb. 4.33(c) und 4.33(d)). Die Ursache hierfür findet sich in den $(2s2p^3P_2)9l_j$ -Autoionisationsraten (Abs. 1.3.3), die für höhere Drehimpulse stark abnehmen. Sobald die Autoionisationsraten die radiativen Raten signifikant unterschreiten ($A_a \ll A_\gamma$), ist der DR-Wirkungsquerschnitt direkt proportional zur Autoionisationsrate (Gl. 1.31).

Die weitestgehende Abwesenheit von Rydbergresonanzbeiträgen hoher Gesamtdrehimpulse in Abb. 4.33(d) beruht folglich auf deren geringen Autoionisationsraten. Im Gegensatz hierzu tragen entsprechende Gesamtdrehimpulse für andere Resonanzserien durchaus relevant zu den Resonanzstärken bei.

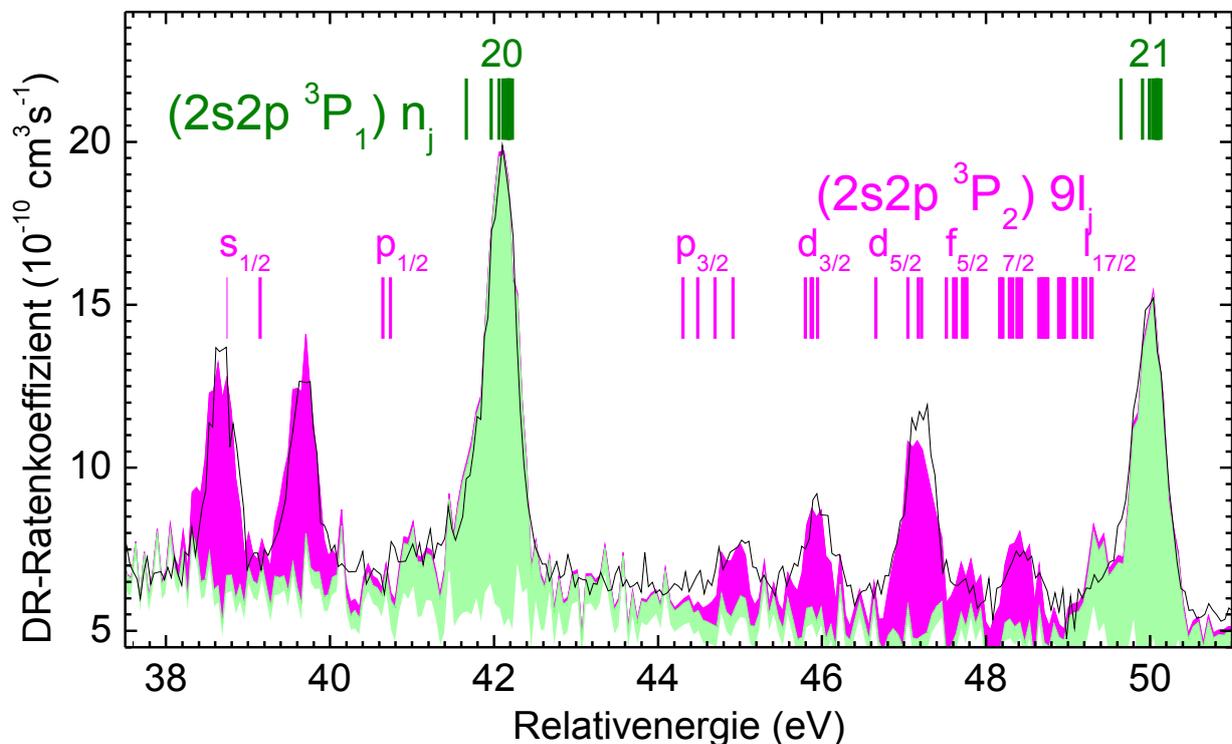


Abbildung 4.32: Absoluter Ratenkoeffizient der dielektronischen Rekombination berylliumartiger Xenonionen bei Relativenergien zwischen 37 und 52 eV. Resonanzen der $2s^2\ ^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p^3P_2)9l_j$ -Resonanzgruppe sind durch magentafarbene/dunkle flächige Darstellung hervorgehoben. Grün/hell flächig hervorgehoben die $n=20$ bzw. 21 Resonanzen der $2s^2\ ^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p^3P_1)n$ -Resonanzserie. $((2s2p^3P_2)9l_j)_J$ -Resonanzpositionen (I) wurden aus Literatur-Anregungsenergien [34] und Rydbergbindungs- sowie Wechselwirkungsenergien (LANL Programmpaket [103–105]) berechnet. Die im Vergleich zu Resonanzgruppen anderer Serien (Abb. 4.3) stark abweichende Resonanzstärkenverteilung ist auf die stärkere Reduktion der Autoionisationsraten dieser Serie zurückzuführen (Siehe Text).

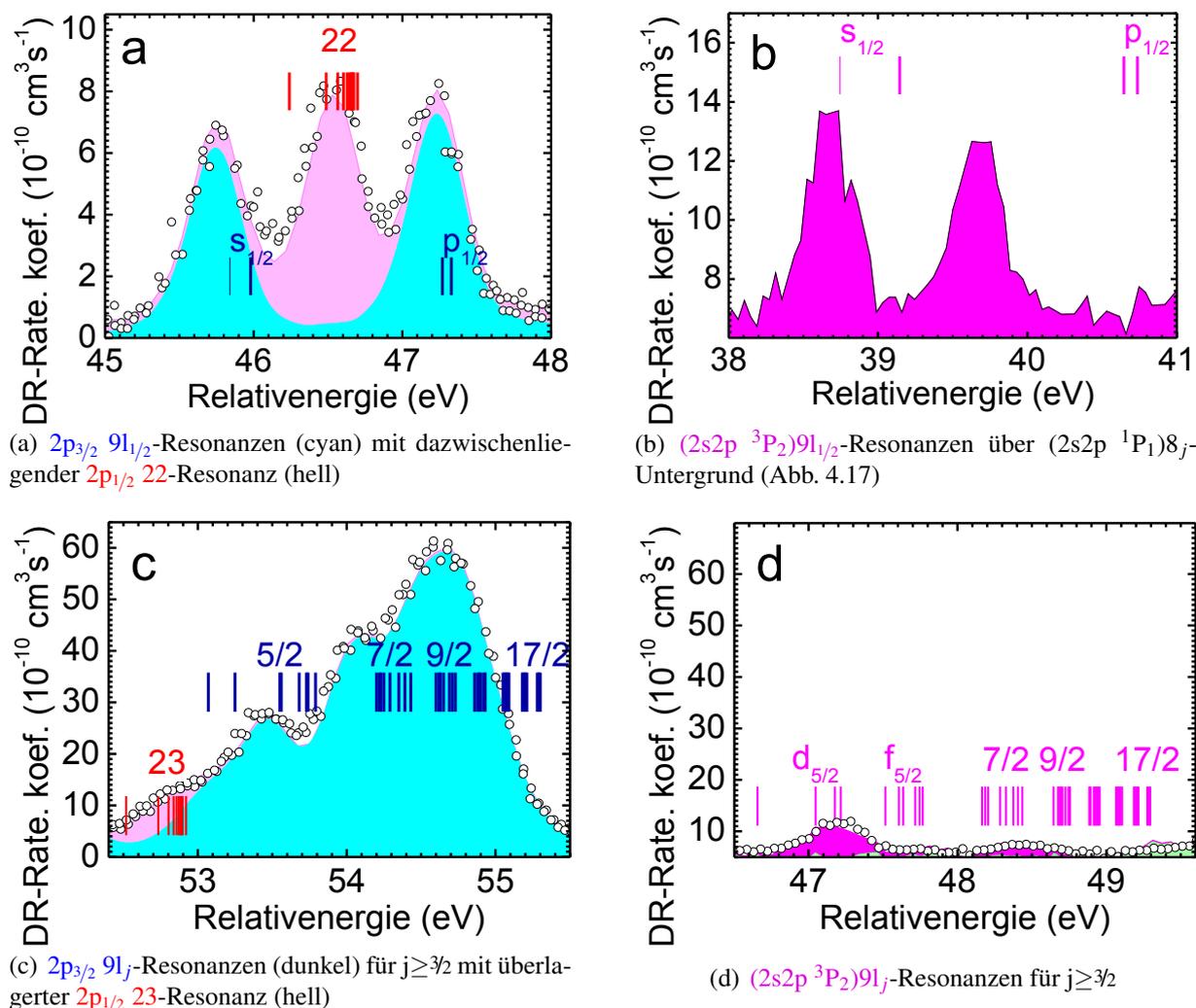


Abbildung 4.33: Vergleich der $(2s2p \ ^3P_2)9l_j$ -DR-Resonanzgruppe bei berylliumartigen Xenonionen (rechts) mit der $2p_{3/2} 9l_j$ -DR-Resonanzgruppe bei lithiumartigen Xenonionen (links). Die annähernde Übereinstimmung der Resonanzstärken bei $j = 1/2$ (oben) und die enormen Unterschiede bei hohen Drehimpulsen (unten) gehen auf die drastische Verminderung der Autoionisationsraten zurück. Die vertikalen Striche entsprechen – für die betrachteten Resonanzen – aus Literaturanregungsenergien [1, 34, 60] und Rydbergbindungs- und Wechselwirkungsenergien (LANL Programmpaket [103–105]) berechneten Resonanzpositionen (Gl. 1.4). Es sei angemerkt, dass die so berechneten Resonanzlagen für die $2p_{3/2} 9l_{1/2}$ -Resonanz deutlich besser übereinstimmen als für die $(2s2p \ ^3P_2)9l_{1/2}$ -Resonanz. Zu Fehlern siehe Abschnitt 3.2.2 bzw. 3.5.6.

4.2.7 Bestimmung des metastabilen $2s2p\ ^3P_0$ -Strahlanteils

Wie schon z.B. in Abbildung 4.17 gezeigt, finden sich im Xe^{50+} -Rekombinationsspektrum nicht nur Resonanzen der $(2s^2\ ^1S_0) + e^- \rightarrow (2s2p\ ^3P_1)_{n_j-}$, $(2s2p\ ^3P_2)_{n_j-}$ und $(2s2p\ ^1P_1)_{n_j-}$ -Resonanzserien, sondern auch Resonanzen der $(2s2p\ ^3P_0) + e^- \rightarrow (2p^2\ ^3P_1)_{8_j-}$ -Resonanzgruppe. Der zugeordnete, initial metastabile $2s2p\ ^3P_0$ -Zustand ist der niederenergetischste angeregte Zustand und kann nur durch Übergang in den Grundzustand abgeregt werden. Bedingt durch den für beide Zustände verschwindenden Gesamtdrehimpuls J sind keine Einphotonenübergänge möglich, wobei der Kernspin ($I=0$) für ^{136}Xe auch hyperfein-induzierte Übergänge verhindert. Somit ist der E1M1-Übergang der dominante Übergang. Die extrem lange Lebensdauer (Abs. 1.1.3.1 bzw. Abb. 1.13) sorgt dafür, dass zum Messzeitpunkt trotz vorhergehender Kühlung noch immer ein relevanter Anteil von $\text{Xe}^{50+}(2s2p\ ^3P_0)$ im Strahl vorhanden ist. Entsprechend stellen die gemessenen Ratenkoeffizienten-Spektren eine Superposition des $2s^2\ ^1S_0$ - und des $2s2p\ ^3P_0$ -DR-Spektrums dar, die jeweils mit dem entsprechenden Anteil am Ionenstrahl gewichtet sind. Dabei ist der Anteil des metastabilen $2s2p\ ^3P_0$ -Zustandes relativ klein aber nicht vernachlässigbar. So wird die Stärke von Grundzustandsresonanzen durch die Normierung auf den totalen Ionenstrom statt auf den Strom der Grundzustandsionen leicht unterschätzt. Dieser Effekt kann durch Bestimmung der jeweiligen Strahlanteile und Renormierung korrigiert werden. Untersucht man die $(2s2p\ ^1P_1)_{8_j-}$ bzw. $(2p^2\ ^3P_1)_{8_j-}$ -Resonanzen im Detail und vergleicht Resonanzen bei unterschiedlichem zeitlichen Abstand von der Bevölkung des $2s2p\ ^3P_0$ -Zustandes (Abb. 4.35), so stellt man fest, dass die Resonanzen des metastabilen Zustand im späteren Messbereich deutlich kleiner sind, während die Resonanzen des Grundzustands leicht vergrößert sind.

Die Herleitung der Anteile beider Ionen aus der relativen Änderung der Stärken von Reso-

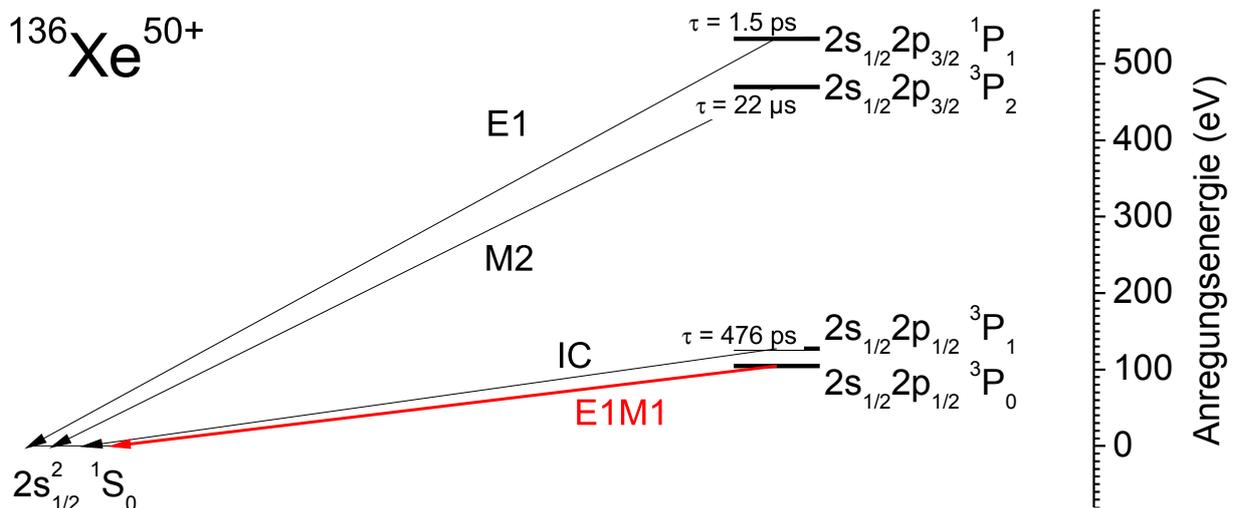
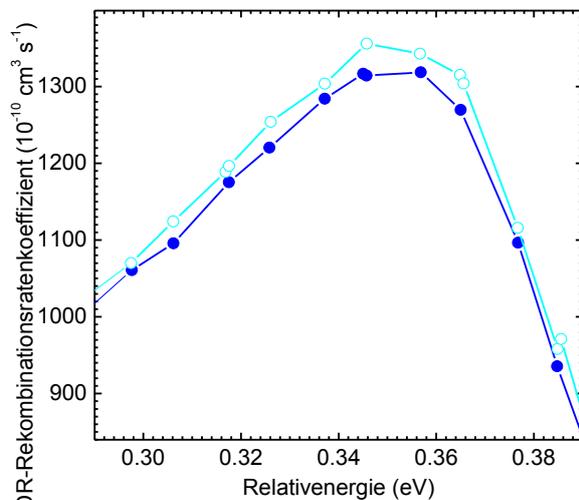


Abbildung 4.34: Vereinfachtes $^{136}\text{Xe}^{50+}$ Energieschema bezüglich $\text{Xe}^{50+}(1s^2\ 2s^2\ ^1S_0)$ -Grundzustand mit Literaturanregungsenergien [34] und Einphotonenübergangsraten [43]. Der erste angeregte Zustand ($2s2p\ ^3P_0$) kann nur mittels E1M1-Zweiphotonenübergang relaxieren.

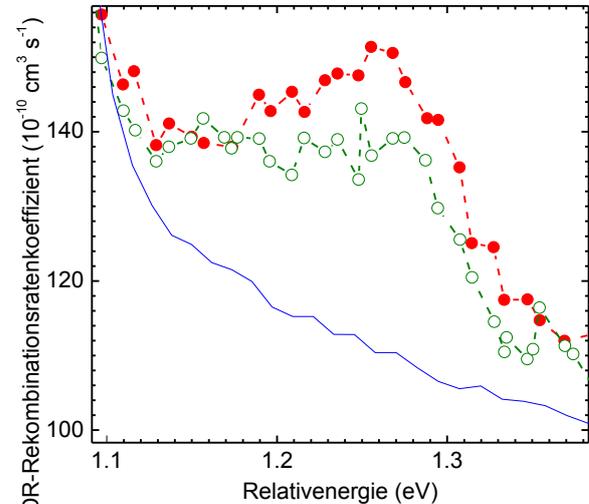
nanzen des Grund- bzw. metastabilen Zustandes wird im Folgenden vorgenommen:

Sei $\mathbf{I}_{G/M}^{(F,S)}$ der absolute Ionenstrom des metastabilen (M) bzw. Grundzustands (G) -Anteils zum frühen (F) bzw. späten (S) Messabschnitt, $\mathbf{I}^{(F,S)} = I_G^{(F,S)} + I_M^{(F,S)}$ der Ionenstrom zum frühen (F) bzw. späten (S) Messabschnitt, $\mathbf{a}_{G/M}^{(F,S)} = I_{G/M}^{(F,S)} / I^{(F,S)}$ der Anteils von Grund- (G) oder metastabilem (M) Zustand am Ionenstrom während des frühen (F) bzw. späten (S) Messabschnitts und $\mathbf{F}_{G/M} = a_{G/M}^{(S)} / a_{G/M}^{(F)}$ der Quotient aus spätem (S) und frühem (F) Strahlanteil des Grund- (G) bzw. metastabilen (M) Zustandes.

$$\begin{aligned}
 a_M^{(F)} + a_G^{(F)} &= \frac{I_M^{(F)} + I_G^{(F)}}{I^{(F)}} = 1 = \frac{I_M^{(S)} + I_G^{(S)}}{I^{(S)}} = a_M^{(S)} + a_G^{(S)} \\
 a_M^{(F)} + a_G^{(F)} &= a_M^{(F)} \cdot F_M + a_G^{(F)} \cdot F_G \\
 a_M^{(F)}(1 - F_M) &= (1 - a_M^{(F)}) \cdot (F_G - 1) \\
 a_M^{(F)} - a_M^{(F)} \cdot F_M &= F_G - 1 - a_M^{(F)} F_G + a_M^{(F)} \\
 a_M^{(F)} \cdot (F_G - F_M) &= F_G - 1 \\
 a_M^{(F)} &= \frac{F_G - 1}{F_G - F_M}
 \end{aligned} \tag{4.13}$$



(a) — Grundzustands-Resonanz $2s^2 \ ^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p \ ^1P_1)8_{9/2}$. Der Ratenkoeffizient des späteren Messbereiches ist gegenüber dem früheren um etwa 3% erhöht.



(b) Reduktion des Ratenkoeffizientenanteils - - - des metastabilen Zustands $2s2p \ ^3P_0 + e^- \rightarrow (2p^2 \ ^3P_1)8_{9/2}$ über Grundzustandsuntergrund (—) um etwa 30%.

Abbildung 4.35: DR-Ratenkoeffizient für Messungen von 15 bis 67 Sekunden (●) bzw. von 67 bis 120 Sekunden nach Injektion (○), exemplarisch für Resonanz von Grund-(a) und metastabilem Zustand(b). Bedingt durch die Änderung der relativen Strahlanteile weist der spätere Messbereich leicht reduzierte Resonanzen des Grundzustands und deutlich reduzierte Resonanzen des metastabilen Zustands auf.

Der früh (F) bzw. spät (S) gemessene Ratenkoeffizient $\alpha_{\text{exp}}^{(F,S)}$ entspricht einer Überlagerung der Ratenkoeffizienten von Grund- ($\alpha_G = \langle \sigma_{GV} \rangle$) und metastabilem Zustand ($\alpha_M = \langle \sigma_{MV} \rangle$), die mit ihren Ionenstromanteilen $a_G^{(F,S)}$ bzw. $a_M^{(F,S)}$ zum entsprechenden Zeitpunkt gewichtet sind. Experimentell lassen sich frühes (F) und spätes (S) Spektrum auch als Summe der Komponenten $\tilde{\alpha}_G^{(S,F)}$ und $\tilde{\alpha}_M^{(S,F)}$ ausdrücken.

$$\alpha_{\text{exp}}^{(F,S)} = \frac{\alpha_G \cdot I_G^{(F,S)} + \alpha_M \cdot I_M^{(F,S)}}{I_G^{(F,S)} + I_M^{(F,S)}} = \underbrace{\alpha_G \cdot a_G^{(F,S)}}_{\tilde{\alpha}_G^{(S,F)}} + \underbrace{\alpha_M \cdot a_M^{(F,S)}}_{\tilde{\alpha}_M^{(S,F)}} \quad (4.14)$$

Löst man diese Gleichung nach Grundzustands- ($a_G^{(F,S)}$) bzw. metastabilem ($a_M^{(F,S)}$) Anteil auf, so erhält man:

$$a_G^{(F,S)} = \frac{\alpha_{\text{exp}}^{(F,S)} - \tilde{\alpha}_M^{(F,S)}}{\alpha_G} \quad a_M^{(F,S)} = \frac{\alpha_{\text{exp}}^{(F,S)} - \tilde{\alpha}_G^{(F,S)}}{\alpha_M} \quad (4.15)$$

bzw. für die oben definierten Quotienten F_G bzw. F_M :

$$F_G = \frac{a_G^S}{a_G^F} = \frac{\alpha_{\text{exp}}^{(S)} - \tilde{\alpha}_M^{(S)}}{\alpha_{\text{exp}}^{(F)} - \tilde{\alpha}_M^{(F)}} \quad F_M = \frac{a_M^S}{a_M^F} = \frac{\alpha_{\text{exp}}^{(S)} - \tilde{\alpha}_G^{(S)}}{\alpha_{\text{exp}}^{(F)} - \tilde{\alpha}_G^{(F)}} \quad (4.16)$$

Wählt man nun für die Bestimmung von F_G einen Energiebereich $[E_{\text{min } G}, E_{\text{max } G}]$ ohne Resonanz des metastabilen Zustands, so gilt (insbesondere für kleine metastabile Strahlanteile) $\tilde{\alpha}_M \ll \tilde{\alpha}_G \leq \alpha_{\text{exp}}$ (Abb. 4.17). Somit lässt sich die Näherung $F_G \approx \alpha_{\text{exp}}^{(S)}/\alpha_{\text{exp}}^{(F)}$ verwenden. Zur Verminderung des statistischen Fehlers nutzt man den gesamten geeigneten Energiebereich und erhält (Abb. 4.35(a)):

$$F_G \approx \frac{\int_{E_{\text{min } G}}^{E_{\text{max } G}} \alpha_{\text{exp}}^{(S)}(E) dE}{\int_{E_{\text{min } G}}^{E_{\text{max } G}} \alpha_{\text{exp}}^{(F)}(E) dE} \quad (4.17)$$

In Worten ausgedrückt: Die Änderung des Grundzustandsstrahlanteils entspricht der Änderung der Ratenkoeffizienten im von Grundzustandsresonanzen dominierten Strahlbereich.

Aufgrund des höheren Grundzustandsanteils des Ionenstrahls ($a_G^{(F,S)} \gg a_M^{(F,S)}$) wird der experimentell gemessene Ratenkoeffizient selbst im Bereich mit Resonanzen des metastabilen Zustands ($\alpha_M \gg \alpha_G$) stark von den Ausläufern der Grundzustandsresonanzen beeinflusst. Entsprechend ist zur Bestimmung der Änderung des metastabilen Strahlanteils F_M keine mit obigem Vorgehen identische Näherung möglich. Allerdings lässt sich ein nur aus Grundzustandsresonanzen bestehendes Spektrum ($\alpha_{G \text{ sim}}^{(F,S)}(E)$) simulieren und – im Bereich der Grundzustandsresonanzen – an das gemessene Spektrum des frühen (F) bzw. späten (S) Messbereiches anpassen. Im Bereich der Resonanzen des metastabilen Zustandes entspricht $\alpha_{G \text{ sim}}^{(F,S)}(E)$ dem Grundzustandsuntergrund $\tilde{\alpha}_G^{(F,S)}(E)$, so dass man die Änderung des metastabilen Strahlanteils gemäß dem Ausdruck $f_M \approx \alpha_{\text{exp}}^{(S)} - \alpha_{G \text{ sim}}^{(S)} / \alpha_{\text{exp}}^{(F)} - \alpha_{G \text{ sim}}^{(F)}$ erhält. Auch hier kann man zur Verminderung des statistischen Fehlers den gesamten geeigneten Energiebereich $[E_{\text{min } M}, E_{\text{max } M}]$ nutzen und erhält:

$$F_M \approx \frac{\int_{E_{\min M}}^{E_{\max M}} \left(\alpha_{\text{exp}}^{(S)}(E) - \alpha_{G \text{ sim}}^{(S)}(E) \right) dE}{\int_{E_{\min M}}^{E_{\max M}} \left(\alpha_{\text{exp}}^{(F)}(E) - \alpha_{G \text{ sim}}^{(F)}(E) \right) dE} \quad (4.18)$$

Siehe hierzu auch Abb. 4.35(b). In Worten: Die Änderung des metastabilen Strahlanteils entspricht der Änderung des von den Resonanzen des metastabilen Zustandes verursachten Anteils am Ratenkoeffizienten.

Wählt man Integrationsgrenzen ($E_{\min G} = 0.2$ eV, $E_{\max G} = 0.45$ eV, $E_{\min M} = 1.16$ eV und $E_{\max M} = 1.95$ eV) so, dass Resonanzen von Grund- und metastabilem Zustand bestmöglich separiert sind, so erhält man mit Gl. 4.13 während der frühen Messphase einen metastabilen Strahlanteil von $6.0 \pm 0.5\%$. Dieser geht im Verlauf dieser spezifischen Messung auf etwa 4% zurück. Da die verschiedenen Strahlanteile in unterschiedlichen Messbereichen stark unterschiedliche Rekombinationsverluste aufweisen, lässt sich diese spezielle Abnahme nicht einfach auf andere Messbereiche übertragen. Trotzdem kann von einem metastabilen Strahlanteil von $5 \pm 3\%$ ausgegangen werden, der bei der Bestimmung von Resonanzstärken berücksichtigt werden sollte.

4.2.7.1 Vergleich mit Literaturwerten

Für andere Speicherringmessungen an berylliumartigen Ionen mit verschwindendem Kernspin konnten ebenfalls Strahlanteile des initial metastabilen $2s2p \ ^3P_0$ -Zustandes bestimmt werden. Savin *et al.* [139] kommen für $^{56}\text{Fe}^{22+}(2s2p \ ^3P_0)$ auf einen Strahlanteil von $7\% \pm 2\%$. Die Bestimmung des Strahlanteils gelang über den Vergleich von gemessenen und berechneten Ratenkoeffizienten von Resonanzen des initial metastabilen $2s2p \ ^3P_0$ -Zustandes. Diese gehen in das experimentelle Spektrum proportional zum relativen Anteil des $2s2p \ ^3P_0$ -Zustands am Gesamtionenstrom ein, so dass aus der Reduktion gegenüber dem theoretischen Spektrum der relative Strahlanteil bestimmt werden konnte. Für dieses Ion führt die im Vergleich zu Xenon deutlich geringere Kernladung ($Z = 26$) zu einer enormen Verlängerung der ($2s2p \ ^3P_0 \rightarrow 2s^2 \ ^1S_0$)-E1M1-Strahllebensdauer auf etwa 21 Stunden (Gl. 1.17). Entsprechend ist während üblicher Speicherdauern keine signifikante Abnahme des metastabilen Strahlanteils zu erwarten, so dass eine Ermittlung des Strahlanteils aus dem Vergleich von Spektren unterschiedlichen Anteils nicht möglich ist. Für $^{48}\text{Ti}^{18+}$ geben Schippers *et al.* [11] einen $2s2p \ ^3P_0$ -Strahlanteil von $\sim 5\%$ an. Die verwendete Methodik entspricht der von Savin *et al.* .

Bei Single-Path-DR-Messungen von berylliumartigem C^{2+} geben Dittner *et al.* [140] einen $2s2p \ ^3P$ -Strahlanteil von etwa 70% an, dieser bezieht sich aber auf die Summe der Anteile der Zustände $2s2p \ ^3P_0$, $2s2p \ ^3P_1$ und $2s2p \ ^3P_2$. Der $2s2p \ ^3P_0$ -Zustand hat hiervon nur ein statistisches Gewicht von $1/9$, so dass sich bei Annahme einer statistischen Verteilung nur ein Anteil von ca. 8% des Strahls im $2s2p \ ^3P_0$ -Zustand befindet, was konsistent mit den hier gegebenen Resultaten ist. Es sei angemerkt, dass sich Single-Path- und Speicherring-Experimente signifikant in der zur Relaxation angeregter Zustände vor Beginn der Messung zur Verfügung stehenden Zeit unterscheiden. Diese ist bei Speicherringexperimenten mit mindestens einer Sekunde typischerweise um viele Größenordnungen länger, so dass bei entsprechenden Experimenten die relativ langlebigen Zustände $2s2p \ ^3P_1$ und $2s2p \ ^3P_2$ während der Messung nicht mehr bevölkert sind.

In der Arbeit von Badnell *et al.* [141] konnte der Anteil der langlebigen $2s2p\ ^3P_J$ -Zustände am Ionenstrom des Single-Path-DR-Experimentes zu $70\% \pm 5\%$ für berylliumartiges O^{4+} und $75\% \pm 10\%$ für berylliumartiges C^{2+} experimentell bestimmt werden. Dies geschah durch Erzeugung von Löchern in der K-Schale und Untersuchung der im Anschluss emittierten Auger-Elektronen. Mit der oben erläuterten Abschätzung des statistischen Anteils des $2s2p\ ^3P_0$ -Zustands von $1/9$ ergibt sich für diese ein Strahlanteil etwa 8% für O^{4+} und C^{2+} . Diese Ergebnisse sind konsistent mit dem oben für berylliumartiges Xe^{50+} bestimmten Strahlanteil des metastabilen $2s2p\ ^3P_0$ -Zustands. Eine Besonderheit der hier vorgelegten Messung ist, dass zeitliche Änderungen in der Besetzung des $2s2p\ ^3P_0$ -Zustands beobachtet werden konnten. Diese werden in Kapitel 4.3 im Detail diskutiert.

4.2.8 Resonanzstärken

Für die beiden Rydbergserien $2s^2\ ^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p\ ^3P_1)n_j$, bzw. $(2s2p\ ^1P_1)n_j$ lassen sich Resonanzen bis $n=36$ ($2s2p\ ^3P_1$), bzw. $n=34$ ($2s2p\ ^1P_1$) auflösen (Abb. 4.37). Im Gegensatz hierzu sind keine Resonanzen der $(2s2p\ ^3P_0)n_j$ -Serie und nur wenige Resonanzen der $(2s2p\ ^3P_2)n_j$ -Serie sichtbar. Die Messung absoluter Ratenkoeffizienten erlaubt es, die Stärken der separierten Resonanzen zu extrahieren.

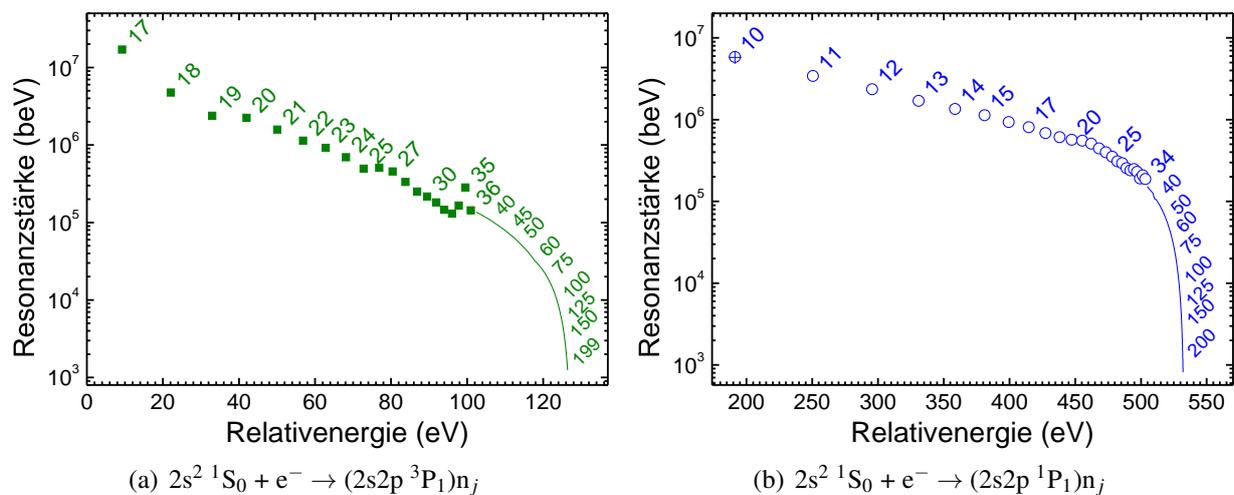
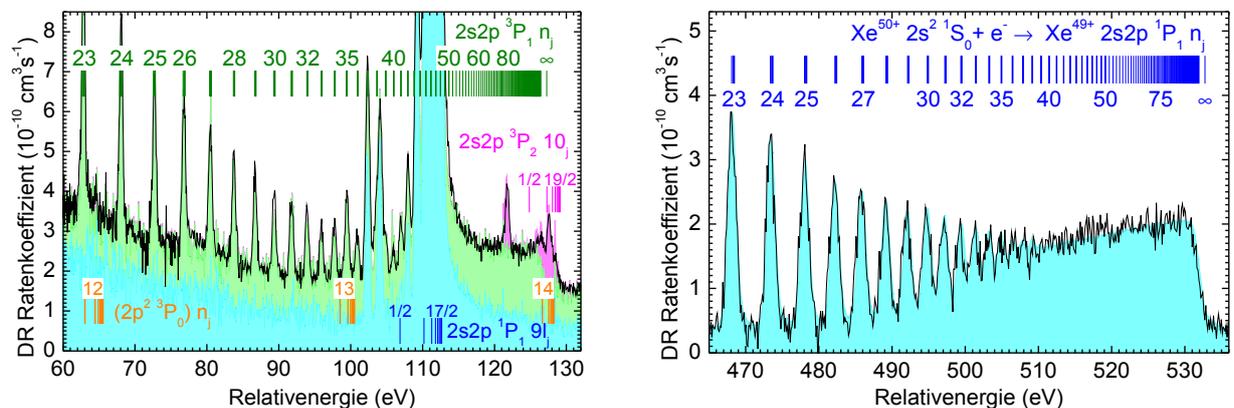


Abbildung 4.36: Resonanzstärken und Lage des Resonanzschwerpunktes der separierten Resonanzen der dielektronischen Rekombination. Für die $(2s^2\ ^1S_0 \rightarrow 2s2p\ ^3P_1)$ - bzw. $(2s2p\ ^1P_1)$ -Anregungen konnten Einfänge bis $n=36$ bzw. 34 separat aufgelöst werden (siehe auch Tab. 4.8). Mit Abschnitt 3.5.6 kann der relative Fehler der Resonanzstärken zu 17% abgeschätzt werden. Der Verlauf der Resonanzstärken für höhere, nicht mehr separierbare Rydbergzustände ist als durchgezogene Linie eingezeichnet. Er weist für $n \gtrsim 110$, bedingt durch die Feldionisation (Abs 1.3.5), sehr viel höhere systematische Fehler auf. Eine mögliche Erklärung der erhöhten Stärke der $(2s2p\ ^3P_1)35$ -Resonanz findet sich im Text.

Äquivalent zum Vorgehen in Abschnitt 4.1.6 wurden auch hier Resonanzstärken ermittelt, die in Tabelle 4.8 mit ihrer Schwerpunktsenergie gelistet und in Abbildung 4.36 graphisch dargestellt sind. Auch für die nicht mehr aufgelösten, höheren Resonanzen lässt sich aus den Ratenkoeffizienten noch ein ungefährender Verlauf der Resonanzstärken extrahieren. Die entsprechenden Ergebnisse finden sich gleichfalls in Abb. 4.36. Es sei angemerkt, dass die Stärken jenseits von $n \sim 111$ zusätzliche systematische Fehler durch die dann einsetzende Feldionisation aufweisen (Abs. 1.3.5). Für niedrige Rydbergzustände sind auch Teile der Feinstrukturaufspaltung auflösbar (Abs. 4.2.5). Für eine einheitlichen Darstellung wurden in Abb. 4.36, bzw. Tabelle 4.8 für $n \geq 10$ die summierten Stärken aller Teilresonanzen gegen den Schwerpunkt ihrer Lagen aufgetragen. Zur festzustellenden Abnahme der Resonanzstärke mit steigender Energie trägt die E^{-1} Abhängigkeit des DR-Wirkungsquerschnitts (Gl. 1.30 bzw. 1.31) bei. Zusätzlich erfolgt die radiative Stabilisierung (Abs. 1.3.3) eines höheren Rydbergelektrons langsamer, wenn beim Einfang die häufigeren Zustände mit hohem Gesamtdrehimpuls besetzt werden, da Letztgenannte nur über einen vielstufigen und damit langsameren Prozess relaxieren können.



(a) $2s^2 \ ^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p \ ^3P_1)n$ -DR-Serie mit DR-Resonanzen $(2s2p \ ^1P_1)9_l$ - und $(2s2p \ ^3P_2)10_j$ sowie $(2p^2 \ ^3P_0)_j$ -Resonanzen der trielektronischen Rekombination

(b) $2s^2 \ ^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p \ ^1P_1)n$ -Rydbergresonanzserie

Abbildung 4.37: Absoluter Xe^{50+} -DR-Ratenkoeffizienten: Die $2s^2 \ ^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p \ ^3P_1)n$ -, bzw. $(2s2p \ ^1P_1)n$ -DR-Resonanzserien konnten bis $n=36$ bzw. 34 aufgelöst werden. Die aus Resonanzstärken (Abb. 4.36) und experimentellen Parametern simulierte Ratenkoeffizienten sind als farbige Flächen angegeben. Dargestellte Resonanzlagen (l) wurden aus Anregungsenergien [34] und wasserstoffartiger Näherung der Rydbergbindungsenergie (Gl. 1.4) ermittelt.

4.2.9 Trielektronische Rekombination (TR)

In der Entwicklung der $(2s2p \ ^3P_1)n$ -DR-Resonanzstärken in Abschnitt 4.2.8 fällt auf, dass die der $(2s2p \ ^3P_1)35$ -Resonanz zugeordnete Resonanzstärke deutlich über der Stärke benachbarter Resonanzen liegt (Abb. 4.36(a)). Dies kann mit Resonanzen der trielektronischen Rekombination (TR) $[142] \ 2s^2 \ ^1S_0 + e^- \rightarrow (2p_{1/2}^2 \ ^3P_0)13_j$ erklärt werden, die bei nahezu identischer Energie

zu finden ist (Abb. 4.37(a)) und deren Stärke der $(2s2p^3P_1)35$ -Resonanz zugeschlagen wurde. Auch ist zwischen bestimmten Unterzuständen überlappender natürlicher Linienbreite ein adiabatischer Übergang $((2p^2^3P_0)131_j)_J \leftrightarrow ((2s2p^3P_1)351'_{j'})_J$ möglich. Dieser Übergang ist in der Lage, die Fluoreszenzausbeute (Abs. 1.31) und damit auch die Resonanzstärke durch Öffnen neuer Kanäle der radiativen Stabilisierung oder Autoionisation zu beeinflussen. Aus der von Safronova *et al.* [34] gegebenen $(2s^2^1S_0-2p^2^3P_0)$ -Anregungsenergie lassen sich – bei Nutzung einer Wasserstoffnäherung ($Z_{\text{eff}}=50$) der Bindungsenergie des Rydbergelektrons (Gl. 1.4) – Positionen erwarteter Resonanzen der $(2p^2_{1/2}^3P_0)n$ -TR-Serie bestimmen. Abb. 4.37(a) zeigt die auf diesem Weg gewonnenen Resonanzlagen für $n=12, 13$ und 14 . Bei genauer Betrachtung stellt man im gemessenen Spektrum an diesen Positionen kleine Resonanzen fest. Allerdings befinden sich im gemessenen Spektrum eine Vielzahl von Resonanzen verschiedener DR-Serien. Überlagert eine starke DR-Resonanz eine schwache TR-Resonanz, so ist die TR-Resonanz in der Messung nicht mehr zu erkennen. Wird die TR-Resonanz von einer DR-Resonanz geringer Stärke überlagert, so erschwert dies die eindeutige Zuordnung experimentell bestimmter Resonanzstärken zur DR- bzw. TR-Resonanz.

In der Regel finden sich TR-Resonanzen signifikanter Stärke eher in den Rekombinationspektren leichter Ionen [142]. Ursache hierfür ist die unterschiedliche Abhängigkeit der DR- und TR-Wirkungsquerschnitte $\sigma^{(\text{DR})}$ bzw. $\sigma^{(\text{TR})}$ der ihnen zu Grunde liegenden Autoionisation- (A_a) bzw. Drei-Elektronen-Autoionisationsraten (A_{3e}) von der Kernladungszahl Z .

$$\sigma_{\Delta n=0}^{(\text{TR})} \propto \frac{1}{E} \frac{A_{3e} \cdot \sum A_\gamma}{A_{3e} + A_a + \sum A_\gamma} = \frac{1}{E} \cdot \begin{cases} \frac{A_{3e}}{A_a} \cdot \sum A_\gamma & \text{für } A_{3e} \ll A_a \gg \sum A_\gamma \\ \sum A_\gamma & \text{für } A_a \ll A_{3e} \gg \sum A_\gamma \\ A_{3e} & \text{für } A_{3e} \ll \sum A_\gamma \gg A_a \end{cases} \quad (4.19)$$

Hierbei ist E die Resonanzenergie und $\sum A_\gamma$ die Summe aller möglichen radiativen Stabilisierungen. Schnell [142, Abs. 2.4.2] gibt für $Z < 40$ $A_{3e} \propto Z^{-3/2}$, $A_{a,\Delta n=0} \propto Z^{1/2}$ und $\sum A_r \propto Z$ an. Diese Abhängigkeiten lassen sich – unter anderem aufgrund der Z^4 -Skalierung der E1-Übergangsraten des Rydbergelektrons in Wasserstoffnäherung [36] – nicht einfach auf den hier vorliegenden Fall übertragen. Der zweite in Gleichung 4.19 betrachtete Fall ($A_a \ll A_{3e} \gg \sum A_\gamma$) ist z.B. gegeben, wenn sich ein doppeltangeregtes Ion oberhalb der Drei-Elektronen-Autoionisationsschwelle aber unterhalb der Zwei-Elektronen-Autoionisationsschwelle befindet und die radiativen Raten klein sind.

4.2.10 DR-Spektrum des initial metastabilen $2s2p^3P_0$ -Strahlanteils

Aus dem gemessenen DR-Spektrum lassen sich einzelne Resonanzstärken des Grundzustandes, wie in Abschnitt 4.2.8 beschrieben, bestimmen. Unter Nutzung der so gewonnenen Resonanzstärken und Beachtung des Anteils des Grundzustandes am Ionenstrom (Abs. 4.2.7) lässt sich ein Spektrum simulieren, das dem Grundzustandsbeitrag zum gemessenen Spektrum entspricht. Eine Subtraktion dieses Spektrums vom gemessenen Spektrum gemäß Gleichung 4.40 legt den Anteil des metastabilen $2s2p^3P_0$ -Strahlanteils am Ratenkoeffizienten frei. Hieraus lässt sich mittels Renormierung auf den Ionenstromanteil des metastabilen $\text{Xe}^{50+} 2s2p^3P_0$ -Zustands das zugehörige DR-Spektrum gewinnen (Abb. 4.38).

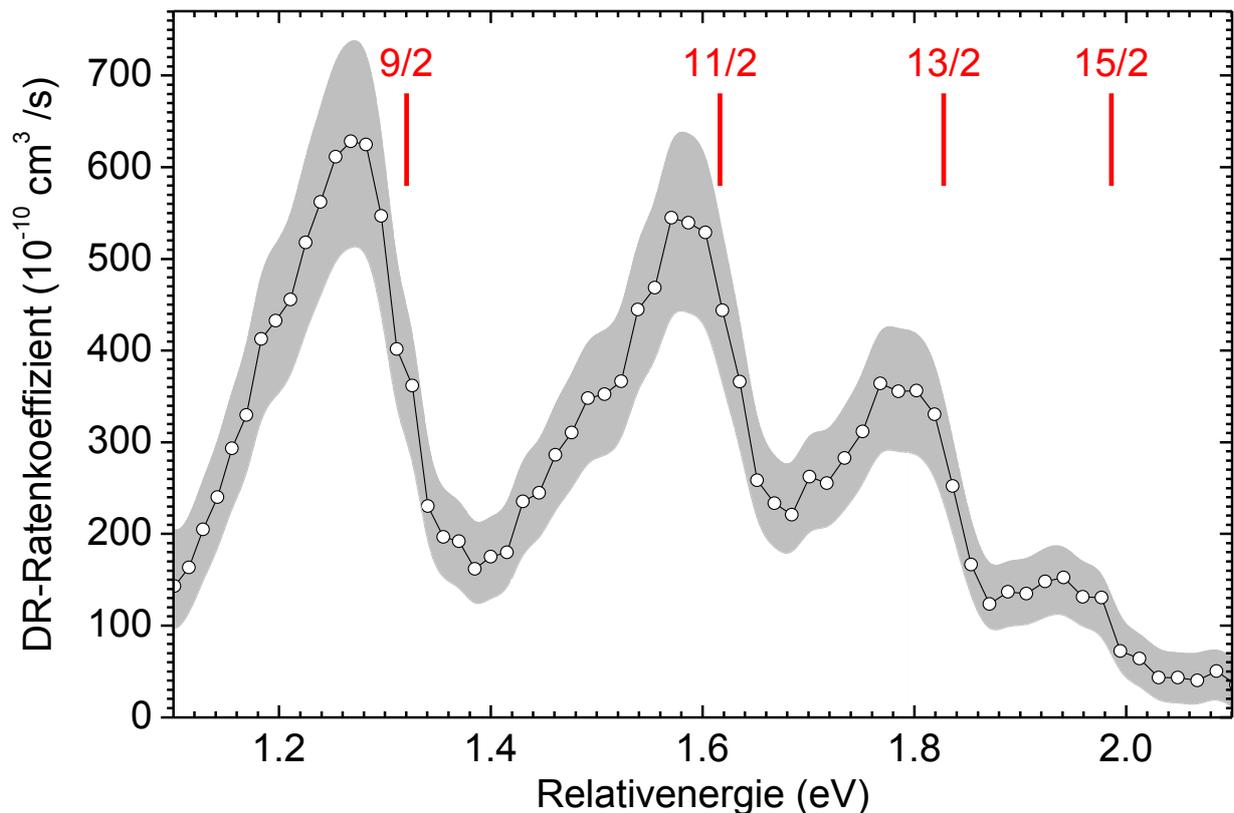


Abbildung 4.38: Absolutes Spektrum der dielektronischen Rekombination für Xe^{50+} ($2s2p\ ^3P_0$) nach Subtraktion des Grundzustandsanteils und Renormierung auf ($2s2p\ ^3P_0$) Ionenstromanteil. Zu erkennen sind Resonanzen der $2s2p\ ^3P_0 + e^- \rightarrow (2p^2\ ^3P_1)8l_j$ -Resonanzgruppe für $j = 9/2, 11/2, 13/2$ und $15/2$. Fehlermargen berücksichtigen Fehler der Zählratenstatistik, systematische Fehler (wie in Abschnitt 3.5.6 diskutiert), einen 1.5%-igen Fehler des Grundzustandsuntergrundabzuges (Abs. 4.3.2.6) und 0.5% absolute Unsicherheit der Bestimmung des metastabilen Strahlanteils dieser Messungen. Resonanzpositionen (l) ergeben sich aus Anregungsenergien (Abs. 4.2.3.2) und Diracbindungsenergien (Gl. 1.4) bei $Z_{\text{eff}} = 50$.

Dieses Verfahren liefert nur für jene Bereiche des gemessenen Spektrums verwertbare Ergebnisse, in denen sich erkennbare Resonanzen des initial metastabilen $2s2p\ ^3P_0$ -Zustandes befinden. Für Bereiche, in denen nur Grundzustandsresonanzen erkennbar sind, führt die Subtraktion des Grundzustandsanteils zu einem nahezu verschwindenden Ratenkoeffizienten. Dieser unterscheidet sich nur an Stellen signifikant von Null, an denen Simulation und Messung ungenügende Übereinstimmung aufweisen. Gemäß Fehlerfortpflanzungsgesetz führt Subtraktion und Renormierung zu einer Erhöhung des absoluten Fehlers um einen Faktor, der dem reziproken metastabilen Strahlanteil entspricht. Der relative Fehler erhöht sich um einen Faktor, welcher dem reziproken Anteil des metastabilen Zustands am Ratenkoeffizientenspektrum entspricht.

4.2.11 Plasmaratenkoeffizient

Äquivalent zum Vorgehen in Abschnitt 4.1.7 wurden aus den in Abschnitt 4.2.8 gewonnenen Resonanzstärken der dielektronischen Rekombination berylliumartiger Xenonionen Plasmaratenkoeffizienten ermittelt. Abb. 4.39 zeigt den Plasmaratenkoeffizienten für berylliumartiges Xenon. Enthalten sind DR-Resonanzstärken des gemessenen Energiebereiches (0 bis ~ 550 eV), bestehend aus den Resonanzserien $2s^2 \ ^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p \ ^1P_1)n$, $(2s2p \ ^3P_1)n$ und $(2s2p \ ^3P_2)n$. Die Resonanzstärken, der mit der vierten möglichen, inneren L-Schalenanregung ($2s2p \ ^3P_0$) verbundene Resonanzserie, sind zu gering, um in der Messung nachgewiesen werden zu können. Demzufolge ist auch ihr Beitrag zum Plasmaratenkoeffizient vernachlässigbar. Als gestrichelte Linie dargestellt ist der RR-Anteil des Plasmaratenkoeffizienten, welcher gemäß Gl. 1.25 und 1.22 für Einfänge in $n_{\max} < 1000$ berechnet wurde. In der Darstellung nicht enthalten sind Beiträge von $\Delta n \geq 1$ DR-Resonanzen, die erst bei Energien oberhalb des sich von 0 bis 550 eV erstreckenden Energiebereiches dieser Messung auftreten. Wie man sieht, wird der Plasmaraten-

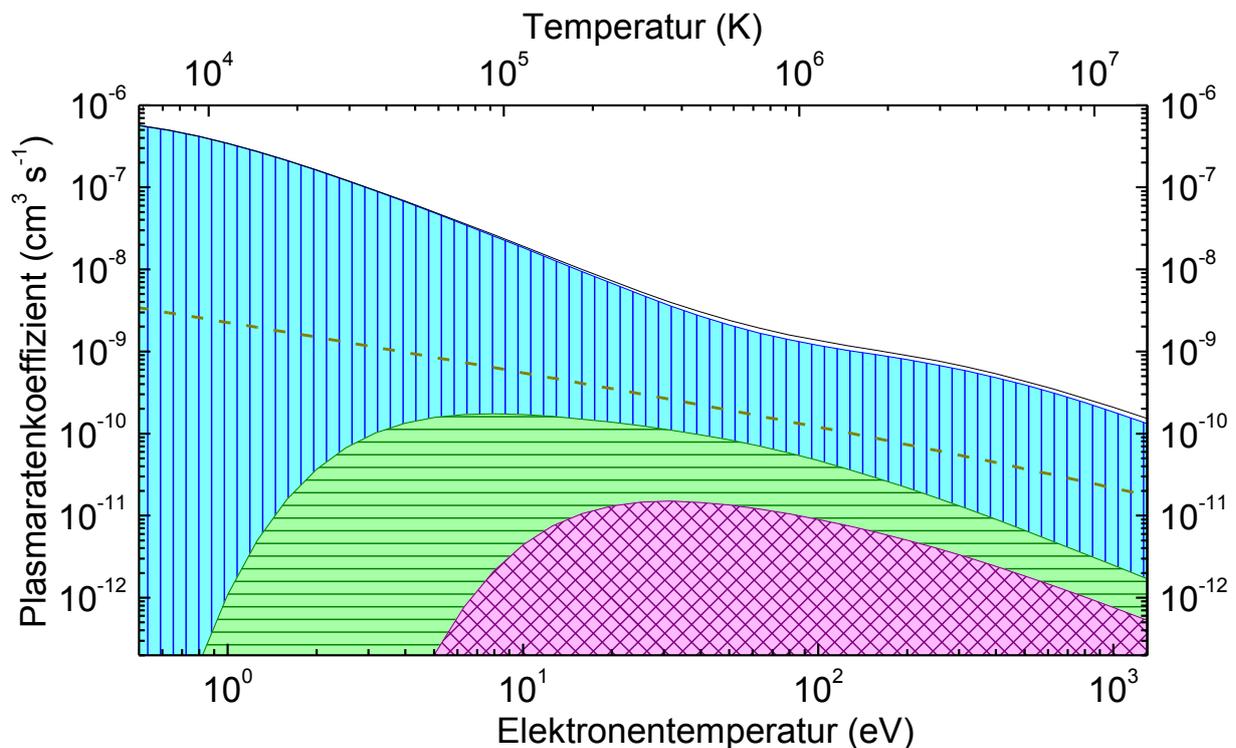


Abbildung 4.39: $\Delta n = 0$ -DR und RR-Plasmaratenkoeffizient von Xe^{50+} (dicke durchgezogene Linie) als Summe der Beiträge der radiativen Rekombination (gestrichelte Linie; zur Berechnung siehe Text) sowie den Beiträgen der $(2s^2 \ ^1S_0) + e^- \rightarrow (2s2p \ ^1P_1)n$ - (vertikal schraffiert), $(2s2p \ ^3P_1)n$ - (horizontal schraffiert) und $(2s2p \ ^3P_2)n$ -DR-Resonanzserien (Rautenmuster), deren Resonanzstärken in Abschnitt 4.2.8 experimentell bestimmt wurden. Der Fehler des Plasmaratenkoeffizienten kann gemäß Abschnitt 3.5.6 zu 17% abgeschätzt werden. Beiträge der $(2s2p \ ^3P_0)n$ -Resonanzserie sind vernachlässigbar gering. Beiträge der $\Delta n = 1$ -DR-Resonanzserien dürften erst jenseits einiger hundert meV einer Rolle spielen.

tenkoeffizient weitestgehend von der $(2s2p\ ^1P_1)n$ DR-Resonanzserie dominiert. Nicht im DR-Plasmaratenkoeffizient enthalten sind Beiträge von $\Delta n \geq 1$ -DR-Resonanzen, die oberhalb des gemessenen Energiebereiches [0 – 550 eV] liegen. Gemäß LANL-Programmpaket [103–105] ist die niederenergetischste $\Delta n \geq 1$ Resonanz ($2s^2 + e^- \rightarrow 2s\ 3s^2$) bei etwa 1.3 keV zu erwarten und sollte bei Plasmatemperaturen (kT) oberhalb einiger hundert eV berücksichtigt werden. Die bei $E \lesssim 10$ meV (Abb. 4.48 & 4.51) auftretende Ratenüberhöhung (Abs. 1.3.2) hat auf das Plasmaratenkoeffizientenspektrum jenseits von 500 meV nur mehr eine sehr geringe Auswirkung. Wie in Abs. 4.1.7 für Xe^{51+} diskutiert, ist auch für Xe^{50+} der Einfluss der Feldionisation auf den Plasmaratenkoeffizienten gering.

Für eine bessere, weitere Nutzbarkeit der ermittelten Plasmaratenkoeffizienten wurde auch hier der DR-Anteil des Plasmaratenkoeffizienten ($\alpha_p^{(DR)}$) in Abhängigkeit von der Elektronentemperatur gemäß Gleichung 4.6 parametrisiert. Dabei wurden für $i_{\max} = 5$ die in Tabelle 4.9 angegebenen Parameter ermittelt. Für Temperaturen zwischen 10^4 und 10^8 Kelvin beträgt die Abweichung zwischen gemessenem und parametrisiertem Plasmaratenkoeffizienten maximal 2% bei einem relativen Fehler des gemessenen Plasmaratenkoeffizienten von 17% (Abs. 3.5.6).

Tabelle 4.9: Parameter der Kurvenanpassung des Xe^{50+} $\Delta n = 0$ -DR-Plasmaratenkoeffizienten gemäß Gleichung 4.6. Abweichung der Parametrisierung gegenüber dem Plasmaratenkoeffizienten $\leq 2\%$ für Plasmatemperaturen zwischen 10^4 und 10^8 Kelvin

	i:	1	2	3	4	5
c_i	$[\text{cm}^3\ \text{s}^{-1}\ \text{K}^{3/2}]$	0.07116	0.6059	0.1108	2.129	7.045
E_i	[eV]	0.1480	0.5706	1.645	119.9	403.7

4.3 $^{136}\text{Xe}^{50+}$ $2s2p\ ^3\text{P}_0$ -Strahllebensdauer & $(2s2p\ ^3\text{P}_0 \rightarrow 2s^2\ ^1\text{S}_0)$ -E1M1-Übergangsrate

Wie schon in Kapitel 4.2 erläutert finden sich im DR-Ratenkoeffizientenspektrum von berylliumartigem $^{136}\text{Xe}^{50+}$ Resonanzen, die der $2s2p\ ^3\text{P}_0 + e^- \rightarrow (2p^2\ ^3\text{P}_1)8_j$ -Resonanzgruppe des initial bevölkerten metastabilen $2s2p\ ^3\text{P}_0$ -Zustands zugeordnet werden können (Abb. 4.40). Die Präsenz dieser Resonanzen im gemessenen Spektrum ist darauf zurückzuführen, dass der $2s2p\ ^3\text{P}_0$ -Zustand nur durch E1M1-Zweiphotonenemission oder höhere Multipolübergänge in den Grundzustand relaxieren kann. Im Folgenden (Abs. 4.3.1) werden zuerst Zweiphotonenübergänge vorgestellt und theoretische Vorhersagen der Lebensdauer des $(2s2p\ ^3\text{P}_0 \rightarrow 2s^2\ ^1\text{S}_0)$ -E1M1-Übergangs diskutiert. Im zweiten Abschnitt (Abs. 4.3.2) erfolgt die Bestimmung der Lebensdauer des metastabilen $2s2p\ ^3\text{P}_0$ -Strahlanteils aus dem Experiment. Im Anschluss (Abs. 4.3.3) werden Einflüsse auf die Lebensdauer des $2s2p\ ^3\text{P}_0$ -Strahlanteils auf Basis eines Ratengleichungssystems

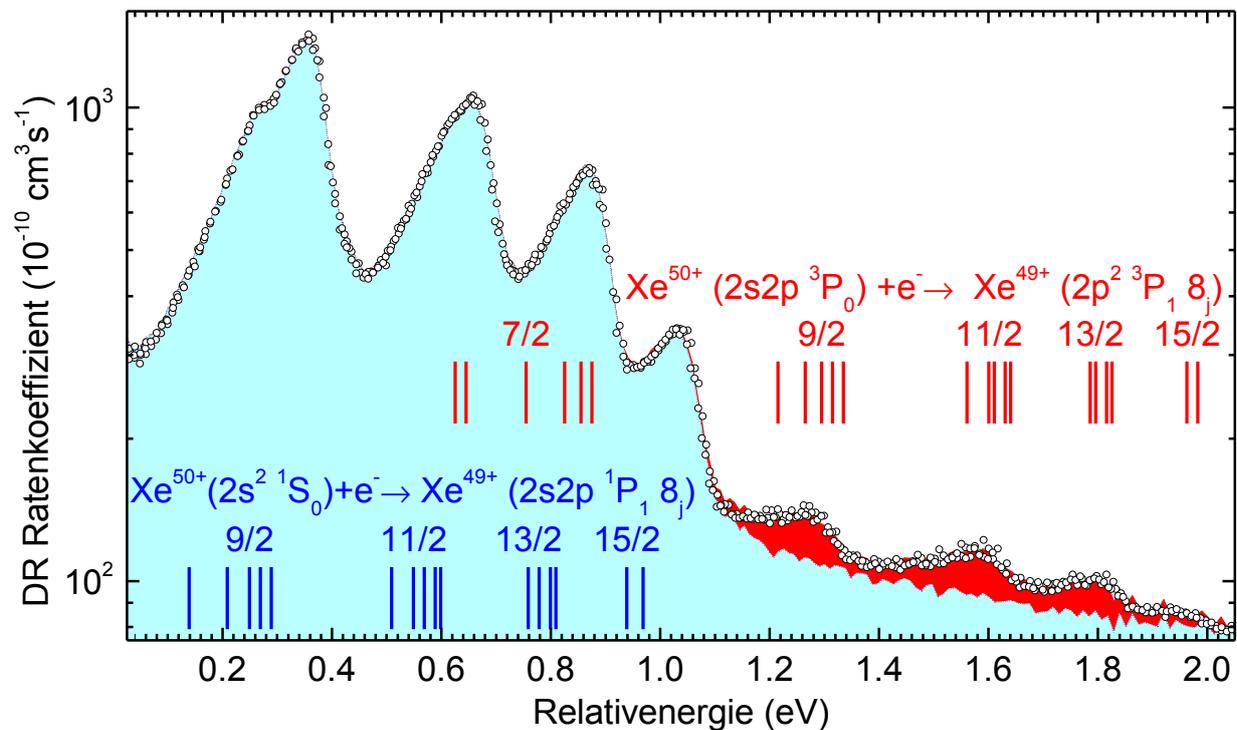


Abbildung 4.40: Detailansicht des $^{136}\text{Xe}^{50+}$ -DR-Ratenkoeffizientenspektrums. Dominant sind Resonanzen der $2s^2\ ^1\text{S}_0 \rightarrow (2s2p\ ^1\text{P}_1)8_j$ -Resonanzgruppen. Flächig dunkel hervorgehoben sind Resonanzen der $2s2p\ ^3\text{P}_0 + e^- \rightarrow (2p^2\ ^3\text{P}_1)8_j$ -Resonanzgruppe des initial bevölkerten metastabilen $2s2p\ ^3\text{P}_0$ -Zustands. Die geringe Stärke letztgenannter Resonanzen ist auf den geringen Anteil am Ionenstrahl zurückzuführen. Die zur Verdeutlichung eingezeichneten Resonanzpositionen ergeben sich aus gemessenen Anregungsenergien (Abs. 4.2.3) und mit dem LANL-Programmpaket [103–105] berechneten Rydbergbindungs- und Wechselwirkungsenergien.

diskutiert. Den Abschluss (Abs. 4.3.4) des Kapitels bilden die daraus resultierenden Schlussfolgerungen für die Lebensdauer des $(2s2p\ ^3P_0 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0)$ -E1M1-Übergangs.

4.3.1 Zweiphotonenübergänge

Der Grundzustand atomarer Systeme mit zwei Valenzelektronen in offener Valenzschale, wie sie der zweiten Hauptgruppe des Periodensystems entsprechen, ist $ns^2\ ^1S_0$. Das niedrigste angeregte Energieniveau ist $nsnp\ ^3P_0$. Nur im Falle nichtverschwindenden Kernspins ($I \neq 0$) erlaubt die leichte Niveaumischung durch Hyperfeinwechselwirkung äußerst langsame Einphotonenübergänge zwischen diesen Niveaus. Letztere sind als zentrale “clock“-Übergänge für die Entwicklung ultrastabiler optischer Uhren von großer Bedeutung [12, 13]. Hierbei reduzieren langsame Übergänge die Energie- bzw. Frequenzunschärfe.

Bei verschwindendem Kernspin ($I = 0$) sind Einphotonenübergänge zwischen Zuständen mit verschwindendem Gesamtdrehimpuls J verboten. Alle Kerne mit gerader Protonen- und Neutronenzahl haben im nuklearen Grundzustand einen solchen verschwindenden Kernspin [41]. Diese Kerne stellen die Mehrzahl der stabilen Kerne des Periodensystems (Abb. 5.2). Für alle diese Kerne ist bei Konfiguration mit zwei Valenzelektronen der höchst langsame E1M1-Zweiphotonenübergang die dominante Abregung des $(nsnp\ ^3P_0)$ -Niveaus. Aus diesem Grund handelt es sich um einen äußerst langlebigen metastabilen Zustand.

Einen sehr ausführlichen Überblick über Zweiphotonenübergänge in schweren Systemen – mit Stand 2004 – geben Mokler & Dunford [40]. Entsprechend sei für detailliertere Ausführungen auf diese Publikation und die dort angegebenen umfangreichen Referenzen verwiesen. Im Folgenden zitierte Quellen beschränken sich aus diesem Grund mit wenigen Ausnahmen auf neuere oder für das durchgeführte Experiment besonders relevante Quellen. Theoretische Untersuchungen zu Zweiphotonenübergängen wurden bisher primär in wasserstoff- [143–150] und heliumartigen [149, 151–153] Systemen vorgenommen. Als Beispiele seien hier der $(2S \rightarrow 1S + 2\gamma_{E1})$ -Übergang in wasserstoffartigen Ionen bzw. die $(2\ ^1S_0 \rightarrow 1\ ^1S_0 + 2\gamma_{E1})$ -, $(2\ ^3S_1 \rightarrow 1\ ^1S_0 + 2\gamma_{E1})$ - und $(2\ ^3P_0 \rightarrow 1\ ^1S_0 + \gamma_{E1} + \gamma_{M1})$ -Übergänge in heliumartigen Ionen genannt. Im Gegensatz zu berylliumartigen Systemen stehen diese in der Regel in Konkurrenz zu anderen Übergängen. So dominiert für schwere wasserstoffartige Ionen der $(2S \rightarrow 1S + \gamma_{M1})$ -Übergang, während für leichte heliumartige Ionen die $(2\ ^3P_0 \rightarrow 1\ ^1S_0 + \gamma_{E1} + \gamma_{M1})$ -Übergangsrate nur einen Bruchteil der $(2\ ^3P_0 \rightarrow 2\ ^3S_1 + \gamma_{E1})$ -Übergangsrate beträgt und für Kernladungszahlen von 60, 72 bzw. 88 einen Anteil von 1, 5 bzw. 30% übersteigt [154]. Ein weiterer Unterschied liegt in der Übergangsenergie, die beim $(2s2p\ ^3P_0 \rightarrow 2s^2\ ^1S_0)$ -Innerschalenübergang in berylliumartigen Ionen sehr viel geringer ist als bei den oben besprochenen $\Delta n \geq 1$ -Übergängen in wasserstoff- oder heliumartigen Systemen. Die starke Abhängigkeit der Übergangsrate von der Übergangsenergie (z.B. Gl. 1.6) führt zu – gegenüber wasserstoff- und heliumartigen Systemen – drastisch verminderten Übergangsraten und verlängerten Lebensdauern in berylliumartigen Ionen. Auch experimentelle Untersuchungen atomarer Zweiphotonenübergänge liegen bisher primär für wasserstoffartige und heliumartige Systeme sowie für den K-Schalen Übergang in neutralen Atomen vor [40, 155, 156].

Im Gegensatz hierzu existieren für $(nsnp\ ^3P_0 \rightarrow ns^2\ ^1S_0 + \gamma_{E1} + \gamma_{M1})$ -Zweiphotonenübergänge in erdalkaliartigen Ionen keine experimentellen sondern nur wenige theoretische Arbei-

ten. Die recht aktuelle Arbeit von Santra *et al.* [157] beschreibt ($nsp^3P_0 \rightarrow ns^2\ ^1S_0 + \gamma_{E1} + \gamma_{M1}$)-Übergänge in Neutralatomen für $3 \leq n \leq 5$. Die dortigen Rechnungen resultieren in Lebensdauervorhersagen von 198000 (3s3p Magnesium), 81000 (4s4p Calcium) und 5770 Jahren (5s5p Strontium).

4.3.1.1 Vorhersagen der $2s2p\ ^3P_0 \rightarrow 2s^2\ ^1S_0$ -E1M1-Übergangslbensdauer

Für berylliumartige Ionen wurden in Abschnitt 1.1.2.2 die theoretischen Arbeiten von Schmieder [42] und Laughlin [3] diskutiert. Dabei wurden von Schmieder Übergangsraten für berylliumartige Systeme mit Kernladungszahlen zwischen 12 und 20 berechnet, während Laughlin in nichtrelativistischer Näherung und mit der nur für L-S-Kopplung gültigen Näherung vernachlässigbarer Aufspaltung zwischen $2s2p\ ^3P_0$ - und $2s2p\ ^3P_1$ -Zustand eine geschlossene Formel (Gl. 1.11) angibt. Für den Fall berylliumartigen Xenons resultiert letztere Rechnung, bei Verwendung von Literatur-Anregungsenergien [34], in einer Vorhersage der Lebensdauer von 30 Sekunden. Berücksichtigt man die Aufhebung der energetischen Entartung der Niveaus $E(^3P_0)$ und $E(^3P_1)$

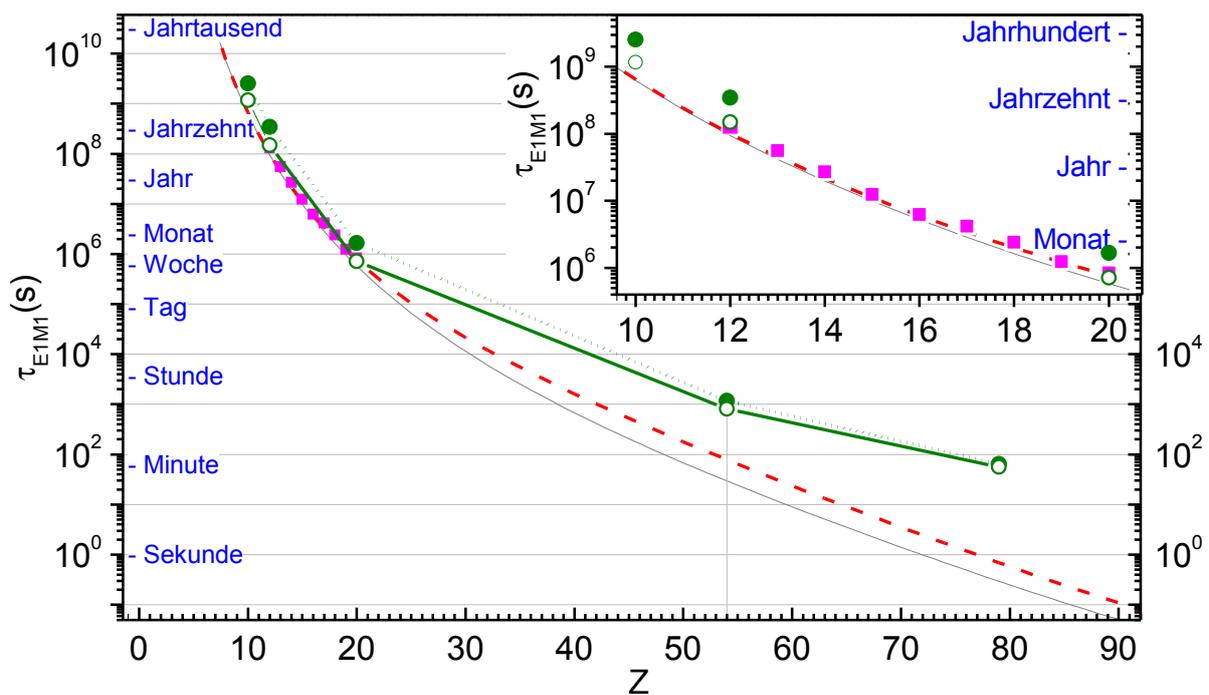


Abbildung 4.41: Lebensdauer des $2s2p\ ^3P_0 \rightarrow 2s^2\ ^1S_0 + \gamma_{E1} + \gamma_{M1}$ -Übergangs in berylliumartigen Ionen nach Schmieder [42] (■) und Laughlin [3] (— $2s2p\ ^3P_1$ -Zwischenzustand), bzw. Korrektur gemäß Gl. 1.17 (---) mit Literaturanregungsenergien [34]. Zum Vergleich werden unveröffentlichte, relativistische Rechnungen von Fratini *et al.* [158] für alle Zwischenzustände (●) und bei Beschränkung auf $2s2p\ ^3P_1$ -Zustand (○) gezeigt. Die relativistische Rechnung sorgt – insbesondere bei schweren Ionen – für eine um mehrere Größenordnungen verlängerte Lebensdauer.

für hohe Kernladungen, so erhöht sich die entsprechend vorhergesagte Lebensdauer auf 78 Sekunden (Gl 1.17). Abbildung 4.41 stellt die Vorhersagen zur $(2s2p\ ^3P_0 \rightarrow 2s^2\ ^1S_0) + \gamma_{E1} + \gamma_{M1}$ Lebensdauer dar. Besonders auffällig ist, dass die vorhergesagte Lebensdauer von einigen Jahrtausenden für leichte Ionen bis zu wenigen hundert Millisekunden für Uran reicht. Es sei darauf hingewiesen, dass der nichtrelativistische Ansatz dieser Rechnungen gerade für schwere Kerne ungeeignet ist. Eine publizierte relativistische Rechnung ist leider aktuell nicht verfügbar.

Fratini *et al.* [158] führen derzeit solche relativistische Rechnungen durch, deren vorläufige Resultate von $2.5 \cdot 10^9$, $3.5 \cdot 10^8$, $1.7 \cdot 10^6$, 1200 sowie 65 Sekunden für $Z = 10, 12, 20, 52$ und 79 ebenfalls in Abb. 4.41 dargestellt sind. Es zeigt sich eine im Vergleich zur korrigierten Vorhersage nach Laughlin (Gl 1.17) um den Faktor 4, 3.5, 2.2, 15 bzw. 93 erhöhte Lebensdauer. Die moderate Verlängerung der Lebensdauer für niedrige und mittlere Kernladungen beruht weitestgehend auf der Berücksichtigung aller möglicher Zwischenzustände anstelle der Beschränkung auf den $2s2p\ ^3P_1$ -Zustand. Die sehr viel größeren Unterschiede für hohe Kernladungen sind auf die relativistische Behandlung zurückzuführen, die bei großen Kernladungen zu stärkeren Effekten führen.

4.3.2 Lebensdauer des $2s2p\ ^3P_0$ -Strahlanteils

In diesem Abschnitt wird die Lebensdauer des $2s2p\ ^3P_0$ -Strahlanteils bestimmt. Zu Beginn (Abs. 4.3.2.1) wird die grundsätzliche Methode erklärt. Anschließend (Abs. 4.3.2.2) wird die zur Bestimmung herangezogene Messung erläutert und die Reduktion des $2s2p\ ^3P_0$ -Strahlanteils anhand zeitlich versetzter Ratenkoeffizientenspektren der $2s2p\ ^3P_0 + e^- \rightarrow (2p^2\ ^3P_1)8_j$ -DR-Resonanzen aufgezeigt. Es folgt die Herleitung der Zeitentwicklung der Population des $2s2p\ ^3P_0$ -Zustandes aus den Ratengleichungen (Abs. 4.3.2.3). Mit dieser wird aus den experimentellen Daten und der Zeitentwicklung des Gesamtionenstroms (Abs. 4.3.2.4) die Zeitentwicklung der metastabilen Strahlkomponente und die ihr entsprechende Strahllebensdauer bestimmt (Abs. 4.3.2.5). Den Abschluss bildet die Fehlerrechnung (Abs. 4.3.2.6) und eine Zusammenstellung des Ergebnisses (Abs. 4.3.2.7).

4.3.2.1 DR als Werkzeug der Lebensdauerbestimmungen an Speicherringen

Zur Messung langsamer Prozesse ist es nötig, die Untersuchungsobjekte über entsprechend lange Zeiträume mit möglichst geringer Störung zu speichern. Speicherringe bieten diese Möglichkeit. Die Speicherdauer ist hierbei von verschiedenen Faktoren beeinflusst, wobei Restgasdruck und Ionengeschwindigkeit einen besonders starken Einfluss haben.

In der Regel verfügen Speicherringe über Möglichkeiten der Ionenstrommessung. Setzt sich ein Ionenstrom aus mehreren Komponenten (z.B. I_M und I_G) zusammen und möchte man die Lebensdauer eines kleineren Strahlanteils ($I_M \ll I_G$) bestimmen, so ist es nötig, das Signal des zu untersuchenden Zustands von der massiven Überlagerung durch den stärkeren Strahlanteil zu befreien. Hierzu können DR-Resonanzen verwendet werden. Wählt man eine Relativenergie E so, dass sie der Lage einer starken DR-Resonanz des zu untersuchenden Zustands M entspricht, während der 'störende' Zustand G dort keine Resonanz hat, so gilt $\alpha_M > \alpha_G$. Entsprechend

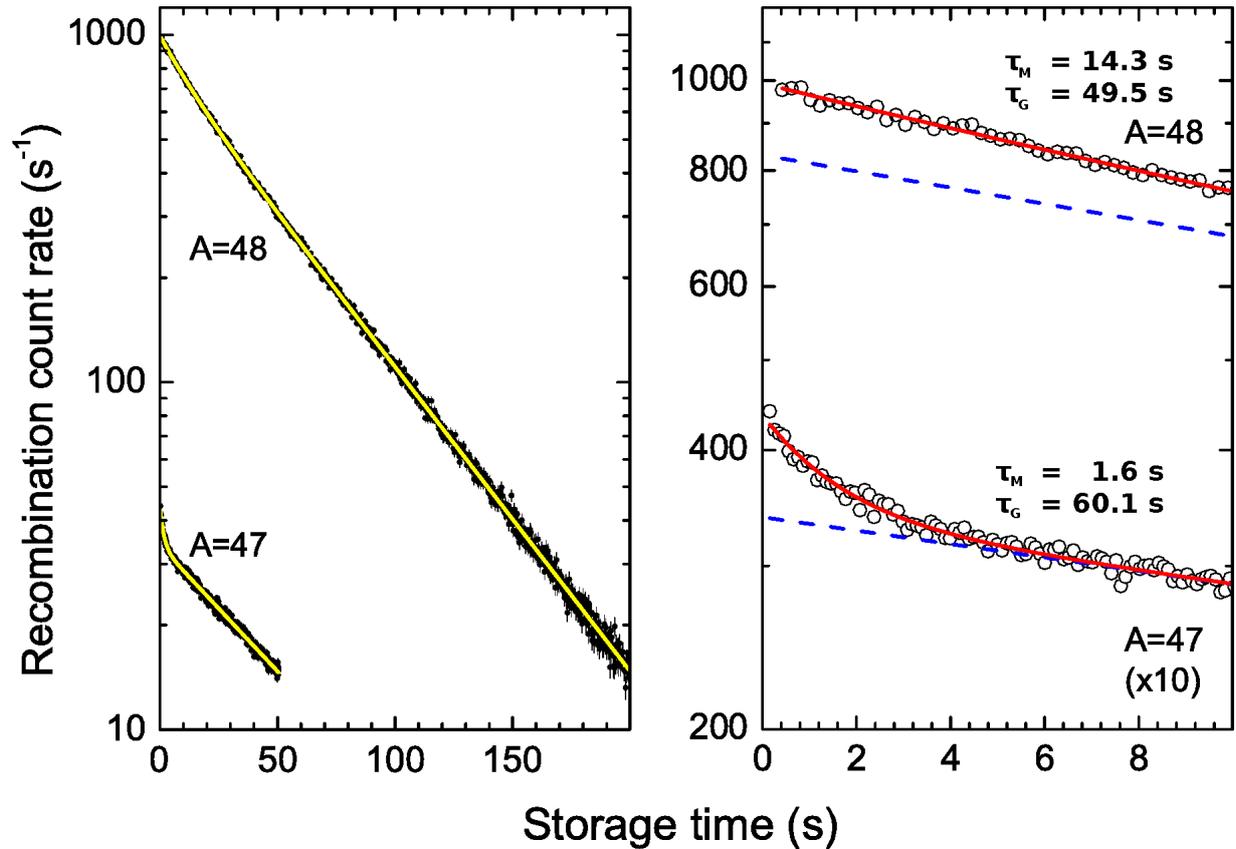


Abbildung 4.42: Zeitabhängige Rekombinationszählrate für berylliumartiges $^{48}\text{Ti}^{18+}$ (oben) bzw. $^{47}\text{Ti}^{18+}$ (unten) aus [11]. Die Abnahme der Zählrate (—) folgt für größere Speicherzeiten der durch die Strahllebensdauer τ_G bedingten Zerfallskurve des Grundzustandes (---). Kurz nach Injektion zeigt sich eine stärkere Reduktion, die auf die kürzere Lebensdauer des kleinen $2s2p\ ^3\text{P}_0$ -Strahlanteils (τ_M) zurückgeht. τ_M ist für $^{47}\text{Ti}^{18+}$ – bedingt durch hier mögliche hyperfeininduzierte Übergänge – sehr viel kleiner als für $^{48}\text{Ti}^{18+}$.

wird der Anteil des Zustands M an der Rekombinationszählrate R gegenüber dem Anteil am Ionenstrom um den Quotienten der Ratenkoeffizienten erhöht.

$$R = R_G + R_M \propto \alpha_G \cdot I_G + \alpha_M \cdot I_M \quad \frac{R_M}{R_G} = \frac{\alpha_M}{\alpha_G} \cdot \frac{I_M}{I_G} \quad (4.20)$$

Mittels der Messung der zeitabhängigen Rekombinationszählrate an der Position einer DR-Resonanz des initial metastabilen $2s2p\ ^3\text{P}_0$ -Zustandes konnten Schippers *et al.* [11] die Lebensdauer des $2s2p\ ^3\text{P}_0$ -Strahlanteils für $^{47}\text{Ti}^{18+}$ und $^{48}\text{Ti}^{18+}$ bestimmen. Hieraus konnte die Lebensdauer des hyperfeininduzierten ($2s2p\ ^3\text{P}_0 \rightarrow 2s^2\ ^1\text{S}_0$)-Übergangs bei $^{47}\text{Ti}^{18+}$ zu 1.8 ± 0.1 Sekunden bestimmt werden. Abbildung 4.42 zeigt den unterschiedlichen Abfall der Rekombinationszählrate der $2s2p\ ^3\text{P}_0$ - und $2s^2\ ^1\text{S}_0$ -Strahlkomponenten für $^{48}\text{Ti}^{18+}$ bzw. $^{47}\text{Ti}^{18+}$.

4.3.2.2 Ratenkoeffizientenentwicklung der $(2p^2\ ^3P_1)8_j$ -DR-Resonanz

Die hier vorgelegte Messung zur dielektronischen Rekombination berylliumartigen Xenons wurde – im Gegensatz z.B. zur Messung des hyperfeininduzierten $\text{Ti}^{18+}(2s2p^3P_0) \rightarrow \text{Ti}^{18+}(2s^2\ ^1S_0) + 1\gamma$ -Übergangs [11] – nicht für die Lebensdauerbestimmung optimiert. So liegt z.B. keine zeitabhängige Messung bei gleichbleibender Relativenergie vor. Trotzdem kann aus den Daten eine Lebensdauer des $2s2p^3P_0$ -Strahlanteils bestimmt werden. Das entsprechende Vorgehen soll im Folgenden erläutert werden.

Im Rahmen der Messung wurde der gewünschte berylliumartige Ladungszustand durch Striping an einer Folie erzeugt. Während dieses Prozesses werden diverse angeregte Zustände bevölkert. Die kurzlebigen Zustände relaxieren während der folgenden Sekunden, die für die Beschleunigung im Synchrotron und die initiale Kühlung im Experimentierspeicherring benötigt werden. Letztlich bleiben nur der $2s^2\ ^1S_0$ -Grundzustand und der metastabile $2s2p^3P_0$ -Zustand in relevantem Maße bevölkert. Das gemessene Spektrum (Abb. 4.40) enthält Resonanzen des initial metastabilen $2s2p^3P_0$ -Strahlanteils. Im Detail handelt es sich hierbei um Resonanzen der $2s2p^3P_0+e^- \rightarrow (2p^2\ ^3P_1)8_j$ -Resonanzgruppe mit den Feinstrukturkomponenten $j=9/2, 11/2, 13/2$ und $15/2$ (Abb. 4.24).

Basis der Untersuchung sind Messungen bei denen die Relativenergie zwischen Ionen- und Elektronenstrahl während der Messung langsam gemäß der in Abb. 4.43 skizzierten Energieabfolge von ± 4 eV auf 0 eV verringert wird. Im Anschluss wurde die Energieabfolge von 4 bis 0 eV ein zweites Mal durchlaufen, bevor der Zyklus mit der nächsten Injektion von Ionen

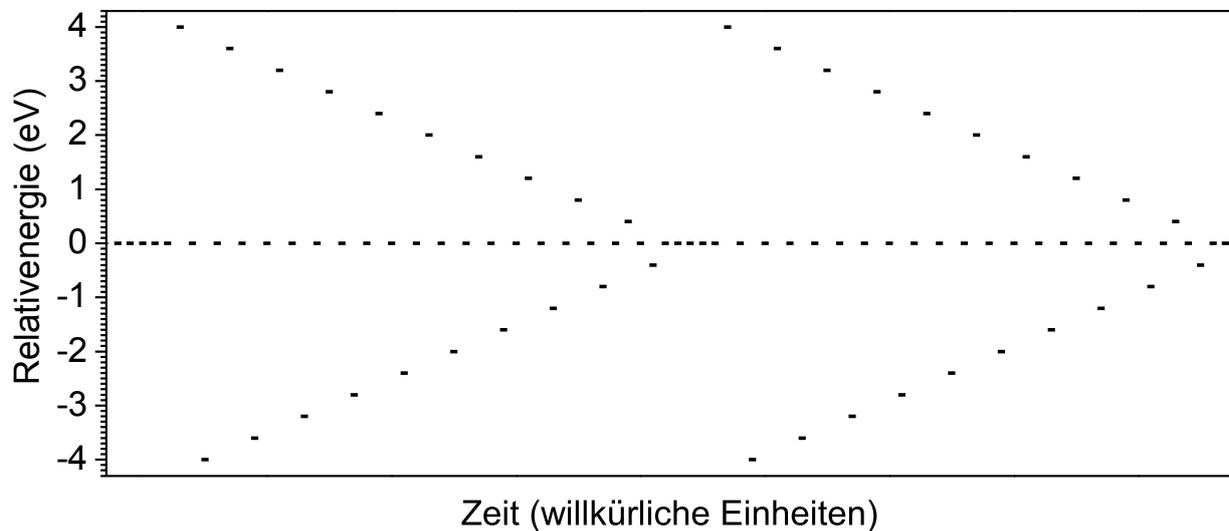


Abbildung 4.43: Skizze der Variation der Relativenergie für eine Injektion. Positive Relativenergien stehen für $\gamma_e > \gamma_i$, negative für $\gamma_e < \gamma_i$. Kühlsschritte bei $E=0$ wechseln sich mit Messschritten bei $E \neq 0$ ab. Bei Letzteren alterniert das Vorzeichen der Relativenergie von Messschritt zu Messschritt. Dabei wird die Energieabfolge für jede Ioneninjektion zweifach durchlaufen.

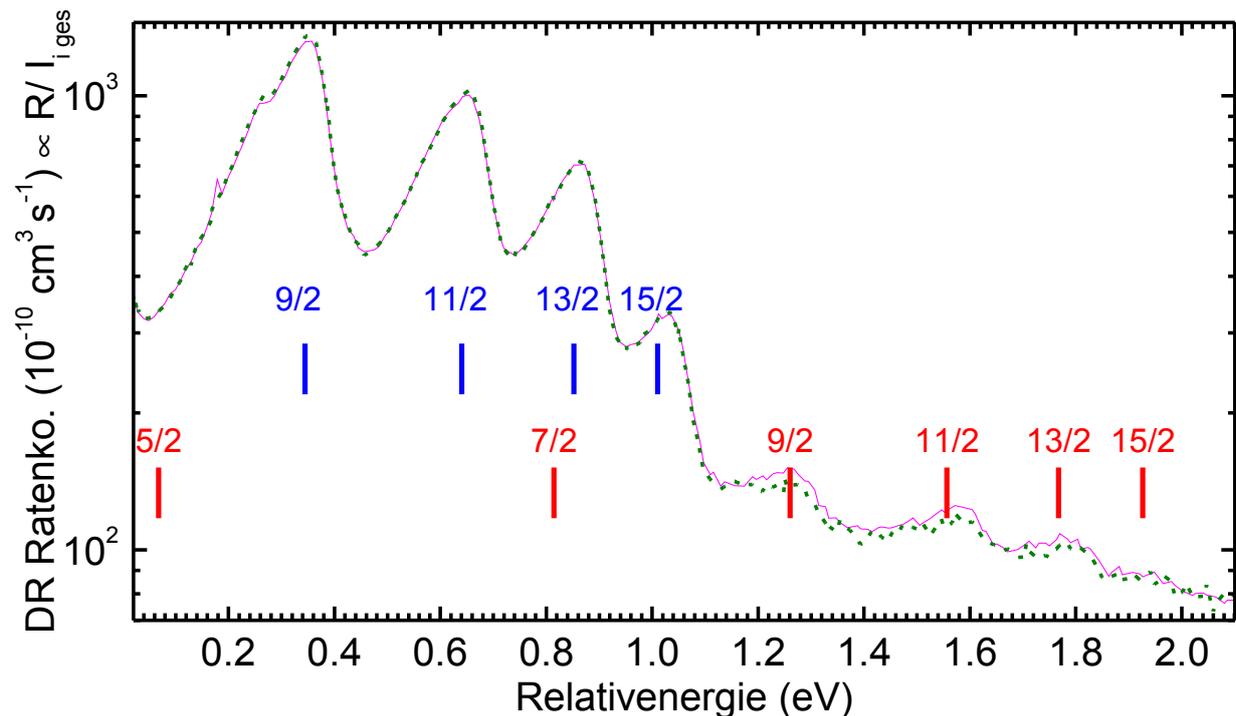


Abbildung 4.44: Spektren der gemessenen, auf den Gesamtionenstrom I_{exp} normierten, DR-Ratenkoeffizienten für frühe (—) und späte (- - -) Messung. Resonanzen des initial metastabilen $2s2p\ ^3P_0$ -Zustandes (rechts unten) sind bei späterer Messung schwächer. Resonanzen des initialen ($2s^2\ ^1S_0$)-Grundzustandes (links oben) sind bei späterem Messbereich minimal stärker (siehe auch Abb. 4.35(a)). Resonanzpositionen (l) sind für die Resonanzgruppen $2s2p\ ^3P_0 + e^- \rightarrow (2p^2\ ^3P_1)8_j$ - bzw. $2s^2\ ^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p\ ^1P_1)8_j$ markiert. Sie wurden nach Gleichung 1.28 unter Verwendung von Literatur-Anregungsenergien [34] und Diracbindungsenergien (Gl. 1.4) bei $Z_{\text{eff}} = 50$ gewonnen. Diese Näherung ist primär für größere j gültig und überschätzt die Resonanzenergie für kleine j deutlich (Abb. 4.18)

erneut begann. Der zweifache Ansteuerung der Energieabfolge erlaubt es, die durchgeführte Rekombinationsmessung in zwei Zeitabschnitte aufzuspalten. Dabei unterscheiden sich der “frühe“ vom “späten“ Zeitabschnitt durch einen zeitlichen Versatz von $t_{\text{ramp}} = 52.35 \pm 0.15$ Sekunden. Vergleicht man beide Spektren (Abb. 4.44), so stellt man fest, dass die Resonanzen des initial metastabilen $2s2p\ ^3P_0$ -Zustandes in der späteren Messung signifikant schwächer ausfallen, während die Resonanzen des initialen $2s^2\ ^1S_0$ -Grundzustandes leicht stärker werden (Abb. 4.35(a)).

4.3.2.3 Ratengleichungssystem

Unter der Voraussetzung, dass sich weder die Elektronendichte noch der Restgasdruck während der Messung signifikant ändert, lässt sich die zeitliche Entwicklung der Zahl des Ionen in Grund- (G) bzw. metastabilen (M) Zustand (N_G bzw. N_M) über folgende Ratengleichungen beschreiben

[159, 160] wobei A_x die Be- oder Entvölkerungsrate des Prozesses x bezeichnet:

$$\frac{dN_M}{dt} = - [A_{2\gamma} + A_q + A_{SE}(E) + A_{PR\ M}(E) + A_{ml}] N_M + A_e N_G \quad (4.21)$$

$$\frac{dN_G}{dt} = [A_{2\gamma} + A_q + A_{SE}(E)] N_M - [A_e + A_{PR\ G}(E) + A_{gl}] N_G \quad (4.22)$$

Hierbei ist $A_{2\gamma}$ die E1M1-Zweiphotonenübergangsrate von M nach G, A_q die durch das Quenching des metastabilen Zustands verursachte zusätzliche Übergangsrate von M nach G, A_{SE} die (energieabhängige) Rate für den radiativen oder dielektronischen Einfang eines Elektrons in den metastabilen Zustand gefolgt von Autoionisation in den Grundzustand (Superelastischer Stoß), $A_{PR\ M}(E)$ die (energieabhängige) Rate der Rekombinationsverluste von M durch Wechselwirkung mit den Elektronen des Elektronenkühlers, A_{ml} die Rate des Verlusts von M durch Stöße mit dem Restgas, A_e die Rate der Kollisionsanregung von G nach M, $A_{PR\ G}(E)$ die (energieabhängige) Rate der Rekombinationsverluste von G durch Wechselwirkung mit den Elektronen des Elektronenkühlers und A_{gl} die Rate des Verlusts von G durch Stöße mit dem Restgas.

Berücksichtigt man die Energieabhängigkeit nicht, so ergibt sich mit den Parametern

$$A = \frac{1}{2} (A_{2\gamma} + A_q + A_{SE} + A_e + A_{PR\ M} + A_{ml} + A_{PR\ G} + A_{gl}) \quad (4.23)$$

$$\Gamma = \sqrt{(A - A_{gl} - A_{PR\ G})^2 - A_e (A_{PR\ M} + A_{ml} - A_{gl} - A_{PR\ G})} \quad (4.24)$$

und den Startwerten $N_M(0) = N_M^{(0)}$ und $N_G(0) = N_G^{(0)}$ die Lösung [159]:

$$N_M(t) = \left(N_M^{(0)} \cosh(\Gamma t) + \left[A_e N_G^{(0)} - (A - A_e - A_{gl} - A_{PR\ G}) N_M^{(0)} \right] \frac{\sinh(\Gamma t)}{\Gamma} \right) \exp(-At)$$

$$N_G(t) = \left(N_G^{(0)} \cosh(\Gamma t) + \left[(A_{2\gamma} + A_q + A_{SE}) N_M^{(0)} + (A - A_e - A_{gl} - A_{PR\ G}) N_G^{(0)} \right] \frac{\sinh(\Gamma t)}{\Gamma} \right) \exp(-At)$$

Deutlich einfacher lässt sich $N_M(T)$ unter der Annahme vernachlässigbarer Kollisionsanregung $A_e N_G \ll |dN_M/dt|$ beschreiben. In diesem Fall gilt:

$$\frac{dN_M}{dt} = - [A_{2\gamma} + A_q + A_{SE}(E(t)) + A_{PR\ M}(E(t)) + A_{ml}] N_M \quad (4.25)$$

Wären $A_{SE}(E(t))^\ddagger$ und $A_{PR\ M}(E(t))$ nicht energie- und damit indirekt zeitabhängig, so ergäbe sich als Lösung nun eine einfache Exponentialfunktion. Dies ist aber aufgrund der Änderung der Energie während der Messung nicht der Fall. Aus diesem Grund muss ein etwas umständlicheres Vorgehen gewählt werden, um zumindest bei einem konstanten zeitlichen Abstand t_{ramp} zweier Messungen eine identische relative Abnahme gemäß folgender Gleichung nachzuweisen:

$$N_M(t + t_{\text{ramp}}) \approx F_M \cdot N_M(t) \quad \forall t \in [t_0, t_0 + t_{\text{ramp}}] \quad (4.26)$$

[‡]Die Schreibweise $A_x(E(t))$ dient der Veranschaulichung der indirekten Zeitabhängigkeit der Übergangsrate A_x , die sich aus der Abhängigkeit der Übergangsrate A_x von der Relativenergie $A_x(E)$ und der Zeitabhängigkeit der Relativenergie $E(t)$ ergibt.

Lokal ($t_{i+1} = t_i + \Delta t$, mit $\Delta t > 0$ & Δt hinreichend klein, so dass gilt $A_{\text{PR M}}(E(t)) + A_{\text{SE}}(E(t)) \approx A_{\text{PR M}}(E(t_i)) + A_{\text{SE}}(E(t_i)) \forall t \in [t_i, t_i + \Delta t]$) ergibt sich aufgrund der Stetigkeit von $A_{\text{SE}}(E(t))$ und $A_{\text{PR M}}(E(t))$ die Lösung:

$$N_M(t_{i+1}) \approx N_M(t_i) \cdot \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau_M(t_i)}\right) \quad \text{mit} \quad \tau_M(t_i) = (A_{2\gamma} + A_q + A_{\text{SE}}(E(t_i)) + A_{\text{PR M}}(E(t_i)) + A_{\text{ml}})^{-1} \quad (4.27)$$

Global ergibt sich hieraus:

$$N_M(t_n) \approx N_M(t_0) \prod_{i=0}^{i=n-1} \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau_M(t_i)}\right) \quad (4.28)$$

Und bei Durchlaufen einer kompletten Rampe der Länge t_{ramp} :

$$N_M(t + t_{\text{ramp}}) \approx N_M(t) \underbrace{\prod_{i=0}^{i=n-1} \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau_M(t + i \cdot \Delta t)}\right)}_{F_M(t)} \quad \text{mit} \quad t \in [t_0, t_0 + t_{\text{ramp}}]; \Delta t = \frac{t_{\text{ramp}}}{n} \quad (4.29)$$

Das zweimalige, identische Abfahren der Relativenergien in Rampen der Länge t_{ramp} sorgt für eine Periodizität der angesteuerten Relativenergien während der Messung ($E(t) = E(t + t_{\text{ramp}}) \forall t \in [t_0, t_0 + t_{\text{ramp}}]$) und somit auch für eine Periodizität der energieabhängigen Verluste $A_{\text{PR M}}(E(t)) = A_{\text{PR M}}(E(t + t_{\text{ramp}}))$ und $A_{\text{SE}}(E(t)) = A_{\text{SE}}(E(t + t_{\text{ramp}}))$, sowie des lokalen exponentiellen Abfalls $\tau_M(t) = \tau_M(t + t_{\text{ramp}})$. Aufgrund dieser Periodizität lassen sich in Gl. 4.29 alle $\tau_M(t + i\Delta t)$ mit $t + i\Delta t > t_{\text{ramp}}$ durch $\tau_M(t + i\Delta t - t_{\text{ramp}})$ ersetzen. Das Produkt in Gl. 4.29 läuft nun nicht mehr von t bis $t + t_{\text{ramp}}$, sondern – nach Umordnung – von t_0 bis $t_0 + t_{\text{ramp}}$. Somit ist F_M eine zeitunabhängige Konstante:

$$N_M(t + t_{\text{ramp}}) \approx N_M(t) \underbrace{\prod_{i=0}^{i=n-1} \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau_M(t_0 + i\Delta t)}\right)}_{F_M} \quad \text{mit} \quad t \in [t_0, t_0 + t_{\text{ramp}}]; \Delta t = \frac{t_{\text{ramp}}}{n} \quad (4.30)$$

$$\frac{N_M(t + t_{\text{ramp}})}{N_M(t)} \approx F_M \quad \forall t \in [t_0, t_0 + t_{\text{ramp}}] \quad (4.31)$$

Wie man sieht, ist die relative Reduktion des metastabilen Strahlanteils zwischen zwei Messzeitpunkten, deren zeitlicher Abstand einem kompletten Durchlauf der Energierampe entspricht, immer gleich groß. Der Parameter F_M beschreibt die zeitliche Entwicklung des metastabilen Strahlanteils. Die äquivalente Lebensdauer τ_M im Fall eines einfachen exponentiellen Abfalls ergibt sich wie folgt:

$$F_M = \exp\left(-\frac{t_{\text{ramp}}}{\tau_M}\right) \Leftrightarrow \tau_M = -\frac{t_{\text{ramp}}}{\ln(F_M)} \quad (4.32)$$

Aufgrund der Konstanz der Ionengeschwindigkeit gilt hier $I_M(t) \propto N_M(t)$, bzw.

$$\frac{I_M(t + t_{\text{ramp}})}{I_M(t)} \approx F_M \quad \forall t \in [t_0, t_0 + t_{\text{ramp}}] \quad (4.33)$$

4.3.2.4 Gesamtionenstrom

Abb. 4.45 zeigt den zeitabhängige Verlauf des experimentell bestimmten Ionenstroms (I_{exp}), der näherungsweise einem exponentiellen Abfall $I_{\text{exp}} = I_0 \cdot \exp(-t/\tau_{\text{I exp}})$ entspricht. Allerdings ist die Übereinstimmung mit dem exponentiellen Abfall nicht perfekt. Der Grund hierfür liegt in der unterschiedlichen Zeitentwicklung des metastabilen Strahlanteils und der Energieabhängigkeit u.a. der DR-Übergangsrate (Gl. 4.22). Dazu, dass diese Beschreibung trotzdem näherungsweise richtig ist, tragen verschiedene Faktoren bei: Zum Einen ist der metastabile Anteil klein. Zum Zweiten ist der Unterschied der zeitlichen Entwicklung des metastabilen Anteils zwar signifikant, überspannt aber (wie noch gezeigt werden soll) nicht mehrere Größenordnungen. Zum Dritten ist die (mittelbare) Zeitabhängigkeit der DR-Verlustrate der Grundzustandsionen nicht dominant genug, um die Zeitentwicklung stark vom exponentiellen Abfall zu entfernen. Mitursache für Letzteres ist, dass die Relativenergie während der Kühlschritte konstant bleibt und somit nur die Relativenergie bei Messung variiert wird, so dass die Änderung der DR-Verlustraten durch die Variation der Relativenergie bei Messung nur die Hälfte der Gesamtmesszeit betrifft. Die Zeitkonstante $\tau_{\text{I exp}}$ des exponentiellen Fits beträgt im Laborsystem für zwei unterschiedliche Messungen 121.4 (U) bzw. 123.1 (T) Sekunden. Gemittelt erhält man 122.2 ± 2.0 Sekunden, wobei der Fehler aus dem Vergleich beider Messungen abgeschätzt wird.

Für weitere Rechnungen ist es nützlich einen äquivalent zu Gl. 4.33 definierten Parameter

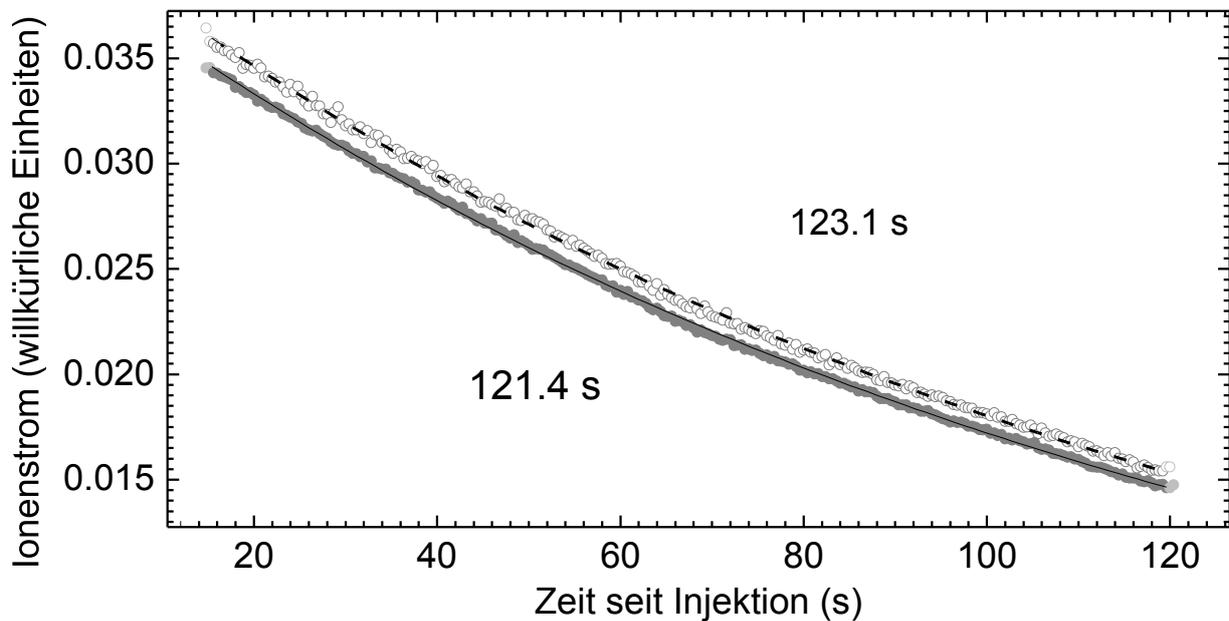


Abbildung 4.45: Zeitabhängige Abnahme des Gesamtionenstroms während der Speicherung im Speicherring der zwei für die Bestimmung der Lebensdauer des $2s2p^3P_0$ -Strahlanteils genutzten Messungen U (●) und T (○). Mittels Exponentialfit (— bzw. - -) konnte die jeweilige Strahllebensdauer $\tau_{\text{I exp}}$ zu 121.4 bzw. 123.1 Sekunden bestimmt werden.

F_{exp} zur Beschreibung des zeitlichen Abfalls einzuführen:

$$F_{\text{exp}} = \frac{I_{\text{exp}}(t + t_{\text{ramp}})}{I_{\text{exp}}(t)} \quad (4.34)$$

Dieser ergibt sich aus den Messungen U bzw. T zu im Mittel 0.648 ± 0.003 bzw. 0.651 ± 0.005 (Der angegebene Fehler entspricht einer Standardabweichung). Vorteil des Parameters ist, dass er sich auch für nicht rein exponentielle Abfälle noch klar definieren lässt, wenn diese eine Periodizität mit t_{ramp} aufweisen.

4.3.2.5 Ermittlung der Lebensdauer des $2s2p$ $^3\text{P}_0$ -Strahlanteils

Der gemessene Ratenkoeffizient ($\alpha_{\text{exp}}(E, t)$) ist die ionenstromgewichtete Superposition der Ratenkoeffizienten beider Strahlanteile $\alpha_M(E) = \langle \sigma_M \cdot v(E) \rangle$, bzw. $\alpha_G(E) = \langle \sigma_G \cdot v(E) \rangle$ gemäß folgender Gleichung:

$$\alpha_{\text{exp}}(E, t) \propto \frac{R_{\text{exp}}(E, t)}{I_{\text{exp}}(t)} \quad (4.35)$$

$$\alpha_{\text{exp}}(E, t) = \underbrace{\alpha_M(E) \frac{I_M(t)}{I_{\text{exp}}(t)}}_{\tilde{\alpha}_M(E, t)} + \underbrace{\alpha_G(E) \frac{I_G(t)}{I_{\text{exp}}(t)}}_{\tilde{\alpha}_G(E, t)} \quad (4.36)$$

Hierbei ist R_{exp} die gemessene Zählrate und $I_{\text{exp}}(t) = I_M(t) + I_G(t)$ der gemessene, zeitabhängige Ionenstrom. $\tilde{\alpha}_M(E, t)$ und $\tilde{\alpha}_G(E, t)$ sind die auf den metastabilen (M), bzw. Grundzustandsstrahlanteil (G) zurückzuführenden Anteile des gemessenen Ratenkoeffizienten.

Der Quotient (Q_M) der metastabilen Anteile des Ratenkoeffizienten $\tilde{\alpha}_M(E, t)$ zu Messzeiten, deren zeitlicher Abstand dem Durchlauf einer Rampe t_{ramp} entspricht, lässt sich folgendermaßen ausdrücken:

$$Q_M = \frac{\tilde{\alpha}_M(E, t + t_{\text{ramp}})}{\tilde{\alpha}_M(E, t)} = \frac{\frac{I_M(t + t_{\text{ramp}})}{I_{\text{exp}}(t + t_{\text{ramp}})} \alpha_M(E)}{\frac{I_M(t)}{I_{\text{exp}}(t)} \alpha_M(E)} \quad (4.37)$$

$$\stackrel{\text{Gl. 4.33 \& 4.34}}{=} \frac{F_M \cdot I_M(t)}{I_M(t)} \frac{I_{\text{exp}}(t)}{F_{\text{exp}} \cdot I_{\text{exp}}(t)} = \frac{F_M}{F_{\text{exp}}} \quad (4.38)$$

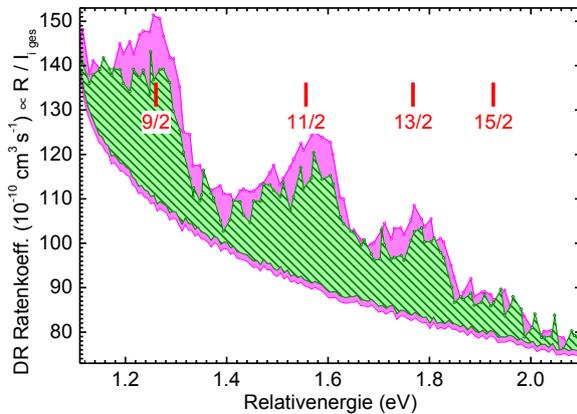
$$F_M = Q_M \cdot F_{\text{exp}} \quad (4.39)$$

Hierbei beträgt die Rampenlänge $t_{\text{ramp}} = 52.35 \pm 0.15$ Sekunden. Der auf den metastabilen Zustand zurückgehende Anteil des Ratenkoeffizienten $\tilde{\alpha}_M(E, t)$ lässt sich aus dem gemessenen Ratenkoeffizienten $\alpha_{\text{exp}}(E, t)$ durch Subtraktion des Grundzustandsanteils $\tilde{\alpha}_G(E, t)$ gewinnen. Da der eigentliche Grundzustandsanteil des Ratenkoeffizienten nicht separat gemessen wurde, wird dieser durch eine auf Basis des experimentellen Ratenkoeffizientenspektrums erstellte Simulation (Abs. 3.3.4) ersetzt. Das hierzu verwendete Vorgehen wird im Folgenden erläutert.

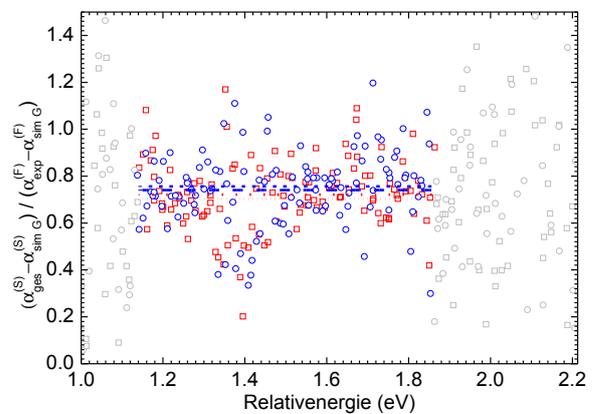
Der gemessene Ratenkoeffizient stellt eine Überlagerung der Anteile von metastabilem und Grundzustand dar (Gl. 4.36). Der vergleichsweise geringe, metastabile Anteil ($I_M \ll I_G$) wirkt sich auf das Spektrum primär in dem Bereich aus, in welchem der Ratenkoeffizient des metastabilen Zustands deutlich größer ist als der des Grundzustands ($\alpha_M \gg \alpha_G$). Nur in diesem Fall trägt der metastabile Zustand in stärkerem Maße zum gemessenen Ratenkoeffizient bei ($\tilde{\alpha}_M \ll \tilde{\alpha}_G$). In Bereichen mit starken DR-Resonanzen des Grundzustands ($\alpha_G \gtrsim \alpha_M$) ist der Einfluss des deutlich kleineren Strahlanteils des metastabilen Zustands ($I_M \ll I_G$) auf den experimentell bestimmten Ratenkoeffizienten gering ($\tilde{\alpha}_M \ll \tilde{\alpha}_G$). Nutzt man nun diesen Bereich, um Positionen und Stärken der Grundzustandsresonanzen zu bestimmen und auf deren Basis ein simuliertes Spektrum zu erzeugen, so entspricht das so simulierte Spektrum ($\alpha_{\text{sim G}}$) näherungsweise dem für die Subtraktion benötigten Grundzustandsanteil ($\tilde{\alpha}_G$). Dieses Verfahren wird für frühen (F) und späten (S) Anteil der Messung separat durchgeführt, da sich der (relative) Anteil des Grundzustandes am Gesamtionenstrom im Laufe der Messung leicht erhöht und somit auch $\tilde{\alpha}_G$ leicht steigt. Die Subtraktion dieses Anteils vom gemessenen Ratenkoeffizienten ergibt den gesuchten Anteil des metastabilen Zustandes am gemessenen Ratenkoeffizienten wie folgt:

$$\tilde{\alpha}_M^{(F,S)}(E) = \alpha_{\text{exp}}^{(F,S)}(E) - \alpha_{\text{sim G}}^{(F,S)}(E) \quad (4.40)$$

Abb. 4.46(a) zeigt $\alpha_M(E)$ für frühen (flächig) und späten (schraffiert) Messbereich. Der hieraus gewonnene Quotient Q_M (Gl. 4.37) ist in Abb. 4.46(b) für verschiedene Energien aufgetragen. Zieht man zur Ermittlung von Q_M nicht nur einen einzigen Zeitpunkt der Messung, sondern den



(a) DR-Ratenkoeffizientenanteil des initial metastabilen Zustandes ($\tilde{\alpha}_M^{(F,S)}$) für frühen (F, magentafarbene Fläche) und späten (S, grüne Schraffur) Messbereich über jeweils leicht unterschiedlichem Untergrund des Grundzustandsanteils für eine der zwei Messungen und Messmodus $\gamma_e > \gamma_i$. Resonanzpositionen (I) siehe Abb. 4.44. Zu Fehlern siehe Abschnitt 3.2.2 bzw. 3.5.6.



(b) Quotient aus spätem und frühem DR-Ratenkoeffizientenanteil des initial metastabilen Zustandes im Bereich der Resonanzen für zwei unterschiedliche Messungen (\square bzw. \circ) bei gleichen Einstellungen samt zugehörigem mittleren Quotienten für die Messmodi $\gamma_e > \gamma_i$ (\cdots bzw. $---$) und $\gamma_e < \gamma_i$ ($\cdot\cdot\cdot$ bzw. $---$).

Abbildung 4.46: Zeitliche Reduktion des Beitrags der $2s2p\ ^3P_0 + e^- \rightarrow (2p^2\ ^3P_1)8_j$ -Resonanzgruppe zum gemessenen Ratenkoeffizienten.

gesamten Energiebereich mit signifikanten Resonanzen des metastabilen Zustandes [1.14 eV, 1.86 eV] heran, so reduziert sich der statistische Fehler signifikant.

$$Q_M = \frac{\int_{1.14}^{1.86} \tilde{\alpha}_M^{(S)}(E) dE}{\int_{1.14}^{1.86} \tilde{\alpha}_M^{(F)}(E) dE} = \frac{C^{(S)}}{C^{(F)}} \quad (4.41)$$

Aus Q_M und F_{exp} (Abs. 4.3.2.4) ergibt sich mit Gleichung 4.39 die Zeitkonstante der Reduktion der metastabilen Strahlkomponente F_M , bzw. die hierzu äquivalente 'Lebensdauer' τ_M (Gl. 4.32). Dieses Verfahren wurde für zwei unabhängige Messungen (U, T) und die zwei Messbereiche[§] separat durchgeführt. Die entsprechenden Ergebnisse sind in Tabelle 4.10 dokumentiert. Aufgrund der hohen Geschwindigkeit der Ionen, die einem relativistischen Gammafaktor (γ_i) von 1.063 entspricht, kommt es im Laborsystem zu einer Zeitdilatation. Diese verlängert die im Laborsystem gemessene, relative Strahllebensdauer $\tau_{M \text{ CM}}$ gegenüber der Eigenzeit im mitbewegten Bezugssystem. Entsprechend erhält man die Eigenzeit-Strahllebensdauer $\tau_{M \text{ CM}}$ über den Zusammenhang $\tau_{M \text{ CM}} = \tau_{M \text{ Lab}}/\gamma_i$.

Tabelle 4.10: Der angegebene Parameter Q_M entspricht der Reduktion des metastabilen $2s2p \ ^3P_0$ -Anteils am Ratenkoeffizient ($\tilde{\alpha}_M^{(F,S)}$) beim Vergleich von früher (F) und um $\Delta t = 52.35$ Sekunden verzögerter, später (S) Messung. F_{exp} bzw. F_M beschreibt die Reduktion des Gesamtionenstroms I_{exp} , bzw. des Ionenstroms des metastabilen Strahlanteils I_M während des Durchlaufens einer Rampe t_{ramp} . τ_M bzw. $\tau_{M \text{ CM}}$ entspricht der zu F_M äquivalente Lebensdauer des metastabilen Strahlanteils im Labor- bzw. Eigenzeitsystem. Die Parameter werden (soweit möglich) für verschiedene Messungen (U/T) und Messmodi ($\gamma_e > \gamma_i$ bzw. $\gamma_e < \gamma_i$) getrennt dargelegt. Sofern zwei Fehlergrößen angegeben sind, bezeichnet die erste Klammern den mittels Fehlerfortpflanzung aus der Zählratenstatistik ($\Delta N = \sqrt{N}$) gewonnenen, statistischen Fehler. Die zweite Klammer gibt systematische Fehler an (Abs. 4.3.2.6). In beiden Fällen bezeichnen die in Klammern angegebenen n Ziffern die Fehler der letzten n Stellen des angegebenen Wertes.

Messung:	U $_{\gamma_e > \gamma_i}$	U $_{\gamma_e < \gamma_i}$	T $_{\gamma_e > \gamma_i}$	T $_{\gamma_e < \gamma_i}$
Q_M	0.721(11)(58)	0.703(11)(61)	0.740(12)(62)	0.756(12)(62)
F_{exp}	0.648(3)	0.648(3)	0.651(3)	0.651(3)
F_M	0.467(7)(38)	0.456(7)(40)	0.481(8)(41)	0.492(8)(41)
t_{ramp} [s]	52.35(15)	52.35(15)	52.35(15)	52.35(15)
τ_M [s]	68.8 (1.4)(7.4)	66.7(1.3)(7.5)	71.5(1.6)(8.4)	73.8(1.7)(8.8)
$\tau_{M \text{ CM}}$ [s]	64.7 (1.3)(7.0)	62.7(1.2)(7.0)	67.3(1.5)(7.9)	69.4(1.6)(8.3)

[§]Die beiden Messbereiche $\gamma_e > \gamma_i$ bzw. $\gamma_e < \gamma_i$ bezeichnen die Möglichkeiten, identische Relativenergien E zu erreichen, indem entweder die Elektronen gegenüber dem Ionenstrahl beschleunigt ($\gamma_e > \gamma_i$) oder abgebremst ($\gamma_e < \gamma_i$) werden.

4.3.2.6 Fehlerrechnung

Aus der Zählratenstatistik ($\Delta N = \sqrt{N}$) ergibt sich ein statistischer Fehler des Ratenkoeffizienten ($\Delta\alpha_{\text{exp}}$). Dieser entspricht dem statistischen Anteil des Fehlers des Ratenkoeffizientenanteils des metastabilen Zustandes ($\tilde{\alpha}_M$). Hieraus ergibt sich durch Anwendung des Fehlerfortpflanzungsgesetzes auf die numerische Integration der Fehler des Zählers ($C^{(S)}$) bzw. Nenners ($C^{(F)}$) des Quotienten $Q_M = C^{(S)}/C^{(F)}$ (Gl. 4.41) und damit auch der statistische Anteil des Fehlers des Quotienten wie folgt:

$$\begin{aligned}\Delta C^{(S/F)} &= \Delta \left(\int_{1.14}^{1.86} \tilde{\alpha}_M^{(S/F)}(E) dE \right) = \Delta \left(\sum_{i=0|E_0=1.14}^{i=n|E_n=1.86} \tilde{\alpha}_M^{(S/F)}(E_i) dE \right) \\ &= \sqrt{\sum_k \left| \frac{\partial \sum_{i=0|E_0=1.14}^{i=n|E_n=1.86} \tilde{\alpha}_M^{(S/F)}(E_i) dE}{\partial \tilde{\alpha}_M^{(S/F)}(E_k)} \right|^2} \left(\Delta \tilde{\alpha}_M^{(S/F)}(E_k) \right)^2 = \sqrt{\sum_k \left| \Delta \tilde{\alpha}_M^{(S/F)}(E_k) \right|^2 dE^2} \\ \Delta Q_M^{\text{stat}} &= \sqrt{\left(\frac{\Delta C^{(S)}}{C^{(F)}} \right)^2 + \left(\frac{C^{(S)} \Delta C^{(F)}}{C^{(F)} \cdot C^{(F)}} \right)^2} = Q_M \sqrt{\left(\frac{\Delta C^{(S)}}{C^{(S)}} \right)^2 + \left(\frac{\Delta C^{(F)}}{C^{(F)}} \right)^2}\end{aligned}$$

Die Fehler der Dauer des Durchlaufs einer Rampe $\Delta t_{\text{ramp}} = 0.15$ s und des exponentiellen Abfalls des Gesamtionenstromes $\Delta \tau_{i \text{ exp}} = 2$ s sind verhältnismäßig klein. Dominiert wird der Fehler der Zeitentwicklung des metastabilen $2s2p^3P_0$ -Strahlanteils vom systematischen Fehler des Abzuges des $2s^2^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p^1P_1)8_j$ -Untergrundes. Dieser Untergrund beträgt selbst beim Maximum der $2s2p^3P_0 + e^- \rightarrow (2p^2^3P_1)8_{9/2}$ -Resonanz 70% des DR-Ratenkoeffizienten (Abb. 4.44). Im gesamten betrachteten Bereich von 1.14 bis 1.86 eV beträgt der relative Anteil der metastabilen Ionen am integrierten Ratenkoeffizienten ($\int \tilde{\alpha}_M^{(F,S)} dE / \int \alpha_{\text{exp}}^{(F,S)} dE$) nur 16% bei früher, bzw. 12% bei später Messung. Zur Ermittlung des relativen Fehlers des Grundzustandsabzugs wurden die Ratenkoeffizienten zweier Messungen (T bzw. U), die unter identischen Bedingungen durchgeführt wurden, in einem Energiebereich verglichen, der von den $\text{Xe}^{50+}(2s^2^1S_0) + e^- \rightarrow \text{Xe}^{49+}(2s2p^1P_1)8_j$ -Grundzustandsresonanzen dominiert wird. Bildet man gemäß Gleichung 4.42 den Quotienten der Integrale des gemessenen DR-Ratenkoeffizienten über den Energiebereich von 0.1 bis 1.14 eV, so erhält man einen Unterschied von 1.2%.

$$\frac{\int_{0,1}^{1,14} \alpha_{\text{exp}}^{(T)} dE}{\int_{0,1}^{1,14} \alpha_{\text{exp}}^{(U)} dE} = 1.012 \quad (4.42)$$

Nimmt man 1.2% als systematischen relativen Fehler des Untergrundabzugs ($\Delta\alpha_{\text{sim G}}^{(F,S)} = 1.2\% \cdot \alpha_{\text{sim G}}^{(F,S)}$), so ergibt sich der Untergrundanteil des Fehlers des in Gl. 4.37 definierten Quotienten Q über folgenden Zusammenhang:

$$\Delta Q_{\text{sys}} = \sqrt{\left| \frac{\partial Q}{\partial G^{(S)}} \right|^2 (\Delta G^{(S)})^2 + \left| \frac{\partial Q}{\partial G^{(F)}} \right|^2 (\Delta G^{(F)})^2} = Q \sqrt{\left(\frac{\Delta G^{(S)}}{G^{(S)}} \right)^2 + \left(\frac{\Delta G^{(F)}}{G^{(F)}} \right)^2} \quad (4.43)$$

Hierbei ist $G^{(F,S)} = \int_{0,1}^{1,14} \alpha_{\text{sim G}}^{(F,S)} dE$, $F = \int_{0,1}^{1,14} \tilde{\alpha}_M^{(F)} dE$ und $S = \int_{0,1}^{1,14} \tilde{\alpha}_M^{(S)} dE$.
Aus der Kenntnis der Fehler aller Einflussgrößen lässt sich der Fehler der Zeitkonstanten F_M und der zu ihr äquivalenten Lebensdauer τ_M ableiten.

$$\Delta F_M = \sqrt{\left| \frac{\partial F_M}{\partial Q} \right|^2 \Delta Q^2 + \left| \frac{\partial F_M}{\partial F_{\text{exp}}} \right|^2 \Delta F_{\text{exp}}^2} = F_M \cdot \sqrt{\left(\frac{\Delta Q}{Q} \right)^2 + \left(\frac{\Delta F_{\text{exp}}}{F_{\text{exp}}} \right)^2} \quad (4.44)$$

$$\Delta \tau_M = \tau_M \sqrt{\left(\frac{\Delta t_{\text{ramp}}}{t_{\text{ramp}}} \right)^2 + \left(\frac{\tau_M}{t_{\text{ramp}}} \frac{\Delta F_M}{F_M} \right)^2} \quad (4.45)$$

Die einzelnen so erhaltenen Fehler finden sich in Tabelle 4.10 getrennt nach statistischem und systematischem Anteil.

4.3.2.7 Ergebnis

Mittelt man die in Tabelle 4.10 angegebenen Resultate der einzelnen Messungen bzw. Messbereiche gewichtet mit den inversen Fehlerquadraten, so erhält man:

$$F_M = 0.474 \pm 0.004 \pm 0.040 \quad \tau_M = 70.1 \pm 0.8 \pm 8.0 \text{ s} \quad \tau_{M \text{ CM}} = 66.0 \pm 0.7 \pm 7.5 \text{ s} \quad (4.46)$$

Angegeben ist jeweils zuerst die statistische und dann die systematische Komponente des Fehlers.

4.3.3 Ent- und Bevölkerungsprozesse des $2s2p \ ^3P_0$ -Zustands

In diesem Abschnitt werden auf Basis des Ratengleichungssystems (Abs. 4.3.2.3 und Gl. 4.21, 4.22) die verschiedenen Raten und ihr Einfluss auf die zeitliche Reduktion des $2s2p \ ^3P_0$ -Strahlanteils diskutiert. Dies erlaubt genauer einzugrenzen, welcher Anteil der zeitlichen Reduktion der Ionen des $2s2p \ ^3P_0$ -Zustandes auf die $(2s2p \ ^3P_0 \rightarrow 2s^2 \ ^1S_0)$ -Zweiphotonenübergangsrate $A_{2\gamma}$ zurückgeht.

4.3.3.1 Ratengleichungen

Die Änderung der Zahl der Ionen im metastabilen Zustand (N_M) bzw. Grundzustand (N_G) wird durch folgende Ratengleichungen ausgedrückt (Gl. 4.21 & 4.22):

$$\frac{dN_M}{dt} = - (A_{2\gamma} + A_q + A_{SE} + A_{PR M}(E) + A_{ml}) N_M + A_e N_G \quad (4.47)$$

$$\frac{dN_G}{dt} = (A_{2\gamma} + A_q + A_{SE}) N_M - (A_e + A_{PR G}(E) + A_{gl}) N_G \quad (4.48)$$

Hierbei ist $A_{2\gamma}$ die E1M1-Zweiphotonenübergangsrate vom metastabilen Zustand in den Grundzustand, A_q die durch das (magnetische) Quenching des metastabilen Zustands verursachte, zusätzliche Übergangsrate vom metastabilen Zustand in den Grundzustand, A_{SE} die (energieabhängige) Rate des radiativen oder dielektronischen Einfangs eines Elektrons in den metastabilen Zustand, gefolgt von Autoionisation in den Grundzustand (Superelastischer Stoß), $A_{PR M}(E)$ die

(energieabhängig) DR- und RR- Verlustrate des metastabilen Strahlanteils durch Wechselwirkung mit den Elektronen des Elektronenkühlers, A_{ml} die Rate der Entvölkerung des metastabilen Zustands durch Stöße mit dem Restgas, A_e die Rate der Kollisionsanregung vom Grundzustand in den metastabilen Zustand, $A_{\text{PR M}}(E)$ die (energieabhängig) DR- und RR- Verlustrate des Grundzustands Strahlanteils durch Wechselwirkung mit den Elektronen des Elektronenkühlers und A_{gl} die Rate der Entvölkerung des Grundzustands durch Stöße mit dem Restgas

Wie in Abschnitt 4.3.3.2 noch gezeigt wird, ist die Kollisionsanregung A_e vernachlässigbar. In diesem Fall ergibt sich eine vereinfachte Ratengleichung wie folgt:

$$\frac{dN_M}{dt} \approx - (A_{2\gamma} + A_q + A_{\text{SE}}(E) + A_{\text{PR M}}(E) + A_{\text{ml}}) N_M \quad (4.49)$$

Deren Zeitentwicklung lässt sich – wie in Abschnitt 4.3.2.3 gezeigt – durch den in Gl. 4.31 eingeführten Parameter F_M beschreiben.

$$\begin{aligned} F_M &= \prod_{i=0}^{i=n-1} \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau_M(t_i)}\right) \quad \text{mit } t \in [t_0, t_0 + t_{\text{ramp}}]; \Delta t = \frac{t_{\text{ramp}}}{n}, t_i = t_0 + i\Delta t \\ &= \exp\left(-\Delta t \sum_{i=0}^{i=n-1} [A_{2\gamma} + A_q + A_{\text{SE}}(E(t_i)) + A_{\text{PR M}}(E(t_i)) + A_{\text{ml}}]\right) \\ &= \exp\left(-\Delta t \cdot n [A_{2\gamma} + A_q + A_{\text{ml}}] - \Delta t \sum_{i=0}^{i=n-1} [A_{\text{SE}}(E(t_i)) + A_{\text{PR M}}(E(t_i))]\right) \\ \ln(F_M) &= -t_{\text{ramp}} [A_{2\gamma} + A_q + A_{\text{ml}}] - \sum_{i=0}^{i=n-1} A_{\text{SE}}(E(t_i))\Delta t - \sum_{i=0}^{i=n-1} A_{\text{PR M}}(E(t_i))\Delta t \quad (4.50) \end{aligned}$$

Löst man nach der Zweiphotonenübergangsrate $A_{2\gamma}$ auf, so erhält man:

$$A_{2\gamma} = -\frac{\ln(F_M)}{t_{\text{ramp}}} - A_q - A_{\text{ml}} - \frac{\sum_{i=0}^{i=n-1} A_{\text{SE}}(E(t_i))\Delta t}{t_{\text{ramp}}} - \frac{\sum_{i=0}^{i=n-1} A_{\text{PR M}}(E(t_i))\Delta t}{t_{\text{ramp}}} \quad (4.51)$$

Berücksichtigt man die Zusammensetzung der Rekombinationsverluste durch Wechselwirkung mit den Elektronen des Kühlers aus radiativer und dielektronischer Rekombination ($A_{\text{PR M}}(E) = A_{\text{RR M}}(E) + A_{\text{DR M}}(E)$), so ergibt sich:

$$A_{2\gamma} = -\frac{\ln(F_M)}{t_{\text{ramp}}} - A_q - A_{\text{ml}} - \frac{\sum_{i=0}^{n-1} A_{\text{SE}}(E(t_i))\Delta t}{t_{\text{ramp}}} - \frac{\sum_{i=0}^{n-1} A_{\text{RR M}}(E(t_i))\Delta t}{t_{\text{ramp}}} - \frac{\sum_{i=0}^{n-1} A_{\text{DR M}}(E(t_i))\Delta t}{t_{\text{ramp}}}$$

Zusätzlich gilt, dass die Relativenergie $E(t_i)$ während der Hälfte der Messzeit der Kühlenergie entspricht. Bei passender Umordnung von t_i kann also $E(t_i) = 0 \forall i \geq n/2$ angenommen werden.

Mit $\sum_{i>n/2}^{n-1} \Delta t = 1/2 t_{\text{ramp}}$ und $\Delta t = t_{\text{ramp}}/n$ folgt:

$$\begin{aligned}
 A_{2\gamma} &= -\frac{\ln(F_M)}{t_{\text{ramp}}} - A_q - A_{\text{ml}} - \frac{A_{\text{SE}}(0) + A_{\text{RR M}}(0) + A_{\text{DR M}}(0)}{2} \\
 &\quad - \frac{\sum_{i=0}^{i<n/2} A_{\text{SE}}(E(t_i))}{n} - \frac{\sum_{i=0}^{i<n/2} A_{\text{RR M}}(E(t_i))}{n} - \frac{\sum_{i=0}^{i<n/2} A_{\text{DR M}}(E(t_i))}{n} \\
 &= -\frac{\ln(F_M)}{t_{\text{ramp}}} - A_q - A_{\text{ml}} - \frac{A_{\text{SE}}(0) + A_{\text{RR M}}(0) + A_{\text{DR M}}(0)}{2} \\
 &\quad - \frac{1}{2} \langle A_{\text{SE}}(E_i) \rangle - \frac{1}{2} \langle A_{\text{RR M}}(E_i) \rangle - \frac{1}{2} \langle A_{\text{DR M}}(E_i) \rangle \quad \text{mit: } E_i \neq 0
 \end{aligned}$$

Auch die Rate A_{SE} für den superelastischen Stoß lässt sich in eine radiative ($A_{\text{SE R}}$) und eine dielektronische Komponente ($A_{\text{SE D}}$) unterteilen, die – für den relevanten Energiebereich – den folgenden Prozessen entsprechen:

$$A_{\text{SE R}}: Xe^{50+}(2s2p^3P_0) + e^- \xrightarrow{\gamma} Xe^{49+}(2s2p^3P_0n) \rightarrow Xe^{50+}(2s^2^1S_0) + e^-$$

$$A_{\text{SE D}}: Xe^{50+}(2s2p^3P_0) + e^- \rightarrow Xe^{49+}(2p^2^3P_1 8_j) \rightarrow Xe^{50+}(2s^2^1S_0) + e^-$$

Somit ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 A_{2\gamma} &= -\frac{\ln(F_M)}{t_{\text{ramp}}} - A_q - A_{\text{ml}} - \frac{A_{\text{SE D}}(0) + A_{\text{SE R}}(0) + A_{\text{RR M}}(0) + A_{\text{DR M}}(0)}{2} \quad (4.52) \\
 &\quad - \frac{1}{2} \langle A_{\text{SE D}}(E_i) \rangle - \frac{1}{2} \langle A_{\text{SE R}}(E_i) \rangle - \frac{1}{2} \langle A_{\text{RR M}}(E_i) \rangle - \frac{1}{2} \langle A_{\text{DR M}}(E_i) \rangle \quad \text{mit: } E_i \neq 0
 \end{aligned}$$

In den folgenden Abschnitten sollen die einzelnen relevanten Punkte diskutiert und – soweit möglich – Abschätzungen für ihre Größe angegeben werden:

Grundzustand Äquivalent zum obigen Vorgehen lässt sich auch bei der Ratengleichung des Grundzustandsanteils (Gl.4.48) vorgehen:

$$\begin{aligned}
 F_G &= \frac{N_G(t+t_{\text{ramp}})}{N_G(t)} = \prod_{i=0}^{n-1} \exp\left(\frac{t_{\text{ramp}}}{n} \left[(A_{2\gamma} + A_q + A_{\text{SE}}(E_i)) \frac{N_M}{N_G} - A_e - A_{\text{PR G}}(E_i) - A_{\text{gl}} \right]\right) \quad (4.53) \\
 &= \exp\left(t_{\text{ramp}} \left[(A_{2\gamma} + A_q) \frac{N_M}{N_G} - A_e - A_{\text{gl}} \right]\right) \cdot \exp\left(\frac{t_{\text{ramp}}}{n} \left[\frac{N_M}{N_G} \sum_{i=0}^{n-1} A_{\text{SE}}(E_i) - \sum_{i=0}^{n-1} A_{\text{PR G}}(E_i) \right]\right) \\
 \frac{\ln(F_G)}{t_{\text{ramp}}} &= \left(A_{2\gamma} + A_q + \frac{A_{\text{SE}}(0) + \langle A_{\text{SE}}(E_i \neq 0) \rangle}{2} \right) \frac{N_M}{N_G} - A_e - A_{\text{gl}} - \frac{A_{\text{PR G}}(0) + \langle A_{\text{PR G}}(E_i \neq 0) \rangle}{2}
 \end{aligned}$$

Aufgrund des kleinen metastabilen Strahlanteils ($N_M(t) \ll N_G(t)$ Abs. 4.2.7) und der langsamen Entvölkerung des $2s2p^3P_0$ -Zustandes (Abs. 4.3.2.7) ist hierbei der Zuwachs der Zahl der Grundzustandsionen aus dem metastabilen Zustand verhältnismäßig klein. Dies erlaubt, die zeitliche

Änderung des Verhältnisses der Besetzungen des Zustandes $N_M/N_G(t)$ durch eine erhöhte Unsicherheit dieses Verhältnisses zu ersetzen $N_M/N_G \approx \frac{5 \pm 3}{95 \mp 3}$ (Abs. 4.2.7), ohne das Ergebnis deutlich zu beeinflussen.

4.3.3.2 Kollisionsanregung A_e

Zu Beginn soll die Kollisionsanregung A_e diskutiert werden, da es sich hierbei um den einzigen Prozess der Ratengleichung handelt, der den metastabilen Zustand aus dem Grundzustand bevölkert. Dies erhöht die Komplexität des Ratengleichungssystems signifikant. In Abs. 4.3.2.3 wurde angenommen, dass die Bevölkerung aus dem Grundzustand gegenüber der gesamten Änderung der Zahl der metastabilen Ionen vernachlässigt werden kann ($A_e N_G \ll |dN_M/dt|$). Hierfür soll der folgende Zusammenhang gezeigt werden:

$$A_e \ll \frac{N_M}{N_G} \frac{1}{\tau_M} \leq \frac{3}{97} \cdot \frac{1}{70.5 \text{ s}} = 4.4 \cdot 10^{-4} / \text{s} \quad (4.54)$$

Hierbei wurde der gegen Ende der Messzeit erreichte minimale, metastabile Strahlanteil mit 3% abgeschätzt (Abs. 4.2.7).

Die Anregungsrate durch Wechselwirkung von Grundzustandsionen mit dem Restgas (A_e) wird wie folgt genähert wobei der Einfluss des Atomkerns selbst vernachlässigt wird:

$$A_e = \sigma_{3P_0}(32 \text{ keV}) \cdot n_e \cdot v_i \quad (4.55)$$

Hierbei ist $\sigma_{3P_0}(32 \text{ keV})$ der Elektronenstoßanregungsquerschnitt für den $(2s^2 \ ^1S_0 \rightarrow 2s2p \ ^3P_0)$ -Übergang in Xe^{50+} bei einer Relativenergie von 32 keV, n_e die Elektronendichte im Restgas und v_i die Ionengeschwindigkeit. Mit der Elektronendichte n_e als Produkt aus Restgas-Teilchendichte n_{RG} und der mittleren Zahl a der Elektronen pro Restgasatom bzw. -molekül, der Zustandsgleichung idealer Gase $n_{\text{RG}} = p/k_B \cdot T$ und der Ionengeschwindigkeit v_i ergibt sich:

$$A_e = \frac{\sigma_{3P_0}(32 \text{ keV}) \cdot a \cdot p \cdot v_i}{k_B T} \quad (4.56)$$

Mit $\sigma_{3P_0}(32 \text{ keV}) \sim 7.7 \cdot 10^{-25} \text{ cm}^2$ (LANL-Programmpaket [103–105]), dem typischen ESR-Gasdruck $p = 10^{-11} \text{ mbar}$ [¶], der Ionengeschwindigkeit $v_i = 10^8 \text{ m/s}$, der Temperatur 300 K, der Boltzmannkonstanten $k_B = 1.4 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$ ergibt sich:

$$A_e \sim \frac{7.7 \cdot 10^{-25} \text{ cm}^2 \cdot a \cdot 10^{-9} \frac{\text{kg}}{\text{ms}^2} \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}}{1.4 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} \cdot 300 \text{ K}} = a \cdot 1.8 \cdot 10^{-9} / \text{s} \quad (4.57)$$

Wie man sieht, ist die Forderung aus Gl. 4.54 erfüllt und somit die Bevölkerung des metastabilen Zustands durch Elektronenstoßanregung aus dem Grundzustand gegenüber der Änderung der Besetzung des metastabilen Zustands vernachlässigbar.

[¶]Bei dem hier angenommenen Wert handelt sich um einen typischen ESR-Restgasdruck und nicht um einen Messwert des Experimentes. Für dieses wurden zwar auch Druckmessungen durchgeführt, doch lassen sich deren Ergebnisse nicht auf den 108 Meter langen Speicherring übertragen, da die Messungen an wenigen Orten mit tendenziell schlechteren Vakuumbedingungen vorgenommen wurden.

4.3.3.3 Quenching A_q

Die zum Umlauf der Ionen im Speicherring nötigen Ablenkmagnete führen zu einer Mischung magnetischer Unterzustände [161]. Blau *et al.* [162] geben die resultierende Zerfallsrate A_M der Mischung eines Zustands a mit dem Zustand b wie folgt an:

$$A_M = A_a \cdot \cos^2 \theta_M + A_b \cdot \sin^2 \theta_M \quad (4.58)$$

Es sind A_a und A_b die Zerfallsraten der ungestörten Zustände, $\theta_M \propto \mu_0 H / \Delta E_{a,b}$ die Mischungsstärke und $\Delta E_{a,b}$ die Energiedifferenz der Zustände. Für kleine Mischungen $\theta_M \ll \pi/2$ gilt:

$$A_M = A_a + \underbrace{A_b \cdot \theta_M^2}_{A_{q\ a}} \quad (4.59)$$

Die Größenordnung der Mischungsstärke θ_M lässt sich wie folgt abschätzen [11, 163]:

$$\theta_M \sim \frac{\mu_B B}{\Delta E_{a,b}} \quad (4.60)$$

Hierbei ist μ_B das Bohrsche Magneton und B die magnetische Flussdichte. Letztere lässt sich aus dem Impuls der Ionen $p \sim 45 \text{ GeV}/c$, der Ionenladung $q = 50e$ und dem Ablenkradius $\rho = 6.25 \text{ m}$ über den Zusammenhang $p/q = B \cdot \rho$ zu $B \sim 0.48 \text{ T}$ berechnen. Bei Kenntnis der Energiedifferenz $\Delta E_{a,b}$ und der Übergangsrate A_b des zu mischenden Zustandes ergibt sich die Abschätzung der durch das magnetische Quenching verursachten Übergangsrate $A_{q\ a}$ des Zustands a über den folgenden Zusammenhang [11]:

$$A_{q\ a} \sim A_b \cdot \left(\frac{\mu_B \cdot B}{\Delta E_{a,b}} \right)^2 \quad (4.61)$$

Die Zustände $2s^2\ ^3P_0$ und $2s2p\ ^3P_1$ besitzen eine Energiedifferenz $\Delta E_{3P_0,3P_1}$ von 22.5 eV [43]. Mit 428.4 eV [43] ist die Energiedifferenz $\Delta E_{3P_0,1P_1}$ zwischen den Zuständen $2s^2\ ^3P_0$ und $2s2p\ ^1P_1$ sehr viel größer und die Mischung beider Zustände entsprechend kleiner. Andererseits ist die Rate des ($2s2p\ ^3P_1 \rightarrow 2s^2\ ^1S_0$)-Interkombinationsübergangs (A_{3P_1}) mit $\sim 2.2 \cdot 10^9 /s$ [43] (siehe auch [129, 164]) sehr viel geringer als die des ($2s2p\ ^1P_1 \rightarrow 2s^2\ ^1S_0$)-E1-Übergangs ($A_{1P_1} = 6.8 \cdot 10^{11} /s$ [43]). Aus diesem Grund müssen beide möglichen Wege des Quenchings berücksichtigt werden. Hingegen kann der $2s2p\ ^3P_2$ -Zwischenzustand vernachlässigt werden, da hier sowohl $A_{3P_2} \ll A_{3P_1}$ als auch $\Delta E_{3P_0,3P_2} \gg \Delta E_{3P_0,3P_1}$ gilt. Somit ergibt sich die durch das Quenching verursachte Übergangsrate wie folgt:

$$\begin{aligned} A_q &\sim A_{3P_1} \cdot \left(\frac{\mu_B B}{\Delta E_{3P_0,3P_1}} \right)^2 + A_{1P_1} \cdot \left(\frac{\mu_B B}{\Delta E_{3P_0,1P_1}} \right)^2 \\ &\sim 3.4 \cdot 10^{-3} /s + 2.9 \cdot 10^{-3} /s = 6.3 \cdot 10^{-3} /s \end{aligned}$$

Die sechs Umlenkmagneten decken nur 39 Meter des 108 Meter ESR-Umfangs ab, was einem Anteil von 36% entspricht. Die Passage eines Dipolmagneten benötigt bei $\beta_i \sim 1/3 \cdot c$ etwa 60 ns.

Diese Zeitspanne ist sehr groß gegenüber typischen Zeitskalen der Änderung atomarer Wellenfunktionen^{||}. Entsprechend kann man davon ausgehen, dass das magnetische Quenching in 36% der Umlaufzeit mit oben berechneter Rate stattfindet, während in der restlichen Zeit kein magnetisches Quenching auftritt. Somit ergibt sich eine mittlere Quenchingrate A_q , bzw. Lebensdauer τ_e wie folgt:

$$A_q = 2.2 \cdot 10^{-3}/\text{s} \quad \Leftrightarrow \quad \tau_q = A_q^{-1} = 440 \text{ s} \quad (4.62)$$

Fehlerabschätzung Für den $(2s2p\ ^3P_0 \rightarrow 2s^2\ ^1S_0)$ -Übergang in $^{47}\text{Ti}^{18+}$ ($I=5/2$) berechnen Li *et al.* [165] in Abwesenheit eines Magnetfeldes eine hyperfeininduzierte Übergangsrates A_{HIT} von 0.66 /s. Die Anwesenheit eines Magnetfeldes führt bei den sechs magnetischen Unterzustände $M_F = -5/2, -3/2, -1/2, 1/2, 3/2, 5/2$ zu unterschiedlichen Übergangsrates, die von Li *et al.* in einem Magnetfeld der Stärke 1 Tesla zu 0.77, 0.73, 0.68, 0.64, 0.60, 0.56 /s angegeben werden. Dies bedeutet ein Unterschied von 0.11, 0.07, 0.02, -0.02, -0.06, -0.10 /s zum Fall ohne Magnetfeld. Die oben verwendete Abschätzung kommt für den vom Magnetfeldquenching induzierten Übergang zu einer Rate von 0.04 /s. Wie man sieht, entspricht die Abschätzung der Größenordnung der Änderung der hyperfeininduzierten Übergangsrates. Für kleine magnetische Quantenzahlen liegt die von Li *et al.* berechnete Änderung der Übergangsrates unterhalb der Abschätzung. Im Folgenden wird für A_q ein Fehler von $\pm 2 \cdot 10^{-3}/\text{s}$ angenommen.

Stark-Quenching Zusätzlich zum Quenching in magnetischen Feldern kommt es auch in elektrischen Feldern zu einem ähnlichen, 'Stark quenching' genannten Effekt, dem man eine Lebensdauer τ_{Stark} zuordnen kann. Maul *et al.* [14] geben für Kernladungen von 46 bzw. 56 eine Lebensdauer von 5.6 bzw. $5.0 \cdot 10^{21} \text{ s v}^2/\text{m}^2$ an. Mit $E = |\vec{v} \times \vec{B}|$, $\vec{v}_i \perp \vec{B}_i$, einer Ionengeschwindigkeit $v_i = 0.34c$ und einer Magnetfeldstärke B von 0.48 Tesla ergibt sich innerhalb der Dipolmagnete:

$$\tau_{\text{Stark}} \sim \frac{(5.0 \pm 0.5) \cdot 10^{21} \text{ s v}^2/\text{m}^2}{(v \cdot B)^2} \sim 2 \cdot 10^6 \text{ s} \sim 24 \text{ Tage} \quad \Leftrightarrow \quad A_{\text{Stark}} \sim 5 \cdot 10^{-7}/\text{s}$$

Wie man sieht, ist dieser Effekt vernachlässigbar.

Quenching durch Stöße mit dem Restgas Wie in Abschnitt 4.3.3.2 schon diskutiert, beträgt bei einer Relativenergie von 32 keV der Wirkungsquerschnitt der $2s^2\ ^1S_0 + e^- \rightarrow 2s2p\ ^3P_0 + e^-$ -Elektronenstoßanregung etwa $7.7 \cdot 10^{-25} \text{ cm}^2$. Bei im Mittel n Elektronen pro Restgasatom und einem typischen Restgasdruck von 10^{-11} mbar entspricht dies einer Verlustrate des Grundzustands von etwa $n \cdot 1.8 \cdot 10^{-9}/\text{s}$. Für den Prozess der Elektronenstoßabregung ($2s2p\ ^3P_0 \rightarrow 2s^2\ ^1S_0$) ist ein Wirkungsquerschnitt vergleichbarer Größenordnung und ähnlichen Übergangsrates zu erwarten, der gegenüber anderen Verlustraten vernachlässigt werden kann. Den höchsten Elektronenstoßanregungsquerschnitt des anfänglichen $2s2p\ ^3P_0$ -Zustands bei Relativenergien von 32 keV besitzt mit $\sigma \sim 2 \cdot 10^{-21} \text{ cm}^2$ (LANL [103–105]) die $2s2p\ ^3P_0 + e^- \rightarrow 2p^2\ ^3P_1 + e^-$ -Anregung. Dies entspricht – äquivalent zu Gl. 4.57 – einer Verlustrate von etwa $5n \cdot 10^{-6}/\text{s}$, die im Vergleich zum magnetischen Quenching ebenfalls vernachlässigbar ist.

^{||}Schätzt man die Größenordnung der Dauer der Anpassung atomarer Wellenfunktion mit der klassischen Umlaufdauer der $n=2$ Elektronen in Xenon ab, so erhält man etwa $10^{-19} - 10^{-20} \text{ s}$.

Ergebnis

$$A_q = (2.2 \pm 2.0) \cdot 10^{-3}/s \quad \Leftrightarrow \quad \tau_q = A_q^{-1} = 440 \text{ s} \quad (4.63)$$

4.3.3.4 Radiative Rekombination A_{RRM} & radiativ superelastischer Stoß A_{SER}

Der Wirkungsquerschnitt des radiativen Einfangs lässt sich mittels Gl. 1.26 berechnen. Vergleicht man den Querschnitt des initial metastabilen Zustands $2s2p \ ^3P_0 + e^- \rightarrow (2s2p \ ^3P_0)n_j$ und des häufigeren Grundzustand $2s^2 \ ^1S_0 + e^- \rightarrow (2s^2 \ ^1S_0)n_j$ für $n \leq 1000$ so stellt man fest, dass sich diese nur um 3% unterscheiden (Abb. 4.47). Berücksichtigt man die Feldionisation (Abs. 1.3.5) für Quantenzahlen $n \gtrsim 110$ und faltet den Wirkungsquerschnitt mit der experimentellen Geschwindigkeitsverteilung, so erhält man den energieabhängigen RR-Ratenkoeffizienten. Während der Wirkungsquerschnitt für $E \rightarrow 0$ eine Singularität aufweist (Gl. 1.25), ist dies für den Ratenkoeffizienten auf Grund der Faltung mit der Elektronenenergieverteilung nicht so. Für den Fall der Kühlung bei Relativenergien von 0 eV beträgt der so berechnete Ratenkoeffizient $(68 \pm 10) \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3/s$. Während der Messung ändert sich die Relativenergie und damit auch der RR-Ratenkoeffizient. Bildet man einen – mit der Häufigkeit, der während der Messschritte angesteuerten Energien, gewichteten – Mittelwert der RR-Ratenkoeffizienten während der Messung, so beträgt dieser $(14 \pm 2) \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3/s$.

Für Messungen an Xe^{50+} wird der RR durch DR-Resonanzen überlagert. Somit lässt sich der RR-Ratenkoeffizienten nicht separat messen. Hingegen liegt bei Xe^{51+} die erste DR-Resonanz bei 10 eV (Abb. 4.2). Messungen bei geringerer Relativenergie zeigen demzufolge – näherungsweise – nur den RR-Ratenkoeffizienten. Vergleicht man nun, wie in Abbildung 4.48 zu sehen, den bei kleinen Energien gemessenen Xe^{51+} -Ratenkoeffizient mit dem berechneten Xe^{51+} -RR-Ratenkoeffizienten, so lässt sich hieraus erkennen, dass experimentelle und theoretische Beschreibung für Energien größer 10 meV im Rahmen der experimentellen Messunsicherheiten übereinstimmen. Für Energien unterhalb etwa 10 meV wird der experimentelle Ratenkoeffizient von der Ratenüberhöhung (Abs. 1.3.2) stark vergrößert. Dieser muss insbesondere bei verschwindender Relativenergie berücksichtigt werden. Die Ratenüberhöhung tritt primär bei sehr geringen Relativenergien auf. Je besser die Strahlkühlung, desto geringer die temperaturbedingte Energieunschärfe und desto geringer die bei einer nominalen Relativenergie von 0 eV erreichte, mittlere Energie der Elektron-Ion Stöße. Die Messungen an berylliumartigem Xenon wurden, im Vergleich zu lithiumartigem Xenon, mit deutlich geringeren Ionenströmen durchgeführt, was eine leicht verbesserte Kühlung und somit eine stärkere Ratenüberhöhung erwarten lässt. Aus diesem Grund sollte der Ratenüberhöhungsfaktor bei Xe^{50+} nicht von Xe^{51+} übernommen werden. In Abschnitt 4.3.3.10 wird der Ratenüberhöhungsfaktor bei Xe^{50+} zu 5.4 ± 0.5 bestimmt. Verwendet man diesen, so erhält man den RR-Ratenkoeffizient bei Kühlung unter Berücksichtigung der Ratenüberhöhung:

$$\alpha_{RR}(E=0) = (370 \pm 60) \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3/s \quad (4.64)$$

Hieraus lässt sich mittels Gl. 3.21 die RR-Übergangsrate A_{RRM} eines im Ring mit der Geschwin-

digkeit $\beta_i c$ kreisenden Ions ($I_i = qe\beta_i c/U$) bei Kühlung wie folgt bestimmen:

$$A_{\text{RR M}} = \frac{\alpha_{\text{RR}}(0)(1 - \beta_e \beta_i) I_e L}{e \beta_e \pi r_e^2 c U} = \alpha_{\text{RR}}(0) \cdot 6.17 \cdot 10^4 / \text{cm}^3 = (2.3 \pm 0.4) \cdot 10^{-3} / \text{s} \quad (4.65)$$

Äquivalent ergibt sich die mittlere RR-Zählrate bei Kühlung zu $\langle A_{\text{RR M}}(E_i \neq 0) \rangle = (0.086 \pm 0.012) \cdot 10^{-3} / \text{s}$

Im Gegensatz zu Grundzustandsionen befinden sich angeregte Ionen nach dem radiativen Einfang eines Elektrons in einem Rydbergzustand evtl. noch oberhalb der Grundzustands-Autoionisationsschwelle. Dies ist für $n > 18$ der Fall, da hier die Ionisationsenergie des Rydbergelektrons kleiner ist als die Anregungsenergie des Atomrumpfes. In diesem Fall kann ein radiativer Einfang nicht nur zur radiativen Rekombination, sondern auch zur Autoionisation in den Grundzustand führen. Abb. 4.47 zeigt, dass der radiative Einfang in $n \leq 18$ nur einen Teil des RR-

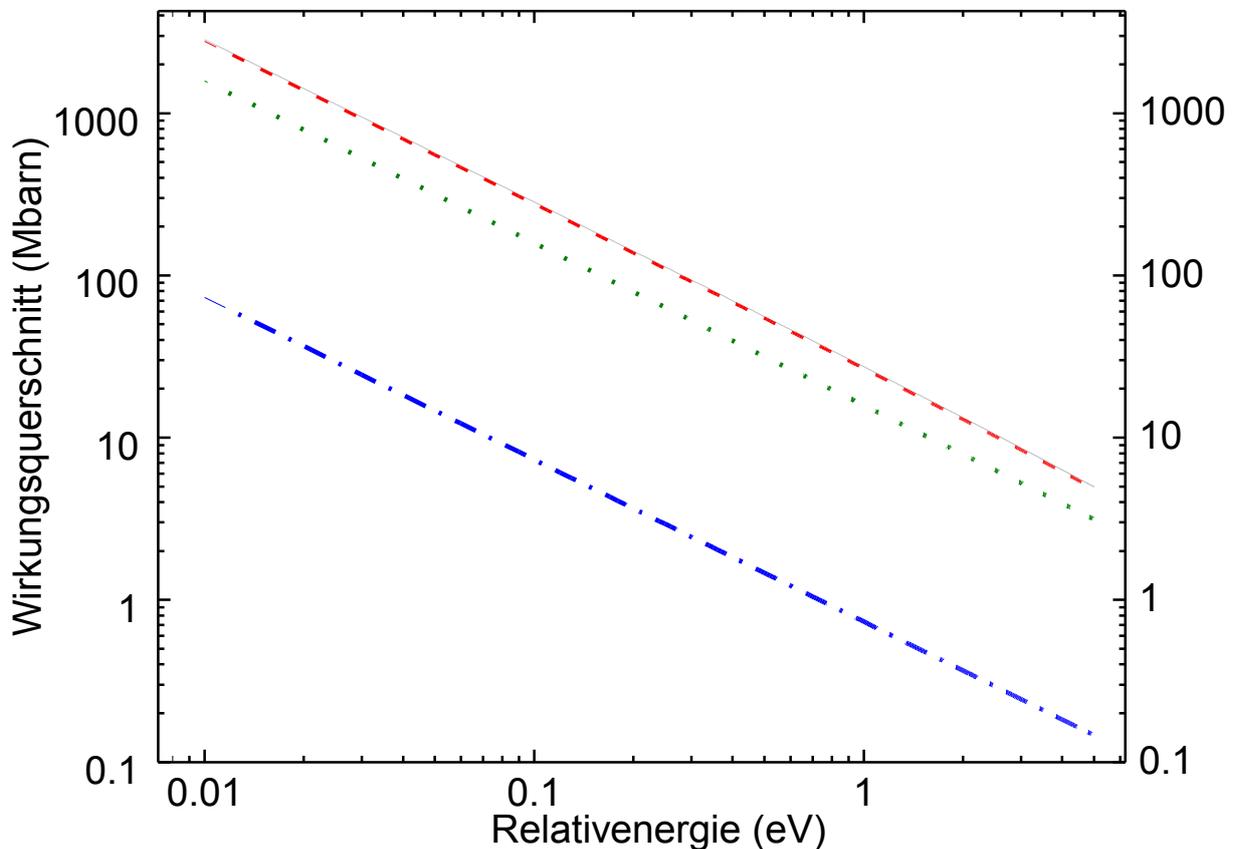


Abbildung 4.47: Aufgetragen ist der Wirkungsquerschnitt des radiativen Einfangs in einen beliebigen freien Zustand für den Grundzustand $\text{Xe}^{50+} 2s^2 1S_0$ (—), bzw. den metastabilen Zustand $\text{Xe}^{50+} 2s2p^3P_0$ (- - -) im für die Lebensdauerermessung relevanten Energiebereich. Der Unterschied beider Querschnitte ($\cdot - \cdot$) beträgt weniger etwa 3% der jeweiligen Werte. Ebenfalls angegeben ist der Wirkungsquerschnitt für radiativen Einfang in $n \leq 18$ für $\text{Xe}^{50+} 2s2p^3P_0$ ($\cdot \cdot \cdot \cdot$ siehe Abs. 4.3.3.4).

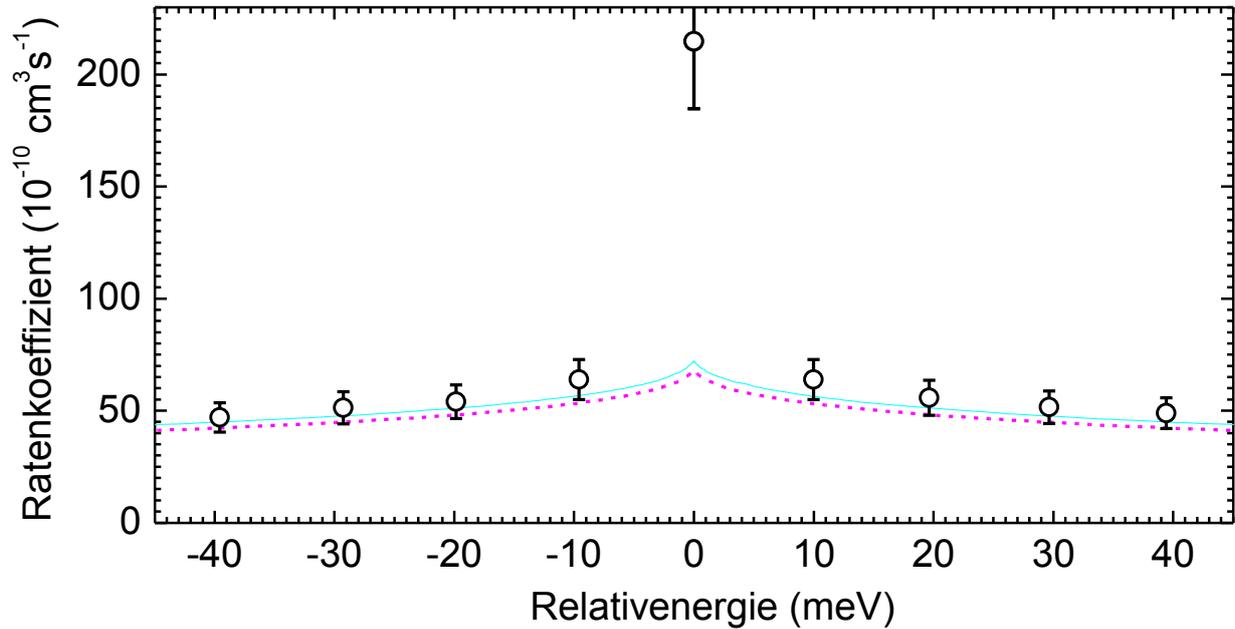
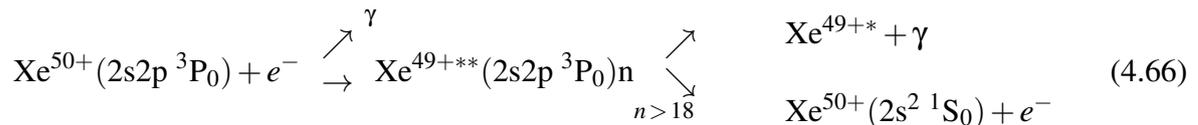


Abbildung 4.48: \circ gemessener Xe^{51+} -RR-Ratenkoeffizient mit systematischen Unsicherheiten (Abs. 3.5.6) und Faltung theoretischer Vorhersagen mit den Experimentbedingungen (—). Zum Vergleich ist die Faltung theoretische Vorhersagen für Xe^{50+} dargestellt (- - -). Dabei unterscheiden sich die Ratenkoeffizienten von lithium- und berylliumartigem Xenon nur um etwa 6%. Für eine Relativenergie von 0 eV tritt eine Ratenüberhöhung (Abs. 1.3.2 und dortigen Referenzen) des experimentellen Resultats gegenüber den theoretischen Vorhersagen auf, die bei Xe^{51+} knapp einem Faktor 3 entspricht. Oberhalb von 10 meV nimmt dieser Effekt schnell ab.

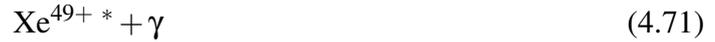
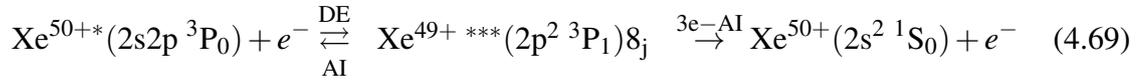
Wirkungsquerschnittes ausmacht, so dass es notwendig ist, auch den Fall $n > 18$ zu betrachten.



In keinem Fall ist allerdings eine (Re-)Autoionisation in den metastabilen Zustand möglich. Wenn primär die Entvölkerungsrate des metastabilen Zustandes von Interesse ist, so ist es nicht nötig, die beim radiativen Einfang für $n > 18$ auftretende Verzweigung in die Endzustände $\text{Xe}^{50+}(2s^2\ ^1S_0)$ und Xe^{49+} zu berücksichtigen, da jeder radiative Einfang (unterhalb der Feldionisationsschwelle) zu einer Entvölkerung des metastabilen Zustands führt. In Folge dessen entsprechen die oben unter Vernachlässigung der möglichen Autoionisation in den Grundzustand berechneten Verlustraten der Summe der Verlustraten der radiativen Rekombination ($A_{RR\ M}$) und der auf einen radiativen Einfang folgenden Autoionisation in den Grundzustand ($A_{SE\ R}$).

$$A_{RR\ M}(0) + A_{SE\ R}(0) = (2.3 \pm 0.4) \cdot 10^{-3}/s \quad (4.67)$$

$$\langle A_{RR\ M}(E_i \neq 0) \rangle + \langle A_{SE\ R}(E_i \neq 0) \rangle = (0.086 \pm 0.012) \cdot 10^{-3}/s \quad (4.68)$$

4.3.3.5 Dielektronischer Einfang und Autoionisation in den Grundzustand $A_{\text{SE D}}$ 

Der oben aufgeführte Prozess ermöglicht eine Depopulation des metastabilen, einfach angeregten $2s2p^3P_0$ -Zustandes mittels dielektronischem Einfangs (DE) in den $(2p^2^3P_1)8_j$ -Zustand, der anschließend durch Drei-Elektronen-Autoionisation (3e-AI) in den $2s^2^1S_0$ -Grundzustand übergehen kann. Dabei schränkt der Energiebereich der Messung ($0 \text{ eV} \leq E \leq 4 \text{ eV}$) die erreichbaren Zwischenzustände ein.

Da dieser Prozess nicht zur Umladung führt, wird er im Rahmen der Rekombinationsmessung nicht detektiert, stellt aber einen möglichen Verlustkanal des $2s2p^3P_0$ -Zustandes dar. Die Drei-Elektronen-Autoionisation ist zeitinvers zum trielektronischen Einfang [166] und steht in Konkurrenz zur (Re-) Autoionisation ins Kontinuum des schon initial gegebenen $2s2p^3P_0$ -Zustands. Dabei ist die Rate der Drei-Elektronen-Autoionisation $(2p^2^3P_1)8_j \rightarrow 2s^2^1S_0 + e^-$ sehr viel geringer als die der Autoionisation $(2p^2^3P_1)8_j \rightarrow 2s2p^3P_0 + e^-$. Ursächlich liegt dies in der erhöhten Anzahl der gleichzeitig wechselwirkenden Ladungsträger begründet. Autoionisationsrate und 3e-AI weisen unterschiedliche Abhängigkeit von der Kernladungszahl auf. Schnell [142, 2.4.2] gibt für die $\Delta n = 0$ -Autoionisationsrate $A_a \propto \sqrt{Z}$ (für nicht zu hohe Kernladungszahlen) und für die $\Delta n = 0$ -Drei-Elektronen-Autoionisationsrate $A_{3e} \propto Z^{-1.5}$. Dies entspricht einem mit steigendem Z sinkendem Einfluss der Drei-Elektronen-Autoionisation ($A_{3e}/A_a \propto Z^{-2}$). Schnell *et al.* [166] zeigen die Unterdrückung von trielektronischen Rekombinationsresonanzen jenseits der DR-Seriengrenzen für berylliumartiges Cl^{13+} und damit die Dominanz der Autoionisationsrate (A_a) in einen einfach, angeregten Zustand gegenüber der Drei-Elektronen-Autoionisation (A_{3e}). Für $\text{Xe}^{49+}(2p^2^3P_1)8_j$ sind die Autoionisationsraten A_a (LANL [103–105]) maximal um den Faktor 3 größer als die Summe der radiativen Übergangsraten des Rydberg-Elektrons A_Γ .

Für alle $((2p_{1/2}p_{3/2}^3P_1)8_l)_J$ -Zustände gilt $A_{3e} < 3 \cdot 10^8 / \text{s}$ [167] und $A_\Gamma \geq 10^{10} / \text{s}$ [167] und somit $A_{3e} \ll A_\Gamma$. daraus folgt Somit ist die Reduktion des $2s2p^3P_0$ -Strahlanteils durch 3e-AI gegenüber dem Strahlverlust durch dielektronische Rekombination (Abs. 4.3.3.10) vernachlässigbar.

$$A_{\text{SE D}} \ll A_{\text{DR M}} \quad (4.72)$$

4.3.3.6 Entvölkerung des Grundzustandes

Da der größte Teil des Ionenstrahls aus Grundzustandsionen besteht (Abs. 4.13), weicht der in Gleichung 4.33 eingeführte Parameter der Zeitentwicklung des Grundzustandsionenstromes F_G kaum vom äquivalenten Parameter der Zeitentwicklung des Gesamtionenstromes F_{exp} (Abs. 4.3.2.4) ab. Dies erlaubt, F_G mit den Grundzustandsstrahlanteilen $a_G^{(S)} = 96\% \pm 0.5\%$ bzw. $a_G^{(F)} =$

94% \pm 0.5% (Abs. 4.13) folgendermaßen zu bestimmen:

$$F_G = \frac{I_G(t + t_{\text{ramp}})}{I_G(t)} = \frac{a_G^{(S)} \cdot I_G(t + t_{\text{ramp}})}{a_G^{(F)} \cdot I_G(t)} = \frac{0.96}{0.94} \cdot F_{\text{exp}} = 0.662 \pm 0.007 \quad (4.73)$$

4.3.3.7 Photorekombinationsverluste des Grundzustandes $A_{\text{PR G}}$

Für die späte Messung bei reduziertem metastabilen Strahlanteil wurde bei einer Relativenergie von 0 eV ein Photorekombinationsratenkoeffizient (DR und RR) α_{PR} von $(2160 \pm 300)10^{-10}\text{cm}^3/\text{s}$ gemessen. Nimmt man diesen Wert als Näherung für $\alpha_{\text{PR G}}$, so lässt sich hieraus äquivalent zu Gleichung 4.65 die Rekombinationsverlustrate des Grundzustandes $A_{\text{PR G}}$ bei Kühlung bestimmen.

$$A_{\text{PR G}}(0) = (13.4 \pm 1.9) \cdot 10^{-3}/\text{s} \quad (4.74)$$

Aus dem DR-Ratenkoeffizient lässt sich durch Subtraktion des Anteils der metastabilen Resonanzen und Renormierung auf den Grundzustandsstrahlanteil äquivalent zu Abschnitt 4.2.10 ein Grundzustands-DR-Ratenkoeffizient bilden. Im Gegensatz zum Spektrum des kleineren, metastabilen Strahlanteils (Abs. 4.3.3.10) kann das Grundzustandsspektrum für den gesamten Energiebereich der Messung (hier 0 bis 4 eV) angegeben werden, da die starken gewichteten Grundzustandsresonanzen von den schwächer gewichteten Resonanzen des metastabilen Strahlanteils nicht überlagert werden können (Abb. 4.49). Mittelt man diesen Ratenkoeffizienten gewichtet mit der Messzeit für $E \neq 0$, so erhält man $\langle \alpha_{\text{DR}}(E_i \neq 0) \rangle = (209 \pm 30) \cdot 10^{-10}\text{cm}^3/\text{s}$. Dies entspricht folgender, mittlerer Grundzustands-DR-Verlustrate bei Messung:

$$\langle A_{\text{DR G}}(E \neq 0) \rangle = (1.3 \pm 0.2) \cdot 10^{-3}/\text{s} \quad (4.75)$$

Mit $\langle A_{\text{RR G}}(E \neq 0) \rangle \sim \langle A_{\text{RR M}}(E \neq 0) \rangle = (0.086 \pm 0.012) \cdot 10^{-3}/\text{s}$ ergibt sich die mittlere Rekombinationszählrate bei Messung wie folgt:

$$\langle A_{\text{PR G}}(E \neq 0) \rangle = (1.4 \pm 0.2) \cdot 10^{-3}/\text{s} \quad (4.76)$$

4.3.3.8 Restgaswechselwirkung des Grundzustands A_{gl}

Im Experimentierspeicherring kommt es zu Wechselwirkungen mit dem Restgas. Dies führt zu einer Reduktion des Ionenstroms. Diese Verluste sind umso größer, je langsamer die Ionen sind. Das vorliegende Experiment wurde bei Ionenenergien von 60 MeV/u durchgeführt. Zu berücksichtigen ist hierbei, dass die Wechselwirkung zwischen Ionenstrahl und Restgas eine starke Abnahme mit steigender Ionengeschwindigkeit zeigt. So konnten Schlachter *et al.* [168] für den Energiebereich von 0,3 bis 8,5 MeV/u den Zusammenhang $\sigma_{\text{RG}} \propto q^{3,9} \cdot v^{-9}$ für den Wirkungsquerschnitt des Elektroneneinfangs in hochgeladene Projektile der Ladung q zeigen. Bei einer Untersuchung der Lebensdauer von im Experimentierspeicherring ESR bei Elektronenkühlung gespeichertem U^{92+} kommen Stöhlker *et al.* [169] zu dem Schluss “*For a particular case of U^{92+} ions at 49 MeV/u, a cooler current of 20 mA was applied and the lifetime was still dominated by radiative recombination in the electron cooler and not by charge exchange in the residual gas.*“. Zu beachten ist, dass die vorliegende Messung einen fünffach höheren Elektronenstrom

aber einen zweifach geringeren Ladungszustand aufweist. Da der RR-Wirkungsquerschnitt mit q^2 skaliert (Gl. 1.25), verbleibt mit der obigen $\sigma_{\text{RG}} \propto q^{3,9}$ Skalierung eine um zwei Potenzen höhere Abhängigkeit des Restgas-Wirkungsquerschnittes. Letztlich kann, im Gegensatz zu Messungen bei noch deutlich höheren Ionenenergien [169], der Einfluss der Restgaswechselwirkungen auf die absolute Strahllebensdauer nicht ohne Einschränkungen vernachlässigt werden. Die Berechnung der Restgaswechselwirkung des Grundzustandes aus theoretischen Wirkungsquerschnitten erfordert die Kenntnis des Restgasdrucks auf dem gesamten 108 Meter langen Umfang des Speicherrings. Da eine flächendeckende Messung des Restgasdruckes nicht vorliegt, sollen die Restgasverluste im Folgenden aus der Entvölkerung des Grundzustandes (F_G Abs. 4.3.3.6) und den Übergangsraten gemäß Gl. 4.53 bestimmt werden.

$$A_{\text{gl}} = \frac{\ln(F_G)}{-t_{\text{ramp}}} + \left(A_{2\gamma} + A_q + \frac{A_{\text{SE}}(0) + \langle A_{\text{SE}}(E_i \neq 0) \rangle}{2} \right) \frac{N_M}{N_G} - A_e - \frac{A_{\text{PR G}}(0) + \langle A_{\text{PR G}}(E_i \neq 0) \rangle}{2}$$

Mit $0 < A_{2\gamma} + A_q + \frac{A_{\text{SE}}(0)}{2} + \frac{\langle A_{\text{SE}}(E_i \neq 0) \rangle}{2} < \frac{-\ln(F_M)}{t_{\text{ramp}}} = (14.3 \pm 1.6) \cdot 10^{-3}/\text{s}$ und $A_e \ll A_{\text{PR G}}(E)$ ergibt sich:

$$\frac{\ln(F_G)}{-t_{\text{ramp}}} - \frac{A_{\text{PR G}}(0) + \langle A_{\text{PR G}}(E_i \neq 0) \rangle}{2} < A_{\text{gl}} < \frac{\ln(F_G)}{-t_{\text{ramp}}} + \frac{\ln(F_M)N_M}{-t_{\text{ramp}}N_G} - \frac{A_{\text{PR G}}(0) + \langle A_{\text{PR G}}(E_i \neq 0) \rangle}{2}$$

$$(0.4 \pm 1.0) \cdot 10^{-3} < A_{\text{gl}} < (1.2 \pm 1.1) \cdot 10^{-3}$$

Dieses Ergebnis ist konsistent mit

$$A_{\text{gl}} = (1.2 \pm 1.2) \cdot 10^{-3}/\text{s} \quad (4.77)$$

4.3.3.9 Restgaswechselwirkung A_{ml}

Der metastabile $2s2p^3P_0$ -Zustand besitzt gegenüber dem $2s^2^1S_0$ -Grundzustand eine Anregungsenergie von etwa 111 eV [34]. Dem steht eine Grundzustandsionisationsenergie von etwa 9607 eV [170] gegenüber. Angesichts der nur gut 1% geringeren Ionisationsenergie des metastabilen Zustandes kann äquivalent zu Schippers *et al.* [11] (3%-igen Unterschied der Ionisationsenergien) davon ausgegangen werden, dass die Rekombinations- und Ionisationsverluste durch Wechselwirkung mit dem Restgas für beide Zustände näherungsweise identisch sind.

$$A_{\text{ml}} \approx A_{\text{gl}} = (1.2 \pm 1.2) \cdot 10^{-3}/\text{s} \quad (4.78)$$

4.3.3.10 Dielektronische Rekombination $A_{\text{DR M}}$

Aufgrund der resonanten Natur der dielektronischen Rekombination verfügen $\text{Xe}^{50+}(2s2p^3P_0)$ und $\text{Xe}^{50+}(2s^2^1S_0)$ über stark unterschiedliche DR-Spektren und damit auch DR-Verluste. Wie in Abschnitt 4.2.10 beschrieben, lässt sich aus dem gemessenen Spektrum mittels Untergrundsubtraktion und Renormierung der DR-Ratenkoeffizient des metastabilen $2s2p^3P_0$ -Strahlanteils bestimmen. Dies gelingt allerdings nur, wenn die Resonanzen des Minderheitsstrahlanteils im gemessenen Spektrum sichtbar sind. Der Xe^{50+} Strahl besitzt einen Strahlanteil des $2s^2^1S_0$ -Grundzustands von mindestens 94% und einen metastabilen $2s2p^3P_0$ -Strahlanteil von maximal

6% (Abs. 4.2.7). Entsprechend sind Resonanzen des geringeren Strahlanteils nur sichtbar, wenn das Spektrum des dominanten Strahlanteils an der entsprechenden Position flach ist und keine eigenen Resonanzen besitzt. Abb. 4.49 zeigt das so erhaltene Spektrum im Vergleich zu dem Spektrum des Grundzustands. Erkennbar sind die Resonanzen der $2s2p\ ^3P_0 + e^- \rightarrow (2p^2\ ^3P_1)8l_j$ -Resonanzgruppe für $j = 9/2, 11/2, 13/2$ und $15/2$ bei 1.3, 1.6, 1.8 und 2.0 eV. Die $j = 7/2$ -Resonanz, mit kalkuliertem Energiebereich zwischen 0.6 eV und 0.9 eV, kann nicht separiert werden. Ursache hierfür ist die $2s^2\ ^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p\ ^1P_1)8l_j$ -Grundzustands-Resonanzgruppe, deren Resonanzen für $j = 9/2, 11/2, 13/2$ und $15/2$ bei 0.4, 0.7, 0.9 und 1.1 eV liegen und aufgrund der Dominanz

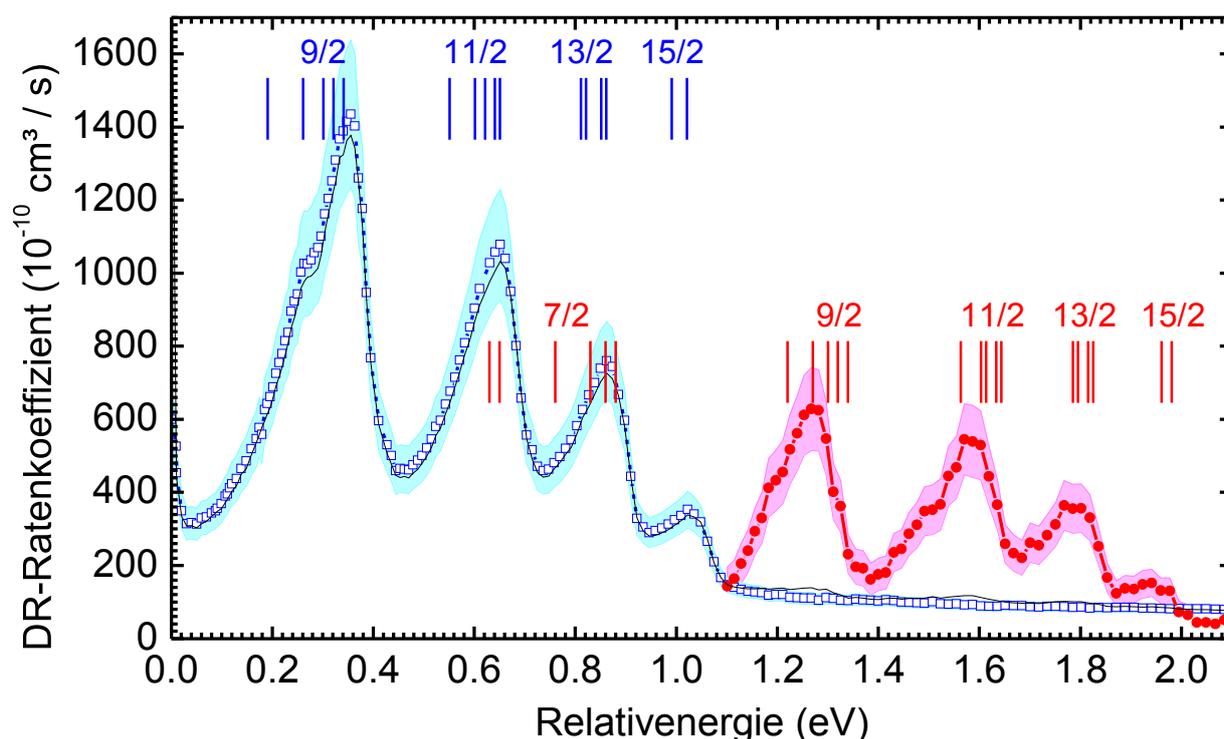


Abbildung 4.49: Absolute DR-Spektren der $2s^2\ ^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p\ ^1P_1)8l_j$ (\square) und $2s2p\ ^3P_0 + e^- \rightarrow (2p^2\ ^3P_1)8l_j$ -Resonanzgruppen (\bullet) nach Renormierung auf entsprechenden Ionenstromanteil (Abs. 4.13) und Subtraktion des Ratenkoeffizienten der anderen Strahlkomponente. Resonanzen des initial metastabilen Zustands für Gesamtdrehimpulse $j = 7/2$ lassen sich aus dem gemessenen DR-Spektrum (—) nicht extrahieren, da sie von Resonanzen der dominanten Grundzustandskomponente des Ionenstrahls überlagert sind. Unsicherheiten (flächig) berücksichtigen Fehler der Zählratenstatistik und systematische Fehler (Abs. 3.5.6). Für den $2s2p\ ^3P_0$ -Strahlanteil ist zusätzlich ein 1.5%-iger Fehler des Grundzustandsuntergrundabzuges (Abs. 4.3.2.6) und eine 0.5%-ige absolute Unsicherheit der Bestimmung des metastabilen Strahlanteils berücksichtigt. Weiterhin dargestellt sind Resonanzpositionen aus bestimmten Anregungsenergien (Abs. 4.2.3.2 und 4.2.3.1) und mit LANL-Programmpaket [103–105] berechneten Rydbergbindungs- und Konfigurationswechselwirkungsenergien. Die $(2p^2\ ^3P_1)_{7/2}$ -Resonanz hat auf das extrahierte Grundzustandsspektrum aufgrund des geringen Strahlanteils des initial metastabilen Zustands nur einen geringen Einfluss, der deutlich unterhalb der angegebenen Unsicherheiten liegt.

des Grundzustands die beiden oben genannten Resonanzen des initial metastabilen Strahlanteils überlagern. Zur Bestimmung der DR-Rekombinationsverluste während der Messung ist es notwendig, das DR-Ratenkoeffizientenspektrum im gesamten angesteuerten Energiebereich zu berücksichtigen. Hierzu sollen im Folgenden die fehlenden Bereiche des Spektrums aus den gemessenen Teilen des Spektrums genähert werden.

Jede einzelne DR-Resonanz (i) der $((2p^2\ ^3P_1)8l_j)_J$ -Resonanzgruppe wird durch die Parameter Resonanzenergie (E_i), natürliche Breite (Γ_i) und Resonanzstärke (S_i) bestimmt, wobei die natürliche Breite in der Regel von der experimentellen Resonanzverbreiterung (Abs 3.4) überlagert wird, so dass sie keinen signifikanten Einfluss auf das gemessene Ratenkoeffizientenspektrum hat. Die Resonanzlagen (E_i) setzen sich näherungsweise aus den drei Komponenten ($2s2p\ ^3P_0 - 2p^2\ ^3P_1$)-Anregungsenergie, $8l_j$ -Rydbergbindungsenergie und der Energie der Wechselwirkung zwischen Rumpf und Rydbergelektron zusammen. Letztere beide lassen sich mit dem LANL-Programmpaket [103–105] berechnen, während erstere deutlich präziser gemessen wurde (siehe Abschnitt 4.2.3.2). Zur Anpassung an das gemessene Spektrum wird zusätzlich für jeden Gesamtdrehimpuls j des Rydbergelektrons eine Verschiebung ΔE_j eingeführt, die in der Größenordnung 0 – 30 meV liegt.

Für die Resonanzstärke S_i wird auf Basis der Abhängigkeiten des Wirkungsquerschnitts

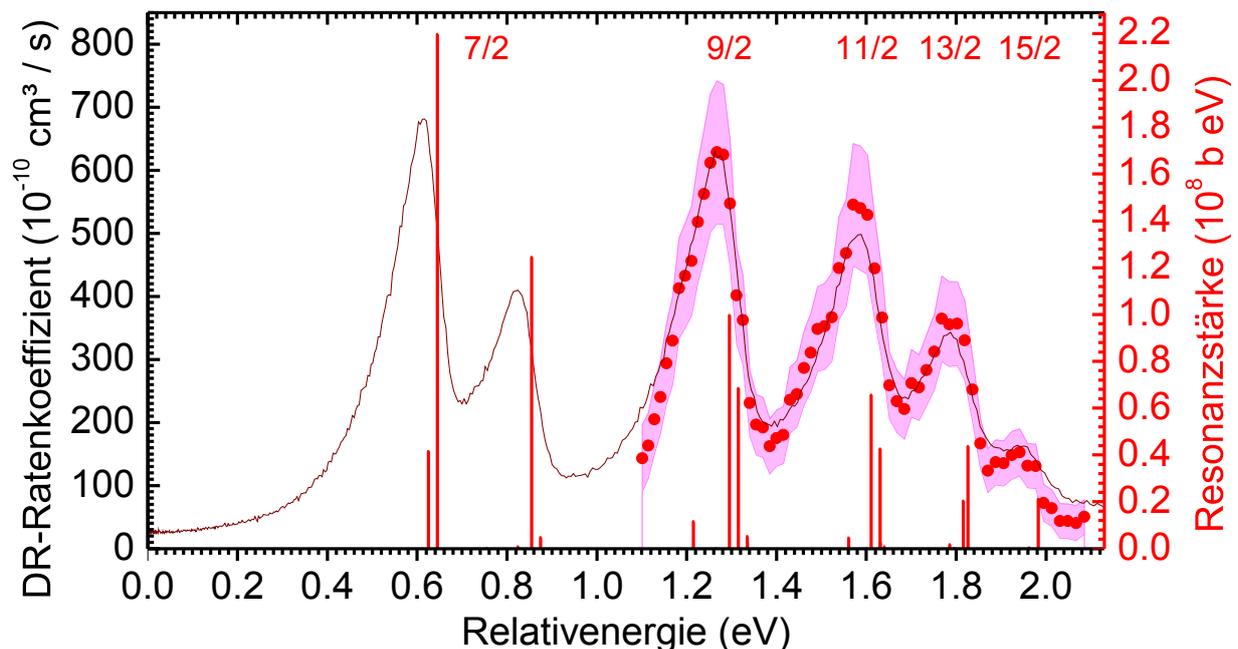


Abbildung 4.50: • Absolutes renormiertes DR-Spektrum der $\text{Xe}^{50+}(2s2p^3P_0) + e^- \rightarrow \text{Xe}^{49+}((2p^2\ ^3P_1)8l_j)_J$ -Resonanzgruppe gemäß Abs. 4.2.10 mit aufgelösten Resonanzen für $j=9/2, 11/2, 13/2$ und $15/2$. Ebenfalls angegeben ist das hieraus extrapolierte Spektrum (—) mit zugeordneten Resonanzstärken und -positionen (|) inklusive $j=7/2$ Resonanz (Methodik siehe Text). Experimentelle Unsicherheiten sind flächig dargestellt.

1.31 von Resonanzposition E_i , Autoionisationsrate A_{a_i} (LANL [103–105]) und radiativen Raten $A_{\Gamma i} = \sum_k A_{\gamma ki}$ (LANL-für Rumpf und Wasserstoffnäherung für Rydbergübergänge) sowie des statistischen Gewichts eines Zustands $(2 \cdot J_i + 1)$ folgende Näherung verwendet:

$$S_i = c \cdot \frac{2J_i + 1}{E_i} \frac{A_{a_i} \cdot A_{\Gamma i}}{A_{a_i} + A_{\Gamma i}} \quad (4.79)$$

Nun wird auf Basis von Resonanzlagen E_i und -stärken S_i ein Spektrum simuliert (Abs. 3.3.4). Dies geschieht unter Variation der Parameter c , $\Delta E_{9/2}$, $\Delta E_{11/2}$, $\Delta E_{13/2}$ und $\Delta E_{15/2}$, bis eine optimale Übereinstimmung mit dem gemessenen Spektrum erreicht wird (Für die nicht messbare $j = 7/2$ -Resonanz wird $\Delta E_{7/2} \approx \Delta E_{9/2}$ genähert). Resultat ist ein simuliertes Ratenkoeffizientenspektrum für den gesamten Messbereich (Abb. 4.50).

Größte systematische Unsicherheit der Extrapolation ist die energetische Lage der $2s2p^3P_0 + e^- \rightarrow (2p^2^3P_1)8_{5/2}$ -Resonanzgruppe. Hier fordert die DR-Resonanzbedingung (Gl. 1.28) eine (unmögliche) negative Relativenergie des Kontinuumselektrons, was zur Folge hat, dass diese Resonanz keinen Beitrag zum Ratenkoeffizientenspektrum liefert. Die Energieunsicherheit erlaubt die Verschiebung der Resonanz – oder zumindest deren Ausläufer aufgrund der natürlichen Linienbreite – zu Relativenergien knapp über Null, was, bedingt durch die $\sigma \propto 1/E$ -Abhängigkeit, einen großen Einfluss auf das Ratenkoeffizientenspektrum haben kann. Der Einfluss dieses Effekts auf den Ratenkoeffizienten bei verschwindenden Relativenergien ($\alpha(0)$) lässt sich kaum beziffern.

Für die Bestimmung der Rekombinationsverluste beider Strahlanteile ist neben den Rekombinationsspektren die Häufigkeitsverteilung der angesteuerten Relativenergien relevant. Im Rahmen der zur Lebensdauerermittlung verwendeten Messung wurden Relativenergien zwischen 0 und 4 eV angesteuert (Abb. 4.43). Um ein Aufheizen des Ionenstrahls zu verhindern und die Ionenenergie zu stabilisieren, wurde zwischen den einzelnen Messschritten Kühlstritte mit $v_i = v_e$ gewählt. Dies entspricht einer Relativenergie von 0 eV (Abb. 4.43). Durch die häufige Ansteuerung immer gleicher Kühlstritte sind die DR-Ratenkoeffizienten bei 0 eV für die gesamten DR-Verluste von besonderer Relevanz.

Aus dem simulierten Spektrum ergibt sich $\alpha_{DR}(0) = (29 \pm 5) \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{s}$ und $\langle \alpha(E \neq 0) \rangle = (133 \pm 22) \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{s}$. Hierbei ist allerdings die bei kleinen Energien auftretende Ratenüberhöhung (Abs. 1.3.2) noch nicht berücksichtigt. Abbildung 4.51 zeigt den Einfluss der Ratenüberhöhung auf das von der Grundzustands-DR dominierte Xe^{50+} -Rekombinations-Spektrum. Der Überhöhungsfaktor lässt sich aus dem Vergleich der Raten bei 0 meV und ~ 25 meV mit einem Faktor 5.4 ± 0.5 beschreiben. Nimmt man für das $\text{Xe}^{50+}(2s2p^3P_0)$ -DR-Spektrum denselben Ratenüberhöhungsfaktor an, so ergibt sich $\alpha_{DR}(0) = (156 \pm 27) \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{s}$ und $\langle \alpha(E \neq 0) \rangle = (133 \pm 22) \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{s}$. Hieraus lassen sich die DR-Verluste des metastabilen Strahlanteils äquivalent zu Abschnitt 4.3.3.4 zu folgenden Werten bestimmen:

$$A_{DR M}(0) = (1.0 \pm 0.2) \cdot 10^{-3}/\text{s} \quad A_{DR M}(E_i \neq 0) = (0.8 \pm 0.1) \cdot 10^{-3}/\text{s} \quad (4.80)$$

Hierin nicht enthalten ist die Unsicherheit von $A_{DR M}(0)$ durch die Lage der $j = 5/2$ Resonanz.

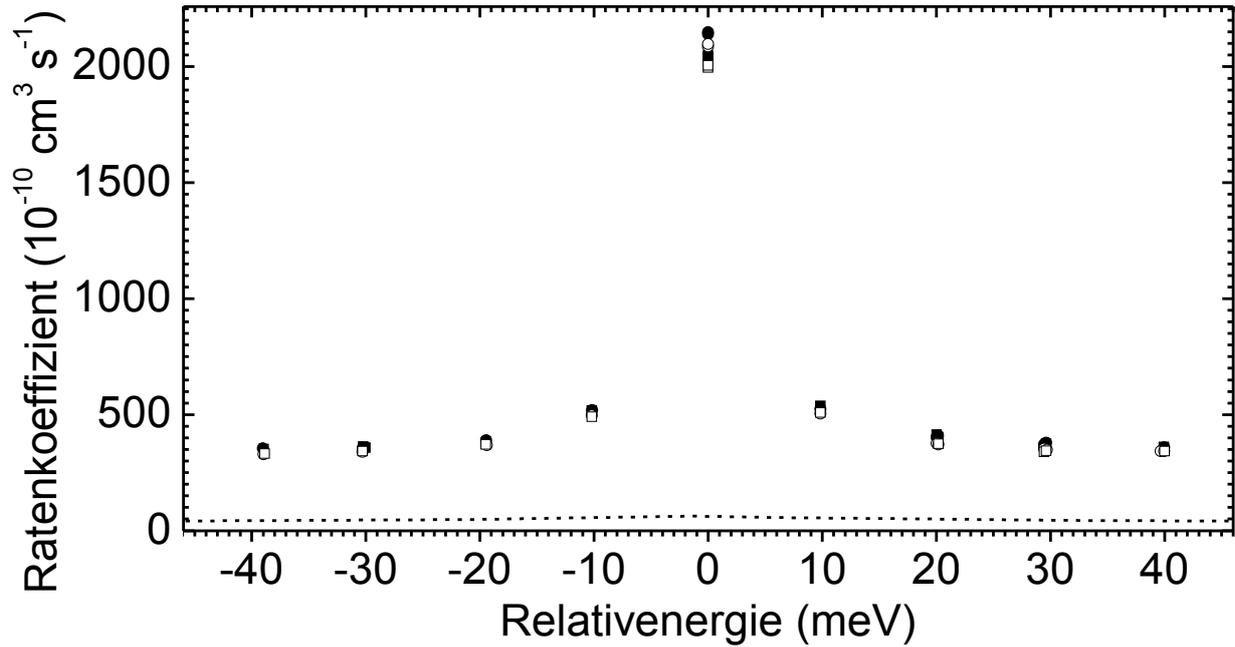


Abbildung 4.51: Gemessener, von der DR dominierter Ratenkoeffizient für berylliumartiges Xe^{50+} für verschiedene Messungen (\bullet , \circ , \square , \blacksquare). Für Relativenergien nahe 0 eV tritt eine Ratenüberhöhung (Abs. 1.3.2) auf, die weder durch den weit schwächeren Anstieg des RR - - - (gefaltete Theorie) noch durch DR-Resonanzen des dominanten Grundzustands erklärt werden kann. Oberhalb von 20 meV ist die Ratenüberhöhung kaum mehr sichtbar. Aus dem Vergleich lässt sich der Faktor der Ratenüberhöhung zu 5.4 ± 0.5 bestimmen.

4.3.4 Folgerungen für die $2s2p^3P_0 \rightarrow 2p^2^1S_0$ -E1M1-Übergangsrates $A_{2\gamma}$

Gemäß Gleichung 4.52 lässt sich aus der Zeitkonstanten der Entvölkerung des $2s2p^3P_0$ -Strahlanteils bei Kenntnis aller anderen relevanten Übergangsrates die E1M1-Zweiphotonenübergangsrates $A_{2\gamma}$ bestimmen. Hierbei werden die aus unterschiedlichen Quellen stammenden Unsicherheiten quadratisch addiert.

$$A_{2\gamma} = -\frac{\ln(F_M)}{t_{\text{ramp}}} - A_q - A_{\text{ml}} - \frac{A_{\text{SE D}}(0)}{2} - \frac{A_{\text{SE R}}(0) + A_{\text{RR M}}(0)}{2} - \frac{A_{\text{DR M}}(0)}{2} \quad (4.81)$$

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2} \langle A_{\text{SE D}}(E_i) \rangle - \frac{\langle A_{\text{SE R}}(E_i) \rangle + \langle A_{\text{RR M}}(E_i) \rangle}{2} - \frac{1}{2} \langle A_{\text{DR M}}(E_i) \rangle \quad \text{mit: } E_i \neq 0 \\ & = [(14.3 \pm 1.6) - (2.2 \pm 2.0) - (1.2 \pm 1.2) - (1.2 \pm 0.2) - (0.5 \pm 0.1) \\ & \quad - (0.0 \pm 0.0) - (0.4 \pm 0.1)] \cdot 10^{-3}/\text{s} \\ & = (8.8 \pm 2.8) \cdot 10^{-3}/\text{s} \Rightarrow \tau_{2\gamma} \sim (113 \pm 36)\text{s} \end{aligned} \quad (4.82)$$

Sind nicht alle Beträge der absoluten Entvölkerungsrates ($A_i \geq 0$) bekannt oder lassen sich weitere Verlustprozesse nicht ausschließen, so stellt obige Rate eine Obergrenze der E1M1-Übergangsrates bzw. Untergrenze der Lebensdauer dar.

Theorie-Vergleich Vergleicht man das experimentelle Ergebnis mit der aus der Arbeit von Laughlin [3] gewonnene Lebensdauervorhersage von 30 Sekunden (Abb. 4.41 bzw. Gleichung 1.11) so fällt eine drastische Diskrepanz auf. Das experimentelle Resultat liegt etwa 280% über der theoretischen Vorhersage. Die Ursache für diese deutliche Abweichung liegt darin, dass die von Laughlin verwendeten Näherungen [nichtrelativistische Rechnung, Annahme einer vernachlässigbaren $(2s2p\ ^3P_0-2s2p\ ^3P_1)$ -Aufspaltung, L-S-Kopplung] nur für leichte Ionen angemessen sind. Darüberhinaus wird der mögliche $2s2p\ ^1P_1$ -Zwischenzustand vernachlässigt. Dies stellt angesichts der hohen $(2s2p\ ^1P_1 \rightarrow 2s^2\ ^1S_0)$ -Übergangsrate [43] ein Problem dar, das sich nicht nur auf schwere Ionen auswirkt. Im Gegensatz zu dieser Vorhersage liegt die unter Berücksichtigung der $(2s2p\ ^3P_0-2s2p\ ^3P_1)$ -Aufspaltung aber ansonsten identischen Näherungen erhaltene Korrektur der E1M1-Lebensdauer von 78 Sekunden (Gl. 1.17) noch im Bereich des Möglichen.

Die von Fratini *et al.* [158] in relativistischer Behandlung und bei Berücksichtigung aller Zwischenzustände gewonnene Zählrate von $0.9 \cdot 10^{-3}/s$ (1170 Sekunden Lebensdauer) liegt eine Größenordnung über dem experimentellen Ergebnis.

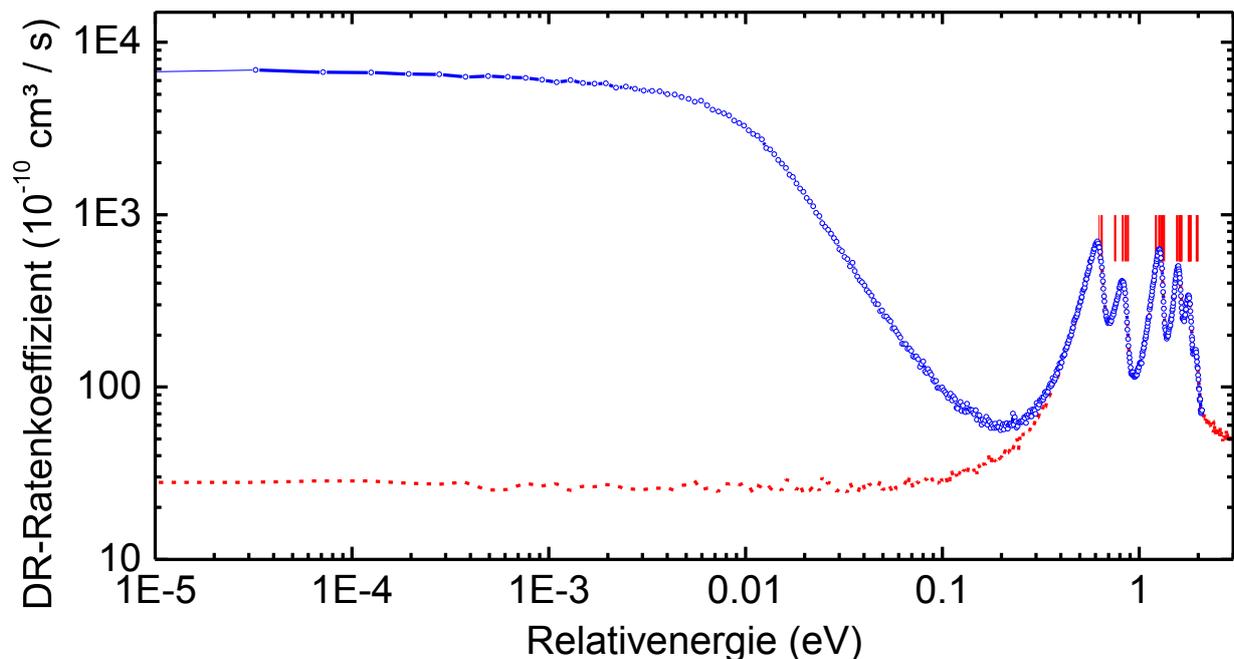


Abbildung 4.52: Hypothetisches, unter der zusätzlichen Annahme einer $(2p^2\ ^3P_1)8f_{5/2}\ ^4G_{7/2}$ -Resonanzposition von 10 meV äquivalent zu Abs. 4.3.3.10 simuliertes Ratenkoeffizientenspektrum (—) im Vergleich zum aus Abb. 4.50 bekannten und zur Berechnung der DR-Verluste bei Kühlung genutzten simulierten Spektrum (- - -). Die um einige Dutzend meV geänderte energetische Position lässt die zuvor nicht existente Resonanz ins DR-Spektrum wandern. Unterhalb von etwa 40 meV dominiert diese Resonanz das Spektrum aufgrund der $1/E$ -Abhängigkeit des DR-Wirkungsquerschnitts 1.31 und der hohen Autoionisationsraten dieser Resonanz. Für Relativenergien nahe Null steigt der DR-Ratenkoeffizient und damit auch die DR-Verlustrate bei Kühlung um mehr als zwei Größenordnungen.

($2p^2\ ^3P_1$) $8l_{5/2}$ -DR-Resonanz als mögliche Erklärung der Diskrepanz Ursache für die Abweichungen könnte eine Unterschätzung der DR-Verluste bei Kühlung ($E=0$) sein. Hier würde ein zusätzlicher DR-Ratenkoeffizient bei Kühlung ($E=0$) von etwa $3000 \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{s}$ den Unterschied erklären. In Abschnitt 4.3.3.10 wurde davon ausgegangen, dass zum DR-Ratenkoeffizienten keine Resonanzen der $2s2p\ ^3P_0 + e^- \rightarrow (2p^2\ ^3P_1)8l_{5/2}$ Resonanzgruppe beitragen, da die Resonanzbedingung nur für (unmögliche) negative Relativenergien des Kontinuum erfüllt ist. Nähme man nun eine um 45 meV erhöhte Energie der $2s2p\ ^3P_0 + e^- \rightarrow (2p^2\ ^3P_1)8f_{5/2}\ ^4G_{7/2}$ -Resonanz an, so dass diese bei 10 meV läge, so ergäbe sich das in Abs. 3.3.4 zu sehende, simulierte Spektrum. Hier betrüge der DR-Ratenkoeffizient bei Kühlung $\alpha_{\text{DR}}(0) \sim 7 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^3/\text{s}$, bzw. – bei Berücksichtigung der Ratenüberhöhung – $\alpha_{\text{DR}}(0) \sim 40 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^3/\text{s}$. Dies läge eine ganze Größenordnung über dem zur Erklärung der Diskrepanz nötigen Ratenkoeffizienten und entspräche einer DR-Verlustrate bei Kühlung $A_{\text{DR}}(E=0)$ von $250 \cdot 10^{-3}/\text{s}$, die zur Hälfte in die Bestimmung von $A_{2\gamma}$ gemäß Gl. 4.81 einging.

Verfügt Grund- und metastabiler Zustand über stark unterschiedliche Ratenkoeffizienten bei Kühlung ($\Delta\alpha(0) = |\alpha_{\text{DR G}}(0) - \alpha_{\text{DR M}}(0)|$), so müsste die Änderung der Strahlzusammensetzung im Verlauf der Messzeit auch eine Änderung des gemessenen Ratenkoeffizienten bei Kühlung zur Folge haben. Deren Größe entspricht dem Produkt aus $\Delta\alpha$ und der Änderung der Strahlkomposition $\sim 2\%$. Für den zur Erklärung der Entvölkerung des $2s2p\ ^3P_0$ -Zustandes notwendigen DR-Ratenkoeffizienten $\alpha_{\text{DR M}}(0) \sim 3000 \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{s}$ und den in Abschnitt 4.3.3.7 bestimmten Ratenkoeffizienten des Grundzustands $\alpha_{\text{DR G}}(0) \approx \alpha_{\text{PR G}}(0) \sim 2200$ ergäbe sich eine Reduktion des Ratenkoeffizienten um etwa $16 \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{s}$ bei einer Reduktion des metastabilen Strahlanteils von sechs auf vier Prozent im Verlauf der Messung. Bedauerlicherweise entspräche diese Änderung nur 0.7% des gemessenen Ratenkoeffizienten bei Kühlung und liegt somit deutlich unterhalb der Messgenauigkeit des Ratenkoeffizienten. Zusätzlich wird dieser Einfluss von einer womöglich leicht stärkeren Ratenüberhöhung des späteren Strahlanteils überlagert. Hierbei führt die Reduktion des Ionenstroms des späteren Messabschnitts zu einer leicht verbesserten Kühlung. Dies senkt, bei einer Relativenergie von 0 eV, die von der Energieverteilung bestimmte, mittlere Elektron-Ion-Stoßenergie etwas und führt zu einer leicht gesteigerten Ratenüberhöhung. Die mögliche zusätzliche ($2p^2\ ^3P_1$) $8l_{5/2}$ -Verlustrate hängt sehr stark von der entsprechenden Position und natürlichen Linienbreite der Resonanz ab. Bedauerlicherweise sind diese nicht hinreichend präzise bekannt um die Verlustrate zu bestimmen.

Resultat Da zusätzliche Rekombinationsverluste durch die ($2p^2\ ^3P_1$) $8l_{5/2}$ -DR-Resonanz nicht ausgeschlossen werden können, muss die in Gl. 4.81 angegebene Übergangsrate als Obergrenze der ($2s2p\ ^3P_0 \rightarrow 2s^2\ ^1S_0$)-E1M1-Zweiphotonenübergangsrate verstanden werden.

$$A_{2\gamma} \leq (8.8 \pm 2.8) \cdot 10^{-3}/\text{s} \quad \tau_{2\gamma} \geq (113 \pm 36) \text{ s} \quad (4.83)$$

4.4 Wasserstoffartiges Uran

In diesem Kapitel werden Messungen der absoluten DR-Ratenkoeffizienten bei stochastisch gekühlten wasserstoffartigen Uranionen behandelt. Da die Auswertung dieses Experiments maßgeblich schon an anderer Stelle dargelegt wurde [84], wird an dieser Stelle nur auf darüber hinausgehende, final publizierte Ergebnisse [76] und einige weiterführende Erkenntnisse eingegan-

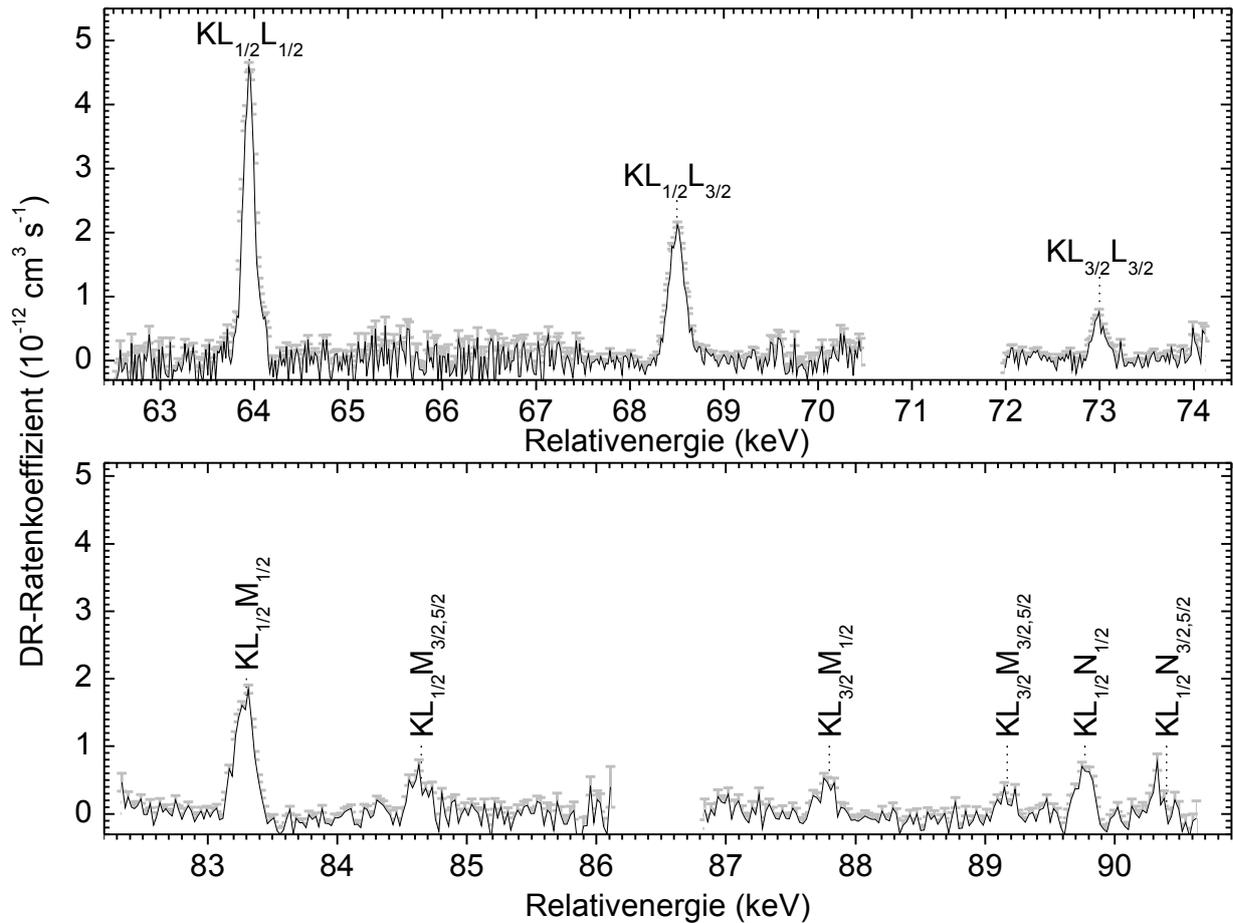


Abbildung 4.53: Absolute U^{91+} -DR-Ratenkoeffizient nach Untergrundabzug für Energiebereiche von 62.5 bis 90.5 keV. Dabei wurden alle DR-Resonanzen von der niederenergetischsten $KL_{1/2}L_{1/2}$ -Resonanz bei 64 keV bis zu $KL_{1/2}N$ -Resonanzen bei etwa 90 keV aufgelöst. Die Nichtexistenz von Unterzuständen der K-Schale verbietet $\Delta n = 0$ -Resonanzen bei $U^{91+}(1s)$. Die $\Delta n = 1$ -Resonanzenergien (Gl. 1.28) sind um $10^2 - 10^3$ höher als die Energien der $\Delta n = 0$ -Resonanzen bei $Xe^{51+}(1s^2 2s)$ (Abb. 4.2). Mit $\sigma_{DR} \propto E^{-1}$ (Gl. 1.31) führt dies zu um 2 bis 3 Größenordnungen geringeren Ratenkoeffizienten und entsprechend höheren Fehleranteilen (grau). Die Konzentration der Messung auf die Resonanzenergien ermöglicht es trotzdem, relativ geringe statistische Fehler zu erreichen. Zur verbesserten Darstellung wurden die Daten entfaltet und zusammengefasst.

gen. Abb. 4.53 zeigt den untersuchten Messbereich zwischen etwa 62 und 91 keV. Bei wasserstoffartigen Ionen im Grundzustand sind im Gegensatz zur Situation bei lithium- und berylliumartigen Ionen keine Anregungen innerhalb der Valenzschale möglich. Die niederenergetischste Anregung erfolgt von der K- in die L-Schale und erfordert etwa $3/4$ der K-Schalen Bindungsenergie, die bei ~ 130 keV liegt. Bei gleichzeitigem Einfang des Kontinuumelektrons in die L-Schale (der tiefste mögliche, nicht radiative Einfang) wird nur etwa $1/4$ der K-Schalen Bindungsenergie frei. Entsprechend sind DR-Resonanzen nur bei Relativenergien von mindestens der halben K-Schalenbindungsenergie möglich, während für geringere Energien keinerlei DR-Resonanzen existieren können. Der gewählte Messbereich von etwa 62 bis 91 keV trägt dieser Tatsache Rechnung und deckt alle KLL- und KLM-Resonanzen ab. Die im üblichen Messmodus alternierender Kühl- und Messschritte (Abs. 2.4.1) zugänglichen Relativenergien sind aus technischen Gründen auf weniger als ein keV limitiert [10]. Um die notwendigen, etwa 2 Größenordnungen höheren Relativenergien zu erreichen, erfolgte die Kühlung des Ionenstrahles auf stochastischem Weg (Abs. 2.3.3). Hierdurch steht der Elektronenkühler während der gesamten Messzeit exklusiv als Elektronentarget zur Verfügung. Die bei $\Delta n = 1$ - im Vergleich zu $\Delta n = 0$ -DR-Messungen um 2 bis 3 Größenordnungen höhere Relativenergie führt aufgrund der $1/E$ -Abhängigkeit des DR-Wirkungsquerschnitts (Gl.1.31) zu sehr viel geringeren Ratenkoeffizienten.

4.4.1 Breit-Wechselwirkung im Ratenkoeffizientenspektrum

Der Einfluss der Breitwechselwirkung auf Bindungsenergien bzw. Lagen der DR-Resonanzen ist verhältnismäßig klein [74]. Hingegen ist der DR-Wirkungsquerschnitt hochgeladener Schwereionen stark von der Breit-Wechselwirkung betroffen. Ursächlich hierfür ist die Abhängigkeit des DR-Wirkungsquerschnitts von Auger- bzw. Autoionisationsraten (Gl. 1.31) und der Z^4 -Abhängigkeit des relativen Breit-Wechselwirkungsanteils der Augerraten [75] (siehe auch Abschnitt 1.4.0.1). Abb. 4.54 zeigt die gemessenen U^{91+} -DR-Ratenkoeffizienten für die drei KLL Resonanzen $KL_{1/2}L_{1/2}$, $KL_{1/2}L_{3/2}$ und $KL_{3/2}L_{3/2}$ im Vergleich mit Multikonfiguration-Dirac-Fock-(MCDF) bzw. QED-Störungstheorie(QED-PT)-Rechnungen, die gemäß der experimentellen Parameter ($\Delta p/p = 7.5 \cdot 10^{-4}$; $kT_{\parallel} = 0.2$ meV, $kT_{\perp} = 120$ meV) gefaltet sind. Beschränkt man die MCDF-Rechnungen auf die Coulomb-Wechselwirkung, so wird bei der entsprechenden Faltung der Ratenkoeffizient der $KL_{1/2}L_{1/2}$ Resonanz um etwa den Faktor zwei unterschätzt. Berücksichtigt man hingegen die generalisierte Breitwechselwirkung, so erhöht sich der Ratenkoeffizient der $KL_{1/2}L_{1/2}$ - und $KL_{1/2}M_{1/2}$ -Resonanzgruppe um etwa 100% und es zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung zwischen experimentellen Messungen und MCDF-Rechnungen. Auch beim Vergleich der Messungen mit störungstheoretischen QED Rechnungen [171], die die Effekte der Breit-Wechselwirkung ebenfalls umfassen, ist die Übereinstimmung sehr gut. Besonders hervorzuheben ist, dass hier vollkommen unabhängige Absolutwerte experimenteller- und theoretischer Daten miteinander verglichen wurden. Tabelle 4.11 gibt einen Überblick über die aus dem Experiment bestimmten Resonanzlagen und -stärken im Vergleich mit MCDF- und störungstheoretischen [172] Rechnungen.

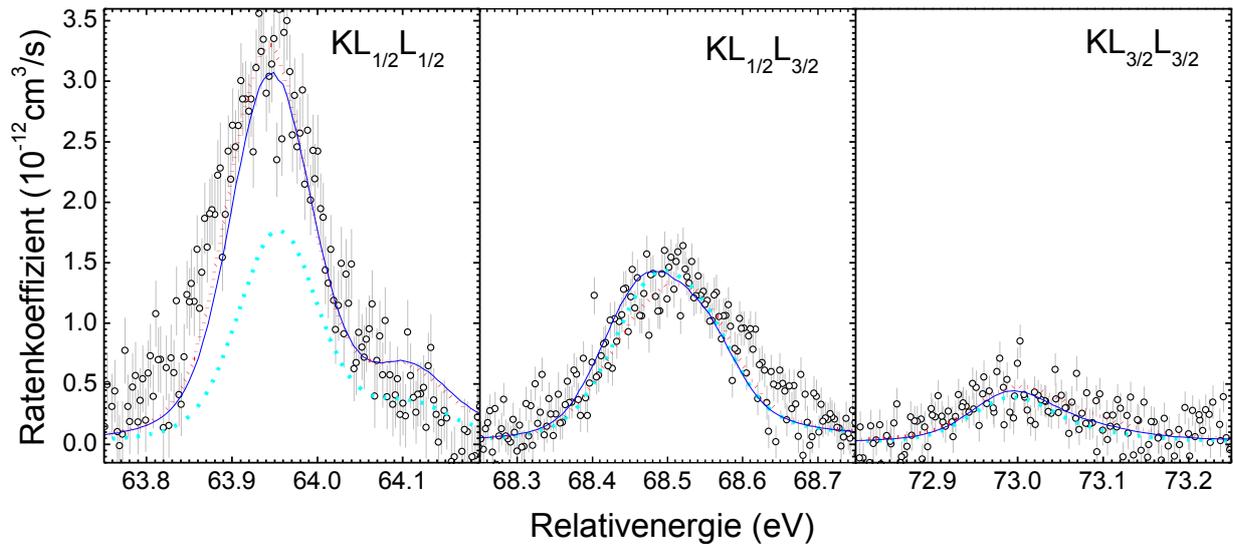


Abbildung 4.54: \circ Gemessene (nicht entfaltete) absolute U^{91+} -DR-Ratenkoeffizienten nach Untergrundabzug für die Resonanzen $KL_{1/2}L_{1/2}$, $KL_{1/2}L_{3/2}$ und $KL_{3/2}L_{3/2}$. Die Fehlerbalken der Messpunkte entsprechen den statistischen Fehlern [76]. Im Vergleich hierzu sind als Linie die mittels Multikonfiguration-Dirac-Fock-Theorie gewonnenen theoretischen Daten nach Faltung mit den experimentellen Parametern [76] (Methode [173]) angegeben. Letztere wurden einmal bei Beschränkung auf die Coulomb-Wechselwirkung (- - -) und ein anderes Mal unter Einbeziehung der (generalisierten) Breit-Wechselwirkung gewonnen (—). Gepunktet (\cdots) dargestellt ist die hiervon unabhängige Rechnung mittels QED-Störungstheorie [171], die gleichfalls mit den experimentellen Parametern gefaltet wurde. Die Schulter der $KL_{1/2}L_{1/2}$ -Resonanz bei 64.1 keV ist dabei auf die $[2s_{1/2}^2]_0$ -Resonanz zurückzuführen

4.4.1.1 Arbeiten zur KLL-DR

Für den theoretischen DR-Wirkungsquerschnitt wasserstoffartigen Wismuts (Bi^{82+}) zeigen Badnell & Pindzola einen signifikanten Anstieg der Resonanzstärke der $KL_{1/2}L_{1/2}$ -Resonanz bei Berücksichtigung der Breit Wechselwirkung [174]. Für die resonante Elektronen-Transfer-Anregung (RTE), die das Äquivalent zum dielektronischen Einfang bei initial (schwach) gebundenen Elektronen darstellt, kommt die theoretische Arbeit von Chen [175] für U^{89+} zu einem signifikanten Anstieg der DR-Resonanzstärke von 50% bei Berücksichtigung der Breit-Wechselwirkung. Experimentelle Untersuchungen zur RTE von wasserstoffartigem U^{91+} beim Stoß mit H_2 zeigen den Einfluss der Breit-Wechselwirkung auf die Bevölkerung des $KL_{1/2}L_{1/2}$ -Niveaus in winkelsensitiver Messungen der Relaxationsphotonen [63]. Hierfür liefern Zakowicz *et al.* [176] komplementäre theoretische Daten. Für heliumartiges $U^{90+} + H_2$ liegt ein RTE-Experiment von Graham *et al.* [177] vor, das ebenfalls die drei Resonanzgruppen $KL_{1/2}L_{1/2}$, $KL_{1/2}L_{3/2}$ und $KL_{3/2}L_{3/2}$ zeigt. Von Kandler *et al.* [178] wurde der RTE von U^{90+} beim Stoß mit Kohlenstoff winkelsensitiv untersucht. RTE-Untersuchungen profitieren von den – im Vergleich zu Elektronenstrahlen – höheren Elektronendichten in ungeladenen Gasen. Sie ermöglichen auch winkelsensitive Messungen, die bei überlagerten Strahlen aus apparativen Gründen nur sehr be-

Tabelle 4.11: Resonanzlagen (E_{Res}) und Resonanzstärken (S) für KLL- und KLM-DR-Resonanzen in wasserstoffartigem U^{91+} nach [76] (Methode [173]) und [172]. Die experimentellen Ergebnisse widerlegen für $KL_{1/2}L_{1/2}$ und $KL_{1/2}M_{1/2}$ die auf Coulombwechselwirkung (C) beschränkten Multikonfigurations-Dirac-Fock-Rechnungen (MCDF). Hingegen stimmen sie sehr gut mit MCDF- und störungstheoretischen Rechnungen [172] überein, bei denen zusätzlich zur Coulombwechselwirkung die Breitwechselwirkung berücksichtigt wurde (C&B). Die Resonanzstärken der schwachen $KL_{1/2}M_{5/2}$ und $KL_{3/2}M_{5/2}$ Resonanzgruppen konnten experimentell nicht verlässlich ermittelt werden. Angegebene experimentelle Fehler entsprechen der quadratischen Addition statistischer und systematischer Beiträge, wobei letztere 0.05% (E_{Res}), bzw. 13% (S) betragen. Zur Fehlernotation siehe Tab. 4.10

Resonanz	Experiment		MCDF C&B		MCDF C		QED PT
	E_{Res} (keV)	S (kb eV)	E_{Res} (keV)	S (kb eV)	E_{Res} (keV)	S (kb eV)	S (kb eV)
$KL_{1/2}L_{1/2}$	63.954(32)	58.7(7.7)	63.961	61.7	63.966	34.5	61(3)
$KL_{1/2}L_{3/2}$	68.513(38)	33.1(4.4)	68.488	35.5	68.495	34.2	32(2)
$KL_{3/2}L_{3/2}$	73.019(47)	9.1(1.8)	73.005	8.69	72.998	7.27	8.5(1.0)
$KL_{1/2}M_{1/2}$	83.284(42)	18.9(2.6)	83.284	21.4	83.288	11.9	
$KL_{1/2}M_{3/2}$	84.628(47)	8.0(1.1)	84.596	8.46	84.591	7.91	
$KL_{1/2}M_{5/2}$			84.944	1.17	84.947	0.90	
$KL_{3/2}M_{1/2}$	87.792(50)	5.6(1.7)	87.782	5.41	87.783	5.29	
$KL_{3/2}M_{3/2}$	89.162(50)	4.0(8)	89.146	4.62	89.144	3.95	
$KL_{3/2}M_{5/2}$			89.482	0.77	89.481	0.66	

schränkt möglich sind. Die Verwendung von gebundenen Elektronen an Stelle freier Elektronen führt bei RTE-Experimenten allerdings zu einer – im Vergleich mit DR-Experimenten – sehr viel schlechteren Energieauflösung.

EBIT-Experimente von Nakamura *et al.* [179] zur KLL-DR bei lithiumartigen Ionen untersuchen die Verteilung der $KL_{1/2}L_{1/2}$ -Resonanzstärke auf die Unterzustände $[2s^2 2p_{1/2}]_1$ und $[2s2p_{1/2}^2]_1$ bei Iod ($Z = 53$), Holmium ($Z = 67$) und Wismut ($Z = 83$). Dabei zeigt sich eine Zunahme des Quotienten beider Resonanzstärken von ~ 5 ($Z = 53$) über ~ 7 ($Z = 67$) bis auf ~ 14 ($Z = 83$), die mit dem zunehmendem Einfluss der Breit Wechselwirkung erklärt wird. Im Unterschied zum vorgelegten Speicherringexperiment handelt es sich bei den Messungen von Nakamura *et al.* nicht um Absolutmessungen, so dass nur relative Vergleiche der Resonanzstärken möglich sind.

4.4.2 Einfluss von DR-RR-Interferenzeffekten

Zwischen radiativer und dielektronischer Rekombination kann es zu Interferenzeffekten kommen, wenn sowohl Anfangs- als auch Endzustand identisch sind (siehe hierzu auch Abschnitt 1.3.4). Bei initial wasserstoffartigem Uran im Grundzustand $U^{91+}(1s)$ interferiert dielektronischer Einfang und anschließende radiative Stabilisierung in Zustand $U^{90+}(1s n l_j)$ mit dem radiativen Einfang in den selben Zustand. Ein Teil der theoretischen Rechnungen berücksichtigt

DR-RR-Interferenzen [65, 180], andererseits werden DR und RR auch häufig in der Näherung unabhängiger Prozesse behandelt. Abb. 4.55 zeigt den Vergleich des Wirkungsquerschnittes der L-Schalen Photorekombination von zwei unabhängigen theoretischen Arbeiten, die sich unter anderem darin unterscheiden, ob sie RR-DR-Interferenz berücksichtigen oder nicht. Wie man sieht, sind Differenzen vorhanden. Maximal ist der Unterschied beider Theorien im Fall des dielektronischen Einfangs in $U^{90+}[2s_{1/2}2p_{3/2}]_2$. Vergleicht man beide Theorien nach Faltung mit den experimentellen Strahlparametern (Abb. 4.54), so bleibt ein gewisser Unterschied erhalten. Beim Vergleich mit den experimentellen Ratenkoeffizienten scheint die Übereinstimmung unter Berücksichtigung der RR-DR-Interferenz etwas besser, allerdings sind Messunsicherheit und Energieauflösung nicht ausreichend, um eine sichere Aussage zu treffen.

Experimentelle Untersuchungen zur Interferenz zwischen KLL-DR und RR bei Messungen von hochgeladenen Uranionen an Elektronenstrahlionenfallen (EBIT) wurden von Knapp *et al.* [66] vorgelegt. Interferenzen von RR und DR zeigen sich unter anderem in den Profilen von DR-Resonanzen. Die in der Näherung unabhängiger Prozesse lorentzartigen Profile von DR-Resonanzen erhalten dabei durch die Interferenz mit der radiativen Rekombination ein Fano-Profil [181, 182]. Entsprechend weisen die von Knapp *et al.* festgestellten Fano-Profile der Wirkungsquerschnitte der $KL_{1/2}L_{3/2}$ -Resonanzen die Interferenz zwischen RR und DR nach. Ähnliche Resultate für Experimente an hochgeladene Quecksilberionen haben González Martínez *et al.* [67] zeigen können.

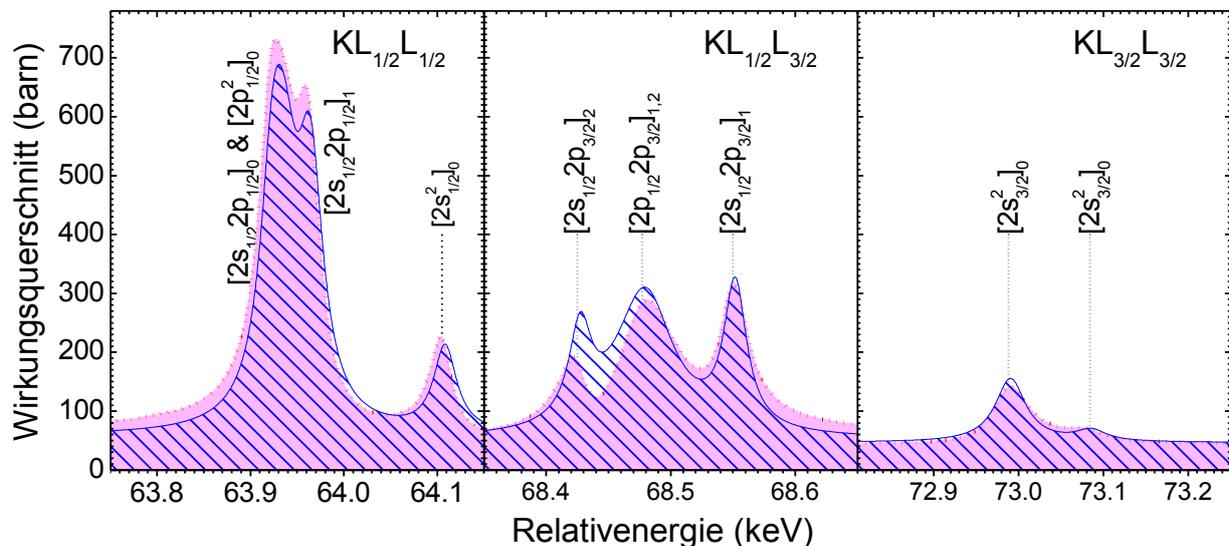


Abbildung 4.55: Wirkungsquerschnitte der L-Schalen Photorekombination; Enthalten sind: Radiative Rekombination in der L-Schale sowie $KL_{1/2}L_{1/2}$, $KL_{1/2}L_{3/2}$ und $KL_{3/2}L_{3/2}$ -DR Prozesse. Die QED-Störungstheorie-Rechnung von Andreev *et al.* [171] (magentafarbene Fläche) berücksichtigt RR-DR-Interferenz. Die blau schraffiert dargestellte Summe aus Multikonfigurations-Dirac-Fock-Rechnungen (DR) [76] und (unabhängiger) radiativer Rekombination in die L-Unterschalen gemäß Gl. 1.26 berücksichtigt diese Interferenz nicht. Die größten Unterschiede zwischen den Theorien zeigen sich beim dielektronischen Einfang in $[2s_{1/2}2p_{3/2}]_2$. (Die Linienform entspricht der natürlichen Linienbreite.)

5 Ausblick

5.1 Optimierte E1M1-Lebensdauerermessung

Mit den in Abschnitt 4.3 gewonnenen Erkenntnissen zur E1M1-Zweiphotonenlebensdauer des initial metastabilen $\text{Xe}^{50+}(2s2p\ ^3\text{P}_0)$ -Strahlanteils ist die Durchführung eines auf die Messung der E1M1-Zweiphotonenlebensdauer in hochgeladenen berylliumartigen Ionen optimierten Experimentes geplant. Da $(2s2p\ ^3\text{P}_0 \rightarrow 2s^2\ ^1\text{S}_0)$ -E1M1-Zweiphotonenübergänge in allen berylliumartigen Ionen mit verschwindendem Kernspin die dominanten Übergänge aus dem $2s2p\ ^3\text{P}_0$ -Zustand sind, ist ein solches Experiment nicht auf Xenon beschränkt und kann auch mit anderen Elementen durchgeführt werden. In einem ersten Schritt sollte dabei ein Element gewählt werden, dessen atomare Struktur und Zweiphotonenübergangsrate für das Experiment optimale Bedingungen bietet. Spätere Experimente mit Elementen anderer Kernladungszahl sind möglich und sinnvoll. Für die optimale Wahl des Experimentierelementes sind verschiedene Kriterien zu beachten, die im Folgenden erläutert werden.

5.1.1 Elementauswahl

5.1.1.1 Strahlpräparationszeit

Die kernladungsabhängige Lebensdauer des $2s2p\ ^3\text{P}_0$ -Zustandes limitiert die bei Speicherringexperimenten zugänglichen Lebensdauern in verschiedener Weise. So muss zu Beginn der Messung noch ein signifikanter Anteil von Ionen des $2s2p\ ^3\text{P}_0$ -Zustandes im Strahl vorhanden sein, um an ihm Messungen zu ermöglichen. Dies ist der Fall, wenn die zwischen der Bevölkerung des Zustandes und dem Beginn der Messung verstrichene Zeit t_A geringer oder zumindest nicht sehr viel größer ist als die Lebensdauer des zu untersuchenden Zustandes $\tau_{2\gamma}$. t_A wird hauptsächlich von der für die Strahlpräparation im Kühler benötigten Zeit bestimmt. Während der Strahlpräparation wird der Ionenstrahl von der ursprünglichen Injektionsbahn auf die für die Messung notwendige Bahn verlagert und es werden die Detektoren an ihre Position gefahren. Zudem wird der aufgeheizte Strahl gekühlt (Abs. 2.3.1). Typischerweise ist hierfür ein Mindestzeitaufwand von etwa 5 Sekunden zu veranschlagen. Im Rahmen der Erzeugung des gewünschten Ladungszustandes erlaubt die GSI-Beschleunigeranlage ein Stripping der Ionen (Abs. 2.1.1) vor und nach der finalen Beschleunigung der Ionen im Schwerionensynchrotron(SIS). Im ersteren Fall verlängert dies t_A . Für optimale Experimentbedingungen sollten Ionen mit hinreichend langer Lebensdauer des $2s2p\ ^3\text{P}_0$ -Zustands (Abb. 4.41) gewählt werden.

$$\tau_{2\gamma}(Z) \stackrel{!}{\gtrsim} 5 \text{ Sekunden} \quad (5.1)$$

Nutzt man die Lebensdauerrechnungen von Fratini *et al.* [158] (Abb. 4.41) und approximiert auf Basis der Resultate für $Z=54$ und 79 mit $\tau = a \cdot Z^b$ zu höheren Kernladungszahlen, so schränkt die entsprechende Grenze $Z \lesssim 110$ die Elementauswahl nicht signifikant ein.

5.1.1.2 Strahllebensdauer

Aufgrund der im Vergleich zu anderen Übergängen sehr viel geringeren Raten des ($2s2p \ ^3P_0 \rightarrow 2s^2 \ ^1S_0 + \gamma_{E1} + \gamma_{M1}$)-Übergangs sind direkte Messungen der Übergangspotonen wenig erfolgversprechend. Die Übergänge selbst lassen sich mit den Methoden der dielektronischen Rekombination nicht beobachten, allerdings lässt sich die mit DR-Resonanzen des metastabilen Zustands verbundene Zählrate zeitabhängig betrachten. Dies erlaubt, die Besetzung des $2s2p \ ^3P_0$ -Zustands zeitabhängig zu untersuchen. Aus der Änderung der Besetzung während der Messung kann die Zustandslebensdauer $\tau_{2\gamma}$ ermittelt werden. Umgekehrt ist für eine solche Bestimmung der Zustandslebensdauer eine Messung notwendig die sich über einen Zeitraum erstreckt, innerhalb dessen der $2s2p \ ^3P_0$ -Zustand durch Zweiphotonenübergänge nennenswert entvölkert wird. Entsprechend sollte die Lebensdauer des Ionenstrahls (τ_{Beam}) im Speicherring größer oder zumindest nicht deutlich kleiner sein als die zu messende Lebensdauer ($\tau_{2\gamma}$). Es gilt also die folgende Bedingung:

$$\tau_{2\gamma}(Z) \stackrel{!}{<} \tau_{\text{Beam}} \quad (5.2)$$

Die Strahllebensdauer im Speicherring ist dabei keine fixe Größe. Maßgeblich hängt sie von Strahlverlusten durch Wechselwirkung mit Restgas bzw. den Elektronen des Kühlers ab. Strahlverluste durch Stöße mit dem Restgas hängen von Gasdruck, Gaszusammensetzung und Ionenenergie ab. Da nicht beabsichtigt ist, Messungen bei künstlich verschlechterten Vakuumbedingungen durchzuführen, ist hierbei die Ionenenergie der primär veränderliche Parameter. Dabei nehmen Verluste durch Restgaswechselwirkung bei steigender Ionenenergie drastisch ab [168, 169]. Der ESR erlaubt, Ionen bei Energien bis zu $\sim 400 \text{ MeV/u}$ zu speichern, was die Restgasverluste minimiert. Bei höheren Energien wird die Strahllebensdauer von der Rekombination im Elektronenkühler dominiert, welche stark vom Elektronenstrom abhängen. Bei niedrigen, aber für die Kühlung ausreichenden Elektronenströmen sind Strahllebensdauern im Stundenbereich möglich [183, 184].

Die Verwendung der verlustfreien, stochastischen Kühlung (Abs. 2.3.3) anstelle der mit Rekombinationsverlusten behafteten Elektronenkühlung [76] erlaubt es, die Verluste im Elektronenkühler auf solche während der eigentlichen Rekombinationsmessung zu beschränken. Akzeptiert man hierbei niedrige, mittlere Signalaraten, so sind DR-Messungen bei sehr langen Strahllebensdauern möglich. Auf Basis der Rechnungen von Fratini *et al.* [158] zur Zustandslebensdauer (Abb. 4.41) ergibt sich hieraus die folgende Bedingung an das zu untersuchende Element:

$$\tau_{2\gamma}(Z) \stackrel{!}{<} 1 \text{ Stunde} \quad \Rightarrow \quad Z \stackrel{!}{>} 49 \quad (5.3)$$

5.1.1.3 Magnetisches Quenching

Magnetische Felder der zur Speicherung des Ionenstrahls notwendigen Dipolmagnete führen zu einer Mischung verschiedener Niveaus. Dieser Effekt wurde in Abschnitt 4.3.3.3 für die Bedingungen der ausgewerteten Xe^{50+} -Messung diskutiert und mit folgender Gleichung abgeschätzt:

$$A_q \sim A_{3P_1} \cdot \left(\frac{\mu_B B}{\Delta E_{3P_0,3P_1}} \right)^2 + A_{1P_1} \cdot \left(\frac{\mu_B B}{\Delta E_{3P_0,1P_1}} \right)^2$$

Mit den Energieaufspaltungen $\Delta E_{3P_0,3P_1} = E_{3P_1} - E_{3P_0}$ und $\Delta E_{3P_0,1P_1} = E_{1P_1} - E_{3P_0}$, dem Bohrschen Magneton μ_B , einer magnetischen Flussdichte $B = v/(q\rho)$, dem Ladungszustand $q = Z - 4$, dem Ablenkradius der ESR Dipolmagnete $\rho = 6.25$ m, dem Impuls $p = Au\gamma_i\beta_i/c$, der Ionenmasse Au sowie mit dem Anteil der Dipolmagneten am Ringumfang von 36% ergibt sich:

$$\tau_q(Z, \gamma_i) = \frac{1}{A_q} = \frac{(Z-4)^2 \cdot \rho^2 \cdot c^2}{0.36 \cdot \mu_B^2 A^2 u^2 (\gamma^2 - 1) \left(A_{3P_1}(Z) \cdot [\Delta E_{3P_0,3P_1}(Z)]^{-2} + A_{1P_1}(Z) \cdot [\Delta E_{3P_0,1P_1}(Z)]^{-2} \right)} \quad (5.4)$$

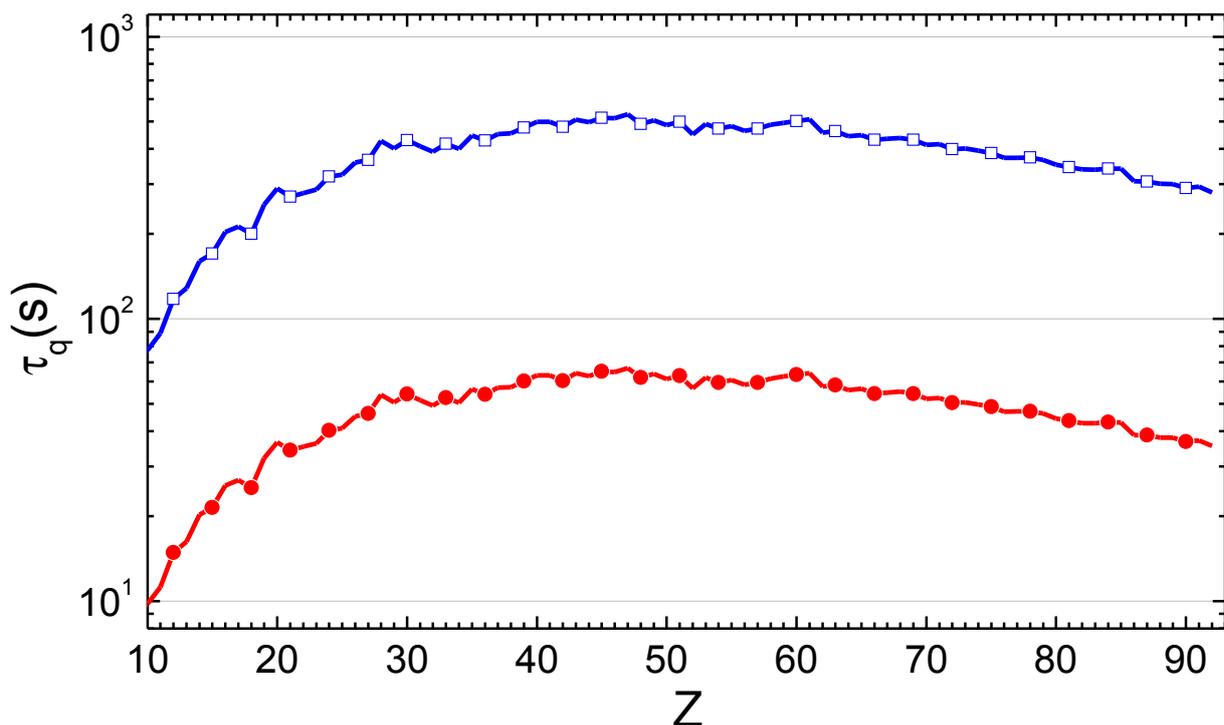


Abbildung 5.1: Abschätzung der Lebensdauer τ_q des $2s2p\ ^3P_0$ -Zustandes bezüglich des durch magnetisches Quenching ermöglichten ($2s2p\ ^3P_0 \rightarrow 2s^2\ ^1S_0$)-Einphotonenübergangs, gemäß Gleichung 5.4. Die Lebensdauer ist zum einen für die während des Xe^{50+} Experiment genutzter Ionenenergie ($-\square-$ $E \sim 60$ MeV/u) und zum anderen für die bei stochastischer Kühlung nötiger Ionenenergie ($- \bullet -$ $E \sim 400$ MeV/u) angegeben.

Setzt man für A die Massenzahl des häufigsten Isotops ein, so erhält man mit den tabellierten, kernladungsabhängigen Werten für A_{3P_1} , A_{1P_1} , E_{3P_0} , E_{3P_1} und E_{1P_1} [43] die Lebensdauer des $2s2p\ ^3P_0$ -Zustandes hinsichtlich Quenching in Abhängigkeit von Kernladung Z und relativistischem Gammafaktor γ_i . Abbildung 5.1 zeigt die so erhaltene Abschätzung der Lebensdauer τ_q für die Ionenenergie pro Nukleon des Xe^{50+} -Experiments ($E \sim 60\ \text{MeV/u}$) und den für stochastische Kühlung (Abs.2.3.3) nötigen Wert ($E \sim 400\ \text{MeV/u}$). Für Lebensdauerermessungen sollte τ_q signifikant größer sein als die zu untersuchende Lebensdauer $\tau_{2\gamma}$.

$$\tau_{2\gamma} \stackrel{!}{\ll} \tau_q \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} \tau_{2\gamma} &\stackrel{!}{\ll} 300\ \text{s} \quad \text{bei } 60\ \text{MeV/u} \\ \tau_{2\gamma} &\stackrel{!}{\ll} 40\ \text{s} \quad \text{bei } 400\ \text{MeV/u (stochast. Kühlung)} \end{aligned}$$

Auf Basis der Rechnungen von Fratini *et al.* [158] zur Zustandslebensdauer (Abb. 4.41) und ihrer Approximation zu hohen Kernladungszahlen (Abs. 5.1.1.1) ergibt sich mit $\tau_{2\gamma}(Z = 80) \sim 60\ \text{s} \ll 300\ \text{s}$ und $\tau_{2\gamma}(Z = 104) \sim 8\ \text{s} \ll 40\ \text{s}$ die folgende Bedingung:

$$\begin{aligned} Z &\stackrel{!}{>} 80 \quad \text{bei } 60\ \text{MeV/u} \\ Z &\stackrel{!}{>} 104 \quad \text{bei } 400\ \text{MeV/u (stochastische Kühlung)} \end{aligned}$$

Wie man sieht, sollte aufgrund des magnetischen Quenchings auf die Nutzung der stochastischen Kühlung verzichtet werden.

5.1.1.4 Verschwindender Kernspin

Für berylliumartige Ionen mit Kernspin $I \neq 0$ stellen hyperfeininduzierte Einphotonenübergänge den dominanten Verlustkanal des $2s2p\ ^3P_0$ -Zustandes dar. Kerne mit gerader Neutronen- und Protonenzahl haben (im nuklearen Grundzustand) weder Kernspin [41] noch hyperfeininduzierte Übergänge und sind demzufolge für die Untersuchung von E1M1-Zweiphotonenübergänge geeignet. In Abb. 5.2 sind gg-Kerne schwarz ($\square, \square, \blacksquare, \blacksquare$) und nicht-gg-Kerne grau \blacksquare dargestellt. Es sei angemerkt, dass gg-Kerne die den größten Teil der stabilen Nuklide stellen (Abb. 5.2).

$$Z \stackrel{!}{\equiv} \text{gerade} \quad N \stackrel{!}{\equiv} \text{gerade} \quad (5.5)$$

5.1.1.5 Elementhäufigkeit

Zur Durchführung erster Experimente sollte ein stabiles oder zumindest extrem langlebiges Isotop gewählt werden, das in der natürlichen Isotopenverteilung nicht zu selten ist. Letztere Forderung berücksichtigt, dass der Anteil des Isotops am von der Ionenquelle zur Verfügung gestellten Ionenstrom dem Anteil des Isotops in der Ionenquelle entspricht, die ihrerseits ohne künstliche Anreicherung in der Regel der natürlichen Isotopenhäufigkeit nahe kommt. Häufige Nuklide, mit einem Anteil von mehr als 5% an der natürlichen Isotopenverteilung, sind in Abbildung 5.2 groß (\square, \blacksquare) hervorgehoben.

$$A(N) \stackrel{!}{\gtrsim} 5\% \quad (5.6)$$

5.1.1.6 $2s2p\ ^3P_0 \rightarrow 2s^2\ ^1S_0$ -Übergangsrate

Experimente am ESR der GSI bieten die Möglichkeit, auch Elemente mit relativ langlebigem $2s2p\ ^3P_0$ -Zustand zu studieren. Allerdings ist der Einfluss der Übergangsraten anderer Ent- und Bevölkerungsprozesse – sowie der damit verbundenen Fehler – auf den relativen Fehler der aus

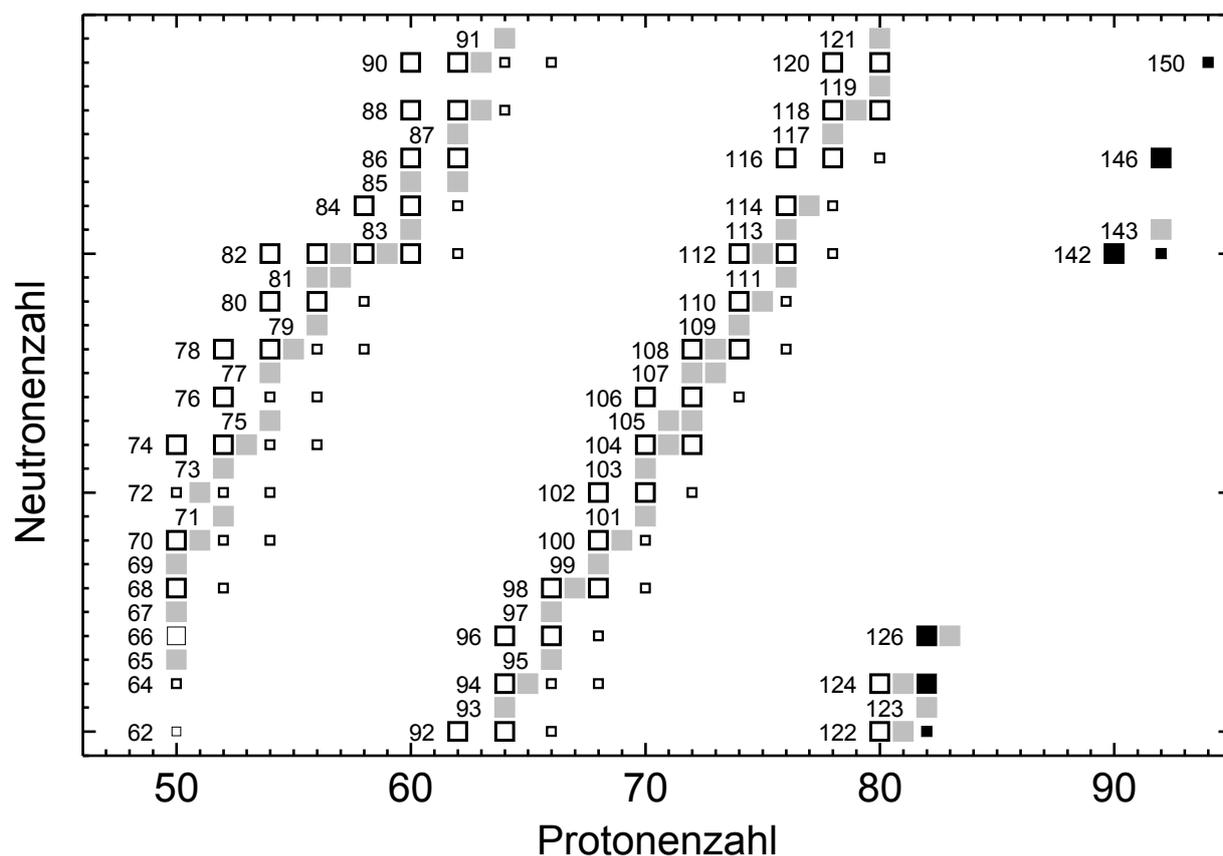


Abbildung 5.2: Nuklidkarte mit Ordnung nach Eignung für die Untersuchung von E1M1-Zweiphotonenübergängen im ersten angeregten Zustand ($2s2p\ ^3P_0$) berylliumartiger Ionen. Die Darstellung beschränkt sich auf stabile oder zumindestens äußerst langlebige ($\tau_{\text{Kern}} > 5 \cdot 10^7$ Jahre) Nuklide, deren Kernladung die Lebensdauer des $2s2p\ ^3P_0 \rightarrow 2s^2\ ^1S_0$ -Übergangs gemäß Gleichung 5.3 auf weniger als eine Stunde begrenzt.

■: Nuklide mit ug-, uu- oder gg-Kernen, deren Kernspin $I \neq 0$ hyperfeininduzierte Übergänge zum dominanten Abregungskanal des $2s2p\ ^3P_0$ -Zustandes macht. Diese Nuklide sind gegenüber gg-Kernen aufgrund ihrer tendenziell niedrigeren Bindungsenergie in der Minderheit.

□, □: gg-Nuklide bei denen die Lebensdauer des $2s2p\ ^3P_0$ -Zustandes gegenüber der Abschätzung der Lebensdauer des magnetischen Quenchings bei $60\ \text{MeV/u}$ nicht hinreichend klein ist ($\tau_{2\gamma} \ll \tau_q \Leftrightarrow Z \leq 80$).

□, ■: gg-Nuklide mit geringer Isotopenhäufigkeit ($< 5\%$)

■: gg-Nuklide, die für die Untersuchung von E1M1-Übergängen mittels DR hinsichtlich erwarteter Lebensdauer $\tau_{2\gamma}$ und natürlicher Isotopenverteilung am besten geeignet erscheinen

der Messung zu extrahierenden Zweiphotonenübergangsrate umso kleiner, je höher die zu bestimmende Rate ist. Somit empfiehlt es sich – zur Verringerung systematischer Fehler – die Untersuchungen an Elementen zu beginnen, welche über eine möglichst hohe Zweiphotonenübergangsrate verfügen. Hierfür bieten sich unter Berücksichtigung der anderen Auswahlkriterien (Abb. 5.2) ^{232}Th und ^{238}U an.

5.1.1.7 Resonanzserie

Im geplanten Experiment sollten DR-Resonanzen des initial metastabilen $2s2p\ ^3\text{P}_0$ -Zustand benutzt werden, um – über die mit ihnen verbundene Zählrate – den zeitabhängigen Abfall des $2s2p\ ^3\text{P}_0$ -Strahlanteils zu messen. Die Wahl einer entsprechenden Resonanzposition dient hierbei dazu, den Anteil des metastabilen Zustands an der Rekombinationszählrate gegenüber dem verhältnismäßig kleinen Anteil dieses Zustands am Ionenstrom zu vergrößern und so bessere Messbedingungen zu schaffen. Je stärker die gewählte Resonanz, bezogen auf den Grundzustandsuntergrund ist, desto besser das Signal-zu-Untergrund-Verhältnis. Weiterhin bietet die Wahl einer starken Resonanz die Möglichkeit hoher Signalraten und somit kleiner statistischer

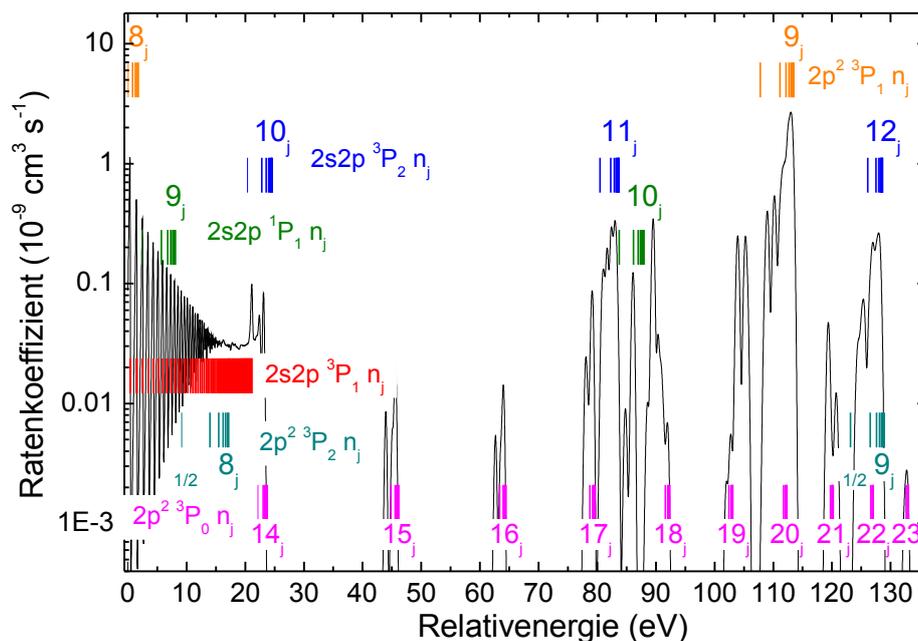


Abbildung 5.3: Mit dem Programmpaket Autostructure [185] berechnetes DR-Ratenkoeffizientenspektrum für den initialen $\text{Xe}^{50+}(2s2p\ ^3\text{P}_0)$ -Zustand (—). Wie man sieht, unterscheiden sich die Resonanzstärken der einzelnen Rydbergresonanzserien $(2s2p\ ^3\text{P}_1)n$, $(2s2p\ ^3\text{P}_2)n$, $(2s2p\ ^1\text{P}_1)n$, $(2p^2\ ^3\text{P}_0)n$, $(2p^2\ ^3\text{P}_1)n$ und $(2p^2\ ^3\text{P}_2)n$ beträchtlich. Mit Abstand am stärksten ist die $2s2p\ ^3\text{P}_0 + e^- \rightarrow (2p^2\ ^3\text{P}_1)n_j$ -Resonanzserie. Die $8l_j$ Resonanzgruppe dieser Serie wurde im Rahmen dieser Arbeit gemessen, ist aber in diesem Spektrum aufgrund der Unterschätzung der $(2s2p\ ^3\text{P}_0 \rightarrow 2p^2\ ^3\text{P}_1)$ -Anregungsenergie nicht enthalten. (Resonanzpositionen (l) aus Anregungsenergien [34] und Diracbindungsenergien (Gl. 1.4))

Fehler. Ist zur Minimierung der Rekombinationsverluste des $2s2p^3P_0$ -Strahlanteils eine hohe Rekombinationszählrate nicht erwünscht, so ist es sinnvoller, die Raten durch Reduktion des Elektronenstromes zu begrenzen, statt auf eine schwächere Resonanz auszuweichen, da in letzterem Fall nur der $2s2p^3P_0$ -DR-Anteil der Zählrate, nicht aber der Grundzustandsanteil reduziert würde.

Für den initialen $2s2p^3P_0$ -Zustand ergeben sich sechs durch Anregung eines Elektrons erreichbare $\Delta n = 0$ -DR-Resonanzserien $(2s_{1/2}2p_{1/2}^3P_1)n$, $(2s_{1/2}2p_{3/2}^3P_2)n$, $(2s_{1/2}2p_{3/2}^1P_1)n$, $(2p_{1/2}^2^3P_0)n$, $(2p_{1/2}2p_{3/2}^3P_1)n$ und $(2p_{1/2}2p_{3/2}^3P_2)n$ während Anregungen in $2p_{3/2}^2^1D_2$ bzw. 1S_0 die Anregung der Konfiguration zweier Elektronen erfordern und entsprechend unwahrscheinlicher sind.

Für Energien oberhalb der $(2s2p^3P_0 \rightarrow 2s2p^3P_1)$ -Anregungsenergie eröffnen sich für die durch den DE entstehenden, mehrfach angeregten Zwischenzustände neue Autoionisationskanäle. Dies reduziert den Anteil der radiativen Stabilisierung und somit auch die Resonanzstärke. Die $(2s2p^3P_0 \rightarrow 2s2p^3P_1)$ -Anregungsenergie beträgt für Xenon, Gold und Uran ($Z = 54, 79$ und 92) etwa $23, 36$ bzw. 40 eV [34]. Allerdings ist dieser Effekt primär für leichtere Kerne mit niedriger Fluoreszenzausbeute ($A_\gamma \ll A_{a_i}$) relevant, während er für schwere Kerne mit $A_{a_i} \ll A_\gamma$ sehr gering ist. Abb. 5.3 zeigt ein mit dem Programmpaket Autostructure [185] berechnetes DR-Spektrum für den initial metastabilen $2s2p^3P_0$ -Zustand. Dabei fällt auf, dass die verschiedenen Resonanzserien sich deutlich in den typischen Ratenkoeffizienten unterscheiden. Die $(2p^2^3P_1)n$ -Resonanzserie, zu der auch die beobachteten $Xe^{50+}(2s2p^3P_0)+e^- \rightarrow Xe^{49+}(2p^2^3P_1)8_j$ -Resonanzgruppe gehört, ist hierbei die mit deutlichem Abstand stärkste Resonanzserie. Die zweitstärkste Serie gehört zur Anregung in den $2s2p^3P_2$ -Zustand. Der Unterschied zwischen den Resonanzstärken der einzelnen Serien ist deutlich größer als der Effekt der $1/E$ -Abhängigkeit des DR-Wirkungsquerschnittes (Gl. 1.31). Es sei angemerkt, dass sich die Serien bei sehr viel höher geladenen Ionen nicht identisch verhalten müssen. Abb. 5.4 zeigt die erwarteten Positionen der beiden stärksten $2s2p^3P_0 + e^- \rightarrow (2p^2^3P_1)n_j$ bzw. $(2s2p^3P_2)n_j$ -Resonanzserien gemäß Anregungsenergien [34] und Diracbindungsenergien (Gl. 1.4) für die Elemente Blei ($Z = 82$), Thorium ($Z = 90$) und Uran ($Z = 92$).

Gleichzeitig sollte sich an der energetischen Position dieser Resonanz keine Grundzustandsresonanz befinden, da der gewünschte Effekt des höheren $2s2p^3P_0$ -Anteils an der Zählrate von dieser verringert oder gar ins Gegenteil verkehrt werden könnte. Auch diese sind in Dirac-Näherung in Abb. 5.4 eingezeichnet. Hierbei ist zwingend das Aufeinandertreffen mit einer der sehr starken $2s^2^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p^1P_1)n_j$ -Resonanzen zu vermeiden, da dies – wie schon für Xe^{50} gezeigt (Abb. 4.44) – die Resonanzen des initial metastabilen $2s2p^3P_0$ -Zustands komplett unsichtbar macht. Die Grundzustandsresonanzen der $2s^2^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p^3P_1)n_j$ und $(2s2p^3P_2)n_j$ -Serie sind hingegen deutlich schwächer. Es empfiehlt sich aber auch diese zu vermeiden. Die Resonanzen der $2s^2^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p^3P_0)n_j$ -Serie konnten im Xe^{50+} Spektrum nicht nachgewiesen werden. Doch führen diese Resonanzen – im Gegensatz zu denen anderen Serien – zu einer zusätzlichen Bevölkering des zu untersuchenden $2s2p^3P_0$ -Zustands und somit zu einem systematischen Fehler der zu messenden Lebensdauer, den vermieden werden sollte. Ebenfalls sollte vermieden werden, dass außerhalb der Driftröhre Relativenergien herrschen, die einer starken Grundzustandsresonanz entsprechen, da diese sonst im gesamten Messbereich für

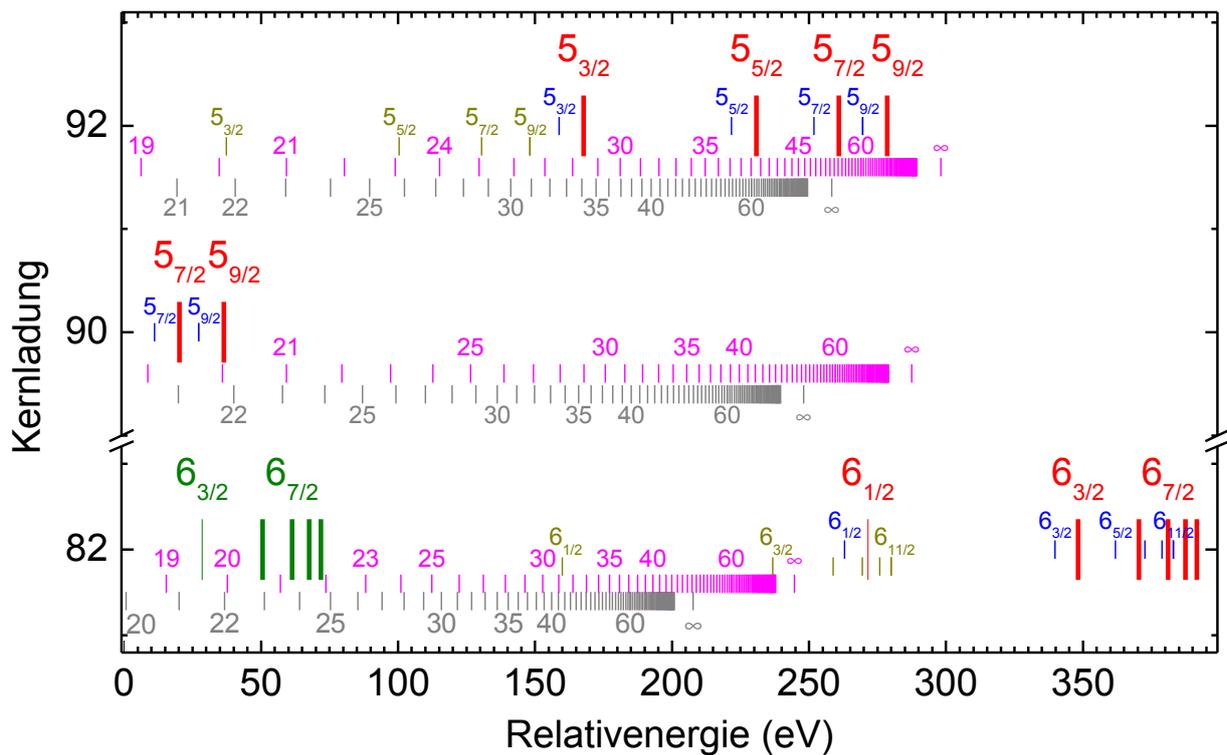


Abbildung 5.4: Erwartete Resonanzpositionen der $2s2p\ ^3P_0 + e^- \rightarrow (2p^2\ ^3P_1)n_j$ bzw. $(2s2p\ ^3P_2)n_j-$ -Resonanzserien aus Anregungs- [34] und Dirac-Bindungsenergien (Gl. 1.4) für Blei ($Z=82$), Thorium ($Z=90$) und Uran ($Z=92$) sind als große Symbole angegeben (| bzw. |). Als kleine Symbole (l, l, l bzw. l) dargestellt sind die erwarteten Resonanzpositionen der $2s\ ^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p\ ^1P_1)n_j-$, $(2s2p\ ^3P_2)n_j-$, $(2s2p\ ^3P_1)n_j-$ bzw. $(2s2p\ ^3P_0)n_j-$ -Grundzustands-Resonanzserien (in absteigender Reihenfolge). Diese sind ebenfalls aus [34, 43] und Dirac-Bindungsenergien genähert.

einen höheren Grundzustandsuntergrund sorgen. Im normalen Messmodus heißt dies, dass die Abwesenheit von Grundzustandsresonanzen bei Energien nahe Null vorteilhaft wäre. Im erweiterten Messmodus 2.4.1.2 lässt sich die Stoßenergie außerhalb der Driftröhre ändern. Wählt man hier einen Bereich ohne Grundzustandsresonanzen, so reduziert dies den Grundzustandsuntergrund. Es sei angemerkt, dass die verwendete Näherung die Resonanzlage für niedrige Haupt- und Gesamtdrehimpulsquantenzahlen j des Rydbergelektrons deutlich überschätzt. In diesem Fall sind die wahren Resonanzpositionen bei niedrigeren Energien zu finden. Für die $Xe^{49+}(\dots)8_{1/2}$ -Resonanzen lag diese Abweichung in der Größenordnung der halben berechneten $8_{1/2}$ -Feinstrukturaufspaltung.

Wie man sieht, liegt die $2s2p\ ^3P_0 + e^- \rightarrow (2p^2\ ^3P_1)5_{9/2}$ Resonanz etwa 10 eV oberhalb der störenden starken $2s^2\ ^1S_0 + e^- \rightarrow (2s2p\ ^1P_1)5_j-$ Resonanzgruppe. Allerdings ist die j -Aufspaltung beider Resonanzgruppen so groß, dass sich auch zwischen einzelnen Grundzustandsresonanzen ein hinreichend großer, resonanzfreier Energiebereich finden sollte.

Es erscheint sinnvoll, bei der Wahl von Uran eine Unterresonanz der $U^{88+}(2s2p\ ^3P_0) +$

$e^- \rightarrow U^{87+}(2p^2 \ ^3P_1)5_{3/2}$ -Resonanz zu wählen, die nicht von anderen Gruppen gestört ist oder aber auf die $5_{9/2}$ auszuweichen, die 'nur' vom $(2s2p \ ^3P_1)n$ -Plateau hoher Hauptquantenzahlen gestört wird. Bei der Wahl von Thorium empfiehlt es sich eine $Th^{86+}(2s2p \ ^3P_0) + e^- \rightarrow Th^{85+}((2p^2 \ ^3P_1)5_{17/2})_J$ - bzw. $5_{19/2})_J$ -Resonanz zu nutzen, die weder mit der $(2s2p \ ^3P_2)20$ - noch mit der $(2s2p \ ^3P_0)21$ -Resonanz zusammenfällt. Es erscheint sinnvoll, die letztliche Entscheidung nach Aufnahme eines groben Übersichtsspektrums des gewählten Elementes zu treffen, da dies die verbleibenden Unsicherheiten hinsichtlich einzelner Resonanzlagen und ihrer Stärken klären kann.

5.1.2 Experimentdurchführung

Ein DR-Experiment zur Bestimmung der E1M1-Zweiphotonenübergangsrate am Experimentierspeicherring kann auf verschiedene Arten durchgeführt werden. Allen ist gemeinsam, dass die zeitliche Entwicklung des Ionenstroms anhand der Zählrate ermittelt wird, wobei das Signal des metastabilen Zustandes durch Wahl einer zugeordneten DR-Resonanzposition als Relativenergie verstärkt wird.

Eine Möglichkeit der Experimentauslegung stellt die Optimierung auf möglichst hohe Signalaraten und damit möglichst geringe statistische Fehler dar. Zu diesem Ziel ist ein verhältnismäßig hoher Elektronenstrom zu wählen, der zu hohen Rekombinationszählraten und demzufolge kleinen statistischen Fehlern der Bestimmung der Lebensdauer des im $2s2p \ ^3P_0$ -Zustand befindlichen Strahlanteils führen würde. Der Nachteil dieser Methode besteht darin, dass zu hohe Rekombinationszählraten die Ionenstrahllebensdauer reduzieren und somit die gemessene Lebensdauer nicht der ungestörten Lebensdauer des Zustandes bezüglich E1M1-Übergang entspricht. Bei bisherigen Experimenten zur Bestimmung von hyperfeininduzierten Lebensdauern [11, 159] mittels DR konnte der Unterschied zwischen 'kurzlebigen' $^{47}Ti^{18+}(2s2p \ ^3P_0)$ und äußerst langlebigen $^{48}Ti^{18+}(2s2p \ ^3P_0)$ genutzt werden. Hierbei wurden die bei zwei separaten Messungen ermittelten Lebensdauern des nahezu stabilen $^{48}Ti^{18+}(2s2p \ ^3P_0)$ -Strahls (ohne Hyperfeinübergänge) und $^{47}Ti^{18+}(2s2p \ ^3P_0)$ -Strahls (mit Hyperfeinübergängen) verglichen (Abb. 4.42). Somit konnten die hyperfeininduzierten Übergänge im Experiment sozusagen an- und ausgeschaltet werden. Die Differenz beider Lebensdauern werden bei ansonsten identischen Experimentbedingung durch die hyperfeininduzierte Übergangsrate verursacht, die aus beiden Werten extrahiert werden kann. Dieses Verfahren ist für eine angestrebte Messung von E1M1-Zweiphotonenübergängen nicht durchführbar, da die Zweiphotonenübergangsrate nicht 'abgeschaltet' werden kann und somit keine Messungen möglich sind, die sich (nur) darin unterscheiden, ob Zweiphotonenübergänge möglich sind oder nicht. Die Berechnung der Rekombinationsverluste aus experimentellen Ratenkoeffizienten ist möglich, sofern sich die Spektren der Strahlanteile separieren lassen. Die Berechnung aus theoretischen Wirkungsquerschnitten ist ebenfalls möglich. Das entsprechende Resultat ist aber bei Existenz von DR-Resonanzen nahe Null außerordentlich sensitiv gegenüber kleinen Unsicherheiten der Resonanzlagen.

Eine andere Möglichkeit stellt die Optimierung auf möglichst ungestörte Zweiphotonenübergänge dar. Falls die Summe aller anderen Be- und Entvölkerungsprozesse gegenüber dem Zweiphotonenübergang vernachlässigbar klein ist ($\sum A_i \ll A_{2\gamma}$), entspricht die gemessene Lebens-

dauer des $2s2p\ ^3P_0$ -Strahlanteils nahezu der E1M1-Zweiphotonenübergangslbensdauer.

$$\frac{1}{\tau_{\text{ges}}} = A_{\text{ges}} = A_{2\gamma} + \sum_i A_i \approx A_{2\gamma} = \frac{1}{\tau_{2\gamma}} \quad (5.7)$$

Um dies zu erreichen, müssen die Verlustprozesse hinreichend reduziert werden. Die Restgasverluste lassen sich durch Erhöhung der Ionenenergie drastisch reduzieren*, was allerdings die Entvölkerung durch magnetisches Quenching erhöht. Verluste durch magnetisches Quenching lassen sich durch Reduktion der Stärke der Dipolmagnetfelder minimieren, was niedrigere Ionenenergien erfordert, die wiederum die Restgasverluste erhöhen. Rekombinationsverluste durch Wechselwirkung mit den Elektronen des Kühlers können durch Verringerung des Elektronenstromes reduziert werden. Allerdings reduziert dies die Signalrate proportional und verschlechtert – bei zu starker Verringerung – Strahlkühlung und Energieauflösung. Die Nutzung der stochastischen Kühlung erlaubt ebenfalls eine drastische Reduktion der Rekombinationsverluste bei Kühlung, erfordert aber hohe Ionenenergien und demzufolge starke Magnetfelder, die wiederum zu einer drastischen Erhöhung der Verluste durch magnetisches Quenching führen.

Zur Kontrolle der verschiedenen Einflussfaktoren empfiehlt es sich, Messungen mehrmals mit unterschiedlichen, experimentellen Bedingungen durchzuführen. Dies erlaubt die verschiedenen Einflüsse zu untersuchen und ein Optimum zu finden, bei dem die Summe der störenden Einflüsse anderer Entvölkerungsraten minimal ist.

5.2 U^{91+} -KLL-DR bei verbesserter Kühlung

Seit der Durchführung des Experimentes zur dielektronischen Rekombination von wasserstoffartigem Uran konnten die apparativen Bedingungen zur Durchführung des Experimentes optimiert werden. Dies erlaubt eine verbesserte Nutzung der stochastischen Kühlung. Statt der beim Experiment gegebenen Impulsverteilungsbreiten von $\Delta p/p = 7.5 \cdot 10^{-4}$ [76] könnten mit dieser Optimierung Messungen bei Breiten von $\Delta p/p = 2 \cdot 10^{-4}$ durchgeführt werden, wie sie bei anderen Messungen [186] schon erreicht wurden. Dies erlaubt eine Untersuchung der $KL_{1/2}L_{3/2}$ -DR-Resonanz auf Unterschiede zwischen Multikonfigurations-Dirac-Fock [76] und QED-Störungstheorie-Rechnungen [171]. Abb. 5.5 zeigt die theoretischen Wirkungsquerschnitte und ihre Faltungen mit Impulsverteilungsbreiten von 2.5 bzw. $7.5 \cdot 10^{-4}$. Wie man sieht, erlaubt die geringere Impulsbreite eine bessere Unterscheidung zwischen beiden theoretischen Ansätzen. Zusätzlich ist zu erwarten, dass sich die $[2s_{1/2}\ 2p_{3/2}]_{J=1}$ -Resonanz separat von den anderen Resonanzen der $KL_{1/2}L_{3/2}$ -Resonanzgruppe auflösen lässt.

*Auch eine Reduktion des Restgasdrucks reduziert die Restgasverluste, doch werden die Experimente in der Regel mit den bestmöglichen Vakuumbedingungen durchgeführt, so dass hier bei akzeptablem, apparativem Aufwand kein sonderlich hohes Optimierungspotential verbleibt.

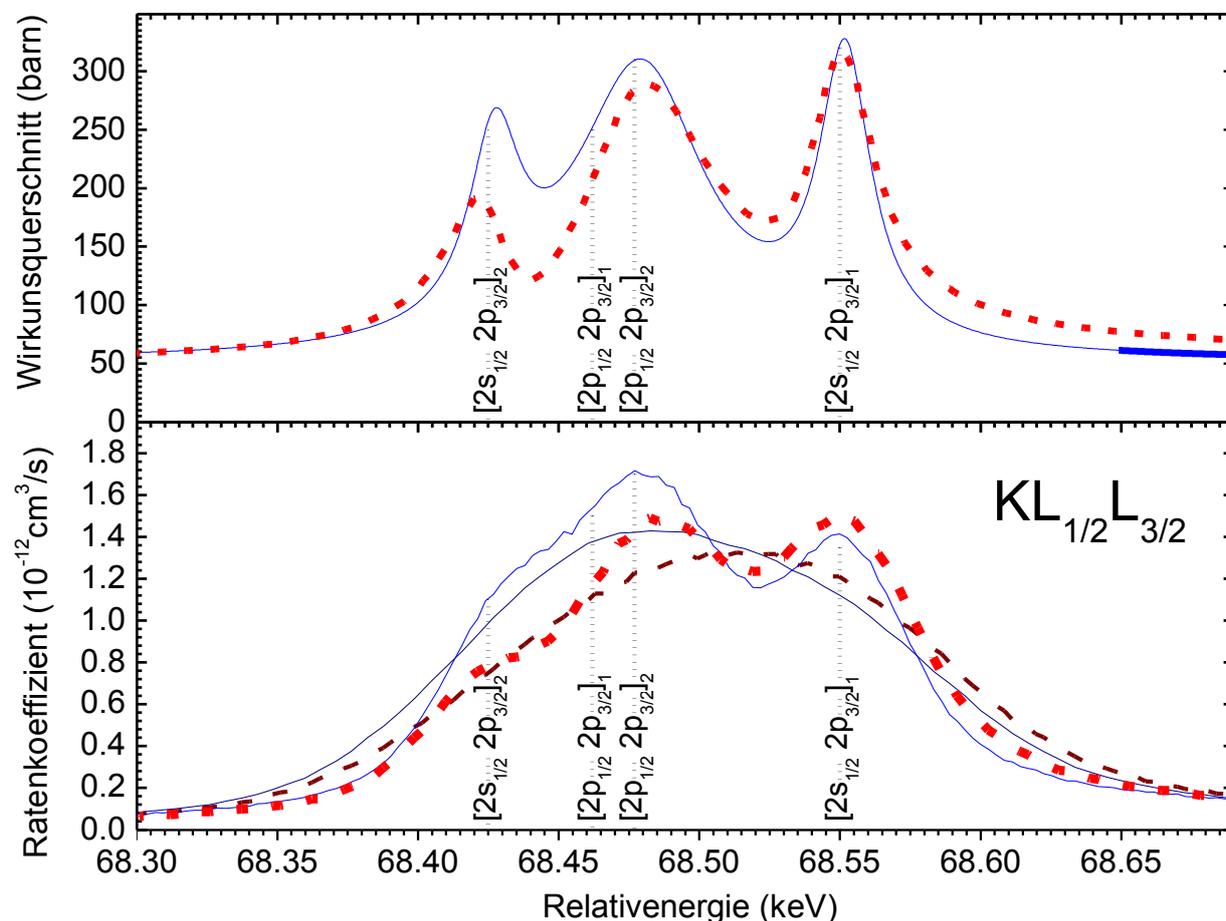


Abbildung 5.5: Oben dargestellt ist der U^{91+} - $KL_{1/2}L_{3/2}$ -DR Wirkungsquerschnitte in QED-Störungstheorie (---) [171] und Multikonfigurations-Dirac-Fock-Theorie [76] (—).

Weiterhin dargestellt ist der Ratenkoeffizienten als Faltung (Abs. 3.3.4) des Wirkungsquerschnitts mit verschiedenen Geschwindigkeitsverteilungen. Als dünne Linie sind die Faltungen dargestellt, die jene Impulsbreite $\Delta p/p = 7.5 \cdot 10^{-4}$ verwenden, die bei der U^{91+} -DR-Messung erreicht wurde [76]. Als dicke Linie sind jene Faltungen gegeben, für die eine (geringere) Impulsbreite $\Delta p/p = 3 \cdot 10^{-4}$ angenommen wurde, welche bei einer Xe^{53+} -DR-Messung schon erreicht werden [186] konnte. Wie man sieht, sind die Unterschiede beider Theorien bei verbesserter Energieauflösung deutlicher erkennbar.

Literaturverzeichnis

- [1] D. Feili, P. Bosselmann, K.-H. Schartner, F. Folkmann, A. E. Livingston, E. Träbert, X. Ma und P. H. Mokler: Measurements of $2s\ ^2S_{1/2} - 2p\ ^2P_{1/2}$ transition energies in lithiumlike heavy ions. III. Experimental results for Sn^{47+} and Xe^{51+} . *Phys. Rev. A* **62**, 022501, 2000.
- [2] E. Träbert, P. Beiersdorfer, J. K. Lepson und H. Chen: Extreme ultraviolet spectra of highly charged Xe ions. *Phys. Rev. A* **68**, 042501, 2003.
- [3] C. Laughlin: Radiative decay of the $2^3P^o_0$ level of beryllium-like ions. *Phys. Lett. A* **75**, 199–200, 1980.
- [4] Aristotle: *On the Generation and Corruption*. eBooks@Adelaide, Adelaide, 2007.
- [5] A. L. Peratt: Electric space: Evolution of the plasma universe. *Astrophysics and Space Science* **244**, 89–103, 1996.
- [6] N. Jarosik, C. L. Bennett, J. Dunkley, B. Gold, M. R. Greason, M. Halpern, R. S. Hill, G. Hinshaw, A. Kogut, E. Komatsu, D. Larson, M. Limon, S. S. Meyer, M. R. Nolte, N. Odegard, L. Page, K. M. Smith, D. N. Spergel, G. S. Tucker, J. L. Weiland, E. Wollack und E. L. Wright: Seven-year Wilkinson Microwave Anisotropy Probe (WMAP) Observations: Sky Maps, Systematic Errors, and Basic Results. *The Astrophysical Journal Supplement Series* **192**, 14, 2011.
- [7] E. W. Schmidt, S. Schippers, A. Müller, M. Lestinsky, F. Sprenger, M. Grieser, R. Repnow, A. Wolf, C. Brandau, D. Lukić, M. Schnell und D. W. Savin: Electron-ion recombination measurements motivated by AGN X-ray absorption features: Fe XIV forming Fe XIII. *Astrophys. J.* **641**, L157–L160, 2006.
- [8] S. Schippers, D. Bernhardt, A. Müller, C. Krantz, M. Grieser, R. Repnow, A. Wolf, M. Lestinsky, M. Hahn, O. Novotný und D. W. Savin: Dielectronic recombination of xenonlike tungsten ions. *Phys. Rev. A* **83**, 012711, 2011.
- [9] C. Brandau, C. Kozhuharov, Z. Harman, A. Müller, S. Schippers, Y. S. Kozhedub, D. Bernhardt, S. Böhm, J. Jacobi, E. W. Schmidt, P. H. Mokler, F. Bosch, H.-J. Kluge, T. Stöhlker, K. Beckert, P. Beller, F. Nolden, M. Steck, A. Gumberidze, R. Reuschl, U. Spillmann, F. Currell, I. I. Tupitsyn, V. M. Shabaev, U. D. Jentschura, C. H. Keitel, A. Wolf und Z. Stachura: Isotope shift in the dielectronic recombination of three-electron $^A\text{Nd}^{57+}$. *Phys. Rev. Lett.* **100**, 073201, 2008.

- [10] C. Brandau, C. Kozhuharov, A. Müller, W. Shi, S. Schippers, T. Bartsch, S. Böhm, C. Böhme, A. Hoffknecht, H. Knopp, N. Grün, W. Scheid, T. Steih, F. Bosch, B. Franzke, P. H. Mokler, F. Nolden, M. Steck, T. Stöhlker und Z. Stachura: Precise determination of the $2s_{1/2} - 2p_{1/2}$ splitting in very heavy lithiumlike ions utilizing dielectronic recombination. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 073202, 2003.
- [11] S. Schippers, E. W. Schmidt, D. Bernhardt, D. Yu, A. Müller, M. Lestinsky, D. A. Orlov, M. Grieser, R. Repnow und A. Wolf: Storage-ring measurement of the hyperfine induced $^{47}\text{Ti}^{18+}(2s2p\ ^3P_0 \rightarrow 2s^2\ ^1S_0)$ transition rate. *Phys. Rev. Lett.* **98**, 033001, 2007.
- [12] H. Katori, M. Takamoto, V. G. Pal'chikov und V. D. Ovsiannikov: Ultrastable optical clock with neutral atoms in an engineered light shift trap. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 173005, 2003.
- [13] M. Takamoto und H. Katori: Spectroscopy of the $^1S_0 - ^3P_0$ clock transition of ^{87}Sr in an optical lattice. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 223001, 2003.
- [14] M. Maul, A. Schäfer und P. Indelicato: Stark quenching for the $1s^2\ 2s\ 2p\ ^3P_0$ level in beryllium-like ions and parity-violating effects. *J. Phys. B* **31**, 2725–2734, 1998.
- [15] T. Becker, J. v. Zanthier, A. Y. Nevsky, C. Schwedes, M. N. Skvortsov, H. Walther und E. Peik: High-resolution spectroscopy of a single In^+ ion: Progress towards an optical frequency standard. *Phys. Rev. A* **63**, 051802, 2001.
- [16] T. Brage, P. G. Judge und C. R. Proffitt: Determination of hyperfine-induced transition rates from observations of a planetary nebula. *Phys. Rev. Lett.* **89**, 281101, 2002.
- [17] G. Kirchhoff und R. Bunsen: Chemische Analyse durch Spectralbeobachtung. *Annalen der Physik* **186(6)**, 161–189, 1860.
- [18] CODATA Task Group on Fundamental Constants: Codata recommendet values of the fundamental physical constants 2010, 2010.
- [19] P. J. Mohr, B. N. Taylor und D. B. Newell: CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2006 2008.
- [20] T. Beier, P. J. Mohr, H. Persson und G. Soff: Influence of nuclear size on QED corrections in hydrogenlike heavy ions. *Phys. Rev. A* **58**, 954, 1998.
- [21] J. Fraunhofer: Bestimmung der Brechungs- und Farbzerstreuungs-Vermögens verschiedener Glasarten, in Bezug auf die Vervollkommnung achromatischer Fernröhre. *Analen der Physik* **56**, 264–313, 1817.
- [22] J. J. Balmer: Notiz über die Spectrallinien des Wasserstoffs. *Annalen der Physik* **261**, 80–87, 1885.
- [23] N. Bohr: On the constitution of atoms and molecules. *Philosophical Magazine Series 6* **26(151)**, 1–25, 1913.

- [24] J. Rydberg: Protokoll fört vid matematiskt-fysiska föreningens sammanträde, 1888.
- [25] N. Bohr und B. Edlén: Rydberg's discovery of the spectral laws [elektronisk resurs]. *Lunds universitets årsskrift; Ny följd; Avd. 2* **50:21**, 15–21, 1954.
- [26] P. A. M. Dirac: The quantum theory of the electron. *Proceedings of the Royal Society London A* **117**, 610, 1928.
- [27] W. R. Johnson und G. Soff: The Lamb shift in hydrogen-like atoms, $1 \leq Z \leq 110$. *At. Data and Nucl. Data Tables* **33**, 405, 1985.
- [28] W. E. Lamb und R. C. Retherford: Fine structure of the hydrogen atom by a microwave method. *Phys. Rev.* **72**, 241, 1947.
- [29] W. Greiner: *Quantum electrodynamics of strong fields*, Band 231 von *Lecture Notes in Physics*. Springer Berlin / Heidelberg, 1985.
- [30] E. A. Uehling: Polarisation effects in the positron theory. *Phys. Rev.* **48**, 55, 1935.
- [31] E. H. Wichmann und N. M. Kroll: Vacuum polarization in a strong coulomb field. *Phys. Rev.* **101(2)**, 843–859, 1956.
- [32] V. A. Yerokhin, A. N. Artemyev und V. M. Shabaev: QED treatment of electron correlation in Li-like ions. *Phys. Rev. A* **75**, 062501, 2007.
- [33] Y. S. Kozhedub, A. V. Volotka, A. N. Artemyev, D. A. Glazov, G. Plunien, V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn und T. Stöhlker: Relativistic recoil, electron-correlation, and QED effects on the $2p_j$ - $2s$ transition energies in Li-like ions. *Phys. Rev. A* **81(4)**, 042513, 2010.
- [34] M. S. Safronova, W. R. Johnson und U. I. Safronova: Relativistic many-body calculations of the energies of $n=2$ states for the berylliumlike isoelectronic sequence. *Phys. Rev. A* **53**, 4036–4053, 1996.
- [35] W. Demtröder: Atome mit mehreren Elektronen. In *Experimentalphysik 3*, Springer-Lehrbuch, S. 191–231. Springer Berlin Heidelberg, 2009.
- [36] I. V. Hertel und C.-P. Schulz: *Atome, Moleküle und optische Physik 1*. Springer-Verlag, 2008.
- [37] M. Göppert: Über die Wahrscheinlichkeit des Zusammenwirkens zweier Lichtquanten in einem Elementarakt. *Naturwissenschaften* **17**, 932–932, 1929.
- [38] M. Lipeles, R. Novick und N. Tolk: Direct detection of two-photon emission from the metastable state of singly ionized helium. *Phys. Rev. Lett.* **15(17)**, 690–693, 1965.
- [39] R. S. Van Dyck, C. E. Johnson und H. A. Shugart: Radiative lifetime of the 2^1S_0 metastable state of helium. *Phys. Rev. A* **4(4)**, 1327–1336, 1971.

- [40] P. H. Mokler und R. W. Dunford: Two-photon decay in heavy atoms and ions. *Phys. Scr.* **69(1)**, C1, 2004.
- [41] T. Mayer-Kuckuk: *Kernphysik Eine Einführung*. Teubner-Verlag, 3 Auflage, 1979.
- [42] R. W. Schmieder: Double- and triple-photon decay of metastable 3P_0 atomic states. *Phys. Rev.* **7**, 1458–1468, 1973.
- [43] K. T. Cheng, M. H. Chen und W. R. Johnson: Hyperfine quenching of the $2s2p\ ^3P_0$ state of berylliumlike ions. *Phys. Rev. A* **77**, 052504, 2008.
- [44] A. Müller und A. Wolf: Production of antihydrogen by recombination of \bar{p} with e^+ : What can we learn from electron-ion collision studies? *Hyperfine Interact.* **107**, 233–267, 1997.
- [45] G. Kilgus, D. Habs, D. Schwalm, A. Wolf, N. R. Badnell und A. Müller: High-resolution measurement of dielectronic recombination of lithiumlike Cu^{26+} . *Phys. Rev. A* **46**, 5730–5740, 1992.
- [46] M. Schnell, S. G. Zhou, M. E. Bannister, S. Böhm, G. Gwinner, S. Kieslich, A. Müller, S. Schippers, D. Schwalm und W. S. A. A. Wolf: Trielectronic recombination in Be-like ions. *Nucl. Instrum. Methods B* **205**, 367–369, 2003.
- [47] A. Einstein: Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt. *Ann. Phys. (Leipzig)* **17**, 132–148, 1905.
- [48] H. A. Kramers: On the theory of X-ray absorption and of the continuous X-ray spectrum. *Philos. Mag.* **46**, 836–871, 1923.
- [49] M. R. Flannery: Electron-ion and ion-ion recombination. In G. W. Drake, Herausgeber, *Atomic, Molecular & Optical Physics Handbook*, S. 605–629. AIP Press, Woodbury, New York, 1996.
- [50] L. H. Andersen und J. Bolko: Radiative recombination between fully stripped ions and free electrons. *Phys. Rev. A* **42**, 1184–1191, 1990.
- [51] M. Stobbe: Zur Quantenmechanik photoelektrischer Prozesse. *Ann. Phys. (Leipzig)* **7**, 661–715, 1930.
- [52] A. Ichihara und J. Eichler: Cross sections for radiative recombination and the photoelectric effect in the K, L and M shells of one-electron systems with $1 \leq Z \leq 112$ calculated within an exact relativistic description. *At. Data Nucl. Data Tables* **74**, 1–121, 2000.
- [53] L. H. Andersen, J. Bolko und P. Kvistgaard: Radiative recombination between free electrons and bare carbon ions. *Phys. Rev. Lett.* **64**, 729–732, 1990.
- [54] A. Müller, S. Schennach, M. Wagner, J. Haselbauer, O. Uwira, W. Spies, E. Jennewein, R. Becker, M. Kleinod, U. Pröbstel, N. Angert, J. Klabunde, P. H. Mokler, P. Spädtke und B. Wolf: Recombination of free electrons with ions. *Phys. Scr.* **T37**, 62–65, 1991.

- [55] M. Hörndl: Classical dynamics of low energy electron-ion recombination in storage rings. Dissertation, Vienna Technical University, 2005.
- [56] M. Hörndl, S. Yoshida, A. Wolf, G. Gwinner und J. Burgdörfer: Enhancement of low energy electron-ion recombination in a magnetic field: Influence of transient field effects. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 243201, 2005.
- [57] M. Hörndl, S. Yoshida, A. Wolf, G. Gwinner, M. Seliger und J. Burgdörfer: Classical dynamics of enhanced low-energy electron-ion recombination in storage rings. *Phys. Rev. A* **74**, 052712, 2006.
- [58] M. Hörndl, S. Yoshida, J. Burgdörfer, G. Gwinner und A. Wolf: Enhanced electron-ion recombination in ion storage rings. *Hyperfine Interact.* **173**, 67–72, 2006.
- [59] C. Brandau: Messungen zur Photorekombination hochgeladener lithiumähnlicher Ionen. Dissertation, Justus-Liebig-Universität, Gießen, 2000.
- [60] S. Martin, J. P. Buchet, M. C. Buchet-Poulizac, A. Denis, J. Desesquelles, M. Druetta, J. P. Grandin, D. Hennecart, X. Husson und D. Lecler: Measurements of $2s-2p$ transition wavelengths in helium- and lithium-like xenon. *Europhys. Lett.* **10(7)**, 645, 1989.
- [61] S. Schippers: Experimente zur Photorekombination atomarer Ionen an Schwerionenspeicherringen. Habilitationsschrift, Justus-Liebig-Universität Giessen / Institut für Kernphysik - Strahlencentrum, 2002. Giessener Elektronische Bibliothek.
- [62] B. W. Shore: Dielectronic recombination. *Astrophys. J.* **158**, 1205–1218, 1969.
- [63] X. Ma, P. H. Mokler, F. Bosch, A. Gumberidze, C. Kozhuharov, D. Liesen, D. Sierpowski, Z. Stachura, T. Stohlker und A. Warczak: Electron-electron interaction studied in strong central fields by resonant transfer and excitation with H-like U ions. *Phys. Rev. A* **68**, 042712, 2003.
- [64] C. Brandau, C. Kozhuharov, A. Müller, D. Bernhardt, S. Böhm, F. Bosch, D. Boutin, F. J. Currell, C. Dimopoulou, B. Franzke, A. Gumberidze, Z. Harman, U. D. Jentschura, C. H. Keitel, H. J. Kluge, Y. S. Kozhedub, R. Krücken, Y. A. Litvinov, F. Nolden, B. O'Rourke, R. Reuschl, S. Schippers, V. M. Shabaev, U. Spillmann, Z. Stachura, M. Steck, T. Stöhlker, I. I. Tupitsyn, D. F. A. Winters und A. Wolf: Isotope shifts in dielectronic recombination: From stable to in-flight-produced nuclei. *J. Phys. Conf. Ser.* **194(1)**, 012023, 2009.
- [65] M. Zimmermann, N. Grün und W. Scheid: Photorecombination on highly charged few-electron uranium ions. *J. Phys. B* **30**, 5259–5270, 1997.
- [66] D. A. Knapp, P. Beiersdorfer, M. H. Chen, J. H. Scofield und D. Schneider: Observation of interference between dielectronic recombination and radiative recombination in highly charged uranium ions. *Phys. Rev. Lett.* **74**, 54–57, 1995.

- [67] A. J. González Martínez, J. R. Crespo López-Urrutia, J. Braun, G. Brenner, H. Bruhns, A. Lapierre, V. Mironov, R. Soria Orts, H. Tawara, M. Trinczek, J. Ullrich und J. H. Scofield: State-selective quantum interference observed in the recombination of highly charged $\text{Hg}^{75+–78+}$ mercury ions in an electron beam ion trap. *Phys. Rev. Lett.* **94**, 203201, 2005.
- [68] S. Schippers, A. Müller, S. Ricz, M. E. Bannister, G. H. Dunn, J. D. Bozek, A. S. Schlachter, G. Hinojosa, C. Cisneros, A. Aguilar, A. M. Covington, M. F. Gharaibeh und R. A. Phaneuf: Experimental link of photoionization of Sc^{2+} to photorecombination of Sc^{3+} : An application of detailed balance in a unique atomic system. *Phys. Rev. Lett.* **89**, 193002, 2002.
- [69] A. Müller, D. S. Belić, B. D. DePaola, N. Djurić, G. H. Dunn, D. W. Mueller und C. Timmer: Experimental measurements of field effects on dielectronic recombination cross sections and Rydberg product-state distributions. *Phys. Rev. A* **36**, 599–613, 1987.
- [70] J. B. Mann und W. R. Johnson: Breit interaction in multielectron atoms. *Phys. Rev. A* **4**, 41, 1971.
- [71] G. Breit: The effect of retardation on the interaction of two electrons. *Phys. Rev.* **34**, 553–573, 1929.
- [72] J. D. Jackson: *Klassische Elektrodynamik*. deGruyter Verlag, Berlin, New York, 3 Auflage, 2002.
- [73] P. Zimmerer, N. Grün und W. Scheid: Auger rates for dielectronic recombination cross sections with highly charged relativistic heavy ions. *Phys. Lett. A* **148**, 457–462, 1990.
- [74] P. J. Mohr, G. Plunien und G. Soff: QED corrections in heavy atoms. *Phys. Reports* **293**, 227–369, 1998.
- [75] P. Zimmerer, N. Grün und W. Scheid: Scaling of relativistic auger rates with z for ions with two electrons. *J. Phys. B* **24(11)**, 2633–2640, 1991.
- [76] D. Bernhardt, C. Brandau, Z. Harman, C. Kozhuharov, A. Müller, W. Scheid, S. Schippers, E. W. Schmidt, D. Yu, A. N. Artemyev, I. I. Tupitsyn, S. Böhm, F. Bosch, F. J. Currell, B. Franzke, A. Gumberidze, J. Jacobi, P. H. Mokler, F. Nolden, U. Spillman, Z. Stachura, M. Steck und T. Stöhlker: Breit interaction in dielectronic recombination of hydrogenlike uranium. *Phys. Rev. A* **83(2)**, 020701, 2011.
- [77] J. Xia, W. Zhan, B. Wei, Y. Yuan, M. Song, W. Zhang, X. Yang, P. Yuan, D. Gao, H. Zhao, X. Yang, G. Xiao, K. Man, J. Dang, X. Cai, Y. Wang, J. Tang, W. Qiao, Y. Rao, Y. He, L. Mao und Z. Zhou: The heavy ion cooler-storage-ring project (HIRFL-CSR) at lanzhou. *Nucl. Instrum. Meth. A* **488(1-2)**, 11 – 25, 2002.

- [78] W. Zhan, H. Xu, G. Xiao, J. Xia, H. Zhao und Y. Yuan: Progress in HIRFL-CSR. *Nuclear Physics A* **834(1-4)**, 694c – 700c, 2010. The 10th International Conference on Nucleus-Nucleus Collisions (NN2009).
- [79] W. Spies, A. Müller, J. Linkemann, A. Frank, M. Wagner, C. Kozhuharov, B. Franzke, F. Bosch, H. Eickhoff, M. Jung, O. Klepper, W. König, P. H. Mokler, R. Moshhammer, F. Nolden, U. Schaaf, P. Spädtke, M. Steck, P. Zimmerer, N. Grün, W. Scheid, M. S. Pindzola und N. R. Badnell: Dielectronic and radiative recombination of lithiumlike gold. *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2768–2771, 1992.
- [80] C. Brandau, T. Bartsch, A. Hoffknecht, H. Knopp, S. Schippers, A. Müller, T. Steih, N. Grün, W. Scheid, F. Bosch, B. Franzke, C. Kozhuharov, P. H. Mokler, F. Nolden, M. Steck, T. Stöhlker und Z. Stachura: High Rydberg resonances in dielectronic recombination of Pb^{79+} . *Phys. Rev. Lett.* **89**, 053201, 2002.
- [81] A. Gumberidze, T. Stöhlker, D. Banaś, K. Beckert, P. Beller, H. F. Beyer, F. Bosch, X. Cai, S. Hagmann, C. Kozhuharov, D. Liesen, F. Nolden, X. Ma, P. H. Mokler, A. Oršić Muthig, M. Steck, D. Sierpowski, S. Tashenov, A. Warczak und Y. Zou: Electron-electron interaction in strong electromagnetic fields: The two-electron contribution to the ground-state energy in He-like uranium. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 203004, 2004.
- [82] W. Spies: Rekombination schwerer lithiumartiger Ionen mit freien Elektronen. Dissertation, Universität Gießen, 1995.
- [83] S. Meer: *Stochastic cooling and the accumulation of antiprotons*. The Nobel Foundation, 1985.
- [84] D. Bernhardt: Dielektronische Rekombination wasserstoffähnlicher Uranionen am Schwerionenspeichering ESR. Diplomarbeit, Universität Gießen, 2006.
- [85] W. Arnold: *10-KV-Hochspannungsteiler mit Frequenzausgang*. Strahlencentrum Uni Giessen, 2001.
- [86] M. Tokman, N. Eklöv, P. Glans, E. Lindroth, R. Schuch, G. Gwinner, D. Schwalm, A. Wolf, A. Hoffknecht, A. Müller und S. Schippers: Dielectronic recombination resonances in F^{6+} . *Phys. Rev. A* **66**, 012703, 2002.
- [87] M. Lestinsky, E. Lindroth, D. A. Orlov, E. W. Schmidt, S. Schippers, S. Böhm, C. Brandau, F. Sprenger, A. S. Terekhov, A. Müller und A. Wolf: Screened radiative corrections from hyperfine-split dielectronic resonances in lithiumlike scandium. *Phys. Rev. Lett.* **100**, 033001, 2008.
- [88] D. Boussard: Schottky noise and beam transfer function diagnostics. In S. Turner, Herausgeber, *Advanced accelerator physics course, Rhodes, Greece, 20 Sep - 1 Oct 1993*, S. 749 ff. CERN 95-06, Genf, 1995.

- [89] M. Hausmann: Energieisochrone Massenmessungen am Experimentierspeicherring der GSI. Dissertation, 1999.
- [90] C. Brandau: 2011. Private Mitteilung.
- [91] A. Müller: New light on electron-ion collisions from heavy-ion storage ring experiments. *Philos. Trans. R. Soc. London Ser. A* **357**, 1279–1296, 1999.
- [92] H. Poth, B. Seligmann, W. Schwab, M. Wörtge, A. Wolf, R. Conti, W. Frieze, D. Gidley, A. Rich, M. Skalsey, J. V. House, P. Zitzewitz, J. Berger, P. Blatt, R. Neumann und G. zu Putlitz: Antihydrogen production in a merged beam arrangement. *Hyperfine Interact.* **44**, 259–270, 1988.
- [93] V. V. Parkhomchuk, Y. K. Batygin und T. Katayama: Luminosity of comoving particle collisions. *Nucl. Instrum. Methods A* **449**, 140–146, 2000.
- [94] P. Glans, E. Lindroth, N. R. Badnell, N. Eklöv, W. Zong, E. Justiniano und R. Schuch: Dielectronic recombination of N^{4+} . *Phys. Rev. A* **64**, 043609, 2001.
- [95] S. Schippers, A. Müller, G. Gwinner, J. Linkemann, A. A. Saghiri und A. Wolf: Storage ring measurement of the CIV recombination rate coefficient. *Astrophys. J.* **555**, 1027–1037, 2001.
- [96] S. Böhm, S. Schippers, W. Shi, A. Müller, N. Eklöv, R. Schuch, H. Danared, N. R. Badnell, D. Mitnik und D. C. Griffin: Measurement of the field induced dielectronic recombination rate enhancement of O^{5+} ions differential in the Rydberg quantum number n . *Phys. Rev. A* **65**, 052728, 2002.
- [97] T. Mohamed, D. Nikolić, E. Lindroth, S. Madzunkov, M. Fogle, M. Tokman und R. Schuch: Dielectronic recombination of lithiumlike beryllium: A theoretical and experimental investigation. *Phys. Rev. A* **66**, 022719, 2002.
- [98] D. W. Savin, E. Behar, S. M. Kahn, G. Gwinner, A. A. Saghiri, M. Schmitt, M. Grieser, R. Repnow, D. Schwalm, A. Wolf, T. Bartsch, A. Müller, S. Schippers, N. R. Badnell, M. H. Chen und T. W. Gorczyca: Dielectronic recombination (via $N=2 \rightarrow N'=2$ core excitations) and radiative recombination of Fe XX: Laboratory measurements and theoretical calculations. *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **138**, 337–370, 2002.
- [99] D. W. Savin, S. M. Kahn, J. Linkemann, A. A. Saghiri, M. Schmitt, M. Grieser, R. Repnow, D. Schwalm, A. Wolf, T. Bartsch, A. Müller, S. Schippers, M. H. Chen, N. R. Badnell, T. W. Gorczyca und O. Zatsarinny: Dielectronic recombination of Fe XIX forming Fe XVIII: Laboratory measurements and theoretical calculations. *Astrophys. J.* **576**, 1098–1107, 2002.

- [100] D. W. Savin, S. M. Kahn, G. Gwinner, M. Grieser, R. Repnow, G. Saathoff, D. Schwalm, A. Wolf, A. Müller, S. Schippers, P. A. Závodsky, M. H. Chen, T. W. Gorczyca, O. Zatsarinny und M. F. Gu: Dielectronic recombination of Fe XXI and Fe XXII via $N=2 \rightarrow N'=2$ core excitations. *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **147**, 421–435, 2003.
- [101] S. Kieslich, S. Schippers, W. Shi, A. Müller, G. Gwinner, M. Schnell, A. Wolf, E. Lindroth und M. Tokman: Determination of the $2s$ - $2p$ excitation energy of lithiumlike scandium using dielectronic recombination. *Phys. Rev. A* **70**, 042714, 2004.
- [102] D. Nikolić, E. Lindroth, S. Kieslich, C. Brandau, S. Schippers, W. Shi, A. Müller, G. Gwinner, M. Schnell und A. Wolf: Dielectronic recombination resonances in Na^{8+} . *Phys. Rev. A* **70**, 062723, 2004.
- [103] R. D. Cowan: *The Theory of Atomic Structure and Spectra*. University of California Press, Berkeley, 1981.
- [104] J. B. Mann: Excitation collision strengths for iron ions calculated with a distorted wave method. *At. Data Nucl. Data Tables* **29(3)**, 407 – 452, 1983.
- [105] R. E. H. Clark, J. Abdallah, Jr. und J. B. Mann: Integral and differential cross sections for electron impact ionization. *Astrophysical Journal* **381**, 597–600, 1991.
- [106] R. Büttner, B. Kraus, K. H. Schartner, F. Folkmann, P. H. Mokler und G. Müller: EUV-spectroscopy of beam-foil excited 14.25 MeV/u $\text{Xe}^{52+} + \dots \text{Xe}^{49+}$ -ions. *Z. Phys. D: Atoms, Molecules and Clusters* **22**, 693–697, 1992.
- [107] K. T. Cheng, Y.-K. Kim und J. P. Desclaux: Electric dipole, quadrupole and magnetic dipole transition probabilities of ions isoelectric to the first-row atoms Li through F^* . *At. Data Nucl. Data Tables* **24**, 111, 1979.
- [108] J. F. Seely: Qed contributions to the $2p$ - $2s$ transitions in highly charged Li-like ions. *Phys. Rev. A* **39**, 3682–3685, 1989.
- [109] P. Indelicato: Recent progress in the theory of relativistic effects and Q.E.D. corrections in two and three-electron ions. *J. Phys. Colloques* **50**, C1–239–C1–254, 1989.
- [110] P. Indelicato und J. P. Desclaux: Multiconfiguration Dirac-Fock calculations of transition energies with QED corrections in three electron ions. *Phys. Rev. A* **42**, 5139, 1990.
- [111] Y.-K. Kim, D. H. Baik, P. Indelicato und J. P. Desclaux: Resonance transition energies of Li-, Na-, and Cu-like ions. *Phys. Rev. A* **44**, 148, 1991.
- [112] S. A. Blundell: Calculations of the screened self-energy and vacuum polarization in Li-like, Na-like, and Cu-like ions. *Phys. Rev. A* **47**, 1790–1803, 1993.
- [113] M. H. Chen, K. T. Cheng, W. R. Johnson und J. Sapirstein: Relativistic configuration interaction calculations for the $n=2$ states of lithiumlike ions. *Phys. Rev. A* **52**, 266–273, 1995.

- [114] J. Sapirstein und K. T. Cheng: *s*-matrix calculations of energy levels of the lithium isoelectronic sequence. *Phys. Rev. A* **83**, 012504, 2011.
- [115] B. Edlén: Comparison of theoretical and experimental level values of the $n=2$ complex in ions isoelectronic with Li, Be, O and F. *Phys. Scr.* **28**, 51–67, 1983.
- [116] W. C. Martin, R. Zalubas und A. Musgrove: Energy levels of phosphorus, P I through P XV **14(3)**, 751–802, 1985.
- [117] J. Sugar und C. Corliss: *J. Phys. Chem. Ref. Data Supl.* **14**, 1–664, 1985.
- [118] S. Suckewer, J. Cecchi, S. Cohen, R. Fonck und E. Hinnov: Tracer element injection into PDX tokamak for spectral line identification and localized doppler temperature measurement. *Physics Letters A* **80(4)**, 259 – 262, 1980.
- [119] J. Sugar, V. Kaufman und W. L. Rowan: Improved wavelengths for prominent lines of Ni X to Ni XXVI. *J. Opt. Soc. Am. B* **9(3)**, 344–346, 1992.
- [120] J. Sugar, V. Kaufman und W. L. Rowan: Improved wavelengths for prominent lines of Cr XVI to Cr XXII. *J. Opt. Soc. Am. B* **10(1)**, 13–15, 1993.
- [121] U. Staude, P. Bosselmann, R. Büttner, D. Horn, K.-H. Schartner, F. Folkmann, A. E. Livingston, T. Ludziejewski und P. H. Mokler: Measurements of $2s^2S_{1/2} - 2p^2P_{3/2,1/2}$ transition energies in lithiumlike heavy ions: Experiments and results for Ni^{25+} and Zn^{27+} . *Phys. Rev. A* **58**, 3516–3523, 1998.
- [122] S. Madzunkov, E. Lindroth, N. Eklöv, M. Tokman, A. Paál und R. Schuch: QED effects in lithiumlike krypton. *Phys. Rev. A* **65**, 032505, 2002.
- [123] I. I. Tupitsyn, A. V. Volotka, D. A. Glazov, V. M. Shabaev, G. Plunien, J. R. Crespo López-Urrutia, A. Lapiere und J. Ullrich: Magnetic-dipole transition probabilities in B-like and Be-like ions. *Phys. Rev. A* **72**, 062503, 2005.
- [124] J. Reader, J. Sugar, N. Acquista und R. Bahr: Laser-produced and tokamak spectra of lithiumlike iron, Fe^{23+} . *J. Opt. Soc. Am. B* **11(10)**, 1930–1934, 1994.
- [125] H. Hinnov, the TFTR Operating Team, B. Denne und the JET Operating Team: Empirical evaluation of three-electron quantum-electrodynamics effects from lithiumlike resonance lines of elements $Z=22-42$ in the Tokamak Fusion Test Reactor and Joint European Torus tokamaks. *Phys. Rev. A* **40**, 4357–4360, 1989.
- [126] P. Bosselmann, U. Staude, D. Horn, K.-H. Schartner, F. Folkmann, A. E. Livingston und P. H. Mokler: Measurements of $2s^2S_{1/2} - 2p^2P_{1/2,3/2}$ transition energies in lithiumlike heavy ions. II. experimental results for Ag^{44+} and discussion along the isoelectronic series. *Phys. Rev. A* **59**, 1874–1883, 1999.

- [127] E. Lindroth, H. Danared, P. Glans, Z. Pesic, M. Tokman, G. Viktor und R. Schuch: QED effects in Cu-like Pb recombination resonances near threshold. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5027–5030, 2001.
- [128] H. Danared, A. Källberg, G. Andler, L. Bagge, F. Österdahl, A. Paál, K.-G. Rensfelt, A. Simonsson, Ö. Skeppstedt und M. A. Ugglas: Studies of electron cooling with a highly expanded electron beam. *Nucl. Instrum. Methods A* **441**, 123–133, 2000.
- [129] G. Möller, E. Träbert, V. Lodwig, C. Wagner, P. H. Heckmann, J. H. Blanke, A. E. Livingston und P. H. Mokler: Experimental transition probability for the E1 intercombination transition in Be-like Xe^{50+} . *Zeitschrift für Physik D Atoms, Molecules and Clusters* **11**, 333–334, 1989.
- [130] E. Träbert, G. Möller, P. H. Heckmann und A. E. Livingston: Wavelength and lifetime measurements on forbidden and intercombination lines in the euv spectra of swift foil-excited highly charged ions. *Physica Scripta* **41(6)**, 860, 1990.
- [131] G. Möller, E. Träbert, P. H. Heckmann, P. H. Mokler und A. E. Livingston: Quest for experimental M1 and E1-intercombination transition probabilities in few-electron Xe ions. *Zeitschrift für Physik D Atoms, Molecules and Clusters* **18**, 223–229, 1991.
- [132] D. Feili, B. Zimmermann, C. Neacsu, P. Bosselmann, K.-H. Schartner, F. Folkmann, A. E. Livingston, E. Träbert und P. H. Mokler: $2s^2\ ^1S_0 - 2s2p\ ^3P_1$ intercombination transition wavelengths in Be-like Ag^{43+} , Sn^{46+} , and Xe^{50+} ions. *Physica Scripta* **71(1)**, 48, 2005.
- [133] M. H. Chen und K. T. Cheng: Energy levels of the ground state and the $2s2p$ ($J=1$) excited states of berylliumlike ions: A large-scale, relativistic configuration-interaction calculation. *Phys. Rev. A* **55**, 166–174, 1997.
- [134] U. I. Safronova: Excitation energies and transition rates in Be-, Mg-, and Zn-like ions. *Mol. Phys.* **98**, 1213–1225, 2000.
- [135] L. Armstrong, W. R. Fielder und D. L. Lin: Relativistic effects on transition probabilities in the Li and Be isoelectronic sequences. *Phys. Rev. A* **14**, 1114–1128, 1976.
- [136] S. J. Goett, R. E. Clark und D. H. Sampson: Intermediate coupling collision strengths for $\delta n = 0$ transitions produced by electron impact on highly charged He- and Be-like ions. *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **25(3)**, 185 – 217, 1980.
- [137] M. Levine, R. Marrs, J. Bardsley, P. Beiersdorfer, C. Bennett, M. Chen, T. Cowan, D. Dietrich, J. Henderson, D. Knapp, A. Osterheld, B. Penetrante, M. Schneider und J. Scofield: The use of an electron beam ion trap in the study of highly charged ions. *Nucl. Instrum. Meth. B* **43(3)**, 431 – 440, 1989.
- [138] S. B. Utter, G. V. Brown, P. Beiersdorfer, E. J. Clothiaux und N. K. Podder: Grazing-incidence measurements of L-shell line emission from highly charged Fe in the soft x-ray region. *Review of Scientific Instruments* **70(1)**, 284–287, 1999.

- [139] D. W. Savin, G. Gwinner, M. Grieser, R. Repnow, M. Schnell, D. Schwalm, A. Wolf, S.-G. Zhou, S. Kieslich, A. Müller, S. Schippers, J. Colgan, S. D. Loch, M. H. Chen und M. F. Gu: Dielectronic recombination of Fe XXXIII forming Fe XXII: Laboratory measurements and theoretical calculations. *Astrophys. J.* **642**, 1275–1285, 2006.
- [140] P. F. Dittner, S. Datz, H. F. Krause, P. D. Miller, P. L. Pepmiller, C. Bottcher, C. M. Fou, D. C. Griffin und M. S. Pindzola: Dielectronic recombination of the Be-like ions: C^{2+} , N^{3+} , O^{4+} , and F^{5+} . *Phys. Rev. A* **36**, 33–39, 1987.
- [141] N. R. Badnell, M. S. Pindzola, L. H. Andersen, J. Bolko und H. T. Schmidt: Dielectronic recombination of light Be-like and B-like ions. *J. Phys. B* **24**, 4441–4452, 1991.
- [142] M. Schnell: Di- und trielektronische Rekombination an berylliumähnlichen Ionen. Dissertation, Universität Heidelberg / Fakultät für Physik und Astronomie, 2003.
- [143] U. D. Jentschura: Two-photon decays reexamined: cascade contributions and gauge invariance. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **41(15)**, 155307, 2008.
- [144] J. Chluba und R. A. Sunyaev: Two-photon transitions in hydrogen and cosmological recombination. *A&A* **480(3)**, 629–645, 2008.
- [145] P. Amaro, J. P. Santos, F. Parente, A. Surzhykov und P. Indelicato: Resonance effects on the two-photon emission from hydrogenic ions. *Phys. Rev. A* **79**, 062504, 2009.
- [146] A. Surzhykov, J. P. Santos, P. Amaro und P. Indelicato: Negative-continuum effects on the two-photon decay rates of hydrogenlike ions. *Phys. Rev. A* **80**, 052511, 2009.
- [147] B. J. Wundt und U. D. Jentschura: Relativistic $(z\alpha)^2$ corrections and leading quantum electrodynamic corrections to the two-photon decay rate of ionic states. *Phys. Rev. A* **80**, 022505, 2009.
- [148] D. Solovyev, V. Dubrovich, A. V. Volotka, L. Labzowsky und G. Plunien: Two-photon decays of highly excited states in hydrogen. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **43(17)**, 175001, 2010.
- [149] F. Fratini, M. C. Tichy, T. Jahrsetz, A. Buchleitner, S. Fritzsche und A. Surzhykov: Quantum correlations in the two-photon decay of few-electron ions. *Phys. Rev. A* **83**, 032506, 2011.
- [150] P. Amaro, A. Surzhykov, F. Parente, P. Indelicato und J. P. Santos: Calculation of two-photon decay rates of hydrogen-like ions by using B-polynomials. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **44(24)**, 245302, 2011.
- [151] G. W. F. Drake: Spontaneous two-photon decay rates in hydrogenlike and heliumlike ions. *Phys. Rev. A* **34(4)**, 2871, 1986.

- [152] A. Surzhykov, A. Volotka, F. Fratini, J. P. Santos, P. Indelicato, G. Plunien, T. Stöhlker und S. Fritzsche: Angular correlations in the two-photon decay of heliumlike heavy ions. *Phys. Rev. A* **81**, 042510, 2010.
- [153] A. V. Volotka, A. Surzhykov, V. M. Shabaev und G. Plunien: Interelectronic-interaction effects on the two-photon decay rates of heavy He-like ions. *Phys. Rev. A* **83**, 062508, 2011.
- [154] I. M. Savukov und W. R. Johnson: Two-photon $E1M1$ decay of $2\ ^3P_0$ states in heavy heliumlike ions. *Phys. Rev. A* **66**, 062507, 2002.
- [155] A. Kumar, S. Trotsenko, A. V. Volotka, D. Banaś, H. F. Beyer, H. Bräuning, A. Gumberidze, S. Hagmann, S. Hess, C. Kozhuharov, R. Reuschl, U. Spillmann, M. Trassinelli, G. Weber und T. Stöhlker: Spectral shape of the $2E1$ decay from $2s$ state in He-like tin. *The European Physical Journal - Special Topics* **169**, 19–22, 2009.
- [156] S. Trotsenko, A. Kumar, A. V. Volotka, D. Banaś, H. F. Beyer, H. Bräuning, S. Fritzsche, A. Gumberidze, S. Hagmann, S. Hess, P. Jagodziński, C. Kozhuharov, R. Reuschl, S. Salem, A. Simon, U. Spillmann, M. Trassinelli, L. C. Tribedi, G. Weber, D. Winters und T. Stöhlker: Spectral shape of the two-photon decay of the $2\ ^1S_0$ state in He-like tin. *Phys. Rev. Lett.* **104**(3), 033001, 2010.
- [157] R. Santra, K. V. Christ und C. H. Greene: Properties of metastable alkaline-earth-metal atoms calculated using an accurate effective core potential. *Phys. Rev. A* **69**, 042510, 2004.
- [158] F. Fratini, S. Fritzsche und A. Surzhykov: 2011. Private Mitteilung.
- [159] S. Schippers, D. Bernhardt, A. Müller, M. Lestinsky, M. Hahn, O. Novotný, D. W. Savin, M. Grieser, C. Krantz, R. Repnow und A. Wolf: Storage-ring measurement of the hyperfine-induced $2s\ 2p\ ^3P_0 \rightarrow 2s^2\ ^1S_0$ transition rate in beryllium-like sulfur. *ArXiv e-prints* 2011.
- [160] 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.* **72**, 1616–1619, 1994.
- [161] S. Mannervik, J. Lidberg, L. O. Norlin und P. Royen: Collisional excitation and destruction of metastable states in a stored ion beam. *Phys. Rev. A* **56**, R1075–R1078, 1997.
- [162] L. M. Blau, R. Novick und D. Weinflash: Lifetimes and fine structure of the metastable autoionizing $(1s2s2p)\ ^4P_J$ states of the negative helium ion. *Phys. Rev. Lett.* **24**, 1268–1272, 1970.

- [163] P. Balling, L. H. Andersen, T. Andersen, H. K. Haugen, P. Hvelplund und K. Taulbjerg: Metastable ion lifetime studies utilizing a heavy-ion storage ring: Measurements on Be^- . *Phys. Rev. Lett.* **69**, 1042–1045, 1992.
- [164] Y. V. Ralchenko und L. A. Vainshtein: Intercombination transitions in Be-like ions. *Phys. Rev. A* **52**, 2449–2452, 1995.
- [165] J. Li, C. Dong, P. Jönsson und G. Gaigalas: M_F -dependent hyperfine induced transition rates in an external magnetic field for Be-like $^{47}\text{Ti}^{18+}$. *Physics Letters A* **375(5)**, 914 – 917, 2011.
- [166] M. Schnell, G. Gwinner, N. R. Badnell, M. E. Bannister, S. Böhm, J. Colgan, S. Kieslich, S. D. Loch, D. Mitnik, A. Müller, M. S. Pindzola, S. Schippers, D. Schwalm, W. Shi, A. Wolf und S.-G. Zhou: Observation of trielectronic recombination in Be-like Cl ions. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 043001, 2003.
- [167] Z. Harman: 2012. Private Mitteilung.
- [168] A. S. Schlachter, J. W. Stearns, W. G. Graham, K. H. Berkner, R. V. Pyle und J. A. Tanis: Electron capture for fast highly charged ions in gas targets: An empirical scaling rule. *Phys. Rev. A* **27**, 3372–3374, 1983.
- [169] T. Stöhlker, T. Ludziejewski, H. Reich, F. Bosch, R. W. Dunford, J. Eichler, B. Franzke, C. Kozhuharov, G. Menzel, P. H. Mokler, F. Nolden, P. Rymuza, Z. Stachura, M. Steck, P. Swiat, A. Warczak und T. Winkler: Charge-exchange cross sections and beam lifetimes for stored and decelerated bare uranium ions. *Phys. Rev. A* **58**, 2043–2050, 1998.
- [170] L. J. Curtis: Data-based methods for isoelectronic prediction of atomic lifetimes and energy levels. *Physica Scripta* **48(5)**, 559, 1993.
- [171] O. Y. Andreev, L. N. Labzowsky und A. V. Prigorovsky: Line-profile approach to the description of the electron-recombination process for the highly charged ions. *Phys. Rev. A* **80(4)**, 042514, 2009.
- [172] O. Y. Andreev, L. N. Labzowsky und A. V. Prigorovsky: Evaluation of the electron capture by the H-like Gd ion within line-profile approach. *Phys. Rev. A* **83**, 064501, 2011.
- [173] Z. Harman, I. I. Tupitsyn, A. N. Artemyev, U. D. Jentschura, C. H. Keitel, J. R. Crespo López-Urrutia, A. J. González Martínez, H. Tawara und J. Ullrich: Benchmarking high-field few-electron correlation and QED contributions in Hg^{75+} to Hg^{78+} ions. II. Theory. *Phys. Rev. A* **73**, 052711, 2006.
- [174] N. R. Badnell und M. S. Pindzola: Dielectronic recombination of Bi^{80+} and Bi^{82+} . *Phys. Rev. A* **43**, 570, 1991.
- [175] M. H. Chen: Effects of relativity on resonant transfer and excitation in collisions of U^{89+} with light targets. *Phys. Rev. A* **41**, 4102–4105, 1990.

- [176] S. Zakowicz, Z. Harman, N. Grün und W. Scheid: Angular distribution of hypersatellite and satellite radiation emitted after resonant transfer and excitation into U^{91+} ions. *Phys. Rev. A* **68**, 042711, 2003.
- [177] W. G. Graham, K. H. Berkner, E. M. Bernstein, M. W. Clark, B. Feinberg, M. A. McMahon, T. J. Morgan, W. Rathbun, A. S. Schlachter und J. A. Tanis: Resonant transfer and excitation for U^{90+} projectiles in hydrogen. *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2773–2776, 1990.
- [178] T. Kandler, P. H. Mokler, T. Stöhlker, H. Geissel, H. Irnich, C. Kozhuharov, A. Kriessbach, M. Kucharski, G. Münzenberg, F. Nickel, P. Rymuza, C. Scheidenberger, Z. Stachura, T. Suzuki, A. Warczak, , D. Dauvergne und R. W. Dunford: Transition selective investigation of the resonant transfer and excitation in $U^{90+} \rightarrow C$ collisions. *Phys. Lett. A* **204**, 274–280, 1995.
- [179] N. Nakamura, A. P. Kavanagh, H. Watanabe, H. A. Sakaue, Y. Li, D. Kato, F. J. Currell und S. Ohtani: Evidence for strong breit interaction in dielectronic recombination of highly charged heavy ions. *Phys. Rev. Lett.* **100**, 073203, 2008.
- [180] O. Y. Andreev, L. N. Labzowsky, G. Plunien und D. A. Solov'yev: QED theory of the spectral line profile and its applications to atoms and ions. *Physics Reports* **455(4-6)**, 135 – 246, 2008.
- [181] U. Fano: Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts. *Phys. Rev.* **124**, 1866–1878, 1961.
- [182] U. Fano und J. W. Cooper: Line profiles in the far-UV absorption spectra of the rare gases. *Phys. Rev.* **137**, A1364–A1379, 1965.
- [183] P. Kienle: Sunshine by cooling. *Naturwissenschaften* **88**, 313–321, 2001.
- [184] A. Müller: Atomic physics experiments at ion storage rings. *Nucl. Instrum. Methods B* **87**, 34, 1994.
- [185] N. R. Badnell: Dielectronic recombination of Fe^{22+} and Fe^{21+} . *J. Phys. B* **19**, 3827–3835, 1986.
- [186] C. Brandau, S. Böhm, C. Kozhuharov, A. Müller, S. Schippers, W. Shi, K. Beckert, P. Beller, F. Bosch, B. Franzke, N. Grün, J. J. Z. Harman, S. Kieslich, H. Knopp, P. Mokler, F. Nolden, W. Scheid, M. Steck und Z. Stachura: Dielectronic recombination of H-, Li- and Be-like xenon ions. *GSI Scientific Report 2002* S. 91, 2003.

6 Anhang

6.1 Monte-Carlo-Simulation 'VDISTRIB'

Im Folgenden wird die Nutzung des zur Experimentauswertung verwendeten c++ Programms 'VDISTRIB' erläutert. Dieses von Carsten Brandau [90] erstellte Programm dient zur Simulation von Ratenkoeffizientenspektren unter Verwendung eines Sets von DR-Resonanzen und experimentellen Parametern. Der Ablauf der Darstellung folgt der Reihenfolge des Programmablaufs.

6.1.1 Eingabedatei der DR-Resonanzen

Vor Programmaufruf ist eine Eingabedatei – aus historischen Gründen trägt sie häufig die Endung *.steih – mit einem Satz von DR-Resonanzen zu erstellen. Jede Zeile der Eingabedatei enthält hierbei eine Resonanz, die mit Resonanzlage, natürlicher Linienbreite und Resonanzstärke parametrisiert wird. Dabei wird davon ausgegangen, dass die natürliche Resonanzform einer Lorentzverteilung entspricht. Die Datei enthält weder Kopfzeile noch Einheiten. Resonanzlage und natürliche Linienbreite sollten in eV angegeben werden, während für die Resonanzstärke eine Angabe in barn eV erwartet wird. Im Folgenden sieht man einen exemplarischen Aufbau einer Eingabedatei.

0.128	0.02	265000000
0.874	0.02	225000000
1.616	0.02	136000000.8

Häufig wird die experimentelle Resonanzbreite von den Strahlparametern dominiert und kaum von der (kleinen) natürlichen Linienbreite beeinflusst. Ist dies der Fall, so darf der Linienbreiten-Eintrag in der Eingabedatei von der realen Linienbreite abweichen, solange dies ohne signifikanten Einfluss auf das simulierte Spektrum bleibt.

6.1.2 Radiative Rekombination

Das Programm berechnet den radiativen Anteil des Rekombinationsspektrums auf semiklassischer Basis [51]. Dabei hängt der Wirkungsquerschnitt des radiativen Einfangs vom Ion und dessen unbesetzten Zuständen ab, die dem Programm mittels der Eingabeparameter effektive Kernladung (Z_{eff}), niedrigste nicht abgeschlossene Schale (n_{min}), Drehimpuls des höchsten besetzten Zustands (l_{min}), Elektronen in dieser Unterschale ($i_{l_{\text{min}}}$) und maximale berücksichtigte

Hauptquantenzahl (n_{\max}) übermittelt werden. Der totale Wirkungsquerschnitt wird als Summation über den unbesetzten Anteil ($f(n)$) aller n -Schalen Wirkungsquerschnitte (Gl. 1.25) ermittelt und mit der Geschwindigkeit zum Ratenkoeffizienten gefaltet. Hierbei wird die numerische Faltung durch die Wahl von i_{\max} (zufälligen) Energien E_i aus der Verteilung der Elektron-Ion-Stoßenergien der Relativenergie E zwischen Elektronen- und Ionenstrahl generiert.

$$\alpha_{\text{RR}}(E) = \langle \sigma_{\text{RR tot}}(E) \cdot v(E) \rangle = \frac{32\pi \cdot a_0^2 \cdot \alpha^3 \cdot 10^4}{3 \cdot \sqrt{3}} \sum_{n=n_{\min}}^{n_{\max}} \frac{f(n)}{i_{\max}} \sum_{i=1}^{i=i_{\max}} \frac{v(E_i)}{n \frac{E_i}{Ry \cdot Z_{\text{eff}}^2} \left(1 + n^2 \frac{E_i}{Ry \cdot Z_{\text{eff}}^2}\right)}$$

6.1.3 Eingabe von Simulationsparametern

Dann erfolgt die Eingabe der experimentellen Parameter Ionenmasse (m_i [u]), Temperatur des Elektronenstrahls (T_{\parallel} , T_{\perp} [meV]), Impulsbreite des Ionenstrahls ($\Delta p/p$), Transversaltemperatur des Ionenstrahls ($T_{i,\perp}$ [eV]), Spannung bei Kühlung (U_{Cool} [V]) und Kathodenspannung (U_{Kath} [V]). Diese Parameter sind entweder aus dem Experiment bekannt oder können durch Variation und Vergleich zwischen simuliertem und experimentellem Spektrum gewonnen werden. Es folgt die Eingabe der Anzahl, der von der Simulation durchzuführenden Iterationen pro Energieschritt (i_{\max}). Die Laufzeit des Programms ist direkt proportional zu dieser Eingabe. Ebenfalls hängt die statistische Güte der simulierten Daten von der Zahl der Iterationen ab. Der Parameter sollte dem gewünschten Kompromiss aus Qualität der Simulation und Programmlaufzeit angepasst werden. Ein typischer Startwert für einen nicht zu langen Durchlauf sind 4000 Iterationen. Nach einem optionalen Einbinden von Daten zur Winkelverteilung des Führungsmagnetfeldes und der Eingabe eines Offsets des Elektronen-Ion-Stoßwinkels erfolgt die Eingabe des Energiebereiches über die Parameter (E_{\min} , E_{\max} und ΔU_{DT}) (Abs. 6.1.3.1). Nun wird der Dateiname der zu erstellenden Ausgabedatei abgefragt. Die letzte Eingabe dient der 'Kontrollausgabe' der Energieverteilung nach jeweils x Iterationsschritten. Da niedrige Werte für übermäßig viele Ausgaben sorgen würden, sollte der hier einzutragende Wert nicht zu gering gewählt werden (~ 4000).

6.1.3.1 Energieschritte

Die Energien des zu simulierenden Relativenergiespektrums werden durch die Grenzen (E_{\min} , E_{\max}) und die Verteilung der Schritte innerhalb dieser Grenzen festgelegt. Im Originalprogramm wird die gewünschte Schrittzahl direkt als Parameter abgefragt. Hieraus resultiert eine Messung mit äquidistanten Relativenergieschritten. Die Breite einzelner DR-Resonanzen ist bei niedrigen Relativenergien um bis zu eine Größenordnung niedriger als bei hohen Relativenergien (Abs. 3.4.2). Entsprechend sorgen äquidistante Schritte im Relativenergiespektrum entweder für zu wenige Schritte im Bereich guter Energieauflösung oder für unnötig viele Schritte – und einen zusätzlichen Rechenaufwand – im Bereich weniger guter Energieauflösung. Um dieses Problem zu vermindern, wurde das Programm zu im Laborsystem äquidistanten Schritte geändert. Dies sorgt aufgrund der Transformationsfunktion (Abb. 3.1) bei niedrigen Relativenergien für deutlich dichtere und bei hohen Relativenergien für weiter auseinanderliegende Schritte, so dass die Anzahl der Schritte pro Resonanzbreite keine so starken Unterschiede mehr aufweist. Die Festle-

gung der Schrittdichte im Laborenergiesystem erfolgt durch Eingabe des Parameters ΔU_{DT} [V], aus dem die Anzahl und jeweilige Relativenergie der Schritte berechnet wird.

6.1.4 Berechnung des DR-Ratenkoeffizienten

Zur numerischen Berechnung des DR-Ratenkoeffizienten äquivalent zu Gl 1.20 werden für jeden Schritt k mit Relativenergie E_k eine Anzahl (i_{\max}) Elektron-Ion-Stoßenergien $E_{i,k}$ 'ausgewürfelt'. Die Verteilung der Energien entspricht hierbei der durch die Experimentparameter (siehe 6.1.3) definierten Verteilung der Stoßenergien bei der gegebenen Relativenergie zwischen Elektronen und Ionenstrahl E_k . Aus den Resonanzenergien (ER_j), Resonanzbreiten (w_j) und Resonanzstärken (S_j) der n gegebenen DR-Resonanzen berechnet sich die Lorentzverteilung der Resonanz j . Die Summation über alle Lorentz-Verteilungen bildet den totalen DR-Wirkungsquerschnitt. Die Multiplikation des Wirkungsquerschnittes bei Stoßenergie $E_{i,k}$ mit der Geschwindigkeit $v(E_{i,k})$ und anschließende Summation über alle Stoßenergien $E_{i,k}$ ergibt den DR-Ratenkoeffizienten an der Stelle E_k . Hierbei fließen experimentelle Parameter, wie z.B. die Impulsbreite $\Delta p/p$, über die 'ausgewürfelten' Elektron-Ion-Stoßenergien $E_{i,k}$ in den simulierten Ratenkoeffizienten ein.

$$\alpha_{\text{DR}}(E_k) = \frac{1}{i_{\max}} \sum_{i=1}^{i_{\max}} \sum_{j=1}^{j=n} \frac{2S_j}{\pi} \frac{w_j}{4(E_{i,k} - ER_j)^2 + w_j^2} \cdot \frac{ER_j^2 + w_j^2}{ER_j \cdot E_{i,k}} \cdot v(E_{i,k}) \quad (6.1)$$

6.1.5 Ausgabe der Ratenkoeffizienten

Die Ratenkoeffizienten werden in eine Datei ausgegeben. Diese enthält eine Kopfzeile mit Angaben zu den verwendeten Parametern und der genutzten DR-Theorie-Quelldatei. Hierauf folgt tabellarisch der eigentliche Inhalt der Ausgabedatei. Jede Zeile entspricht dabei einem Energieschritt des Spektrums. Die Ausgabe ist in vier Spalten geordnet, welche die Energie, RR-Ratenkoeffizient, den DR-Ratenkoeffizient und die Summe aus DR- und RR-Ratenkoeffizient in Einheiten von eV bzw. cm^3/s enthalten. Tabelle 6.1 gibt hierfür ein Beispiel.

Tabelle 6.1: Exemplarischer Aufbau der Ausgabedatei, bestehend aus Kopfzeile(n) und 4 Spalten für Relativenergie [eV] sowie die RR-, DR- bzw. RR + DR-Ratenkoeffizienten [cm^3/s].

DR Theory Data: /home/dietrich/xenon/sim/dietrich/steih/BeMetakor.steih			
m_ion: 1.275e+11 U_cool: 32054.9 U_cath: 32054.9 kTPar: 0.0002 kTPerp: 0.12			
Delta p / p: 3e-05 Delta beta Ion x: 0 Delta beta Ion y: 0 kTs_Ion [eV]: 0			
Zeff: 50 nmin: 2 el. in nmin: 0 lmin: 1 nmax: 111 Iterations: 20000			
-4.0001	8.17557e-10	2.9557e-09	3.77325e-09
-3.98342	8.1731e-10	2.90212e-09	3.71943e-09
⋮	⋮	⋮	⋮

Danksagung

Viele Personen haben im Laufe der Arbeit an meiner Dissertation zu deren Gelingen beigetragen. Hierfür möchte ich an dieser Stelle meinen Dank aussprechen, sowohl gegenüber den im Folgenden genannten Personen als auch gegenüber jenen, die ich nicht aufgeführt habe.

Diese Arbeit wurde am Institut für Atom- und Molekülphysik der Justus-Liebig-Universität durchgeführt. Ich danke Prof. Dr. Alfred Müller und Prof. Dr. Stefan Schippers für die Betreuung meiner Arbeit und die vielen fruchtbaren Gespräche für die sie jederzeit ein offenes Ohr hatten. Großer Dank gebührt Dr. Carsten Brandau, von dessen höchst detaillierten Kenntnissen sowohl der physikalischen als auch der experimentellen Besonderheiten der DR-Messungen hochgeladener Schwerionen am ESR ich sehr profitieren konnte und dessen Programm zur Simulation von ESR-Ratenkoeffizientenspektren (Kap. 6.1) mir eine sehr große Hilfe war. Mein Dank gilt Dr. Christophor Kozhuharov, ohne den der reibungslose Ablauf der Messungen an der GSI kaum denkbar gewesen wäre und von dessen jahrelanger Vorarbeit ich sehr profitieren konnte. Bei MSc. Filippo Fratini möchte ich mich für die kurzfristige Unterstützung durch neue theoretische Rechnungen zu Mehrphotonenübergängen und die freundliche Erlaubnis, diese noch unveröffentlichten Resultate in dieser Arbeit verwenden zu dürfen, bedanken. Dr. Zoltán Harman gilt mein Dank für die Unterstützung durch MCDF-Rechnungen. Bedanken möchte ich mich bei Dr. Eike Schmidt-Naujok, Dr. Alexander Borovik und Dipl.-Phys. Kristof Holste für viele fruchtbare, intensive Diskussionen an unserem Institut. Den weiteren ehemaligen sowie aktuellen Mitgliedern des Institutes gilt mein Dank für die Unterstützung und die angenehme Atmosphäre. Für die Durchführung der Messungen gilt mein Dank den vielen an der erfolgreichen Durchführung der Strahlzeit Beteiligten, der ESR-Mannschaft und der GSI-Beschleuniger-Crew. Ein ganz besonderer Dank gilt meinen Eltern für die Unterstützung meines Studiums und meiner Dissertation.