

Elektronen-Partialwellenanalyse interferierender
Kr I $3d^9 5p / 6p$ -Resonanzen des resonanten
Raman-Auger-Effekts mit Bestimmung
von Orientierung und Alignment
durch Fluoreszenzpolarimetrie

Rüdiger Holger Schill

(Dissertation, Universität Gießen, Juli 2004)



I. Physikalisches Institut der
Justus-Liebig-Universität Gießen
Heinrich-Buff-Ring 16, 35392 Gießen

Dekan: Prof. Dr. V. Metag

I. Berichterstatter: Prof. Dr. K.-H. Schartner

II. Berichterstatter: Prof. Dr. A. Müller

Tag der mündlichen Prüfung 20.08.2004

**ELEKTRONEN-PARTIALWELLENANALYSE
INTERFERIERENDER KR I $3d^9$ $5p/6p$ -RESONANZEN
DES RESONANTEN RAMAN-AUGER-EFFEKTS
MIT BESTIMMUNG VON ORIENTIERUNG UND
ALIGNMENT DURCH FLUORESZENZPOLARIMETRIE**

Inauguraldissertation
zur Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften
der Justus-Liebig-Universität Gießen
Fachbereich 07
(Mathematik und Informatik, Physik, Geographie)

vorgelegt von
Rüdiger Holger Schill
geboren in Herborn

I. Physikalisches Institut
der Justus-Liebig-Universität Gießen

Juli 2004

INHALTSVERZEICHNIS

ABBILDUNGSVERZEICHNIS	5
TABELLENVERZEICHNIS	8
1 EINLEITUNG	9
2 ATOMPHYSIKALISCHE GRUNDLAGEN	13
2.1 Der resonante Auger-Effekt	13
2.1.1 Wirkungsprinzip.....	13
2.1.2 Theoretische Behandlung.....	15
2.2 Definitionen von zirkular polarisiertem Licht	19
2.3 Bestimmung des Alignment- und Orientierungsparameters	20
2.3.1 Bestimmung des Alignmentparameters A_{20} mit linear horizontal polarisierter Anregung.....	23
2.3.2 Bestimmung des Alignmentparameters A_{20} mit zirkular polarisierter Anregung.....	24
2.3.3 Bestimmung des Orientierungsparameters O_{10} mit zirkular polarisierter Anregung.....	25
3 EXPERIMENTELLER AUFBAU	27
3.1 UE56-Undulator Beamline bei BESSY II	27
3.2 Apparativer Aufbau	28
3.3 Empfindlichkeit des polarisationsempfindlichen Detektorzweiges	34

4	MESSMETHODE UND -VERFAHREN	37
4.1	PIFS für den resonanten Raman-Auger-Zerfall.....	37
4.2	Datenerfassung und -verarbeitung.....	39
4.3	Untergrundkorrektur.....	40
4.4	Korrekturen für die verwendeten Interferenzfilter.....	43
4.5	Fit einer Sinus-Funktion.....	47
4.6	Normierung.....	48
4.7	Bestimmung von Alignment- und Orientierungsparameter.....	48
4.8	Beispiele für gemessene Amplitudenmodulationen.....	50
4.9	Korrektur von Kaskaden und Depolarisation.....	52
4.10	Elektronen-Partialwellenanalyse.....	55
5	ERGEBNISSE UND DISKUSSION	57
5.1	Analyse des Kr II $4p^4 (^1S) 5p^2 P_{1/2} \rightarrow 4p^4 (^1S) 5s^2 S_{1/2}$ - Fluoreszenzübergangs bei 445,321 nm.....	57
5.2	Analyse des Kr II $4p^4 (^1D) 5p^2 D_{5/2} \rightarrow 4p^4 (^1D) 5s^2 D_{5/2}$ - Fluoreszenzübergangs bei 408,833 nm.....	59
5.3	Analyse des Kr II $4p^4 (^1D) 5p^2 F_{7/2} \rightarrow 4p^4 (^1D) 5s^2 D_{5/2}$ - Fluoreszenzübergangs bei 457,720 nm.....	72
5.4	Messungen abseits von Resonanzen.....	80
5.5	Beiträge der direkten Anregung.....	81
6	FEHLERBETRACHTUNG	85
6.1	Statistische Fehlerbetrachtung.....	85
6.1.1	Statistischer Fehler des Alignmentparameters bei linearer horizontal polarisierter Anregung.....	87
6.1.2	Statistischer Fehler des Alignmentparameters bei zirkular polarisierter Anregung.....	87
6.1.3	Statistischer Fehler des Orientierungsparameters bei zirkular polarisierter Anregung.....	87

6.2	Systematische Fehlerbetrachtung	88
6.2.1	Polarisation des anregenden Synchrotronstrahles	88
6.2.2	Paralleler Strahlengang im polarisationsempfindlichen Detektorzweig	88
6.2.3	Polarisationsfilterstellung	90
6.2.4	Stellung des $\lambda/4$ -Plättchens	91
6.2.5	Beobachtungswinkel θ	93
6.2.6	Winkel ϕ des polarisationsempfindlichen Detektorzweiges zur Speicherringebene	94
6.2.7	Dunkelzählraten des polarisationsempfindlichen Detektorzweiges	95
6.2.8	Transmissionsverhalten der verwendeten Interferenzfilter	95
6.2.9	Kaskadenkorrektur	98
6.3	Fehlerbetrachtung der Elektronen-Partialwellenanalyse	101
7	ZUSAMMENFASSUNG	103
8	ANHANG	107
8.1	Ergebnis-Tabellen	107
8.2	Auswertung der BESSY II-Strahlzeit 1203	108
	LITERATURVERZEICHNIS	123

Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1:	Schematische Darstellung der Besetzung von Kr II-Satellitenzuständen durch den resonanten Auger-Effekt.....	14
Abb. 2.2:	Schematische Darstellung des resonanten Auger-Effekts mit resonanter und direkter Anregung.....	19
Abb. 2.3:	Polarisationszustände eines axialsymmetrischen Systems.....	21
Abb. 2.4:	Darstellung des Kollisions- und Detektions-Koordinatensystems.....	23
Abb. 3.1:	Schematischer Aufbau der PIFS-Apparatur.....	30
Abb. 3.2:	Schematischer Aufbau des polarisationsempfindlichen Detektorzweiges...	31
Abb. 3.3:	Versuchsaufbau zur Bestimmung des Drehsinnes von zirkular polarisiertem Licht.....	35
Abb. 3.4:	Versuchsaufbau zur Analyse von zirkular polarisiertem Licht.....	36
Abb. 4.1:	Schematische Darstellung der PIFS-Methode.....	38
Abb. 4.2:	Beispiel einer gemessenen Amplitudenmodulation.....	40
Abb. 4.3:	Beispiel von gemessenen Dunkelzählraten des polarisationsempfindlichen Detektorzweiges.....	41
Abb. 4.4:	Transmissionskurve des Interferenzfilters für die 408,833 nm-Linie.....	43
Abb. 4.5:	Transmissionskurve des Interferenzfilters für die 445,321 nm-Linie.....	44
Abb. 4.6:	Transmissionskurve des Interferenzfilters für die 457,720 nm-Linie.....	44
Abb. 4.7:	Fluoreszenzspektrum im Bereich der 408,833 nm-Linie.....	45
Abb. 4.8:	Fluoreszenzspektrum im Bereich der 445,321 nm- und 457,720 nm-Linie.....	46
Abb. 4.9:	Schematische Darstellung der Ableitung von π_{lin} und π_{circ} aus den Amplitudenmodulationen.....	49

Abb. 4.10:	Amplitudenmodulation der 457,720 nm-Linie mit links zirkular polarisierter Anregung auf R1 – R4.....	51
Abb. 4.11:	Normierte Amplitudenmodulation der 457,720 nm-Linie mit links zirkular polarisierter Anregung auf R1 – R4.....	52
Abb. 4.12:	Relative Quanteneffizienz des positionsempfindlichen Detektorsystems....	53
Abb. 5.1:	Amplitudenmodulation der 445,321 nm-Linie mit linear polarisierter Anregung.....	58
Abb. 5.2:	Amplitudenmodulation der 445,321 nm-Linie mit zirkular polarisierter Anregung.....	59
Abb. 5.3:	Korrekturfaktoren für Kaskaden und Depolarisation der 408,833 nm-Linie.....	63
Abb. 5.4:	Ergebnisse für Alignment, Orientierung und Partialwellenanalyse der 408,833 nm-Linie auf R1 – R4.....	65
Abb. 5.5:	Ergebnisse für Alignment, Orientierung und Partialwellenanalyse der 408,833 nm-Linie mit Angabe der Fehler auf R1 – R4.....	66
Abb. 5.6:	Normierte Amplitudenmodulationen der 408,833 nm-Linie mit linear polarisierter Anregung im Bereich von R1.....	69
Abb. 5.7:	Vergleich experimenteller Ergebnisse für Alignment der 408,833 nm-Linie mit Angabe der Fehler auf R2 – R4.....	71
Abb. 5.8:	Korrekturfaktoren für Kaskaden und Depolarisation der 457,720 nm-Linie.....	73
Abb. 5.9:	Ergebnisse für Alignment, Orientierung und Partialwellenanalyse der 457,720 nm-Linie auf R1 – R4.....	75
Abb. 5.10:	Ergebnisse für Alignment, Orientierung und Partialwellenanalyse der 457,720 nm-Linie mit Angabe der Fehler auf R1 – R4.....	76
Abb. 5.11:	Vergleich experimenteller Ergebnisse für Alignment der 457,720 nm-Linie mit Angabe der Fehler auf R2 – R4.....	78
Abb. 5.12:	Normierte Amplitudenmodulationen der 457,720 nm-Linie mit links zirkular polarisierter Anregung abseits der Resonanzen.....	80

Abb. 5.13:	Vergleich von Fluoreszenzspektren mit resonanter und direkter Anregung im Wellenlängenbereich von 415 nm.....	82
Abb. 5.14:	Vergleich von Fluoreszenzspektren mit resonanter und direkter Anregung im Wellenlängenbereich von 445 nm.....	83
Abb. 6.1:	Testmessung im polarisationsempfindlichen Detektorzweig mit Polarisationsfilter in der Gastargetzelle.....	90
Abb. 6.2:	Simulationsrechnung für die Justage des $\lambda/4$ -Plättchens.....	93
Abb. 6.3:	Intensität I_{Linie} zur Korrektur des Interferenzfilters für die 408,833 nm-Linie.....	96
Abb. 6.4:	Intensität I_{Linie} zur Korrektur des Interferenzfilters für die 457,720 nm-Linie.....	97
Abb. 6.5:	Vergleich der Ergebnisse für Alignment- bzw. Orientierungsparameter der 408,833 nm-Linie mit unterschiedlichen Kaskadenanteilen.....	99
Abb. 6.6:	Vergleich der Ergebnisse für Alignment- bzw. Orientierungsparameter der 457,720 nm-Linie mit unterschiedlichen Kaskadenanteilen.....	100
Abb. 8.1:	Normierte Amplitudenmodulationen der 408,833 nm-Linie mit linear polarisierter Anregung im Bereich von R2 – R4.....	117
Abb. 8.2:	Normierte Amplitudenmodulationen der 408,833 nm-Linie mit links zirkular polarisierter Anregung im Bereich von R1.....	118
Abb. 8.3:	Normierte Amplitudenmodulationen der 408,833 nm-Linie mit links zirkular polarisierter Anregung auf R2 – R4.....	119
Abb. 8.4:	Normierte Amplitudenmodulationen der 457,720 nm-Linie mit linear polarisierter Anregung im Bereich von R1.....	120
Abb. 8.5:	Normierte Amplitudenmodulationen der 457,720 nm-Linie mit linear polarisierter Anregung im Bereich von R2 – R4.....	121
Abb. 8.6:	Normierte Amplitudenmodulationen der 457,720 nm-Linie mit links zirkular polarisierter Anregung im Bereich von R1.....	122

Tabellenverzeichnis

Tab. 4.1:	Partielle Alignmentparameter und α_2 -Strukturparameter für die untersuchten Fluoreszenzübergänge.....	56
Tab. 4.2:	Partielle Orientierungsparameter und α_1 -Strukturparameter für die untersuchten Fluoreszenzübergänge.....	56
Tab. 8.1:	Ergebnisse des Alignment- und Orientierungsparameters für die 408,833 nm-Linie.....	107
Tab. 8.2:	Ergebnisse des Alignment- und Orientierungsparameters für die 457,720 nm-Linie.....	108
Tab. 8.3:	Exemplarische Auswertung der Rohdaten der Strahlzeit 1203.....	109ff

1 Einleitung

Der resonante Auger-Effekt beschreibt die resonante Absorption eines Photons durch ein inneres Elektron, wobei der Grundzustand oder ein angeregter Zustand des einfach ionisierten Systems besetzt und ein Auger-Elektron emittiert wird. Dies kann im direkten Prozess (Einstufen-Modell) oder alternativ durch die Besetzung eines Rydbergzustandes mit anschließender Autoionisation unter Beteiligung oder Passivität des Rydbergelektrons beschrieben werden (Zweistufen-Modell). Beide Modelle beinhalten den Einfluss von Elektronenkorrelationen.

Mit dem bisher zumeist angewandten Modell eines Zweistufen-Prozesses lässt sich das Verhalten isolierter Resonanzen diskutieren. Eine der bekanntesten Krypton-Resonanzen dieser Klasse ist die Kr I $3d_{5/2}^9 5p_{3/2}$ -Resonanz bei 91,2 eV. Ihr Zerfall wurde erstmals von Eberhardt et al. experimentell untersucht [Ebe78]. Der resonante Auger-Effekt führt in diesem Fall zur Besetzung von $4s^1 4p^3 nl$ und $4p^4 nl$ Zuständen, die inzwischen mit Bandbreiten der anregenden Undulatorstrahlung um 10 meV mit Hilfe der gebräuchlichen Photoelektronenspektroskopie (PES) in ihren Feinstrukturaufspaltungen aufgelöst werden können. Die wesentlichen Fortschritte bezüglich der Auflösung wurden in Experimenten am MAXlab erzielt, bei denen der RA Effekt mit Bandbreiten der anregenden Strahlung unterhalb der natürlichen Linienbreite untersucht werden konnte (resonanter Raman-Auger-Effekt) [Kiv93]. Eine lineare Dispersion in der kinetischen Energie des Auger-Elektrons zeigt sich, wenn die Energie der anregenden Photonen über die Resonanz gefahren wird. Die bisherigen Arbeiten zum resonanten Auger-Effekt, mit Schwerpunkt auf Edelgasatomen, wurden in einem *Topical Review* im Journal of Physics B zusammengefasst [Arm00]. Dabei nehmen Krypton und Xenon als Target eine zentrale Stellung ein ([Tul94], [Aks96a], [Aks96b]).

Wenn die Abstände dicht liegender Resonanzen vergleichbar mit der natürlichen Linienbreite werden, treten Kohärenzphänomene auf. Sie führen zu interferierenden Amplituden und verändern im Vergleich zu einer statistischen Überlagerung von Werten

des Zweistufen-Modells sowohl die Intensitätsverteilung der Zerfallskanäle als auch sensitivere differentielle Parameter wie z.B. die Winkelverteilung der Auger-Elektronen. Im Krypton sind Kohärenzen für die mit ihren Lorentzbreiten überlappenden $3d^9_{3/2} 5p_{3/2,1/2}$ und $3d^9_{5/2} 6p_{3/2}$ Resonanzen, bei einer Energie um 92,5 eV, zu erwarten. Theoretische Beschreibungen durch das Modell der interferierenden Resonanzen berücksichtigen diesen Effekt. Es ist das Ziel der vorliegenden Arbeit, durch den Vergleich mit dem Experiment das Ergebnis der theoretischen Behandlung des Interferenz-Phänomens zu überprüfen.

Ein weiterer Einfluss auf den resonanten Auger-Effekt ist aus der Interferenz von direkter und resonanter Anregung zu erwarten, die das Charakteristikum der Doppelspaltinterferenz besitzt und für Krypton-Zustände von der Theorie vorhergesagt wird ([Kit01], [Lag03b]). Sie wurde bereits bei Argon-Ionenzuständen nachgewiesen ([Cam96], [Mar01]). Dieser Interferenzeffekt soll hinsichtlich der Nachweisbarkeit in zukünftigen Polarimetrie-Experimenten untersucht werden.

Die verwendete photoneninduzierte Fluoreszenzspektroskopie (PIFS) stellt für den resonanten Auger-Effekt ein mögliches Analyseverfahren dar, das als Alternative oder Ergänzung zur klassischen Photoelektronenspektroskopie (PES) zu betrachten ist. Bei der Photoelektronenspektroskopie müssen zur Bestimmung des Winkelanisotropieparameters $\beta(\text{el})$ der Auger-Elektronen die partiellen Alignment- bzw. Orientierungsparameter kohärent summiert werden, so dass die beim Auger-Zerfall auftretenden Phasen zwischen den Elektronen-Partialwellen zu ermitteln sind. Die photoneninduzierte Fluoreszenzspektroskopie beobachtet den fluoreszenten Zerfall des angeregten Ionenzustandes, der durch den Auger-Zerfall besetzt wird. Sie bietet den Vorteil, dass die partiellen Alignment- bzw. Orientierungsparameter für die Bestimmung des Winkelanisotropieparameters $\beta(\text{fl})$ der Fluoreszenzstrahlung und damit auch für die Bestimmung des Alignment- (A_{20}) und Orientierungsparameters (O_{10}) inkohärent summiert werden. Über die Alignment- und Orientierungsparameter lässt sich schließlich für den vorausgegangenen Auger-Zerfall eine Elektronen-Partialwellenanalyse ableiten.

Um den Alignment- bzw. Orientierungsparameter zu bestimmen, ist eine vollständige Polarisationsanalyse der Fluoreszenzstrahlung vorzunehmen. Den experimentellen Zugang dazu bietet ein im Rahmen dieser Arbeit in die bestehende PIFS-Apparatur neu integriertes und quantifiziertes polarisationsempfindliches Detektionssystem, bestehend aus $\lambda/4$ -Plättchen, Polarisationsfilter, Interferenzfilter und Photomultiplier. Damit werden die experimentellen Möglichkeiten der Apparatur, die sich bisher auf die Fluoreszenzspektroskopie beschränkten, um die Polarimetrie erweitert.

Die bei BESSY II zu Verfügung stehenden Undulator-Beamlines UE56 und U125 ermöglichen die Untersuchung des resonanten Auger-Effekts mit hohem Fluss im Raman-Regime bei einer Bandbreite der anregenden Synchrotronstrahlung von etwa 10 meV, so dass es bei diesem Experiment erstmals möglich ist, das Verhalten von Alignment- und Orientierungsparameter in den Flanken von Resonanzen zu studieren. Ein Polarimetrie-Experiment an den analogen Xe $4d^9 6p$ -Zuständen wurde nur an den Positionen der Resonanzen durchgeführt [Kee03]. Interferenzeffekte durch Lebensdauererweiterung, die in den Flanken der Resonanzen erwartet werden, wurden bisher nur bei der Intensität von Shake-Up-Satelliten nach resonanter Ne $1s \rightarrow 3p$ Anregung erwähnt [Rub96].

Ziel der Arbeit ist es, die mit dem Modell der interferierenden Resonanzen berechnete Energieabhängigkeit des Alignment- und Orientierungsparameters bzw. der drei jeweils beteiligten Elektronen-Partialwellen mit dem polarisationsempfindlichen Detektionssystem im Bereich von etwa 91 eV - 93 eV für verschiedene Ausgangszustände im Fluoreszenzzerfall zu überprüfen und zu klären, ob die berechneten Abweichungen zum Zweistufen-Modell durch das Experiment nachweisbar sind. Dies betrifft explizit auch die bisher als isoliert angesehene Kr I $3d^9_{5/2} 5p_{3/2}$ -Resonanz, und dabei u.a. die Besetzung des $4p^4 (^1D) 5p^2 D_{5/2}$ -Zustandes, für den ein deutlicher Einfluss der relativ weit entfernten höher energetischen Resonanzen auf den Alignmentparameter innerhalb der Linienbreite vorhergesagt wurde.

2 Atomphysikalische Grundlagen

Im Folgenden soll der resonante Auger-Effekt und Möglichkeiten für dessen theoretische Beschreibung vorgestellt werden. Des Weiteren werden im Rahmen der Anregung durch zirkular polarisierte Synchrotronstrahlung zwei unterschiedliche Definitionen zum Drehsinn erläutert, und schließlich werden die Gleichungen hergeleitet, mit denen der Alignment- bzw. Orientierungsparameter aus Intensitätsmessungen der Fluoreszenzstrahlung extrahiert werden kann.

2.1 Der resonante Auger-Effekt

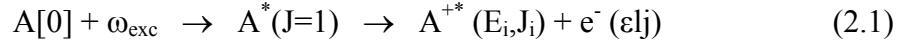
Die in dieser Arbeit untersuchten angeregten Kr II $3d^{10} 4p^4 5p$ -Ionenzustände entstehen über den resonanten Auger-Effekt aus den Kr I $3d^9_{5/2} 5p_{3/2}$ - (R1, Anregungsenergie 91,2 eV), Kr I $3d^9_{3/2} 5p_{1/2}$ - (R2, Anregungsenergie 92,424 eV), Kr I $3d^9_{3/2} 5p_{3/2}$ - (R3, Anregungsenergie 92,454 eV) und Kr I $3d^9_{5/2} 6p_{3/2}$ - (R4, Anregungsenergie 92,564 eV) Atomzuständen. Die Abkürzungen R1 – R4 für die jeweiligen Resonanzen werden in dieser Arbeit zur Vereinfachung verwendet.

2.1.1 Wirkungsprinzip

Als resonanten Auger-Effekt bezeichnet man die resonante Absorption eines Photons durch ein Inner-Schalen-Elektron, bei der das Elektron auf eine höhere Schale angeregt wird. Anschließend füllt beim Zerfall dieses angeregten Atomzustandes ein Elektron aus einer höheren Schale das bei der resonanten Anregung entstandene Loch auf und ein anderes Elektron wird ins Kontinuum emittiert (Auger-Effekt). Das resonant angeregte Elektron kann beim Auger-Zerfall entweder beteiligt (Participator) oder unbeteiligt sein (Spectator). Dabei wird der Grundzustand oder ein angeregter Zustand des einfach ionisierten Systems besetzt.

Der resonante Auger-Effekt bietet einen Zugang zum Studium von Elektronenkorrelationen, da die Dipolanregung von Atomen durch Photonen aufgrund des

Charakteristikums des Dipoloperators nur eine Ein-Elektronen-Anregung erlaubt und durch den anschließenden Auger-Zerfall ein Zwei-Elektronen-Prozess entsteht:



[0] bezeichnet dabei den Grundzustand des Atoms, ω_{exc} die Energie $h\nu$ eines Photons in der resonanten Anregung. E_i , J_i und ϵl klassifizieren den besetzten angeregten Zustand i (initial) bezüglich Quantenzahlen, Bindungsenergie und totalem Drehimpuls sowie Energie, Bahndrehimpuls und totalen Drehimpuls des Auger-Elektrons. Dabei werden die Wirkungsquerschnitte für die Besetzung des Zustandes i stark vom resonanten Auger-Effekt durch die Resonanz dominiert [Ebe78]. Mit diesem Modell eines Zweistufen-Prozesses lässt sich das Verhalten isolierter Resonanzen diskutieren.

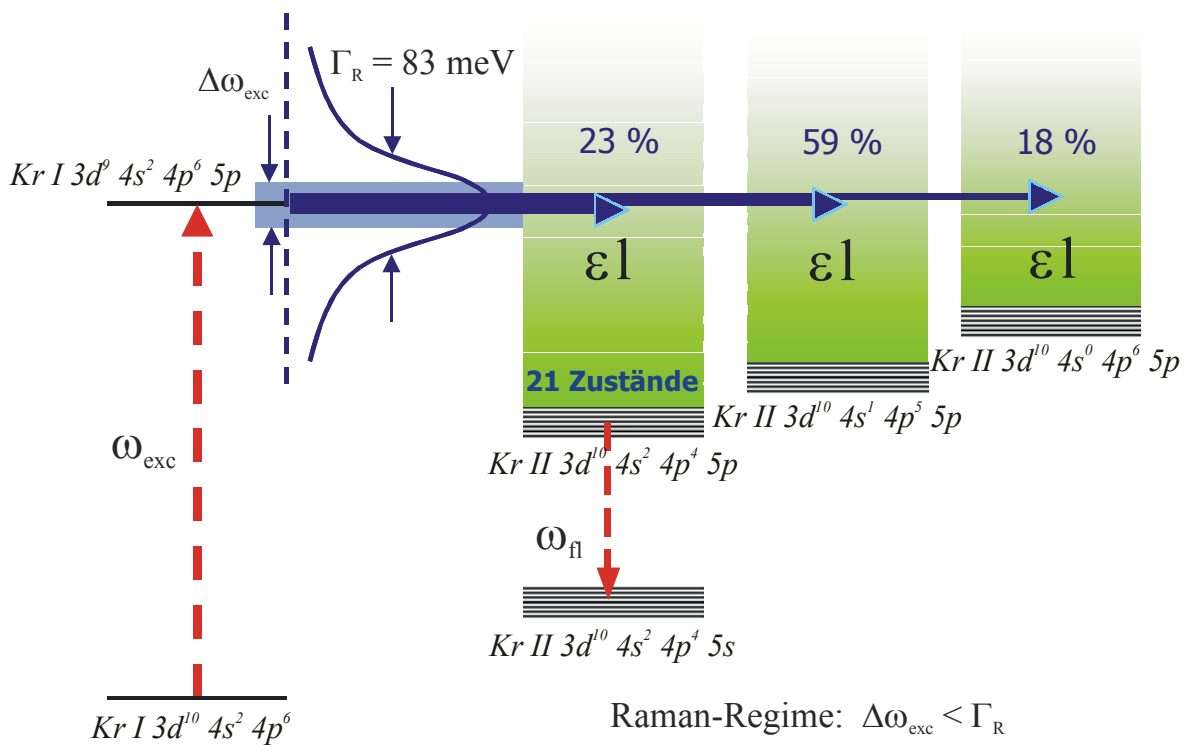


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der Besetzung von Kr II $4s^2 4p^4 5p$ -, $4s^1 4p^5 5p$ - und $4s^0 4p^6 5p$ -Satellitenzuständen durch den resonanten Auger-Effekt. ω_{exc} bezeichnet die Anregungsenergie, $\Delta\omega_{\text{exc}}$ die Bandbreite derselben und ω_{fl} die freiwerdende Energie des fluoreszenten Zerfalls. Γ_R ist die Halbwertsbreite der angeregten isolierten Resonanz. ϵl charakterisiert das emittierte Elektron im Auger-Zerfall bei resonanter Anregung.

In dieser Arbeit werden Kr II $3d^{10} 4p^4 5p$ -Zustände untersucht, die durch den Auger-Zerfall der Resonanzen R1 – R4 besetzt werden. Diese zählen zu den 21 Zuständen dieser Konfiguration, die seit längerem Thema der Forschung sind ([Aks96a], [Zitate in Aks96a], [Aks96b], [Zim00], [Lag03a], [Lag03b]). Ihr Entstehungsprozess findet alternativ zur Besetzung von Kr II $3d^{10} 4s^1 4p^5 5p$ - und $3d^{10} 4s^0 4p^6 5p$ -Zuständen durch den resonanten Auger-Effekt statt (Abbildung 2.1), die allerdings autoionisieren. Wählt man die Bandbreite der anregenden Strahlung $\Delta\omega_{\text{exc}}$ kleiner als die natürliche Linienbreite der Resonanz Γ_R , so findet die Anregung im sogenannten Raman-Regime statt, und man spricht vom resonanten Raman-Auger-Effekt. Dadurch kann das Verhalten einer isolierten Resonanz innerhalb der natürlichen Linienbreite in den Flanken und im Maximum untersucht und bewertet werden. Außerdem können energetisch überlappende oder dicht zusammenliegende Resonanzen detailliert untersucht werden. Bei der Beschreibung eines solchen Falles ist jedoch das Zweistufen-Modell nicht mehr geeignet, da es den Einfluss nur einer Resonanz berücksichtigt und außerdem die direkte Anregung vernachlässigt.

Der experimentelle Wert der natürlichen Linienbreite, der auch in den theoretischen Betrachtungen verwendet wird, beträgt für die Kr I $3d^9 4s^2 4p^6 np$ -Resonanzen 83 meV ([Lag03a], [Lag03b]).

2.1.2 Theoretische Behandlung

Die einfachste Beschreibung behandelt den resonanten Auger-Effekt als unabhängigen Zweistufen-Prozess der resonanten Anregung, die nur den energetisch ausgewählten Kanal der einzelnen anregenden Resonanz und einen nachfolgenden Auger-Zerfall berücksichtigt. Für den betrachteten resonanten Auger-Effekt im Krypton bedeutet das im Zweistufen-Modell eine Berücksichtigung der resonanten Anregung von Kr I $3d^9 4s^2 4p^6 5p / 6p$ -Zuständen und ihren anschließenden Auger-Zerfall in Kr II $3d^{10} 4s^2 4p^4 5p$ -Zustände.

Dieses Modell ist nur für isolierte Resonanzen anwendbar, die mit der gesamten Linienbreite der Resonanz angeregt werden. Aufgrund dieser Resonanzbreite haben auch die im Auger-Zerfall emittierten Elektronen eine Energieverteilung [Rub96]. Wenn ein

größerer Energiebereich mit mehreren benachbarten Resonanzen betrachtet werden soll, erhält man mit dem Zweistufen-Modell einen Energieverlauf, indem man die Einzelwerte im Zweistufen-Modell auf den jeweiligen Resonanzen mit dem energieabhängigen Wirkungsquerschnitt der Resonanz statistisch wichtet.

Eine andere Möglichkeit, den resonanten Auger-Effekt zu beschreiben, ist die Koppelung der Prozesse von Anregung und Zerfall. Die kinetische Energie der im Auger-Zerfall entstehenden Elektronen variiert dabei im Gegensatz zum Zweistufen-Modell mit der Energie der anregenden Photonen ([Rub96], [Mar97]). D.h. die emittierten Elektronen haben nicht mehr den Charakter von Auger-Elektronen, sondern eher den von Elektronen, die in der Photoemission entstehen. Für eine isolierte Resonanz ist das Einstufen-Modell auf der Resonanz identisch mit dem Zweistufen-Modell. Man ist jedoch nicht mehr auf das Vorhandensein von isolierten Resonanzen angewiesen. Die Interferenz von Resonanzen, die durch Lebensdauerbreiterung überlappen, kann bei resonanter Anregung mit einer festen Energie beschrieben werden, so dass man vom Modell interferierender Resonanzen spricht.

Zusätzlich zur resonanten Anregung kann auch ein direkter Anregungsprozess aus dem Grundzustand in den Zustand i bei gleichzeitiger Emission eines Elektrons stattfinden. In diesem Fall muss das Modell interferierender Resonanzen durch einen weiteren Interferenzterm erweitert werden, so dass sowohl die Interferenz aus direkter Anregung und resonanter Anregung als auch die Interferenz von sich überlappenden Resonanzen (Abbildung 2.2) berücksichtigt wird.

Der totale ($\sigma_{E_i j_i}(\omega_{exc})$) und partielle Wirkungsquerschnitt ($\sigma_{E_i J_i}^{\epsilon l j}(\omega_{exc})$) der Photoionisation für die Besetzung des Zustandes i durch die Anregungsenergie ω_{exc} ist gegeben als:

$$\sigma_{E_i j_i}(\omega_{exc}) = \sum_{l,j} \sigma_{E_i J_i}^{\epsilon l j}(\omega_{exc}) = \frac{4}{3} \pi^2 \alpha a_0^2 \omega_{exc} \sum_{l,j} |D(E_i J_i, \epsilon l j)|^2, \quad (2.2)$$

wobei $D(E_i J_i, \epsilon l j)$ die Übergangsamplitude ist, in der Elektronenkorrelationen enthalten sind. $\alpha = \frac{1}{137,036}$ ist die Feinstrukturkonstante und $a_0 = 0,529177 \text{ \AA}$ der erste Bohr'sche

Radius. ω_{exc} ist die Energie des anregenden Photons in atomaren Einheiten, die sich in die Energien des Auger-Elektrons und des untersuchten Kr II $3d^{10} 4s^2 4p^4 5p (E_i J_i)$ -Zustandes aufteilt:

$$\omega_{exc} = \epsilon + E_i \quad (2.3)$$

Für den Photoionisationsprozess gilt die Drehimpulserhaltung:

$$j_{\omega_{exc}} = J_i + j_{el} \quad (2.4)$$

Daraus lassen sich maximal drei erlaubte Elektronen-Partialwellen ableiten mit:

$$j_{el} = J_i - 1, J_i, J_i + 1 \quad (2.5)$$

Die Bahndrehimpulswerte des Elektrons folgen aus der Paritätserhaltung.

Die Übergangsamplitude $D(E_i J_i, \epsilon l j)$ aus Gleichung 2.2 setzt sich für das Modell interferierender Resonanzen zusammen aus der direkten, nicht resonanten Anregung und der resonanten Anregung, die über alle Resonanzen R summiert wird:

$$D(E_i J_i, \epsilon l j) = \underbrace{\langle E_i J_i, \epsilon l j | D | 0 \rangle}_{\text{direkte Anregung}} + \sum_R \frac{\langle E_i J_i, \epsilon l j | H^{ee} | R \rangle \langle R | D | 0 \rangle}{(\omega_{exc} - E(R)) + i\Gamma_R / 2} \quad (2.6)$$

resonante Anregung

Dabei beschreibt der Coulomb-Operator H^{ee} den Auger-Zerfall und der elektrische Dipoloperator D die resonante Anregung aus dem Grundzustand.

Abbildung 2.2 zeigt schematisch den resonanten Auger-Effekt im Modell interferierender Resonanzen für die Kr I $3d^9_{3/2} 5p_{1/2}$ -Anregung und die direkte Besetzung. R3 ist nicht eingezeichnet, da ihr Einfluss aufgrund geringer Besetzung (Berechnungen ergeben 1/19 [Tul94] bzw. 1/80 der Intensität von R2 [Lag03a]) für die theoretische Behandlung der in dieser Arbeit vorgestellten Ergebnisse vernachlässigt wird ([Lag03a], [Lag03b]). Die Gültigkeit dieser Annahme bleibt zu überprüfen.

Die Auswertung von Gleichung 2.6 für die 21 Kr II-Zustände, die die betrachteten Zustände einschließen, wird von Lagutin et al. ([Lag03a], [Lag03b]) durch eine Kombination von Konfigurationswechselwirkung (CI) und Vielteilchenstörungstheorie (MBPT) vorgenommen. Nach Lagutin et al. enthalten die mit Kr II $3d^{10} 4p^4 ({}^1D) 5p {}^2F_{7/2}$ und Kr II $3d^{10} 4p^4 ({}^1D) 5p {}^2D_{5/2}$ bezeichneten Zustände diese LS-Kombinationen zu 96 %.

Die direkte Anregung in Gleichung 2.6 für die untersuchten Kr II $4p^4 ({}^1D) 5p {}^2D_{5/2}$ - und $4p^4 ({}^1D) 5p {}^2F_{7/2}$ -Zustände wird von Lagutin et al. vernachlässigt. Der Grund liegt in dem bei der direkten Anregung beteiligten Shake-Up-Prozess (Monopolanregung), der nur die Besetzung von Kr II $4p^4 5p {}^2P_{3/2, 1/2}$ -Zuständen zulässt. Der eigene experimentelle Aufbau erlaubte eine spektroskopische Überprüfung der Beteiligung der direkten Anregung (Kapitel 5.5).

Im Gegensatz zu R1 – R3, bei denen das 5p-Elektron als Spectator im Auger-Zerfall unbeteiligt bleibt, ist bei R4 (Kr I $3d^9_{5/2} 6p_{3/2}$ -Resonanz) das 6p-Elektron ein Participator. Daher wird bei Lagutin et al. ([Lag03a], [Lag03b]) zusätzlich zur Emission eines Elektrons und zur Abregung eines weiteren Elektrons in die 3d-Schale auch noch ein Shake-Down-Prozess von 6p nach 5p berücksichtigt.

Die genannten Berechnungen auf Basis des Modells interferierender Resonanzen zeigen für die Resonanzen selbst eine gute Übereinstimmung aber für die Flanken der Resonanzen und die Energiebereiche zwischen benachbarten Resonanzen eine klare Abweichung vom Zweistufen-Modell, die in Zusammenhang mit den experimentellen Ergebnissen in Kapitel 5 diskutiert wird.

Damit wird die Aussagekraft des Zweistufen-Modells in Zweifel gezogen, das auch bei Molekülen angewandt wird, bei denen der resonante Auger-Effekt aufgrund selektiver Anregung Beiträge verschiedener Atome trennen kann.

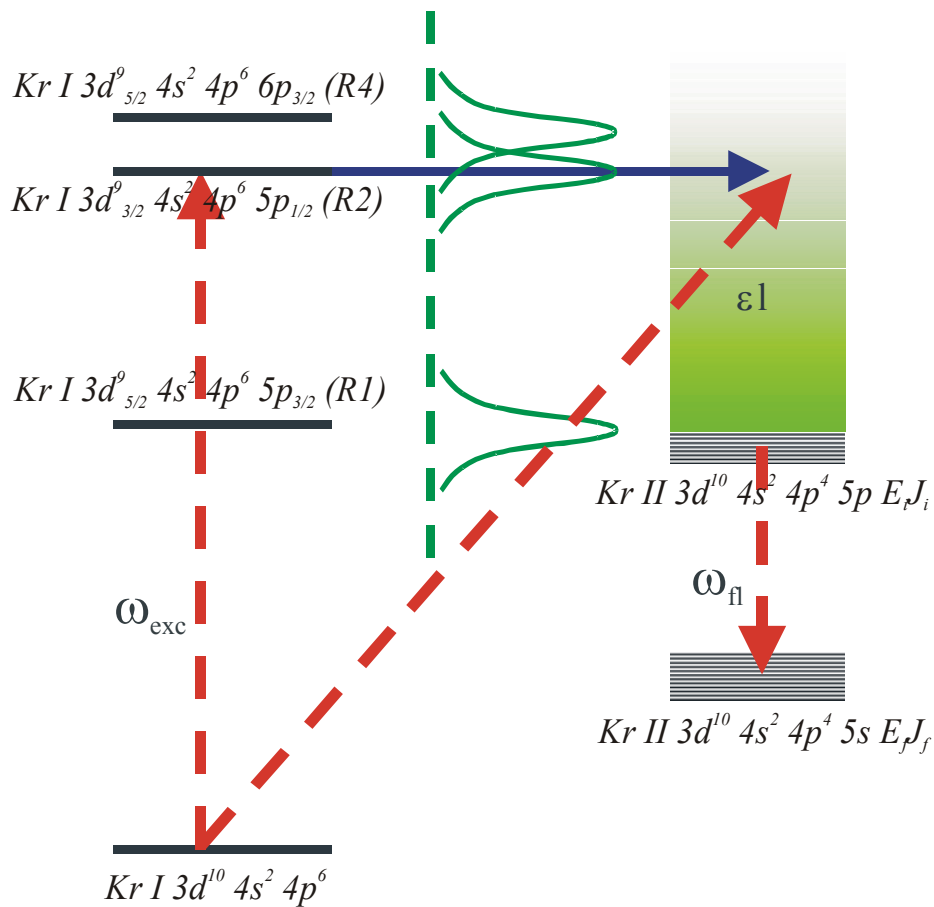


Abbildung 2.2: Besetzung der $Kr II 3d^{10} 4p^4 5p$ -Satellitenzustände durch den resonanten Auger-Effekt auf R2 und direkte Anregung. Schematische Darstellung der Interferenz durch überlappende Resonanzen und der direkten Besetzung. ω_{exc} bezeichnet die Anregungsenergie, ω_{fl} die freiwerdende Energie des radiativen Zerfalls. ϵl charakterisiert das emittierte Elektron im Auger-Zerfall bei resonanter Anregung bzw. bei direkter Anregung in den Ionenzustand.

2.2 Definitionen von zirkular polarisiertem Licht

Die resonante Anregung der $Kr II 3d^{10} 4p^4 5p$ -Zustände erfolgt im Rahmen dieser Arbeit durch linear horizontal polarisierte oder zirkular polarisierte Synchrotronstrahlung.

Es existieren zwei Definitionen zur Beschreibung von zirkular polarisiertem Licht. Die eine ist die optische Definition [Bor65], die andere die Drehimpulsdefinition [Fey91], die die zirkulare Polarisationsrichtung von Licht genauso definiert wie die Polarisationsrichtung von allen anderen Teilchen in der Physik (z.B. Elektronen). Diese beiden Definitionen unterscheiden sich in ihrer Aussage über den Drehsinn.

Wenn man entgegen der Ausbreitungsrichtung von zirkular polarisiertem Licht in die Lichtquelle hineinsieht und sich der elektrische Feldvektor des Lichtes entgegen dem Uhrzeigersinn dreht, handelt es sich nach der optischen Definition um links zirkular polarisiertes Licht. Die Drehimpulsdefinition sieht in dieser Drehung entgegen dem Uhrzeigersinn eine Drehung im mathematisch positiven Sinne und bezeichnet dieses Licht als rechts zirkular polarisiert.

Die in dieser Arbeit verwendete Definition ist, soweit nicht anders erwähnt, die optische Definition.

2.3 Bestimmung des Alignment- und Orientierungsparameters

Der Alignment- (A_{20}) bzw. Orientierungsparameter (O_{10}) ist definiert über:

$$A_{20}(J_i) = \frac{\rho_{20}}{\rho_{00}} = \sqrt{\frac{5}{(2J_i + 3)(J_i + 1)J_i(2J_i - 1)}} \cdot \sum_{M_i} (3M_i^2 - J_i(J_i + 1)) \cdot a(J_i M_i) \quad (2.7)$$

bzw.

$$O_{10}(J_i) = \frac{\rho_{10}}{\rho_{00}} = \sqrt{\frac{3}{J_i(J_i + 1)}} \cdot \sum_{M_i} M_i \cdot a(J_i M_i) \quad (2.8)$$

Dabei sind ρ_{00} , ρ_{10} und ρ_{20} Matrixelemente der Dichtematrix, J_i der Gesamtdrehimpuls des besetzten Ausgangszustandes i und M_i die magnetische Quantenzahl des Ausgangszustandes i , die anschaulich die Projektion von J_i auf die Quantisierungsachse z ist. $a(J_i M_i)$ kennzeichnet die unterschiedliche Besetzung der magnetischen Unterniveaus bei einem polarisierten Ausgangszustands i ([Sch92], [Zim03]). Abbildung 2.3 veranschaulicht die Besetzung der magnetischen Unterniveaus für ein isotropes, ausgerichtetes und orientiertes System.

Alignment- bzw. Orientierungsparameter hängen von der Dynamik des Photoionisationsprozesses ab und werden durch die relativen partiellen Wirkungsquerschnitte bestimmt [Lag03b]:

$$A_{20}(E_i J_i, \omega_{exc}) = \sum_{j_{el}} a_{20}(j_{el}, J_i) \cdot \frac{\sigma_{E_i J_i}^{elj}(\omega_{exc})}{\sigma_{E_i J_i}(\omega_{exc})} \quad (2.9)$$

$$O_{10}(E_i J_i, \omega_{exc}) = \sum_{j_{el}} o_{10}(j_{el}, J_i) \cdot \frac{\sigma_{E_i J_i}^{elj}(\omega_{exc})}{\sigma_{E_i J_i}(\omega_{exc})} \quad (2.10)$$

Die partiellen Alignment- und Orientierungsparameter a_{20} und o_{10} sind rein geometrische Größen und geben das Alignment bzw. die Orientierung an, wenn nur Auger-Elektronen mit der Drehimpuls-Quantenzahl j_{el} beim Übergang in den Zustand J_i emittiert werden.

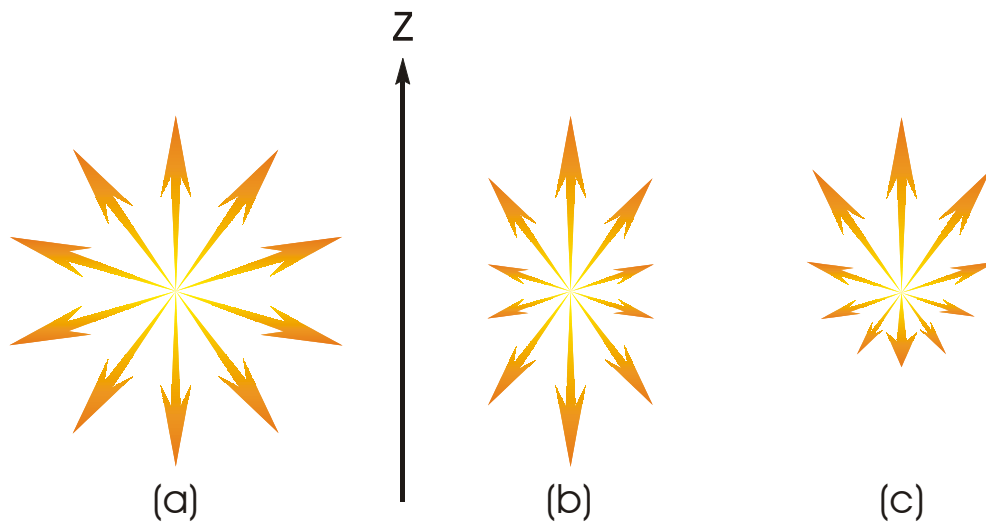


Abbildung 2.3: *Verschiedene Polarisationszustände eines axialsymmetrischen Systems $J_i M_i$ für einen Zustand mit $J_i = 5/2$ mit eingezeichneter Quantisierungsachse z : (a) isotropes System, (b): ausgerichtetes (aligned) System, (c): orientiertes System. Die Länge der Pfeile ist ein Maß für die Anzahl der Teilchen im zugehörigen magnetischen Unterniveau.*

Die Messungen von Alignment- bzw. Orientierungsparameter erlaubt die Bestimmung von drei der fünf zur vollständigen Beschreibung des Photoionisationsprozesses notwendigen Größen, der drei Partialwellenamplituden und der zwei Phasen zwischen den Partialwellen.

Um den Alignment- bzw. Orientierungsparameter abzuleiten, wird der Polarisationsgrad der Fluoreszenzstrahlung bestimmt, die beim Zerfall des angeregten Ionenzustandes i entsteht.

Die Beobachtung der Fluoreszenzstrahlung erfolgt mit einem Detektor, der relativ zur Synchrotronstrahlung in einer bestimmten Position ausgerichtet ist.

Die Arbeit von Schmidt [Sch92] beinhaltet eine geeignete Detektorposition und die zugehörigen Gleichungen, die das gemessene Detektorsignal I (= gemessene Intensität der Fluoreszenzstrahlung) in Abhängigkeit von der Detektorposition beschreiben. Die in dieser Arbeit abgeleiteten Gleichungen passen zwar zu den beschriebenen Drehungen des Koordinatensystems, nicht aber zu der zeichnerisch dargestellten Detektorposition. Das dort gezeigte Koordinatenkreuz des Detektorsystems sitzt im Ursprung auf einer Kugelschale und zeigt mit der Richtung x' entlang eines Breitengrades, mit der Richtung y' entlang eines Längengrades während z' senkrecht auf der Kugeloberfläche steht. Die Gleichungen für das Detektions-Koordinatensystem ergeben sich aber nur, wenn man das Kollisions-Koordinatensystem (x,y,z) um den Winkel Φ um die z -Achse dreht und dann um den Winkel Θ in der neuen x - z -Ebene um die y' -Achse (Abbildung 2.4). Diese Position des Detektorsystems wurde von Kabachnik bestätigt [Kab03].

Das verwendete Detektorsystem im hier verwendeten experimentellen Aufbau befindet sich in der Speicherringebene, so dass immer $\Phi = 0^\circ$ gilt.

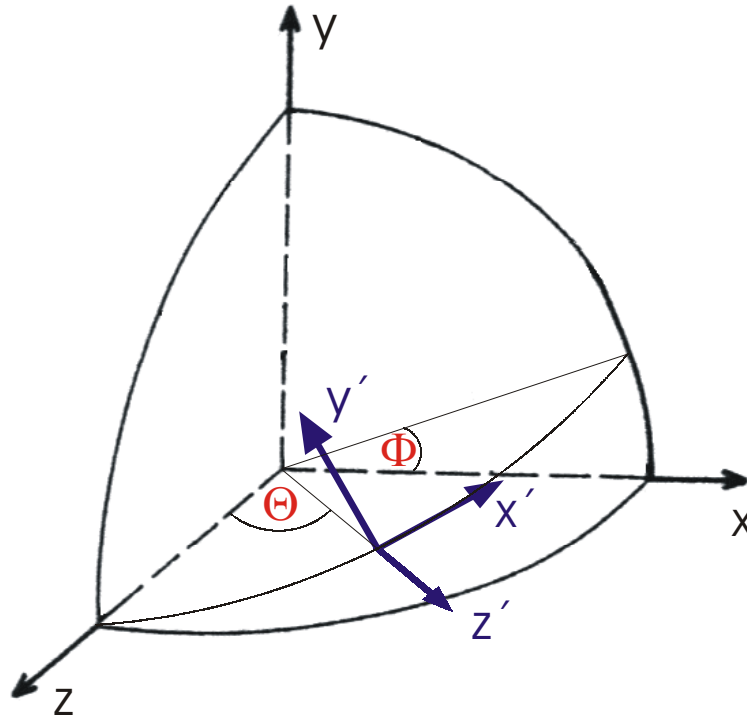


Abbildung 2.4: Kollisions (x,y,z) - und Detektions (x',y',z') -Koordinatensystem. z zeigt in Synchrotronstrahlrichtung und spannt mit x die Speicherringebene auf. Die Winkel Θ und Φ legen die Lage des Detektions-Koordinatensystems fest. z' zeigt in Richtung der emittierten Fluoreszenzstrahlung.

2.3.1 Bestimmung des Alignmentparameters A_{20} mit linear horizontal polarisierter Anregung

Nach Schmidt [Sch92] ist der lineare Polarisationsgrad der Fluoreszenzstrahlung π_{lin} im Detektorsystem gegeben durch:

$$\pi_{lin}(\vec{S}, \Theta, \Phi) = \frac{I_{||}(\vec{S}, \Theta, \Phi) - I_{\perp}(\vec{S}, \Theta, \Phi)}{I_{||}(\vec{S}, \Theta, \Phi) + I_{\perp}(\vec{S}, \Theta, \Phi)} = \frac{3}{4} \beta_2(fl) [\sin^2 \Theta - \tilde{S}_1 (1 + \cos^2 \Theta) \cos 2\Phi] / I_{\beta}^{(0)}(\vec{S}, \Theta, \Phi) \quad (2.11)$$

mit

$$I_{\beta}^{(0)}(\vec{S}, \Theta, \Phi) = 1 - \frac{1}{2} \beta_2(fl) [P_2(\cos \Theta) - \frac{3}{2} \tilde{S}_1 \cos 2\Phi \sin^2 \Theta] \quad (2.12)$$

$P_2(\cos\Theta)$ ist das Legendre-Polynom zweiten Grades und ist gegeben durch:

$$P_2(\cos\Theta) = \frac{1}{2}(3\cos^2\Theta - 1) \quad (2.13)$$

Die Intensität I_{\parallel} bzw. I_{\perp} bezeichnet die vom Detektorsystem gemessene Intensität der Fluoreszenzstrahlung, bei denen das Detektorsystem auf Fluoreszenzstrahlung empfindlich ist, deren elektrischer Feldvektor parallel bzw. senkrecht zum elektrischen Feldvektor der einfallenden linear horizontal polarisierten Synchrotronstrahlung schwingt. \vec{S} ist der aus den Stokes-Parametern zusammengesetzte Stokes-Vektor der anregenden Strahlung.

Die Stokes-Parameter S_1 und S_2 geben den linearen Polarisationsgrad für verschiedene Bezugsachsen an. Somit beschreibt $\tilde{S}_1 = \sqrt{S_1 + S_2}$ den linearen Polarisationsgrad. $\tilde{S}_1 = +1$ definiert linear horizontal polarisierte Strahlung, deren elektrischer Feldvektor in Richtung der x-Achse in Abbildung 2.4 schwingt.

Gleichung 2.11 vereinfacht sich dadurch und mit $\Phi = 0^\circ$ zu:

$$\pi_{in}(\Theta) = \frac{-\frac{3}{2}\beta_2(fl)\cos^2\Theta}{1 - \frac{3}{2}\beta_2(fl)\cos^2\Theta + \beta_2(fl)} \quad (2.14)$$

Damit ergibt sich Winkelasymmetrieparameter zu:

$$\beta_2(fl) = \frac{-2\pi_{in}}{3\cos^2\Theta(1 - \pi_{in}) + 2\pi_{in}} \quad (2.15)$$

Mit $\beta_2(fl) = \alpha_2 \cdot A_{20}$ folgt unmittelbar der Alignmentparameter A_{20} :

$$A_{20} = \frac{\beta_2(fl)}{\alpha_2} \quad (2.16)$$

Der Strukturparameter α_2 ist eine geometrische Größe für einen Übergang $J_i \rightarrow J_f$ [Lag00]. Werte für α_2 , die in dieser Arbeit verwendet wurden, finden sich in Tabelle 4.1.

2.3.2 Bestimmung des Alignmentparameters A_{20} mit zirkular polarisierter Anregung

Der lineare Polarisationsgrad kann aus Gleichung 2.11 auch ebenso mit $\tilde{S}_1 = 0$ und $S_3 = \pm 1$, d.h. durch Anregung mit zirkular polarisierter Synchrotronstrahlung beider

Drehrichtungen, abgeleitet werden. Dadurch vereinfacht sich Gleichung 2.11 mit $\Phi = 0^\circ$ zu:

$$\pi_{lin}(\Theta) = \frac{\frac{3}{4} \beta_2(fl) \sin^2 \Theta}{1 - \frac{3}{4} \beta_2(fl) \cos^2 \Theta + \frac{1}{4} \beta_2(fl)}, \quad (2.17)$$

woraus sich wieder der Winkelasymmetrieparameter ergibt:

$$\beta_2(fl) = \frac{4\pi_{lin}}{3 \sin^2 \Theta (1 - \pi_{lin}) + 2\pi_{lin}} \quad (2.18)$$

Mit Hilfe von Gleichung 2.16 kann dann der Alignmentparameter A_{20} bestimmt werden.

2.3.3 Bestimmung des Orientierungsparameters O_{10} mit zirkular polarisierter Anregung

Der zirkulare Polarisationsgrad der Fluoreszenzstrahlung π_{circ} im Detektorsystem ist nach Schmidt [Sch92] gegeben durch:

$$\pi_{circ}(\vec{S}, \Theta, \Phi) = \frac{I_R(\vec{S}, \Theta, \Phi) - I_L(\vec{S}, \Theta, \Phi)}{I_R(\vec{S}, \Theta, \Phi) + I_L(\vec{S}, \Theta, \Phi)} = \beta_1(fl) \cos \Theta S_3 / I_{fl}^{(0)}(\vec{S}, \Theta, \Phi) \quad (2.19)$$

mit $S_3 = +1$ für rechts zirkular polarisierte Strahlung in Drehimpuls-Definition.

Für die in dieser Arbeit verwendete optische Definition ändert sich Gleichung 2.19 zu:

$$\pi_{circ}(\vec{S}, \Theta, \Phi) = \frac{I_L(\vec{S}, \Theta, \Phi) - I_R(\vec{S}, \Theta, \Phi)}{I_L(\vec{S}, \Theta, \Phi) + I_R(\vec{S}, \Theta, \Phi)} = \beta_1(fl) \cos \Theta S_3 / I_{fl}^{(0)}(\vec{S}, \Theta, \Phi) \quad (2.20)$$

mit $S_3 = +1$ für links zirkular Strahlung.

Die Intensitäten I_L und I_R sind die vom Detektorsystem gemessenen Intensitäten der Fluoreszenzstrahlung, bei denen das Detektorsystem auf links bzw. rechts zirkular polarisierte Fluoreszenzstrahlung empfindlich ist. Für welche Position der Kombination aus $\lambda/4$ -Plättchen und Polarisationsfilter dies der Fall ist, wurde mit Hilfe eines von Bennett und Bennett beschriebenen Versuchsaufbaus bestimmt [Dri78] (siehe Kapitel 3.3).

Mit $\tilde{S}_1 = 0$ und $S_3 = +1$ für links zirkular polarisierte Synchrotronstrahlung, die im Rahmen der vorliegenden Arbeit fast ausschließlich für die Orientierungsmessungen verwendet wurde, vereinfacht sich Gleichung 2.20 mit $\Phi = 0^\circ$ zu:

$$\pi_{circ}(\Theta) = \beta_1(fl) \cos \Theta, \quad (2.21)$$

wobei der Einfluss von $\beta_2(fl)$ im Nenner von Gleichung 2.20 vernachlässigt wird, da maximal gemessene Werte von $|\beta_2(fl)| = 0,2$ den Nenner $I_f^{(0)}$ nur um etwa 0,2 % beeinflussen.

Mit $\beta_1(fl) = \frac{\pi_{circ}}{\cos \Theta}$ und $\beta_1(fl) = \alpha_1 \cdot O_{10}$ ergibt sich der Orientierungsparameter O_{10} zu:

$$O_{10} = \frac{\pi_{circ}}{\alpha_1 \cos \Theta} \quad (2.22)$$

Der Strukturparameter α_1 ist wie α_2 in Kapitel 2.3.1 eine geometrische Größe für einen Übergang $J_i \rightarrow J_f$. Werte für α_1 , die in dieser Arbeit verwendet wurden, finden sich in Tabelle 4.2.

Es ist zu bemerken, dass der Stokes-Parameter S_3 für links zirkular polarisiertes Licht auch ein anderes Vorzeichen haben kann. Da S_3 aber gleich dem zirkularen Polarisationsgrad ist [Blu81], ist in diesem Fall auch der zirkulare Polarisationsgrad mit einem anderen Vorzeichen definiert ([Hec74], [Dit76]). Dies ist unabhängig von der Definition des Drehsinns von zirkular polarisiertem Licht.

3 Experimenteller Aufbau

Alle Experimente wurden bei der Berliner Elektronenspeicherring Gesellschaft für Synchrotronstrahlung mbH (BESSY II) an den Undulator-Beamlines UE56/1-PGM2, UE56/2-PGM1 und UE56/2-PGM2 durchgeführt. Außerdem wurden einige Messungen mit linear polarisierter Synchrotronstrahlung an der Undulator-Beamline U125/1-PGM vorgenommen, die ausführlich in der Arbeit von Zimmermann [Zim03] beschrieben wird.

Im Folgenden werden die Komponenten des Experimentes beschrieben und deren Funktion während der Messungen erklärt. Grundvoraussetzung für das Experiment ist eine durchstimmbare Lichtquelle mit hohem Photonenfluss und hoher Auflösung, um innerhalb der natürlichen Linienbreite der Zustände mit guter Statistik messen zu können. Diese Voraussetzungen erfüllen Synchrotronstrahlungsquellen der dritten Generation wie BESSY II.

Bezüglich der Grundlagen der Synchrotronstrahlung und deren Erzeugung sowie der Funktionsweise von Undulatoren wird auf die Literatur verwiesen [Wil92].

3.1 UE56-Undulator Beamline bei BESSY II

Die UE56-Undulator Beamlines bei BESSY II erzeugen linear, zirkular und elliptisch polarisierter Strahlung bei sehr hohen Photonenflüssen.

BESSY II macht aufgrund der unterschiedlichen Definitionen des zirkularen Polarisationsgrades (siehe Kapitel 2.2) keine Aussage, ob es sich um rechts oder links zirkular polarisiertes Licht handelt. Statt dessen benutzt man die in positiver oder negativer Richtung einstellbare Shift der Undulatoren. Eine positive Undulatorshift erzeugt eine positive Helizität der Synchrotronstrahlung. D.h., wenn man entgegen der Ausbreitungsrichtung von zirkular polarisiertem Licht in die Lichtquelle hineinsieht, dreht sich der elektrische Feldvektor des Lichtes im mathematisch positiven Sinne, also entgegen

dem Uhrzeigersinn. Es handelt sich um links zirkular polarisiertes Licht im Sinne der optischen Definition. Dementsprechend bedeutet eine negative Undulatorshift rechts zirkular polarisierte Synchrotronstrahlung.

3.2 Apparativer Aufbau

Der Gesamtaufbau der PIFS-Apparatur (Abbildung 3.1) sowie deren Justagemöglichkeiten auf den Synchrotronstrahl der Beamline sind ausführlich in den Arbeiten von Kammer [Kam04] und Zimmermann [Zim03] beschrieben. Der Aufbau entstand in den letzten Jahren in Zusammenarbeit mit der kooperierenden Arbeitsgruppe um Prof. Dr. Schmoranzer von der Technischen Universität Kaiserslautern.

Der linear oder zirkular polarisierte Synchrotronstrahl verlässt die BESSY II-Beamline hinter der Spiegelkammer, in der der Strahl refokussiert wird, durchquert eine differentiell gepumpte Druckstufe, gefolgt von der eigentlichen Wechselwirkungszone in der Gastargetzelle, um dahinter von einer Fotozelle zur Ladungsnormierung detektiert zu werden.

Eine fünfstufige, differentiell gepumpte Druckstufe, deren beide letzten Stufen ausheizbar sind, garantiert bei Gasanfall in der Gastargetzelle einen Enddruck von $< 5 \cdot 10^{-9}$ mbar im letzten Teil der Druckstufe, der nach Anforderungen von BESSY II notwendig ist, um das Ventil zur Spiegelkammer der Beamline zu öffnen.

Die Gastargetzelle besteht im wesentlichen aus zwei Teilen, dem Gastargetzellenblock und der eigentlichen Gastargetzelle, die fest im Block verschraubt wird und zum Einlassen von Gas und zur Druckmessung dient. Am Eingang tritt der Synchrotronstrahl durch eine strommessbare Blende mit dem Durchmesser $d = 2$ mm in die Wechselwirkungszone der Zelle ein. Der Kopf der Gastargetzelle wurde für die neueren Messungen aus Mu-Metall gefertigt, nachdem ein deutlicher Einfluss von äußeren Magnetfeldern [Kam04] auf Messungen mit linear polarisierter Strahlung festgestellt wurde und es nötig war, die äußeren Magnetfelder auf einen nicht mehr messbaren Restwert $< 2 \mu\text{T}$ abzuschirmen.

Am Ende der Gastargetzelle tritt der Synchrotronstrahl wieder durch eine strommessbare Blende mit dem Durchmesser $d = 2 \text{ mm}$ aus und trifft auf eine Fotozelle, deren Signal, welches im μA -Bereich liegt, zur Ladungsnormierung der Messungen verwendet wird.

Zwei 1m-Normal-Incidence-Monochromatoren erlauben den Einsatz von unterschiedlichen Detektoren in Kombination mit verschiedenen Gittern zur Detektion von Fluoreszenzstrahlung. Der Sekundärmonochromator 1 vom Typ McPherson 225 ist unter der Gastargetzelle positioniert und erlaubt mit Hilfe eines Wollaston-Prismas, bei entsprechender Ausrichtung der optischen Achsen, die getrennte Detektion der Fluoreszenz mit elektrischem Feldvektor parallel bzw. senkrecht zum elektrischen Feldvektor der anregenden Synchrotronstrahlung. Der Sekundärmonochromator 2 (OLMO [Wil99]) erlaubt in der in Abbildung 3.1 gezeigten Position in der Speicherringebene die Detektion der Fluoreszenzstrahlung unter einem 90° -Winkel zur Ausbreitungsrichtung der Synchrotronstrahlung. Dieser Monochromator wurde mit einem 600 Linien/mm-Gitter, dessen Blaze-Wellenlänge bei 300 nm liegt, und dem Detektorsystem vom Typ SSL 2601A mit dem Imaging Photomultiplier Photon Sensor 3450A [Men98] benutzt, um Spektren der Fluoreszenzstrahlung im sichtbaren Spektralbereich aufzunehmen, in denen auch Fluoreszenzen von Kaskaden-Übergängen der Zustände zu erwarten sind, die mit dem polarisationsempfindlichen Detektorzweig aufgenommenen wurden.

Des Weiteren kann der Monochromator mit dieser Detektor-Konfiguration, wie in Abbildung 3.1 angedeutet, um 45° in der Speicherringebene geschwenkt werden, um mit Hilfe eines vorgeschalteten $\lambda/4$ -Plättchens und eines schrittmotorgesteuerten Polarisationsfilters die Polarisationsanalyse eines Wellenlängenbereiches der Fluoreszenzstrahlung von fast 50 nm simultan durchzuführen. Ein von 90° abweichender Winkel ist für eine Orientierungsmessung unabdingbar, da entsprechend Gleichung 2.21 für 90° kein zirkularer Polarisationsgrad messbar ist. Die Wahl dieses 45° -Winkels beruht auf konstruktionstechnischen Gründen des Gastargetzellenblocks und der Gastargetzelle. Dieses System wurde bereits mit Erfolg getestet, bedarf aber noch einer genaueren Betrachtung hinsichtlich der apparativen Polarisation des Systems, da die Spiegelung der

Fluoreszenzstrahlung am Reflexionsgitter des Sekundärmonochromators den Polarisationsgrad der Strahlung verändern kann.

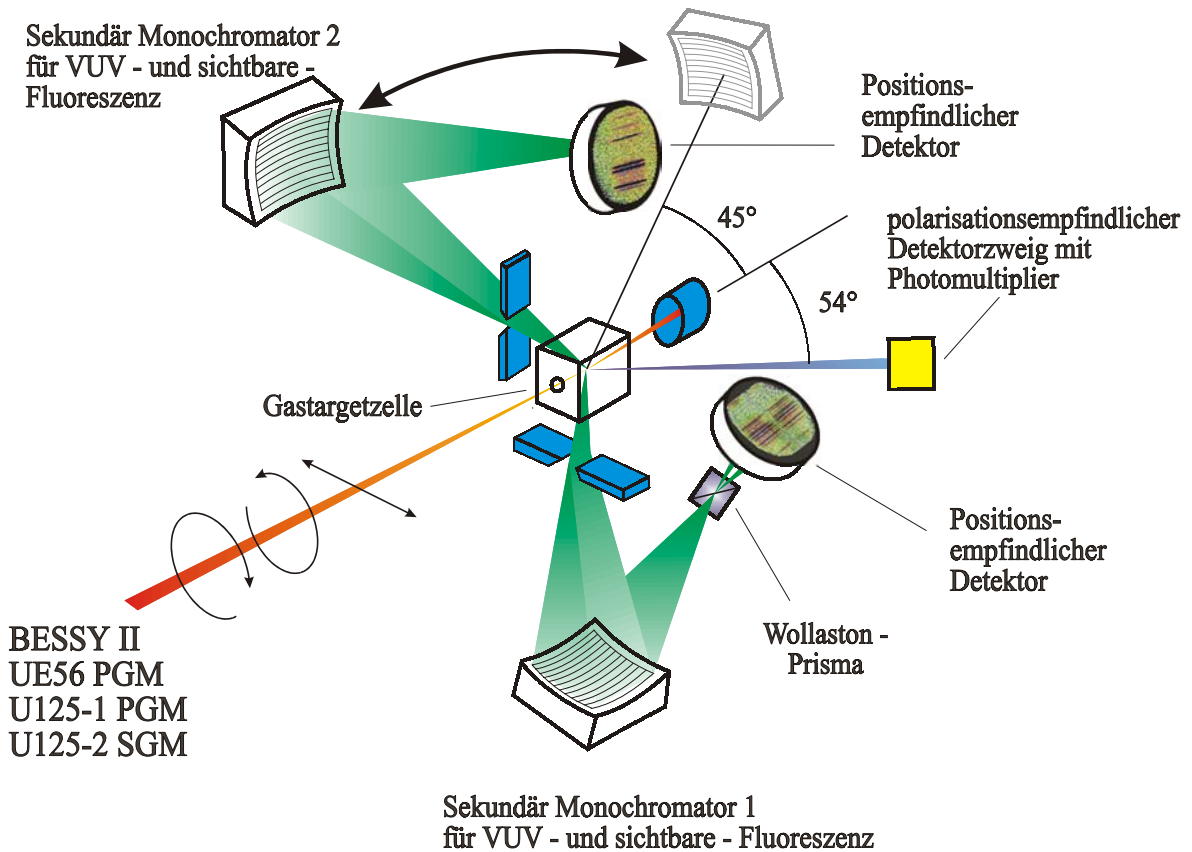


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung der PIFS-Apparatur.

Um die PIFS-Apparatur an verschiedenen Beamlines bei BESSY II mit unterschiedlicher Fokus-Lage des Synchrotronstrahles zu verwenden, kann der gesamte Aufbau durch ein Versetzen der Druckstufe um 180° in der Speicherringebene gedreht werden, so dass der Synchrotronstrahl in Abbildung 3.1 von hinten in die Gastargetzelle eintritt.

Die Signalverarbeitung dieses Detektorsystems wurde in vorherigen Arbeiten ([Lie01], [Men98], [Zim98]) ausführlich beschrieben.

Der polarisationsempfindliche Detektorzweig, mit dem die Polarisationsgrade zur Ableitung des Orientierungs- und Alignmentparameters gemessen wurden, befindet sich unter einem 54° -Winkel zur Ausbreitungsrichtung des Synchrotronstrahles in der Speicherringebene (siehe Abbildung 3.2). Er besteht aus einem geschwärzten Tubus mit vorgebauter Glasscheibe, einer Linse mit Brennweite $f = 15$ cm, einem $\lambda/4$ -Plättchen, einem Polarisationsfilter, einem Interferenzfilter, gefolgt von einer weiteren Linse mit Brennweite $f = 10$ cm und dem eigentlichen Detektor, einem photonensensitiven Elektronenvervielfacher (PSEV), im folgenden Photomultiplier genannt.

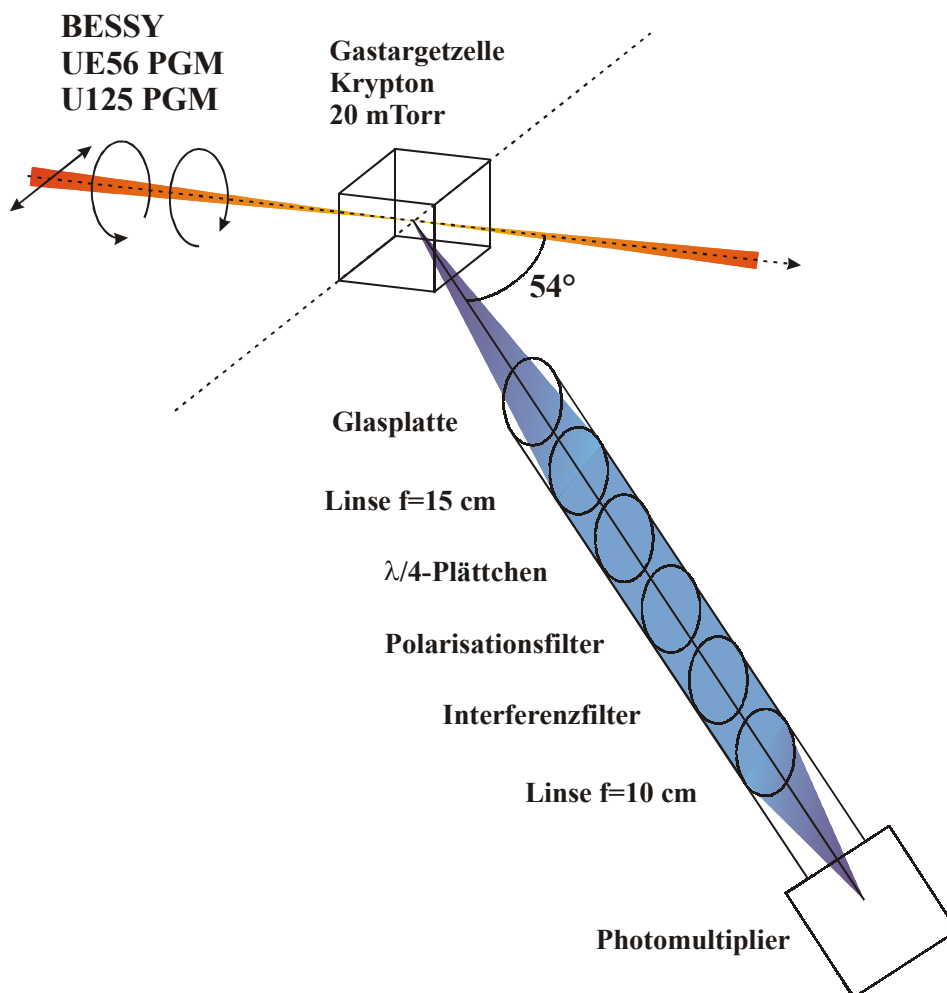


Abbildung 3.2: Schematischer Aufbau des polarisationsempfindlichen Detektorzweiges.

Die Glasscheibe begrenzt das Vakuum der Gastargetzelle, in der ein Druck von 20 mTorr Krypton herrscht. Die erste Linse steht im Abstand ihrer Brennweite vom Synchrotronstrahl, d.h. die in der Gastargetzelle um den Synchrotronstrahl entstehende Fluoreszenzstrahlung wird parallelisiert, was für den Durchgang der zu untersuchenden Fluoreszenzstrahlung durch $\lambda/4$ -Plättchen, Polarisationsfilter und Interferenzfilter wichtig ist.

Das $\lambda/4$ -Plättchen kann für Messungen mit linear polarisierter Strahlung entfernt werden, um etwaige Verfälschungen, z.B. durch Transmission oder falsche Winkelposition, zu vermeiden. Es handelt sich um ein Glimmerplättchen, das bei einer Wellenlänge von ~ 450 nm eine Phasenverschiebung von 90° zwischen paralleler und senkrechter Komponente des durchgehenden Lichtes erzeugt. Mit Hilfe von Tutton's Test für $\lambda/4$ -Plättchen aus Glimmer [Str52] wurden die langsamen und schnellen Achsen des $\lambda/4$ -Plättchen ermittelt. Dies war notwendig, da zwar am $\lambda/4$ -Plättchen eine Achse markiert war, aber vom Hersteller widersprüchliche Angaben gemacht wurden, ob es sich dabei um die langsame oder schnelle Achse handelt. Durch Tutton's Test wurde die markierte Achse als langsame Achse identifiziert. Das $\lambda/4$ -Plättchen war für einen Großteil der Messungen so eingebaut, dass die schnelle Achse in der 0° -Position in der Speicherringebene liegt. Dies erleichterte den Vergleich mit den bei Bennett [Dri78] und Stone [Sto63] beschriebenen Experimenten. Eine weitere Möglichkeit bei den Messungen war es, das $\lambda/4$ -Plättchen in die 45° -Position zu stellen. Dabei ist die schnelle Achse um 45° im Uhrzeigersinn gedreht, wenn man von der Position des Photomultipliers in die Lichtquelle hineinsieht. Eine Eigenschaft dieser Methode ist es, dass der lineare Anteil des Lichtes in zirkulares umgewandelt wird. Dieses Licht geht als flacher Untergrund in die Messung von Amplitudenmodulationen ein. D.h. man kann bei zirkularer Anregung nicht mehr, wie in Kapitel 2.3.2 beschrieben, den linearen Polarisationsgrad und damit den Alignmentparameter A_{20} bestimmen. Aber der zirkulare Polarisationsgrad, und damit der Orientierungsparameter O_{10} (Kapitel 2.3.3), kann über die Extremstellen der gemessenen Amplitudenmodulation bei 0° und 90° Polarisationsfilterstellung ermittelt werden, was die statistische Unsicherheit der Ergebnisse verringert (Kapitel 6.1).

Bei Messungen mit $\lambda/4$ -Plättchen, bei denen die Wellenlänge der beobachteten Fluoreszenzstrahlung von 450 nm abweicht, liegt auch eine von 90° abweichende Phasenshift zwischen paralleler und senkrechter Komponente vor. Bei Messungen in der 0° -Position ergeben Simulationsrechnungen einen geringen Einfluss auf den zirkularen Polarisationsgrad, während der lineare Polarisationsgrad nicht verändert wird. Für Messungen mit $\lambda/4$ -Plättchen in der 45° -Position müssen Korrekturen vorgenommen werden, die den linearen Polarisationsgrad berücksichtigen (siehe auch Kapitel 5.2).

Der schrittmotorbetriebene Polarisationsfilter wird über das verwendete Meßprogramm zur Datenaufnahme PaForDos [Sta94] gesteuert und ist in der 0° -Anfangs-Position, wenn die Durchlassrichtung für den schwingenden elektrischen Feldvektor parallel zur Speicherringebene eingestellt ist. Eine Drehung des Polarisationsfilters um 360° entspricht 1143 Schritten. Mit Hilfe von PaForDos kann der Polarisationsfilter so gedreht werden, dass in regelmäßigen Winkelschritten (Steps), ladungsnormiert über die Fotozelle, die hinter der Gastargetzelle den Photostrom des Synchrotronstrahles misst, Intensitäten der Fluoreszenzstrahlung gemessen werden. Nach einer gewünschten Anzahl von Schritten (entspricht einem Sweep) kann der Schrittmotor den Polarisationsfilter zurück auf die Startposition fahren und das gleiche Meßprogramm beliebig oft wiederholen, während PaForDos die Intensitäten der Steps winkelgetreu für jeden Sweep addiert. Die Drehrichtung des Polarisationsfilters ist gegen den Uhrzeigersinn, wenn man von der Position des Photomultipliers in die Lichtquelle hineinsieht.

Für diese Arbeit standen Interferenzfilter für drei verschiedene Fluoreszenzübergänge von Krypton-Ionen zur Verfügung:

$$408,833 \text{ nm: } 4p^4 ({}^1D) 5p {}^2D_{5/2} \rightarrow 4p^4 ({}^1D) 5s {}^2D_{5/2}$$

$$445,321 \text{ nm: } 4p^4 ({}^1S) 5p {}^2P_{1/2} \rightarrow 4p^4 ({}^1S) 5s {}^2S_{1/2}$$

$$457,720 \text{ nm: } 4p^4 ({}^1D) 5p {}^2F_{7/2} \rightarrow 4p^4 ({}^1D) 5s {}^2D_{5/2}$$

Eine weitere Linse mit einer Brennweite von $f = 10 \text{ cm}$ fokussiert die parallele Fluoreszenzstrahlung auf die aktive Fläche des Photomultipliers vom Typ EMI 9502 SA. Bei diesem Typ werden Pulse, die im längerwelligen roten Spektralbereich ausgelöst

werden könnten, durch eine reduzierte Kathodensensitivität verhindert, was eine sehr geringe Dunkelzählrate von etwa 1 - 3 counts/s zur Folge hat. Der Photomultiplier wurde mit einer Spannung von ~ -1260 V betrieben und durch Peltier-Elemente, die mit einem Strom von 6 A und einer Spannung von ~ 6 V betrieben wurden, und einen Umlaufkühler mit einer Vorlauftemperatur von etwa -10 °C gekühlt. Die Signale des Photomultipliers werden über eine PAD-Einheit (Preamplifier – Amplifier – Discriminator) von Nuclear Data vom Typ ND-520 zum PC-System weitergeleitet, wo sie von PaForDos erfasst werden.

3.3 Empfindlichkeit des polarisationsempfindlichen Detektorzweiges

Wie in Kapitel 2.3.3 erwähnt, ist es notwendig, die Positionen der Kombination aus $\lambda/4$ -Plättchen und Polarisationsfilter zu ermitteln, bei denen das Detektorsystem sensitiv für die links (I_L) bzw. rechts (I_R) zirkular polarisierte Komponente des Fluoreszenzlichtes ist. Dies geschieht mit Hilfe eines bei Bennett [Dri78] beschriebenen Versuchsaufbaues, der in Abbildung 3.3 links zu sehen ist.

Unpolarisiertes Licht tritt durch einen Polarisationsfilter in 45° -Position und ein $\lambda/4$ -Plättchen, dessen schnelle Achse horizontal ausgerichtet ist (0° -Position), wodurch zirkular polarisierte Strahlung entsteht, deren elektrischer Feldvektor sich im Uhrzeigersinn dreht (rechts zirkular polarisiert).

Dreht man bei diesem Versuchsaufbau die Ausbreitungsrichtung des Lichtes um und sieht diesmal von der anderen Seite in die Lichtquelle, tritt links zirkular polarisierte Strahlung durch das $\lambda/4$ -Plättchen, dessen schnelle Achse horizontal ausgerichtet ist (0° -Position), und den Polarisationsfilter in 135° -Position (Abbildung 3.3 rechts). Dieses Licht ist bezüglich des 135° -Winkels linear polarisiert. Entsprechend ist diese Konfiguration des polarisationsempfindlichen Detektorzweiges empfindlich für links zirkulares Licht. Man kann leicht folgern, dass der polarisationsempfindliche Detektorzweig mit einem

Polarisationsfilter in 45°-Position und gleicher Position des $\lambda/4$ -Plättchens sensitiv für rechts zirkular polarisiertes Licht ist (Abbildung 3.4).

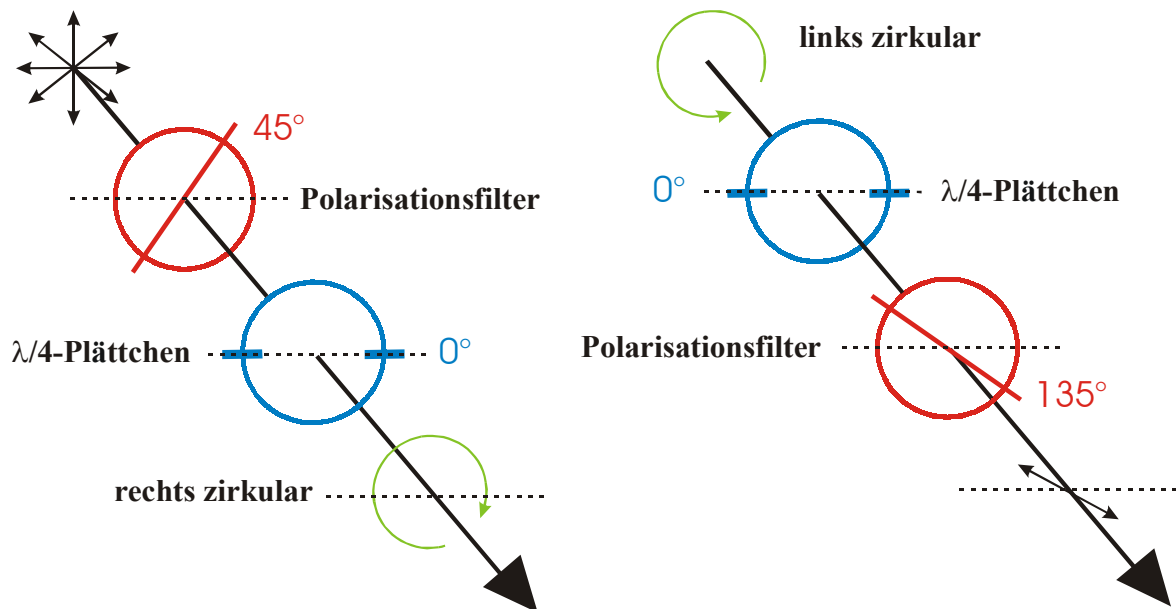


Abbildung 3.3: Links: Versuchsaufbau nach Bennett, der rechts zirkular polarisiertes Licht erzeugt.

Rechts: Umgekehrter Versuchsaufbau nach Bennett, der links zirkular polarisiertes Licht analysiert.

(grün: Drehrichtung des elektrischen Feldvektors; rot: Polarisationsfilter mit eingezeichneter Durchlassrichtung; blau: $\lambda/4$ -Plättchen mit markierter schneller Achse)

Bei der Messung von linear polarisierter Fluoreszenzstrahlung ist die Empfindlichkeit des polarisationsempfindlichen Detektorzweiges trivial. Da diese Messungen ohne $\lambda/4$ -Plättchen gemacht wurden, ist der polarisationsempfindliche Detektorzweig in der 0°-Position des Polarisationsfilters empfindlich auf die linear horizontal polarisierte Komponente der Fluoreszenzstrahlung I_{\parallel} , die also parallel zum einfallenden, ebenfalls linear horizontal polarisierten, Synchrotronstrahl ist. Die 90°-Position des Polarisationsfilters ist entsprechend für I_{\perp} empfindlich.

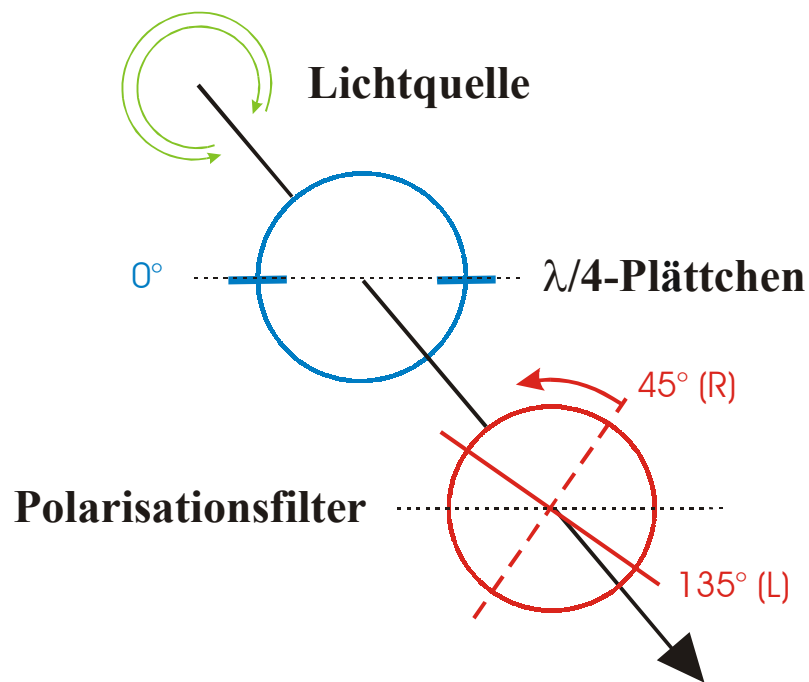


Abbildung 3.4: *Stellungen des Polarisationsfilters in Kombination mit dem $\lambda/4$ -Plättchen in 0° -Position, in denen der polarisationsempfindliche Detektorzweig sensitiv für links (L), bzw. rechts (R) zirkular polarisierte Fluoreszenzstrahlung ist. (rot: Polarisationsfilter mit eingezeichneter Durchlassrichtung und Drehrichtung im Experiment; blau: $\lambda/4$ -Plättchen mit markierter schneller Achse)*

4 Meßmethode und -verfahren

In diesem Kapitel wird das Meßprinzip der PIFS für die Prozesse am Krypton erläutert. Außerdem werden alle Schritte und Korrekturen des Meßsignals erklärt, die notwendig sind, um von den Rohdaten ausgehend Alignment- und Orientierungsparameter zu berechnen und daraus die Elektronen-Partialwellenanalyse abzuleiten.

4.1 PIFS für den resonanten Raman-Auger-Zerfall

Die photoneninduzierte Fluoreszenzspektroskopie (PIFS) wird in der vorliegenden Arbeit auf den resonanten Raman-Auger-Effekt von Krypton angewendet. Dabei wird ein Kryptonatom aus dem Grundzustand durch Synchrotronstrahlung der Energie $h\nu$ resonant in einen Zustand k angeregt. Dieser angeregte Zustand k zerfällt unter Emission eines Elektrons (Auger-Zerfall) in einen angeregten Ionenzustand i (initial), der wiederum unter Emission eines Photons der Energie $h\nu'$ in einen tieferen, im vorliegenden Fall weiterhin angeregten, Zustand f (final) übergeht (Abbildung 4.1). Der angeregte Ionenzustand f kann in darauf folgenden weiteren Zerfällen in tiefere Zustände und schließlich in den Grundzustand des Ions übergehen. Die Photonen der Energie $h\nu'$ werden in dieser Arbeit polarisationsempfindlich detektiert. Die klassische Photoelektronenspektroskopie (PES) würde alternativ bzw. ergänzend die Auger-Elektronen detektieren.

Unter resonantem Raman-Auger-Zerfall versteht man, dass die resonante Anregung des Grundzustandsatoms im sogenannten Raman-Regime, d.h. innerhalb der natürlichen Linienbreite der Resonanz, stattfindet. In dieser Arbeit wurden die Resonanzen mit einer Bandbreite der anregenden Synchrotronstrahlung von 10-12 meV untersucht, wobei die Linienbreite der Resonanzen 83 meV beträgt (Kapitel 2.1.1).

Um die für die Messungen gewünschte Energie der Resonanzen einzustellen, war es notwendig, die genaue Position der Resonanzen R1 – R4 zu bestimmen. Die Resonanzen R1 und R2 sind mit den im Folgenden vorgestellten Verfahren leicht zu identifizieren. Die

Energielage von R3, die in der hochenergetischen Flanke von R2 liegt, kann nur über den bekannten Abstand zu R2 bestimmt werden. Bei R4 wird auf die gleiche Weise vorgegangen, da diese Resonanz, obwohl sie sauber von R1 – R3 zu trennen ist, in ihrer Intensität sehr klein ist, und damit eine exakte Festlegung der Position nur schlecht möglich ist. Dies geschah bei BESSY II nach jeder neuen Injektion von Elektronen in den Speicherring, da sich die Strahlage durch die Injektion verändern kann, was die mit Hilfe des Primärmonochromators eingestellte Energie beeinflusst.

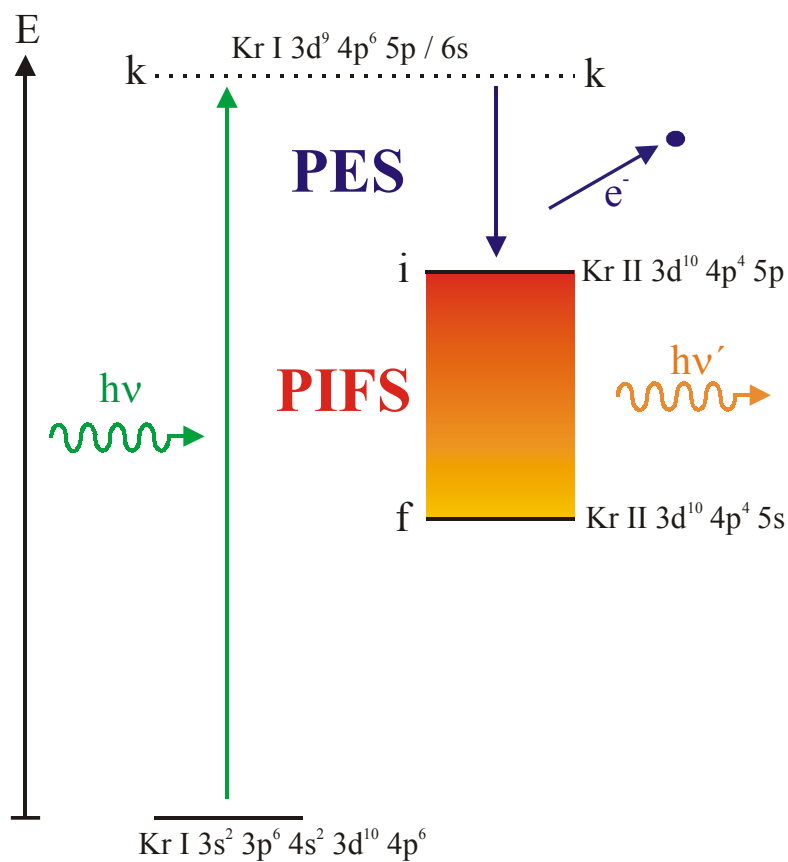


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung der PIFS-Methode am Beispiel der in dieser Arbeit vorgestellten Übergänge des Kryptons.

Die Energielage der Resonanzen konnte dabei auf zweierlei Weise ermittelt werden. Zum einen wurde mit dem Photomultiplier des polarisationsempfindlichen Detektorzweiges, bei einem Energiescan über die Resonanzen, die Fluoreszenz bei einer festen

Polarisationsfilterstellung in Abhängigkeit zur Energieskala erfasst. Das Maximum einer Resonanz, das die Form eines Absorptionsprofils besitzt, liefert in diesem Fall auch ein Maximum im Fluoreszenzsignal. Zum anderen wurde die strommessbare Austrittsblende der Gastargetzelle auf ein Potential von -10 V gelegt, um Elektronen aus der Wechselwirkungszone der Gastargetzelle auf die strommessbare Eintrittsblende abzustößen, die über ein empfindliches Strommeßgerät geerdet ist. Der so gemessene Betrag des Absorptionssignals, das die beim Auger-Zerfall frei gewordenen Elektronen misst, folgt dem Verlauf des Fluoreszenzsignals.

Für die Messungen mit dem polarisationsempfindlichen Detektorzweig wurde dann jeweils über den Primärmonochromator der Beamline die gewünschte feste Energie der anregenden Synchrotronstrahlung eingestellt.

4.2 Datenerfassung und -verarbeitung

Wie bereits in Kapitel 3.2 erwähnt, wurde das in der Arbeitsgruppe entwickelte Programm PaForDos [Sta94] zur Datenerfassung verwendet. Die Signale des Photomultipliers werden pro Step landungsnormiert in ein List-Mode-File geschrieben und in der Form gespeichert, dass jeder gemessene Sweep und Step einzeln wieder aufgerufen werden kann. Wenn alle Sweeps fehlerfrei aufgenommen wurden (kein Abbruch eines einzelnen Sweeps aufgrund einer technischen Störung oder vorgezogenen Injektion von neuen Elektronen in den Speicherring bei BESSY II), kann die Summe aller Sweeps, die den Steps getreu aufgenommen wurde, (oder bei Bedarf ein einzelner Sweep) in Form eines SCA-Files (Ein-Kanal-Analyse des Photomultipliersignals) gespeichert werden. Dieses SCA-File wird mit Hilfe des Programms PaSumAsc in ein ASC-File (ASCII) umgewandelt, das mit einem Tabellen-Kalkulations-Programm gelesen und bearbeitet werden kann. Die zugehörigen Winkel des Polarisationsfilters werden später den gemessenen Steps bzw. Intensitäten, entsprechend den gewählten Voreinstellungen in PaForDos, zugeordnet (Abbildung 4.2). Die gesamte weitere Auswertung erfolgt bis auf den Fit der Sinus-Funktion (Kapitel 4.5) mit einem Tabellen-Kalkulations-Programm.

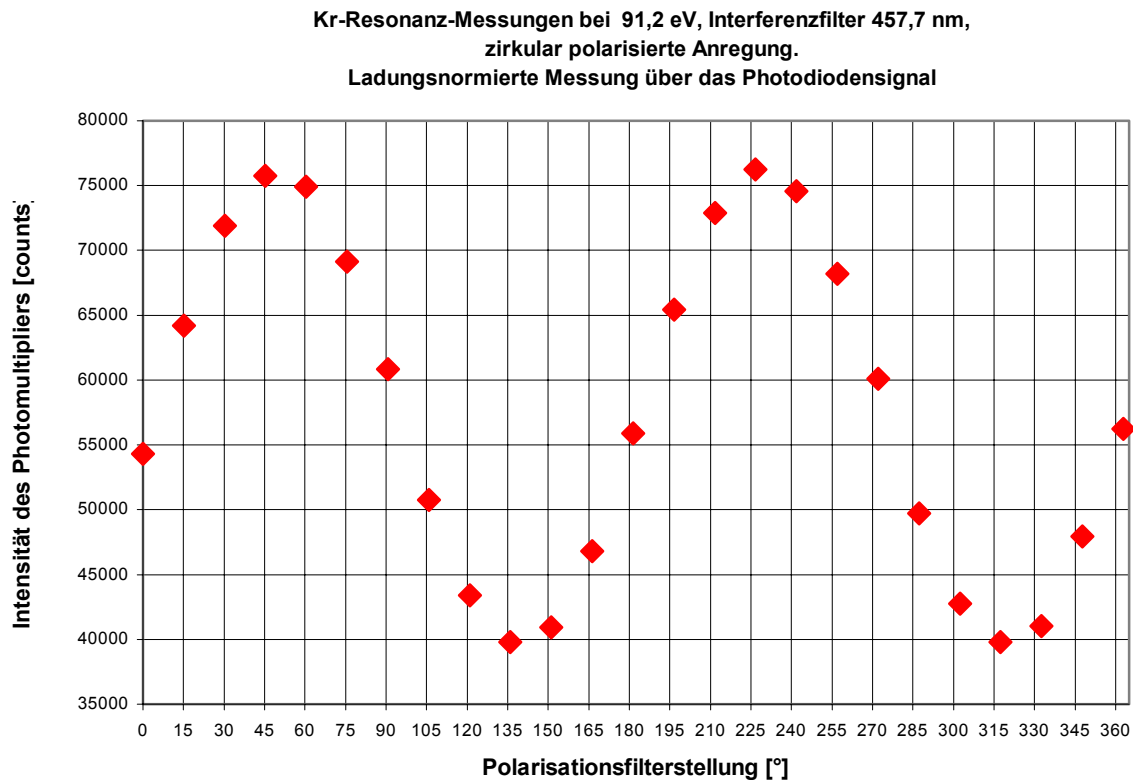


Abbildung 4.2: Beispiel eines mit PaForDos erzeugten SCA-Files (5 Sweeps - 25 Steps) mit zugeordneten Winkeln des Polarisationsfilters auf der x-Achse (1 Step entspricht $\sim 15^\circ$ Drehung des Polarisationsfilters).

4.3 Untergrundkorrektur

Da bei der Aufnahme des Signals immer die Summe aus Untergrundsignal des Photomultipliers und Fluoreszenzsignal erfasst wird, ist es notwendig, ein geeignetes Verfahren zu entwickeln, um beide Signale voneinander zu trennen.

Dazu wird zwischen den Messungen über einige Minuten der Untergrund des Photomultipliers gemessen. Dabei wird der anregende Synchrotronstrahl in der Gastargetzelle belassen aber die Gaszufuhr geschlossen. D.h. der reine Untergrund des Photomultipliers wird zusammen mit möglichem Licht gemessen, das über die Gastargetzelle oder den Tubus des polarisationsempfindlichen Detektorzweiges in die Apparatur eindringt (Abbildung 4.3). Reflexionen des Synchrotronstrahles in der

Gastargetzelle können aufgrund der verschiedenen aus Glas bestehenden Komponenten des polarisationsempfindlichen Detektorzweiges nicht vom Detektor erfasst werden. Diese Messungen wurden zeitnormiert aufgenommen und auf die Dunkelzählrate einer Sekunde gemittelt (DZ). Es stellte sich heraus, dass es nahezu keinen Einfluss durch von außen eindringendes Licht gab, da diese Messungen fast identisch mit Messungen des reinen Untergrundsignals des Photomultipliers waren, die aufgenommen werden konnten, als der Photomultiplier durch einen Schieber geschlossen war. Außerdem war das Untergrundsignal des Photomultipliers über mehrere Wochen betrachtet sehr stabil, so dass es nicht nötig war, den Untergrund für jede Messung neu zu bestimmen. Statt dessen konnte z.B. Strahlzeit vor Injektionen, die sonst nicht für einen weiteren Sweep ausgereicht hätte, mit der Messung des Untergrundsignals sinnvoll ausgenutzt werden.

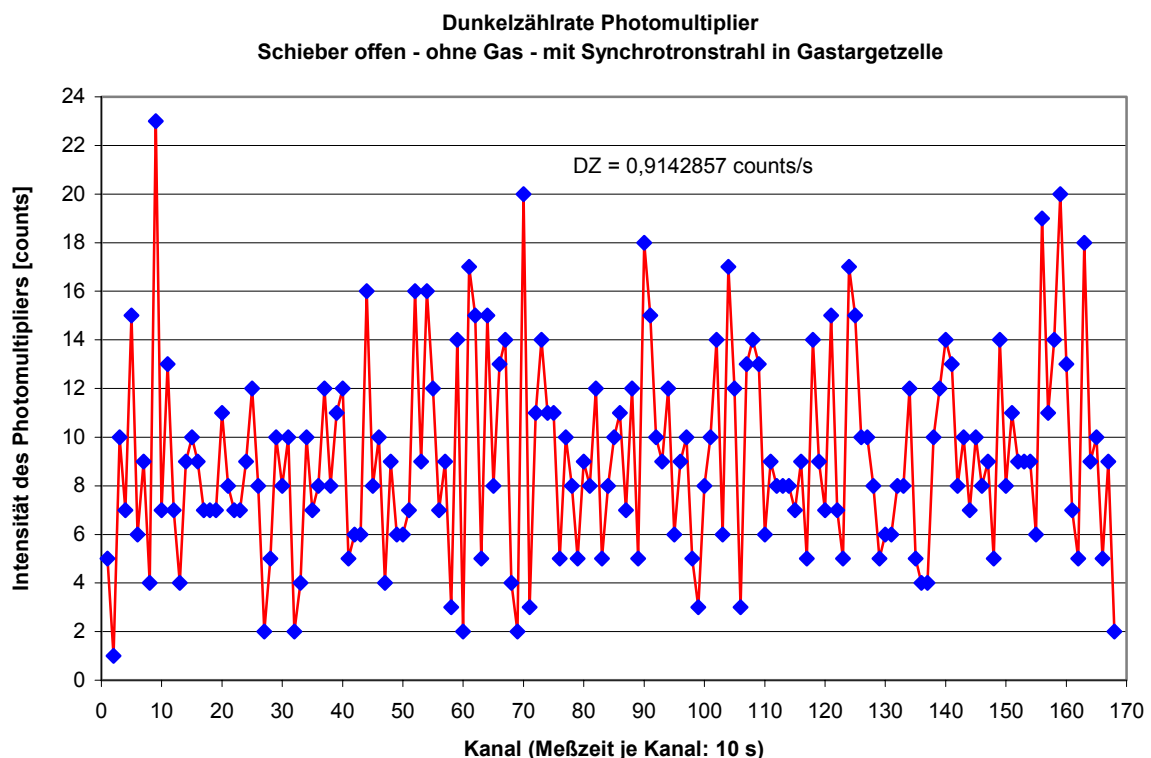


Abbildung 4.3: Beispiel von aufgenommen Dunkelzählraten zwischen zwei Messungen des polarisationsempfindlichen Detektorzweiges. Die Meßdauer betrug 10 s pro Kanal. Der berechnete Mittelwert für 1s (DZ) geht in die Korrektur ein.

Die Messungen der Fluoreszenzstrahlung wurden auf den Strom der Fozelle, die hinter der Gastargetzelle eingebaut ist, normiert. Dieser Strom ist direkt abhängig von der Intensität des Synchrotronstrahles und damit vom Ringstrom im Speicherring. Da der Ringstrom zwischen zwei Injektionen exponentiell abfällt, fällt auch der Strom der Fozelle in gleicher Weise ab. Dementsprechend ist die Dauer jedes Steps in einer Messung unterschiedlich. Bei den Messungen wurde jeweils die Zeitdauer des ersten Steps im ersten Sweep (t_1) als auch des letzten Steps im letzten Sweep (t_2) per Hand mitgeschrieben. Daraus ergibt sich eine mittlere Zeit pro Step $t_{MW} = \frac{1}{2} (t_1 + t_2)$. Eine Berücksichtigung des exponentiellen Abfalls des Stromes der Fozelle ist nicht notwendig, da innerhalb der Dauer einer Messung ($\sim 20 - 90$ min) ein linearer Abfall eine gute Näherung darstellt.

Die untergrundkorrigierte Gesamtintensität des Meßsignals für eine bestimmte Polarisationsfilterstellung mit einer beliebigen Anzahl von Sweeps in der Messung ist damit gegeben als:

$$I_{U.korr.} = I_{Meß} - \left[\underbrace{(t_1 + (S-1) \cdot t_{MW})}_{\text{Dauer erste Polfilterstellung}} + \frac{x-1}{Y-1} \cdot \left\{ \underbrace{(t_2 + (S-1) \cdot t_{MW})}_{\text{Dauer letzte Polfilterstellung}} - \underbrace{(t_1 + (S-1) \cdot t_{MW})}_{\text{Dauer erste Polfilterstellung}} \right\} \right] \cdot DZ \quad (4.1)$$

$I_{Meß}$ ist die Gesamtintensität des Meßsignals für eine Polarisationsfilterstellung. D.h. $I_{Meß}$ enthält die Summe der Intensitäten aller Steps bei einer festen Polarisationsfilterstellung (Polfilterstellung). S ist die Anzahl der Sweeps in einer Messung und Y die Zahl der Steps in einem Sweep. Der Index x ($0..Y-1$) bezeichnet die x -te Polarisationsfilterstellung in einem Sweep. Bei $x = 0$ steht der Polarisationsfilter in der 0° -Position.

Eine nachlassende Empfindlichkeit der Fozelle ist für den Zeitraum einzelner Messungen vernachlässigbar, hat aber über eine Strahlzeit von mehreren Wochen betrachtet Einfluss auf die Ergebnisse der Ladungsnormierung. Um eine Vergleichbarkeit der Ergebnisse zu erhalten, werden die Ergebnisse normiert (siehe Kapitel 4.6).

4.4 Korrekturen für die verwendeten Interferenzfilter

Eine weitere Korrektur betrifft den Interferenzfilter, der die Fluoreszenz des zu beobachteten Übergangs von der gesamten Fluoreszenz separiert.

Da alle Filter dieser Art in ihrem Transmissionsverhalten eine gewisse Breite und Absorption haben, gilt es, dieses besonders zu berücksichtigen. Dazu wurden sowohl die Transmissionskurven des Herstellers als auch eigene, am I. Physikalischen Institut durchgeführte, Messungen ausgewertet. Das Transmissionsverhalten der relevanten Bereiche der Interferenzfilter für die 408,833 nm-Linie, die 445,321 nm-Linie bzw. für die 457,720 nm-Linie ist in den Abbildungen 4.4, 4.5 bzw. 4.6 zu sehen.

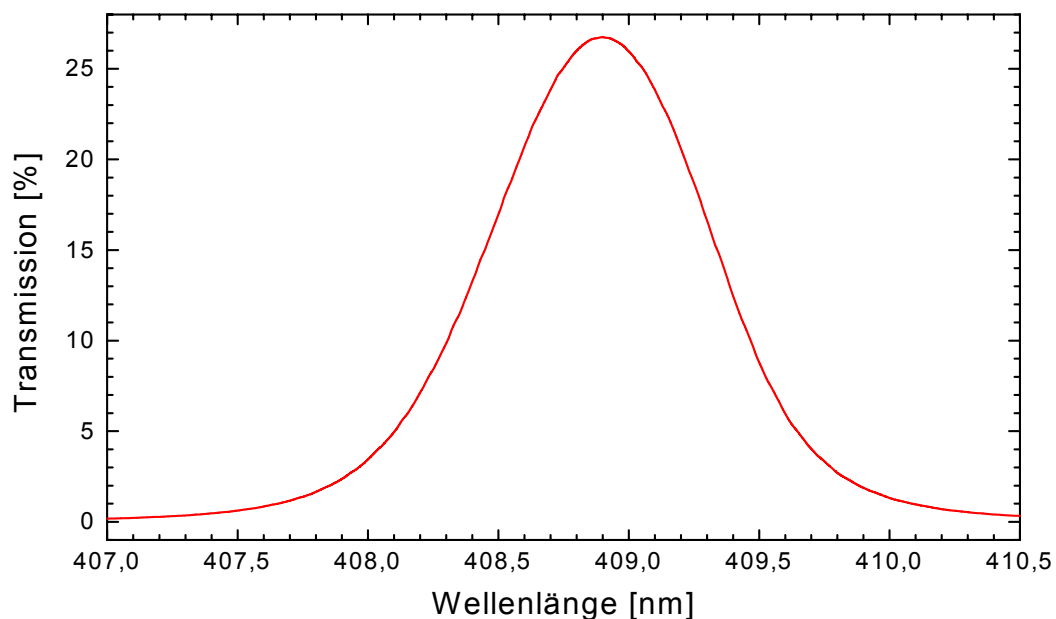


Abbildung 4.4: Ausschnitt der gemessenen Transmissionskurve des Interferenzfilters der 408,833 nm-Linie.

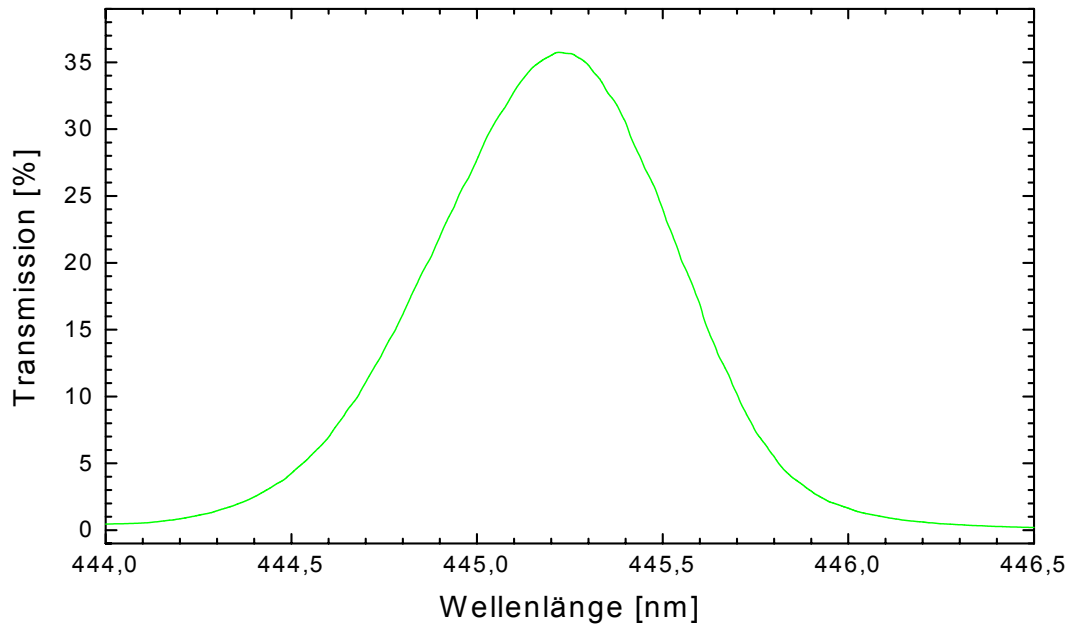


Abbildung 4.5: Ausschnitt der gemessenen Transmissionskurve des Interferenzfilters der 445,321 nm-Linie.

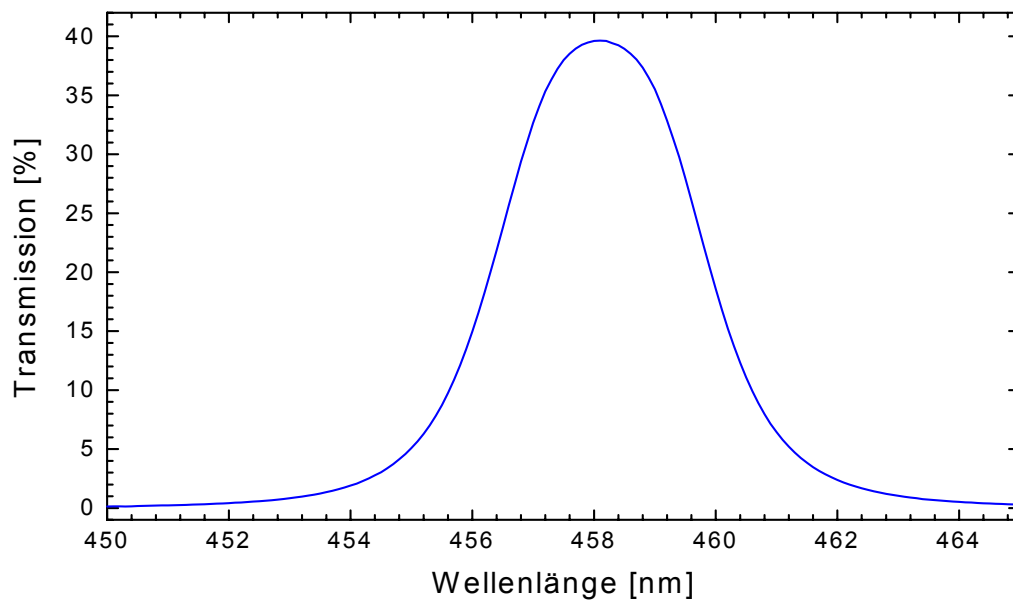


Abbildung 4.6: Ausschnitt der gemessenen Transmissionskurve des Interferenzfilters der 457,720 nm-Linie.

Um den Einfluss von Fluoreszenzlinien zu korrigieren, die durch den Interferenzfilter transmittieren aber nicht beobachtet werden sollen, wurden mit dem Sekundärmonochromator 2 (Kapitel 3.2) aufgenommene Summenspektren betrachtet, die in dem Wellenlängenbereich detektiert wurden, in dem auch die Wellenlänge des Fluoreszenzübergangs liegt, die mit dem Interferenzfilter beobachtet werden soll (Abbildung 4.7 und 4.8).

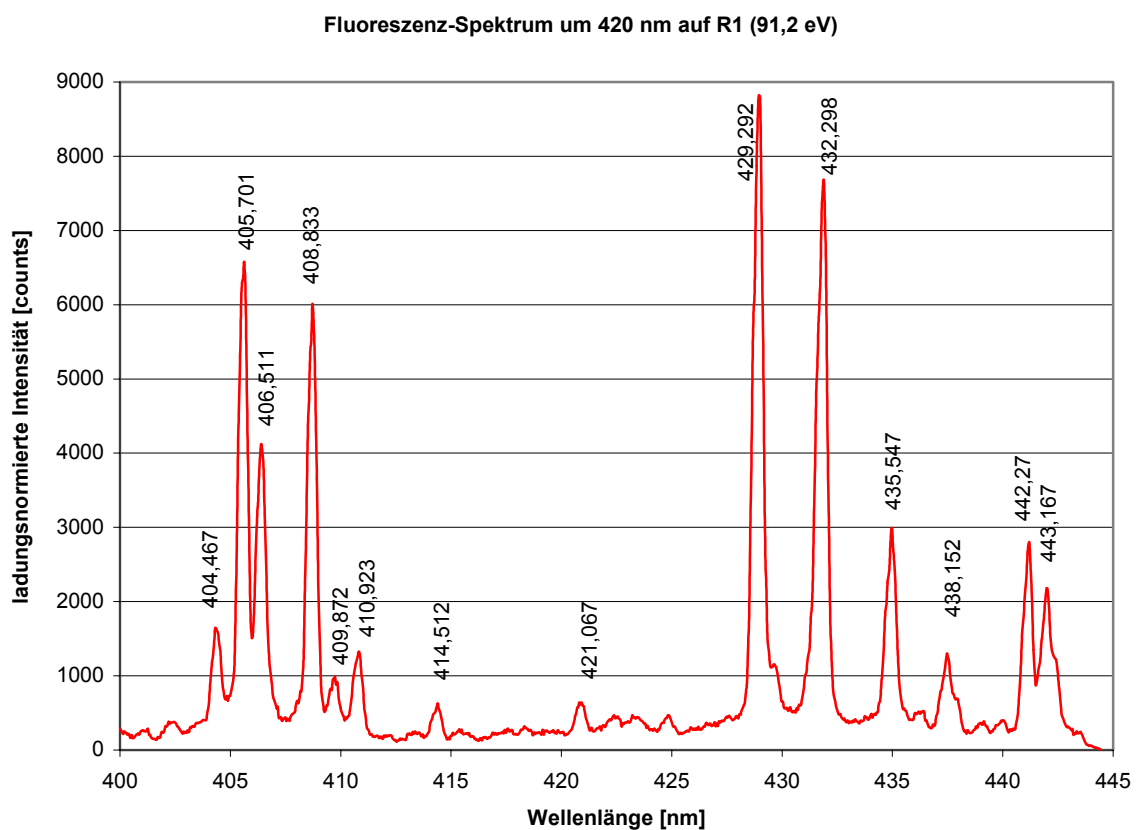


Abbildung 4.7: Fluoreszenzspektrum im Bereich der $4p^4 (^1D) 5p ^2D_{5/2} \rightarrow 4p^4 (^1D) 5s ^2D_{5/2}$ -Fluoreszenz bei 408,833 nm auf R1 mit zugeordneten Wellenlängen.

In diesen Fluoreszenzspektren wurden die Linien, die mit den Interferenzfiltern beobachtet werden sollten, und deren benachbarte Linien gefittet, um die jeweiligen Integrale aller beteiligten Linien zu berechnen. Die dafür verwendete Linienform war ein aus Gauß- und Lorentz-Profilen zusammengesetztes Voigt-Profil, dessen Lorentzanteil für eine alleinstehende Linie mit guter Statistik bestimmt und für das Fitten der im Krypton oft

dicht zusammenliegenden Linien festgesetzt wurde. Der Detektoruntergrund der Fluoreszenzspektren wurde dabei berücksichtigt. Die Integrale der Linien wurden dann mit der Transmission des entsprechenden Interferenzfilters an der jeweiligen Position der Linie multipliziert. Dadurch kennt man die vom Interferenzfilter durchgelassene Intensität jeder benachbarten Linie.

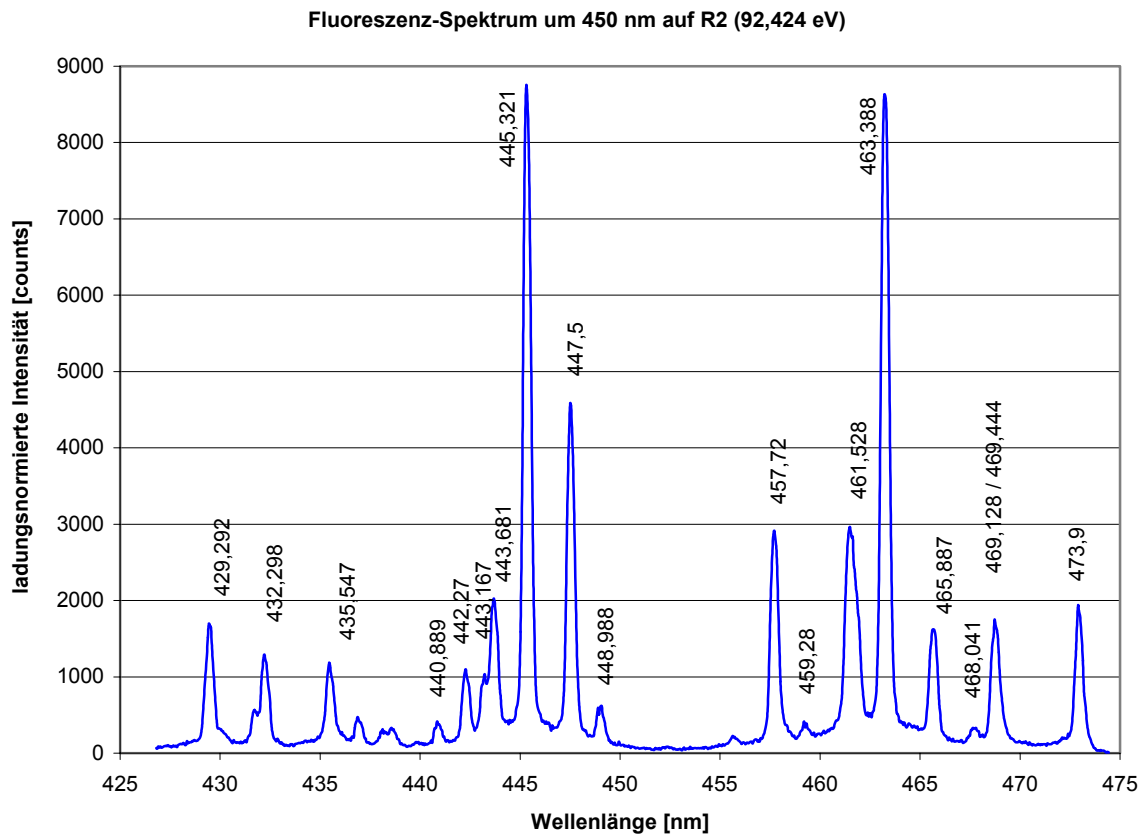


Abbildung 4.8: Fluoreszenzspektrum im Bereich der $4p^4 (^1S) 5p^2 P_{1/2} \rightarrow 4p^4 (^1S) 5s^2 S_{1/2}$ -Fluoreszenz bei 445,321 nm und der $4p^4 (^1D) 5p^2 F_{7/2} \rightarrow 4p^4 (^1D) 5s^2 D_{5/2}$ -Fluoreszenz bei 457,720 nm auf R2 mit zugeordneten Wellenlängen.

Die Summe daraus liefert den gesamten Untergrund, den man dann ins Verhältnis zur durchgelassenen Intensität der zu beobachtenden Linie setzen kann. Dies geschieht so, dass man ein Verhältnis Untergrund : Linie von $1 : I_{\text{Linie}}$ erhält, d.h. das $\frac{1}{1 + I_{\text{Linie}}}$ -fache der

gesamt gemessenen Intensität der Fluoreszenzstrahlung muss für die Korrektur subtrahiert werden:

$$I_{\text{IF kor.}} = I_{\text{U.korr.}} \cdot \left(\frac{1}{1 + I_{\text{Linie}}} \cdot I_{\text{U.korr.}} \right) \quad (4.2)$$

Da die Linienintensitäten in den Fluoreszenzspektren energieabhängig sind, war es notwendig, die Fluoreszenzspektren für alle Anregungsenergien der Zustände, deren Fluoreszenz mit dem polarisationsempfindlichen Detektorzweig analysiert werden sollten, aufzunehmen und auszuwerten.

Für die vorgenommene Korrektur waren die meisten Nachbarlinien von den Hauptlinien spektroskopisch zu trennen. Nur die 457,580 nm-Linie ließ sich nicht von der 457,720 nm-Linie trennen. Um eine Abschätzung für die Intensität der 457,580 nm-Linie zu bekommen, wurde das Multiplet des Ausgangszustandes der 457,580 nm-Linie betrachtet ($6s \ ^2D_{3/2}$). Dieser Ausgangszustand zerfällt bei einer Wellenlänge von 504,631 nm in den $5p \ ^2P_{1/2}$ -Zustand und bei 457,580 nm in den $5p \ ^2P_{3/2}$ -Zustand. Das statistische Verhältnis dieser Übergänge beträgt 1 : 2. Daher wurde die doppelte Intensität der beobachteten 504,631 nm-Fluoreszenzlinie, unter Beachtung der relativen Quanteneffizienz des verwendeten ortsauflösenden Detektorsystems vom Typ SSL 2601A (Kapitel 4.9), für das Verhältnis Untergrund : Linie berücksichtigt.

4.5 Fit einer Sinus-Funktion

Licht, das mit einem Polarisationsfilter analysiert wird, kann immer durch eine sinusförmige Oszillation beschrieben werden, die π -periodisch ist. Für die Auswertung in der vorliegenden Arbeit wurden Funktionen der Form

$$I = I_{\text{MW}} + A \cdot \sin(2[x+W] \cdot \pi/180) \quad (4.3)$$

mit einem Levenberg-Marquardt-Algorithmus durch ein Fit-Programm an die Datenpunkte angepasst.

I_{MW} ist dabei der Mittelwert der Oszillation, A die Amplitude und W die Winkelshift in Grad. x bezeichnet die jeweilige Position des Polarisationsfilters in Grad.

Für die Berechnung der statistischen Fehler (Kapitel 6.1) macht das verwendete Fit-Programm Angaben zu den Absolutfehlern aller oben genannten Fitparameter.

Die Reihenfolge der Korrektur für den Interferenzfilter (Kapitel 4.4) und den Fit der Sinus-Funktion kann auch vertauscht werden, ohne die Ergebnisse zu beeinflussen. In diesem Fall müssen die Fitparameter I_{MW} und A entsprechend Gleichung 4.2 korrigiert werden.

4.6 Normierung

Um die Amplituden der Oszillation der Messungen zu vergleichen, werden die gemessenen Intensitäten und die gefitteten sinusförmigen Oszillationen auf den gefitteten und korrigierten Mittelwert I_{MW} normiert. Die gefittete Winkelshift W bleibt davon unberührt.

4.7 Bestimmung von Alignment- und Orientierungsparameter

Mit Hilfe von Gleichung 4.3 und den gefitteten, normierten und korrigierten Parametern werden die Intensitäten für die Polarisationsfilterstellungen bei 0° , 45° , 90° und 135° berechnet.

Durch die in Kapitel 2.3 abgeleiteten Gleichungen wird dann, je nach Art der anregenden Synchrotronstrahlung, der Alignmentparameter A_{20} bzw. der Orientierungsparameter O_{10} bestimmt. Im Fall der zirkular polarisierten Anregung mit $\lambda/4$ -Plättchen in 0° -Position im polarisationsempfindlichen Detektorzweig werden der lineare und zirkulare Polarisationsgrad simultan gemessen. Dabei wird die Phase der gefitteten Sinus-Funktion entsprechend den relativen Anteilen von linearer und zirkularer Polarisation der Fluoreszenzstrahlung verändert. Bei einer reinen Orientierungsmessung ohne linearen Polarisationsgrad (z.B. bei einem $J_1 = 1/2$ -Zustand, der einen geeigneten Testfall darstellt) resultieren die Intensitäten bei den Polarisationsfilterstellungen 45° und 135° aus den Extremwerten der Funktion (siehe Kapitel 5.1 und Abbildung 4.9). Aber bei einem

Zustand mit $J_i \neq 1/2$ verschiebt die Phase die Extremwerte der Funktion, und die Intensitäten bei den Polarisationsfilterstellungen 45° und 135° , die zur Bestimmung des zirkularen Polarisationsgrades benötigt werden, sitzen nun in den Flanken der gefitteten Funktion (Abbildung 4.9), was zu einer größeren statistischen Unsicherheit der Ergebnisse führt.

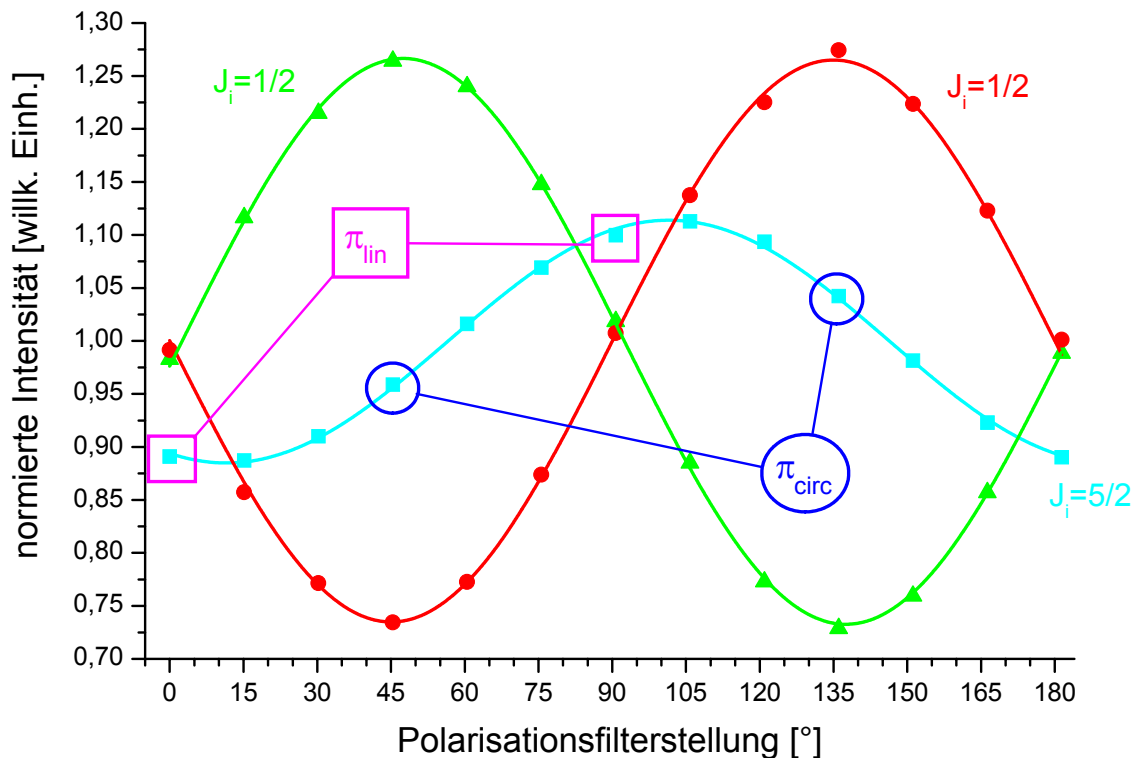


Abbildung 4.9: Messung der Amplitudenmodulation für die 408,833 nm-Linie mit $J_i = 5/2$ auf R1 (türkis: links zirkular polarisierte Anregung) und für die 445,321 nm-Linie mit $J_i = 1/2$ auf R2 mit Anregung durch zirkular polarisierte Synchrotronstrahlung beider Drehrichtungen (grün: links zirkular, rot: rechts zirkular). Die markierten Punkte bei der $J_i = 5/2$ -Linie zeigen die Positionen des Polarisationsfilters, aus denen der lineare und zirkulare Polarisationsgrad abgeleitet werden kann.

Für die Ableitung des linearen Polarisationsgrades π_{lin} bei linear horizontal polarisierter Anregung der Synchrotronstrahlung werden die Intensitäten bei 0° und 90°

Polarisationsfilterstellung benötigt. Dies sind die Extremstellen der gefitteten sinusförmigen Oszillation.

Die lineare Anregung stellt dabei einen Spezialfall dar, da die zu messenden Oszillationen keine Winkelshift durch zirkulare Anteile der Fluoreszenzstrahlung haben. Dies wurde durch den Fit von Sinus-Funktion bei einer Vielzahl von Messungen mit guter Statistik abgesichert, so dass bei allen Messungen von π_{lin} mit linear horizontal polarisierter Anregung die Phasenshift beim Fitten fest vorgegeben werden konnte.

Die Ergebnisse der gemessenen Alignment- bzw. Orientierungsparameter resultieren aus vier Strahlzeiten bei BESSY II mit unterschiedlichem Schwerpunkt auf verschiedene untersuchte Energiebereiche und Arten der Anregung.

Um aus allen abgeleiteten und korrigierten Einzelwerten von Alignment- ($A_{20}(k)$) bzw. Orientierungsparametern ($O_{10}(k)$) für eine feste Anregungsenergie der Photonen einen Mittelwert zu bilden, wird das gewichtete Mittel für eine feste Anregungsenergie berechnet:

$$A_{20}(\text{gew.}) = \frac{\sum_k A_{20}(k) / [\Delta A_{20}(k)]^2}{\sum_k 1 / [\Delta A_{20}(k)]^2} \quad (4.4)$$

bzw.

$$O_{10}(\text{gew.}) = \frac{\sum_k O_{10}(k) / [\Delta O_{10}(k)]^2}{\sum_k 1 / [\Delta O_{10}(k)]^2} \quad (4.5)$$

Aus Gründen der Komplexität wird die statistische und systematische Fehlerbehandlung in Kapitel 6 vorgenommen.

4.8 Beispiele für gemessene Amplitudenmodulationen

Abbildung 4.10 zeigt die gemessenen Amplitudenmodulationen der 457,720 nm-Linie pro Sweep mit zirkular polarisierter Anregung auf den vier untersuchten Resonanzen. Da sich

die gezeigten Messungen bei gleicher Ladungsnormierung pro Step in ihrer Sweep-Anzahl unterscheiden, wurden sie auf einen Sweep normiert. Das $\lambda/4$ -Plättchen im polarisationsempfindlichen Detektorzweig befand sich für die Messungen in der 0° -Position, so dass sowohl der lineare als auch der zirkulare Polarisationsgrad abgeleitet werden kann. Diese gemessenen Amplitudenmodulationen sind in Abbildung 4.11 so dargestellt, dass der jeweilige Mittelwert der Amplitudenmodulation auf $I_{MW} = 1$ normiert wurde.

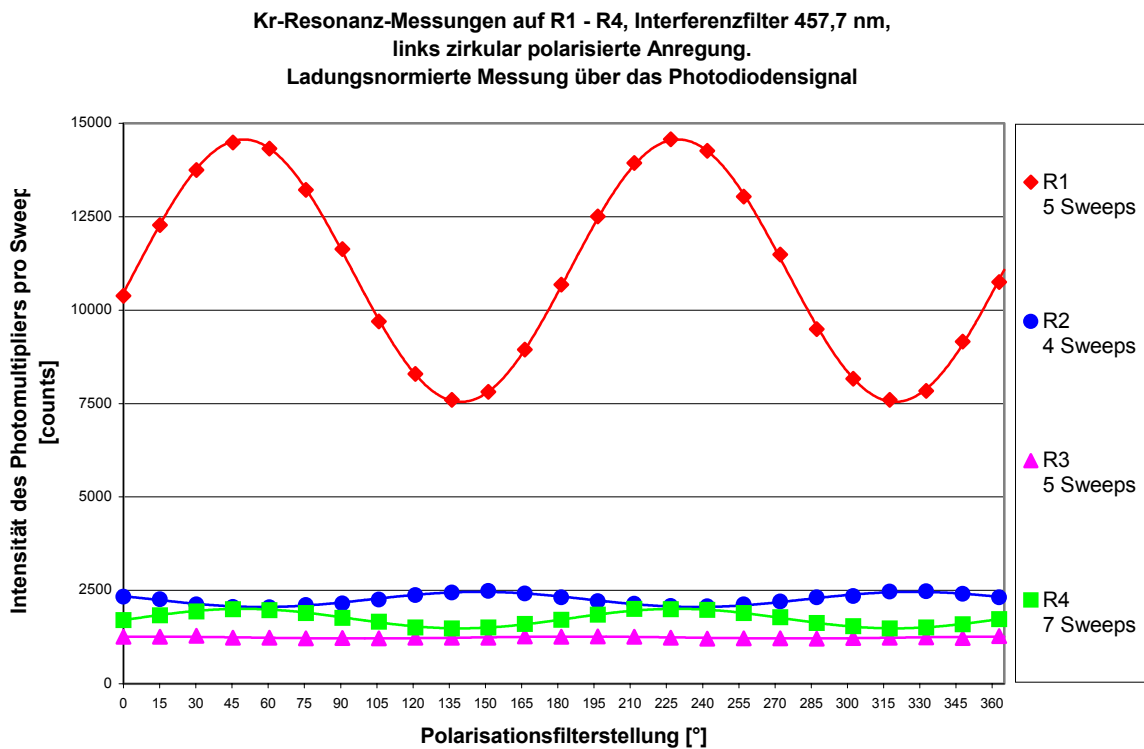


Abbildung 4.10: Amplitudenmodulation der 457,720 nm-Linie mit links zirkular polarisierter Anregung auf R1 – R4. Die Amplitudenmodulation ist in 15° -Schritten gemessen. Die eingezeichneten Kurven stellen die zugehörigen gefitteten Sinus-Funktionen dar.

Dabei ist besonders anschaulich zu sehen, dass der Orientierungsparameter auf R1 und R4 das gleiche Vorzeichen haben muss, während es sich auf R2 umkehrt und der Orientierungsparameter auf R3 etwa den Wert Null hat. Der lineare Polarisationsgrad ist

auf R1, R2 und R4 im Vergleich zum zirkularen nur schwach, was daran zu sehen ist, dass die Oszillationen kaum geshiftet sind, und der zirkulare Polarisationsgrad bei 45° und 135° Polarisationsfilterstellung im Bereich der Extremstellen abgeleitet werden kann.

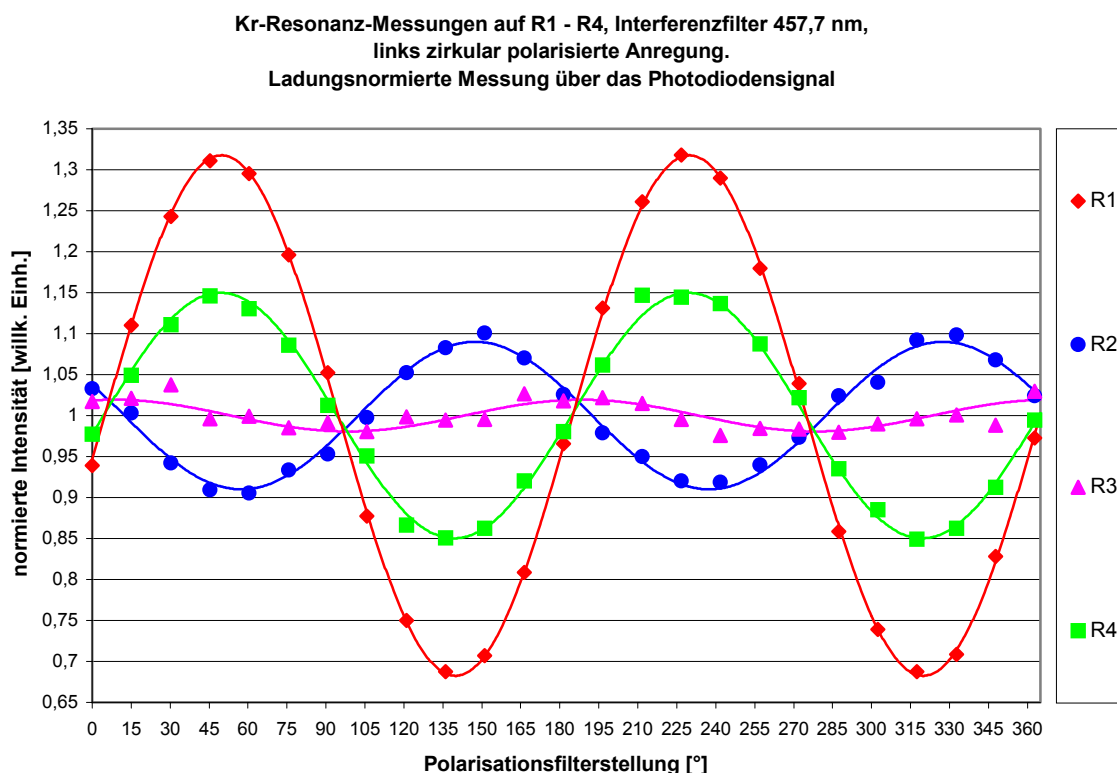


Abbildung 4.11: Normierte Amplitudenmodulation der 457,720 nm-Linie mit links zirkular polarisierter Anregung auf R1 – R4. Die Amplitudenmodulation ist in 15° -Schritten gemessen. Die eingezeichneten Kurven stellen die zugehörigen gefitteten Sinus-Funktionen dar.

4.9 Korrektur von Kaskaden und Depolarisation

Bei der Bildung von Kr II $3d^{10} 4p^4 5p$ -Zuständen durch den resonanten Auger-Effekt können über den Shake-Up-Prozess Kr II $3d^{10} 4p^4 6p$ -Zustände besetzt werden, die durch fluoreszenten Zerfall über 6s oder 5d wieder 5p -Zustände besetzen. Der Einfluss solcher Kaskaden-Übergänge ist für einen Vergleich mit theoretischen Berechnungen zu korrigieren.

Für die Kaskadenkorrektur werden Spektren herangezogen, die ladungsnormiert mit dem Sekundärmonochromator 2 bei allen für die Messungen eingestellten Energien aufgenommen wurden. Es muss berücksichtigt werden, dass Kaskadenlinien in den gemessenen Summenspektren möglicherweise in einem anderen Wellenlängenbereich liegen als die Linie, die durch die Kaskaden besetzt wird. Daher ist es notwendig, die relative Quanteneffizienz des verwendeten ortsauflösenden Detektorsystems vom Typ SSL 2601A zu berücksichtigen (Abbildung 4.12).

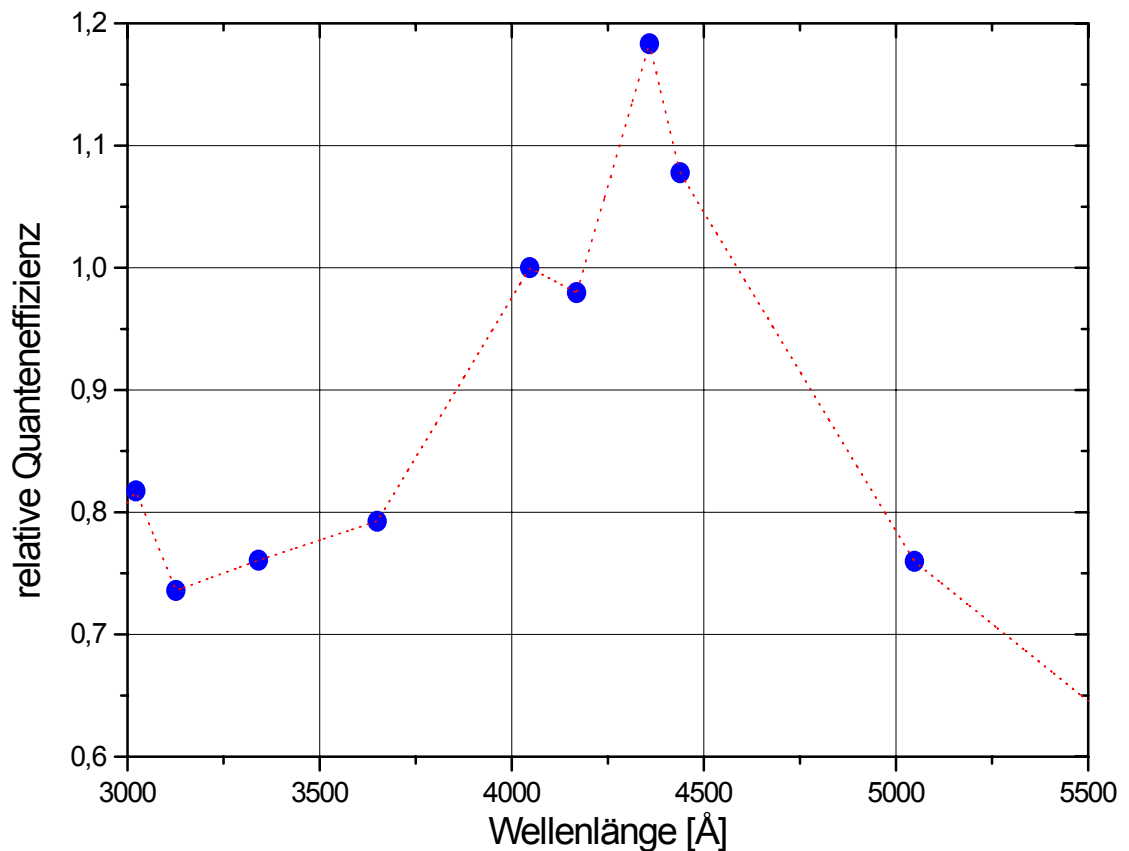


Abbildung 4.12: Gemessene relative Quanteneffizienz des ortsauflösenden Detektorsystems vom Typ SSL 2601A in Abhängigkeit zur Wellenlänge der detektierten Fluoreszenzstrahlung [Mic04].

Die beobachteten Linienintensitäten der zu korrigierenden Linie (I_{Linie}) und der Kaskaden ($I_{Kask.}$) werden, wie in Kapitel 4.4 beschrieben, mit einem Voigt-Profil gefittet und durch die jeweiligen relativen Quanteneffizienzen (QE) dividiert.

$$Kask. = \sum_{\text{alle Kaskaden}} \frac{I_{Kask.} / QE}{I_{Linie} / QE} \quad (4.6)$$

Die Kaskaden wurden für die vorgenommene Korrektur als unpolarisiert angenommen. Da dies sicher nicht für alle Kaskaden richtig ist, wird ein Einfluss von polarisierten Kaskaden in der systematischen Fehlerbetrachtung diskutiert (Kapitel 6.2.9).

Unter dieser Annahme wirken sich Kaskaden rechnerisch nur auf den Mittelwert der Amplitudenmodulation aus:

$$I_{MW \text{ Kask. korr.}} = I_{MW} \cdot (1 - Kask.) \quad (4.7)$$

Ein weiterer zu korrigierender Effekt ist die Depolarisation (Depol.) durch Hyperfein-Wechselwirkungen. Der natürliche Anteil von 11,5 % ^{83}Kr -Isotopen hat einen von Null verschiedenen Kernspin von 9/2, der eine Depolarisation bewirkt. Die Depolarisation für das gesamte Isotopengemisch beträgt 8,9 % und 8,7 % bei einem 5/2 - bzw. 7/2 -Zustand für Alignment sowie 7,6 %, 7,1 % und 6,6 % bei einem 1/2, 5/2 - bzw. 7/2 -Zustand für Orientierung [Lag03b].

Die Depolarisation wirkt sich auf den Polarisationsgrad der Fluoreszenzstrahlung aus, was rechnerisch ebenfalls durch eine Korrektur des Mittelwertes der Amplitudenmodulation zu erfassen ist. Zusammen mit der Korrektur für Kaskaden ergibt sich:

$$I_{MW \text{ korr.}} = I_{MW} \cdot (1 - Kask.) \cdot (1 - Depol.) \quad (4.8)$$

Um die Korrektur von Kaskaden und Depolarisation nicht nacheinander, sondern in einem Schritt vorzunehmen, wird der Korrekturfaktor *Korr.* eingeführt, der exakt die zwei aufeinander folgenden Korrekturen berücksichtigt:

$$Korr. = Kask. + Depol. - Kask. \cdot Depol. \quad (4.9)$$

Der Korrekturfaktor *Korr.* enthält dabei entweder die Depolarisation für das Alignment oder die Orientierung.

Damit ergibt sich die rechnerische Korrektur für den Fitparameter I_{MW} zu:

$$I_{MW \text{ korr.}} = I_{MW} - I_{MW} \cdot \text{Korr.} \quad (4.10)$$

Mit den korrigierten Werten kann entsprechend Kapitel 4.7 der Alignment- bzw. der Orientierungsparameter neu berechnet werden.

4.10 Elektronen-Partialwellenanalyse

Das Ziel der Elektronen-Partialwellenanalyse ist es, eine Aussage darüber zu treffen, mit welchen Anteilen die Elektronen-Partialwellen mit $j_{el} = J_i - 1, J_i, J_i + 1$, die während des Auger-Zerfalls in den Zustand J_i entstehen, das angeregte Krypton-Atom verlassen (Abbildung 4.1), ohne die Auger-Elektronen zu detektieren. Dazu betrachtet man den Zustand J_i als Ausgangszustand des Fluoreszenzüberganges nach J_f .

Dies geschieht mit Hilfe eines linearen Gleichungssystems ersten Grades mit drei Unbekannten $x(l, J_i - 1, \omega)$, $x(l, J_i, \omega)$ und $x(l, J_i + 1, \omega)$, das eine eindeutige Lösung liefert:

$$x(l, J_i - 1, \omega) + x(l, J_i, \omega) + x(l, J_i + 1, \omega) = 1 \quad (4.11)$$

$$a_{20}(J_i - 1, J_i) \cdot x(l, J_i - 1, \omega) + a_{20}(J_i, J_i) \cdot x(l, J_i, \omega) + a_{20}(J_i + 1, J_i) \cdot x(l, J_i + 1, \omega) = A_{20}(\omega) \quad (4.12)$$

$$o_{10}(J_i - 1, J_i) \cdot x(l, J_i - 1, \omega) + o_{10}(J_i, J_i) \cdot x(l, J_i, \omega) + o_{10}(J_i + 1, J_i) \cdot x(l, J_i + 1, \omega) = O_{10}(\omega) \quad (4.13)$$

Die drei Unbekannten $x(l, J_i - 1, \omega)$, $x(l, J_i, \omega)$ und $x(l, J_i + 1, \omega)$ geben den relativen Anteil der beim Auger-Zerfall emittierten lj -Elektronen für $j = J_i - 1, J_i$ und $J_i + 1$ an. $\omega = \omega_{exc}$ ist die Energie der anregenden Synchrotronstrahlung. Gleichung 4.11 dient dabei der Normierung. Die Gleichungen 4.12 und 4.13 ergeben sich aus Gleichung 2.9 bzw. 2.10.

Die partiellen Alignment- und Orientierungsparameter a_{20} und o_{10} geben das Alignment bzw. die Orientierung an, wenn nur Auger-Elektronen mit der Drehimpuls-Quantenzahl j_{el} beim Übergang in den Zustand J_i emittiert werden.

Die verwendeten partiellen Alignment- und Orientierungsparameter wurden bei Lagutin et al. entnommen [Lag03b] und sind in Tabelle 4.1 bzw. 4.2 wiedergegeben.

J_i	$a_{20}(j_{el}, J_i)$				$J_i \rightarrow J_f$	α_2
	3/2	5/2	7/2	9/2		
5/2	-0,748331	0,855236	-0,267261	-	5/2 \rightarrow 5/2	-0,427618
7/2	-	-0,654654	0,872871	-0,305505	7/2 \rightarrow 5/2	0,327327

Tabelle 4.1: Partielle Alignmentparameter $a_{20}(j_{el}, J_i)$ für einen Anfangszustand $J_i = 5/2$ bzw. $7/2$ sowie den Strukturparametern α_2 für die in dieser Arbeit beobachteten Fluoreszenzübergänge.

J_i	$o_{10}(j_{el}, J_i)$				$J_i \rightarrow J_f$	α_1
	3/2	5/2	7/2	9/2		
5/2	1,0247	0,2928	-0,7319	-	5/2 \rightarrow 5/2	0,2928
7/2	-	0,9820	0,2182	-0,7637	7/2 \rightarrow 5/2	0,982

Tabelle 4.2: Partielle Orientierungsparameter $o_{10}(j_{el}, J_i)$ für einen Anfangszustand $J_i = 5/2$ bzw. $7/2$ sowie den Strukturparametern α_1 für die in dieser Arbeit beobachteten Fluoreszenzübergänge.

5 Ergebnisse und Diskussion

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der energieabhängigen Messungen des Alignment- und Orientierungsparameters für die besetzten Krypton-Ionenzustände $4p^4 ({}^1S) 5p {}^2P_{1/2}$, $4p^4 ({}^1D) 5p {}^2D_{5/2}$ und $4p^4 ({}^1D) 5p {}^2F_{7/2}$ und eine daraus abgeleitete Partialwellenanalyse der im vorausgegangenen Auger-Zerfall emittierten Elektronen anhand der Fluoreszenzübergänge $\text{Kr II } 4p^4 ({}^1D) 5p {}^2D_{5/2} \rightarrow 4p^4 ({}^1D) 5s {}^2D_{5/2}$ und $4p^4 ({}^1D) 5p {}^2F_{7/2} \rightarrow 4p^4 ({}^1D) 5s {}^2D_{5/2}$ dargestellt und im Vergleich zu theoretischen Berechnungen diskutiert.

5.1 Analyse des $\text{Kr II } 4p^4 ({}^1S) 5p {}^2P_{1/2} \rightarrow 4p^4 ({}^1S) 5s {}^2S_{1/2}$ -Fluoreszenzübergangs bei 445,321 nm

Durch resonante Anregung des $4p^4 ({}^1S) 5p {}^2P_{1/2}$ -Zustandes im Kr II und Beobachtung von dessen fluoreszentem Zerfall in den $4p^4 ({}^1S) 5s {}^2S_{1/2}$ -Zustand bei einer Wellenlänge von 445,321 nm wird ein Ausgangszustand i besetzt, der wegen $J_i = 1/2$ kugelsymmetrisch ist. Dies bietet einen Zugang zur Untersuchung der apparativen Polarisation des polarisationsempfindlichen Detektorzweiges, da ein solcher Zustand kein Alignment zeigt. D.h., dass bei Anregung der Krypton-Atome mit linear polarisierter Strahlung keine Modulation der Intensität als Funktion der Stellung des Polarisationsfilters zu erwarten ist. Um dies zu testen, wurde R2 gewählt, da der $4p^4 ({}^1S) 5p {}^2P_{1/2}$ -Zustand auf R2 am stärksten besetzt wird. Im Gegensatz zu den beiden anderen im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Zustände, die am stärksten auf R1 besetzt werden, wird dieser Zustand auf R1 nur sehr schwach besetzt (siehe Abbildung 5.14). Wie in Abbildung 5.1 zu sehen, liefert die Messung mit linear polarisierter Undulatorstrahlung eine Streuung der Datenpunkte von etwa 0,5 % um den Mittelwert. Um ein Gefühl für die Statistik dieser Messung zu vermitteln, sei erwähnt, dass der Mittelwert nach der Korrektur des Untergrundes und vor der Normierung bei etwa 110.000 counts lag. Der Fit der Datenpunkte, der zur Bestimmung des Mittelwertes benutzt wurde (Gleichung 4.3), liefert eine Amplitude $A = -0,08 \%$ für die Sinus-Funktion, wobei zu bemerken ist, dass im vorliegenden Fall ein

Fit bei einer offensichtlich rein statistischen Streuung der Datenpunkte physikalisch nicht sinnvoll ist.

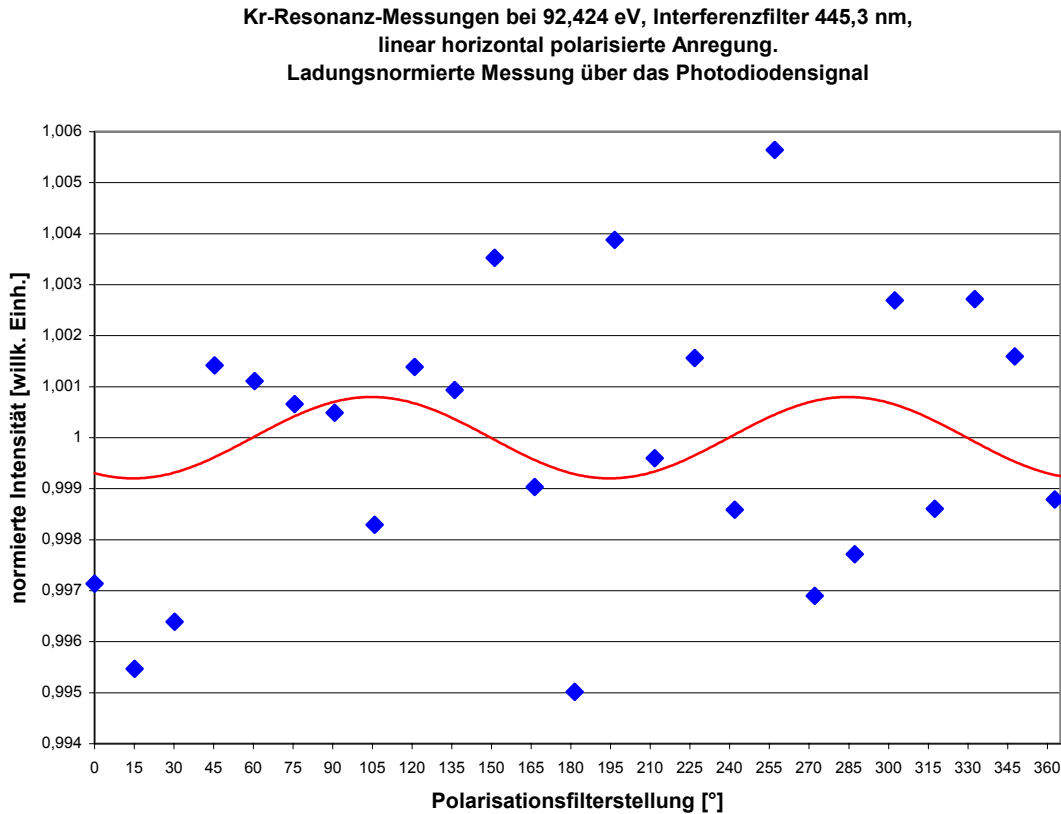


Abbildung 5.1: Auf R2 gemessene normierte Intensität des Fluoreszenzübergangs $4p^4 (^1S) 5p ^2P_{1/2} \rightarrow 4p^4 (^1S) 5s ^2S_{1/2}$ bei 445,321 nm in Abhängigkeit zur Polarisationsfilterstellung mit Anregung durch linear polarisierte Synchrotronstrahlung.

Da der lineare Polarisationsgrad bei der Messung des Kr II $4p^4 (^1S) 5p ^2P_{1/2} \rightarrow 4p^4 (^1S) 5s ^2S_{1/2}$ -Fluoreszenzübergangs vernachlässigbar klein ist, stellt eine Messung der Amplitudenmodulation mit zirkular polarisierter Undulatorstrahlung einen idealen Testfall dar, mit dem durch die Messung des reinen zirkularen Polarisationsgrades dieses Überganges die apparativ eingestellten Positionen von $\lambda/4$ -Plättchen und Polarisationsfilter überprüft werden können. Die Amplitudenmodulation sollte Extrema bei exakt 45° und 135° haben.

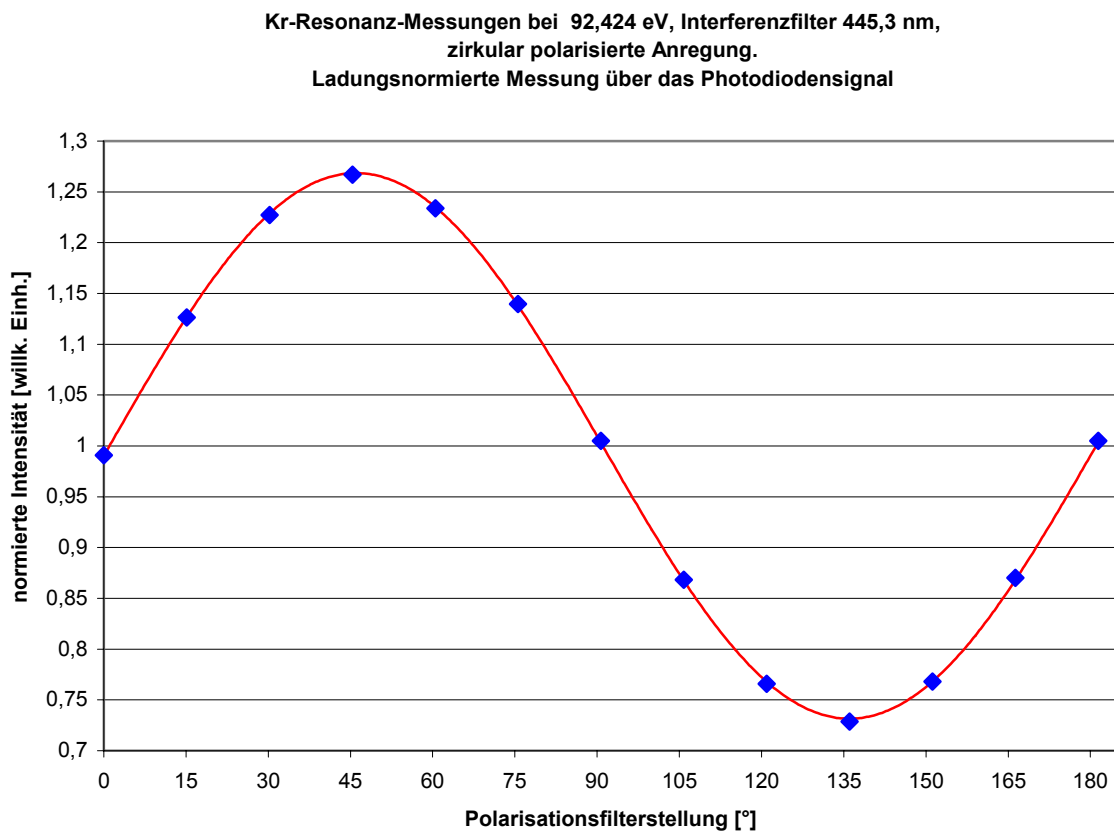


Abbildung 5.2: Auf R2 gemessene normierte Intensität des Fluoreszenzübergangs $4p^4 (^1S) 5p^2 P_{1/2} \rightarrow 4p^4 (^1S) 5s^2 S_{1/2}$ bei 445,321 nm in Abhängigkeit zur Polarisationsfilterstellung mit Anregung durch zirkular polarisierte Synchrotronstrahlung.

Bei Auswertung der in Abbildung 5.2 gezeigten Oszillation ergeben sich die gefitteten Extremwerte der Sinus-Funktion bei ungefähr 44° und 134° . Die daraus ablesbare Winkelshift von etwa 1° würde einen linearen Polarisationsgrad in der Messung von $\pi_{\text{lin}} = 1\%$ bedeuten. Sie hat ihre Ursache aber nicht im Einfluss eines linearen Polarisationsgrades in der Fluoreszenzstrahlung, da er in dieser Größenordnung durch Messung mit linear polarisierter Anregung und einer Statistik, die mit der aus Abbildung 5.1 vergleichbar ist, messbar wäre. Ihre mögliche Ursache ist eine Fehlstellung der Winkelposition von $\lambda/4$ -Plättchen und Polarisationsfilter, die im Rahmen der systematischen Fehlerbehandlung in Kapitel 6.2 zu diskutieren ist.

Der Mittelwert der Amplitudenmodulation aus Abbildung 5.2 lag nach der Korrektur des Untergrundes und vor der Normierung bei etwa 1.200.000 counts.

Es bleibt festzuhalten, dass eine apparative Polarisierung des Detektorsystems nicht nachweisbar war und für die weiteren Auswertungen nicht beachtet werden muss.

Die Auswertung der Messungen bei zirkularer Anregung auf R2 liefert einen Orientierungsparameter von $O_{10} = -0,459(2)$. Dieser Wert liegt sehr nah beim theoretisch vorhergesagten Wert von $O_{10} = -0,50$ [Lag03b]. Daher ist wegen des 1S -Core des $4p^4 (^1S) 5p^2 P_{1/2}$ -Ausgangszustandes im Fluoreszenzzerfall und der damit verbundenen hohen Anregungsenergie ein sehr geringer Einfluss von Kaskaden zu erwarten, so dass der Korrekturfaktor $Korr.$ aus Gleichung 4.9 nur die Depolarisation für Orientierung enthält. Mögliche Kaskadenübergänge waren bei Striganov im tabellierten Energiebereich nicht zu finden [Str68].

5.2 Analyse des Kr II $4p^4 (^1D) 5p^2 D_{5/2} \rightarrow 4p^4 (^1D) 5s^2 D_{5/2}$ - Fluoreszenzübergangs bei 408,833 nm

Die Polarisationsanalyse des Kr II $4p^4 (^1D) 5p^2 D_{5/2} \rightarrow 4p^4 (^1D) 5s^2 D_{5/2}$ - Fluoreszenzübergangs bei 408,833 nm erwies sich als schwierig, da die maximale Transmission des Interferenzfilters, wie in Abbildung 4.4 zu sehen, nur etwa 25 % beträgt. Dies ließ sich aufgrund des geringen Einflusses der Dunkelzählrate im polarisationsempfindlichen Detektorzweig durch längere Meßzeiten kompensieren.

Im Falle der zirkularen Anregung um R1 und R4 ergaben sich für die Bestimmung des Orientierungsparameters mit einem $\lambda/4$ -Plättchen in 0° -Position weitere Probleme. Wie in Abbildung 4.9 zu sehen, ist die Phase der Oszillation gegenüber anderen Messungen um etwa 45° geshiftet, was auf einen starken linearen Polarisationsgrad π_{lin} der Fluoreszenzstrahlung schließen lässt, der im Bereich der Extremstellen der Oszillation abgeleitet werden kann, während der zirkulare Polarisationsgrad π_{circ} im Bereich des Mittelwertes bestimmt wird. Dies führt, wie in Kapitel 4.7 erwähnt, zu einer größeren

Unsicherheit der Ergebnisse, die im Rahmen der Fehlerrechnung (Kapitel 6.1.3) berücksichtigt wird.

Weiterhin galt es die für die Wellenlänge von 408,8 nm vorliegende Phasenshift des $\lambda/4$ -Plättchens von etwa 80° in die Auswertung der mit zirkularer Anregung gemessenen Amplitudenmodulationen einfließen zu lassen.

Simulationsrechnungen auf Basis der Gleichungen von Berry et al. [Ber77] ergaben, dass das bei zirkularer Anregung in 0° -Position eingebaute $\lambda/4$ -Plättchen mit der von 90° abweichenden Phasenshift den linearen Polarisationsgrad nicht beeinflusst, während der Betrag des zirkularen Polarisationsgrades um etwa 1,5 % zu klein gemessen wurde. Diese Korrektur bewirkte für große zirkulare Polarisationsgrade der 408,833 nm-Linie von $\pi_{\text{circ}} = 0,12$ eine Änderung des Orientierungsparameters von $O_{10} = 0,63$ zu $O_{10} = 0,64$.

Die Phasenshift des $\lambda/4$ -Plättchens wurde experimentell bestimmt, indem linear horizontal polarisiertes Licht durch das $\lambda/4$ -Plättchen in 45° -Position fällt und anschließend durch einen rotierenden Polarisationsfilter analysiert wird. Bei einer von 90° abweichenden Phasenshift ist das vom Polarisationsfilter analysierte Licht elliptisch polarisiert, so dass sich eine schwache Oszillation ergibt, die mit Simulationsrechnungen, die die Phasenshift berücksichtigen [Ber77], verglichen werden kann. Diese Messung war aufgrund von Problemen, die durch den Untergrund der verwendeten Fozelle als Detektor entstanden, auf etwa 3° genau. Abweichungen der bei dieser Wellenlänge gemessenen Phasenshift von 80° beeinflussen die Ergebnisse kaum und werden daher in der systematischen Fehlerbehandlung in Kapitel 6.2 vernachlässigt.

Eine alternative Meßmöglichkeit zur Bestimmung des zirkularen Polarisationsgrades bietet ein Meßverfahren mit einem $\lambda/4$ -Plättchen in 45° -Position. Dabei wird der lineare Anteil der Fluoreszenzstrahlung in zirkulares Licht umgewandelt, was bei einer Phasenshift von 90° in der Oszillationsmessung einen flachen Untergrund bedeutet und die Ableitung des zirkularen Polarisationsgrades π_{circ} stets über die Extremstellen der Oszillation (im

beschriebenen Fall bei 0° und 90° Polarisationsfilterstellung) ermöglicht (siehe Kapitel 3.2). Weicht aber die Phasenshift des $\lambda/4$ -Plättchens von 90° ab, so hat der aus dem linearen Anteil der Fluoreszenzstrahlung resultierende Untergrund Extrema an den gleichen Winkelpositionen des Polarisationsfilters wie der Anteil der Oszillation aus dem zirkularen Anteil der Fluoreszenzstrahlung, und es müssen Korrekturen entsprechend des linearen Anteils vorgenommen werden, der z.B. durch Messungen mit linearer Anregung ermittelt werden kann.

Da eine mögliche Korrektur im Bereich von 80° Phasenshift empfindlich auf kleine Änderungen reagiert, wurde dieses Meßverfahren für die 408,833 nm-Linie nicht angewendet.

Die Auswertung der sinusförmigen Oszillationen erfolgte gemäß der in Kapitel 4 beschriebenen Verfahren. Die in Kapitel 4.9 beschriebene Korrektur für Kaskaden und Depolarisation wurde mit den in Abbildung 5.3 dargestellten Korrekturfaktoren $Korr.$ berechnet.

Bei der Kaskadenkorrektur wurden die Fluoreszenzübergänge bei 508,652 nm ($(^1D) 6s \ ^2D_{5/2} \rightarrow (^1D) 5p \ ^2D_{5/2}$), 393,825 nm ($(^3P) 5d \ ^2F_{5/2} \rightarrow (^1D) 5p \ ^2D_{5/2}$) und 394,092 nm ($(^3P) 5d \ ^2P_{3/2} \rightarrow (^1D) 5p \ ^2D_{5/2}$) berücksichtigt. Der Fluoreszenzübergang bei 508,652 nm lieferte dabei den Hauptbeitrag, während die Fluoreszenzübergänge bei 393,825 nm und 394,092 nm spektroskopisch nicht voneinander zu trennen sind und zusammen einen etwas schwächeren Beitrag liefern. Die Fluoreszenzübergänge bei 384,445 nm ($(^3P) 5d \ ^2D_{5/2} \rightarrow (^1D) 5p \ ^2D_{5/2}$), 390,625 nm ($(^3P) 5d \ ^2F_{7/2} \rightarrow (^1D) 5p \ ^2D_{5/2}$), 420,142 nm ($(^3P) 5d \ ^2D_{3/2} \rightarrow (^1D) 5p \ ^2D_{5/2}$), 421,749 nm ($(^1D) 5d \ ^2G_{7/2} \rightarrow (^1D) 5p \ ^2D_{5/2}$) und 506,558 nm ($(^1D) 6s \ ^2D_{3/2} \rightarrow (^1D) 5p \ ^2D_{5/2}$) waren in den mit dem Sekundärmonochromator 2 gemessenen Fluoreszenzspektren nicht nachweisbar [Str68].

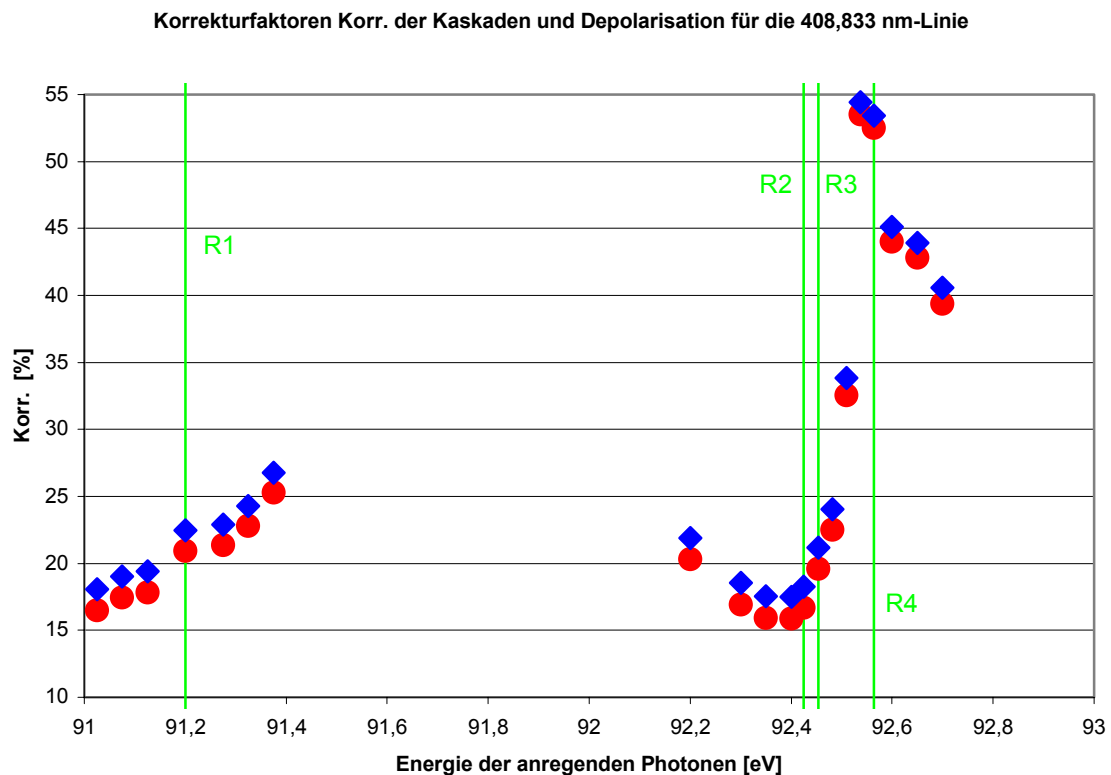


Abbildung 5.3: Korrekturfaktor Korr. aus Gleichung 4.9 mit den Anteilen für Depolarisation von Alignment (blau) bzw. Orientierung (rot) für die 408,833 nm-Linie.

Die experimentell bestimmten Werte für den Alignmentparameter A_{20} , den Orientierungsparameter O_{10} sowie für die Anteile der drei beteiligten Elektronen-Partialwellen als Funktion der anregenden Photonenenergie sind in den Abbildungen 5.4 und 5.5 im Vergleich zu den jeweiligen berechneten Werten und dem Wirkungsquerschnitt dargestellt.

Besondere Beachtung bei der Betrachtung der Ergebnisse verdient der Energieverlauf des Alignmentparameters A_{20} im Bereich von R1 (Abbildung 5.4 und 5.5). Dort wird von den Berechnungen eine deutliche Diskrepanz zwischen dem Energieverlauf auf Basis des Zweistufen-Modells und dem Modell interferierender Resonanzen (siehe Kapitel 2.1.2) vorhergesagt. Während das Zweistufen-Modell beim Überstreichen von R1 einen flachen Energieverlauf beschreibt, ist im Modell interferierender Resonanzen ein deutlicher Abfall des Alignmentparameters mit zunehmender Anregungsenergie festzustellen, was von den

experimentellen Ergebnissen unterstützt wird und durch einen Einfluss von R2 – R4 auf R1 erklärt werden kann. Dabei wird auf R1 der Einzelwert im Zweistufen-Modell annähernd erreicht. Abbildung 5.6 zeigt die für diesen Energiebereich gemessenen, normierten Daten mit gefitteten Sinus-Funktionen vor der Korrektur für Kaskaden und Depolarisation.

Abbildungen 5.4 und 5.5: *Besetzung des Kr II $4p^4$ (1D) $5p^2D_{5/2}$ -Zustandes durch resonanten Raman-Auger-Effekt in verschiedenen Energiebereichen.*

Oben: Mit dem Modell interferierender Resonanzen berechnete Anteile der Elektronen-Partialwellen und experimentelle Ergebnisse aus dem gewichteten Mittel aller Messungen mit Angabe des Standardfehlers des gewichteten Mittels.

Mitte: Theoretisch berechnete und experimentelle Werte des Alignment- (A_{20}) bzw. Orientierungsparameters (O_{10}).

Unten: Berechnete Wirkungsquerschnitte in Mb.

Die Berechnungen mit durchgezogener Linie beziehen sich auf das Modell interferierender Resonanzen. Die unterbrochenen Linien beziehen sich auf mit dem energieabhängigen Wirkungsquerschnitt der Resonanz gewichtete Einzelwerte im Zweistufen-Modell. Die zur Berechnung verwendeten Einzelwerte im Zweistufen-Modell sind auf R1, R2 und R4 durch Querbalken dargestellt.

Die Angaben in den Legenden beziehen sich beim Alignment- bzw. Orientierungsparameter auf unterschiedliche Strahlzeiten bei BESSY II (z.B. 1203: Dezember 2003) und zusätzlich beim Alignmentparameter auf die Art der Anregung (linear oder zirkular polarisierte Synchrotronstrahlung).

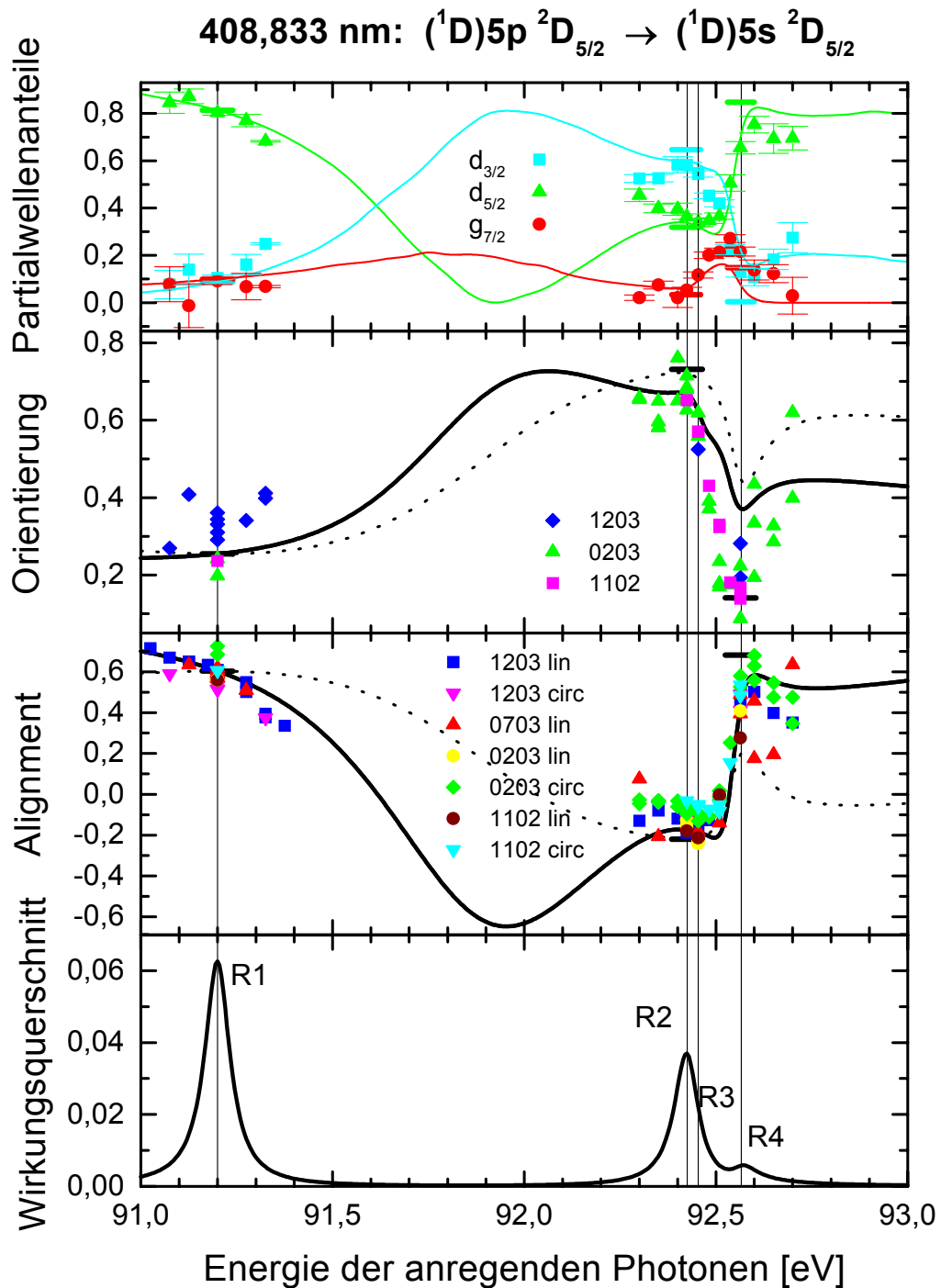


Abbildung 5.4: Besetzung des Kr II $4p^4\ (^1D)\ 5p\ ^2D_{5/2}$ -Zustandes durch resonanten Raman-Auger-Effekt im Energiebereich von R1 – R4 (siehe auch Seite 64).

Mitte: Alle experimentell bestimmten Werte des Alignment- bzw. Orientierungsparameters.

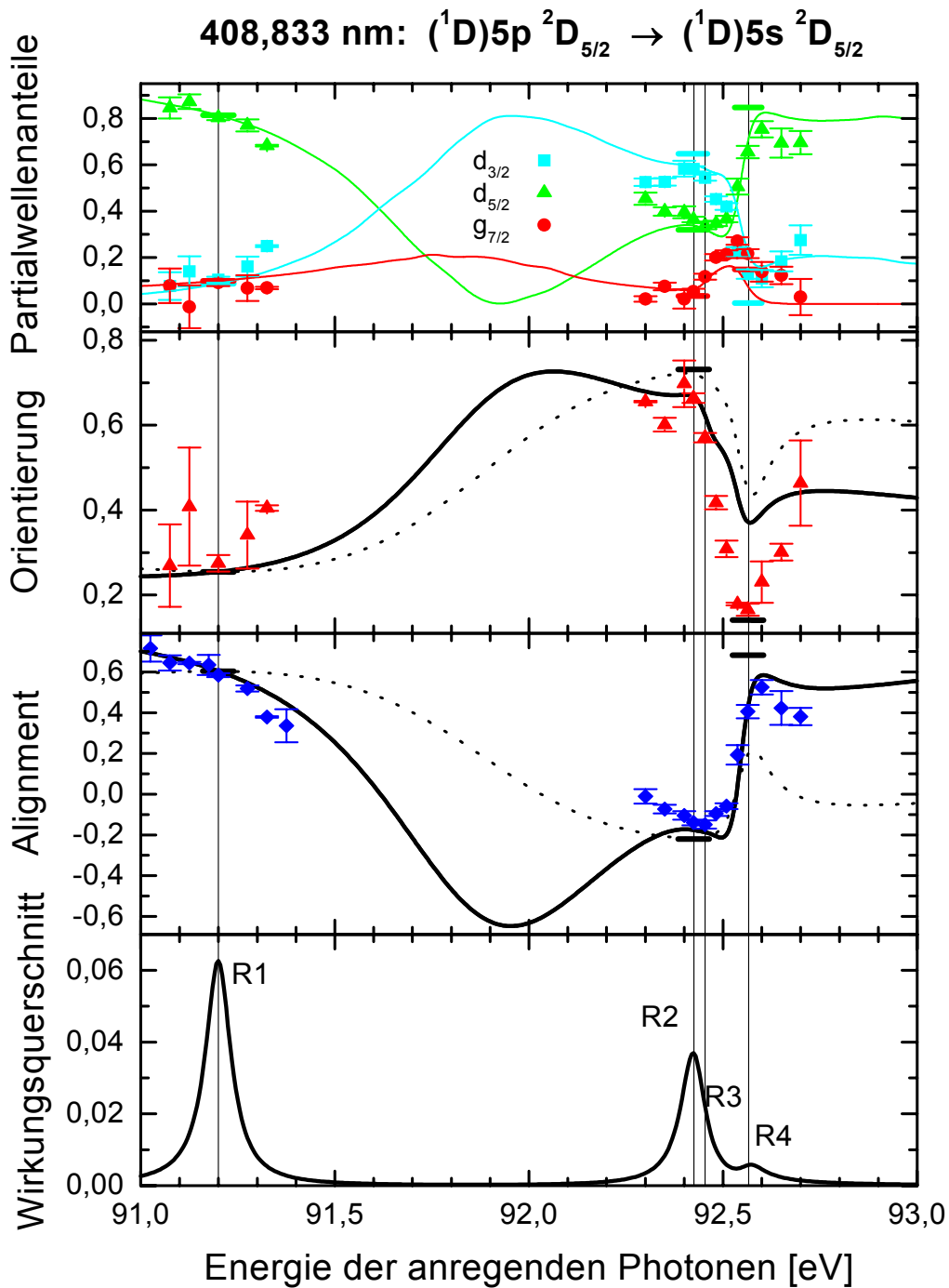


Abbildung 5.5: Besetzung des Kr II $4p^4\ (^1D)\ 5p\ ^2D_{5/2}$ -Zustandes durch resonanten Raman-Auger-Effekt im Energiebereich von R1 – R4 (siehe auch Seite 64).

Mitte: Experimentell bestimmte Werte des Alignment- bzw. Orientierungsparameters aus dem gewichteten Mittel aller Messungen mit Angabe der Fehler.

Da die Phasenlage der Amplitudenmodulation für lineare Anregung durch Messungen auf Resonanzen in 15°-Schritten bei guter Statistik bekannt war, bot es sich an, gezielt die Extremstellen der Modulation bei 0° beginnend alle 90° aufzunehmen, um in den intensitätsschwachen Flanken der Resonanz die Anzahl der Meßpunkte etwa um den Faktor 5 zu Gunsten einer besseren Statistik in den Extremstellen der Modulation zu reduzieren. Dies wird in Abbildung 5.6 beispielhaft dokumentiert.

Um dieses Verhalten im Bereich von R1 zu erklären, wird der Summand der resonanten Anregung in Gleichung 2.6 zerlegt. Dazu wird der Anteil einer einzelnen Resonanz (hier R1) von der Summe abgespalten, um so den Einfluss der einzelnen Beiträge besser studieren zu können:

$$D(E_i J_i, \varepsilon l j) = \frac{\langle E_i J_i, \varepsilon l j | H^{ee} | R1 \rangle \langle R1 | D | 0 \rangle}{(\omega_{exc} - E(R1)) + i\Gamma_{R1} / 2} + \sum_{R=R2}^{R4} \frac{\langle E_i J_i, \varepsilon l j | H^{ee} | R \rangle \langle R | D | 0 \rangle}{(\omega_{exc} - E(R)) + i\Gamma_R / 2} \quad (5.1)$$

Schreibt man den ersten Term von Gleichung 5.1 um, so erhält man:

$$\begin{aligned} & \frac{\langle E_i J_i, \varepsilon l j | H^{ee} | R1 \rangle \langle R1 | D | 0 \rangle}{(\omega_{exc} - E(R1)) + i\Gamma_{R1} / 2} \\ &= \frac{\langle E_i J_i, \varepsilon l j | H^{ee} | R1 \rangle \langle R1 | D | 0 \rangle}{(\omega_{exc} - E(R1)) + i\Gamma_{R1} / 2} \cdot \frac{(\omega_{exc} - E(R1)) - i\Gamma_{R1} / 2}{(\omega_{exc} - E(R1)) - i\Gamma_{R1} / 2} \\ &= \frac{\langle E_i J_i, \varepsilon l j | H^{ee} | R1 \rangle \langle R1 | D | 0 \rangle \cdot [(\omega_{exc} - E(R1)) - i\Gamma_{R1} / 2]}{(\omega_{exc} - E(R1))^2 + (\Gamma_{R1} / 2)^2} \end{aligned} \quad (5.2)$$

Daraus lässt sich der Realteil

$$\frac{\langle E_i J_i, \varepsilon l j | H^{ee} | R1 \rangle \langle R1 | D | 0 \rangle \cdot [\omega_{exc} - E(R1)]}{(\omega_{exc} - E(R1))^2 + (\Gamma_{R1} / 2)^2} \quad (5.3)$$

und der Imaginärteil der Übergangsamplitude $D(E_i J_i, \epsilon l j)$ ableiten.

$$-\frac{\langle E_i J_i, \epsilon l j | H^{ee} | R1 \rangle \langle R1 | D | 0 \rangle \cdot [\Gamma_{R1} / 2]}{(\omega_{exc} - E(R1))^2 + (\Gamma_{R1} / 2)^2} \quad (5.4)$$

Auf R1 ist der Zähler von 5.3 gleich Null. Daher verschwindet der Realteil des Beitrags von R1 in der Übergangsamplitude. Der Imaginärteil in 5.4 ist dabei etwa zwei Größenordnungen größer als die Beiträge von R2 – R4 im zweiten Teil von Gleichung 5.1 [Lag04]. Deshalb wird trotz eines Einflusses von R2 – R4 der Einzelwert des Zweistufen-Modells auf R1 vom Modell interferierender Resonanzen annähernd wiedergegeben.

In den Flanken von R1 wird der Imaginärteil 5.4 kleiner, da der Nenner anwächst. Der Realteil 5.3 nimmt einen Wert ungleich Null an. Er wird vergleichbar mit dem Imaginärteil 5.4. Durch den abfallenden Beitrag von R1 wächst der Einfluss der Beiträge von R2 – R4 im zweiten Teil von Gleichung 5.1, der sich im gesamten Bereich von R1 nur wenig ändert und nur noch eine Größenordnung kleiner ist als die Anteile des Real- und Imaginärteils 5.3 und 5.4 [Lag04].

Der Grund für die unsymmetrische Änderung beim Überstreichen von R1 liegt darin, dass sich in Gleichung 5.1 das Vorzeichen der Beiträge von R2 – R4 nicht ändert, während im Nenner des Beitrags von R1 die Differenz $(\omega_{exc} - E(R1))$ für Anregungsenergien unterhalb von R1 negativ und oberhalb von R1 positiv ist. Dabei ist die Änderung der Zähler in Gleichung 5.1 klein und beeinflusst das Ausmaß der Änderung in der hoch- bzw. niederenergetischen Flanke von R1 kaum.

Der Interferenz-Effekt, d.h. der Einfluss von R2 – R4 auf R1, zeigt sich daher nicht auf der Resonanz sondern in den Flanken und dort um so stärker, je weiter man sich vom Maximum von R1 weg bewegt. Den einzig meßbaren Einfluss von R2 – R4 auf R1 hat dabei R2, da der Wirkungsquerschnitt für die Besetzung des Kr II $4p^4 ({}^1D) 5p {}^2D_{5/2}$ - Zustandes auf R2 mit dem auf R1 vergleichbar ist [Lag04].

Die Tatsache, dass die bisher als isoliert angesehene R1 meßbar von R2 beeinflusst wird, ist dabei bemerkenswert, da R2 um das 15fache der natürlichen Linienbreite von R1 entfernt liegt.

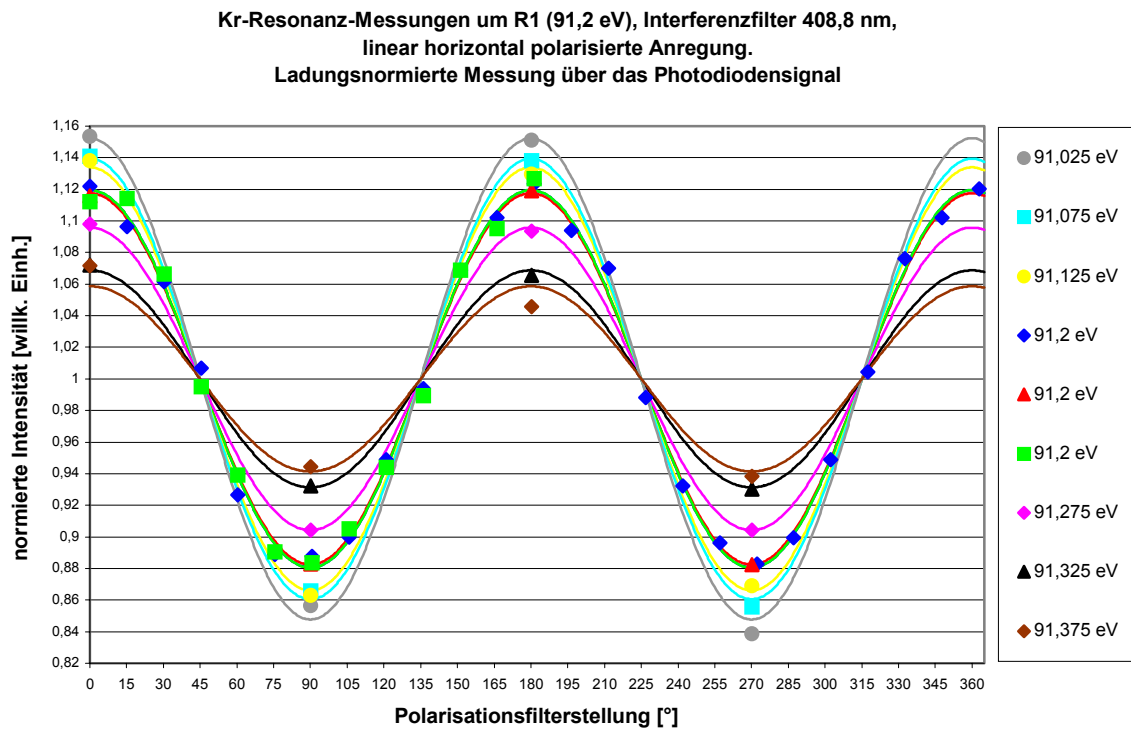


Abbildung 5.6: Energieabhängigkeit der normierten Amplitudenmodulation der 408,833 nm-Linie mit linear horizontal polarisierter Anregung im Bereich von R1. Die Amplitudenmodulation ist über die Extremstellen der Oszillation und in 15°-Schritten gemessen. Die eingezeichneten Kurven stellen die zugehörigen gefitteten Sinus-Funktionen dar.

Des Weiteren ist beim Alignmentparameter auf und oberhalb von R4 eine deutliche Diskrepanz zwischen dem Energieverlauf auf Basis des Zweistufen-Modells und dem Modell interferierender Resonanzen zu erkennen (Abbildung 5.4 und 5.5). Während der Energieverlauf im Zweistufen-Modell auf R4 noch stark von R2 dominiert ist, so dass der Einzelwert des Alignmentparameters im Zweistufen-Modell deutlich unterschritten wird, wird der Einzelwert im Modell interferierender Resonanzen fast erreicht, was die

experimentellen Werte unterstützen. Oberhalb von R4 bleiben die Werte des Alignmentparameters im Modell interferierender Resonanzen nahezu konstant, während der Alignmentparameter im Zweistufen-Modell einen Wert um Null annimmt. Auch hier unterstützen die experimentellen Ergebnisse das Modell interferierender Resonanzen (Abbildung 5.4 und 5.5).

Im Bereich von R2 unterscheiden sich die Berechnungen des Alignmentparameters kaum, so dass keine Aussage getroffen werden kann, von welchem Modell die experimentellen Ergebnisse besser beschrieben werden.

Abbildung 5.7 zeigt im Bereich von R2 – R4 einen Vergleich der über das gewichtete Mittel berechneten Alignmentparameter dieser Arbeit mit Ergebnissen von Schutov [Lag03b]. Die Ergebnisse von Schutov resultieren aus gemeinsamen Messungen mit dem Sekundärmonochromator 1 in Kombination mit dem Wollaston-Prisma und einem positionsempfindlichen Detektor für den sichtbaren Spektralbereich (Kapitel 3.2).

Im Bereich unter R2 und über R3 stimmen die experimentellen Ergebnisse gut überein, während auf R2, R3 und über R4 die Ergebnisse dieser Arbeit tendenziell zwischen den Berechnungen und den von Schutov abgeleiteten Alignmentparametern liegen. Sie sind je nach Anregungsenergie um R2 und R3 im Betrag etwa um den Faktor 1,5 bis 2 kleiner als die Berechnungen auf Basis des Modells interferierender Resonanzen.

Bei der theoretischen Berechnung des Orientierungsparameters O_{10} unterscheiden sich die Energieverläufe im Zweistufen-Modell und im Modell interferierender Resonanzen in den experimentell untersuchten Energiebereichen kaum. Weiterhin ist die Messung des Orientierungsparameters, wie bereits erwähnt, um R1 und R4 aufgrund eines starken linearen Polarisationsgrades in den Einzelmessungen mit einer größeren Meßungenaugigkeit behaftet. Es kann jedoch im gesamten untersuchten Energiebereich keine Aussage getroffen werden, welches theoretische Modell die experimentellen Ergebnisse des Orientierungsparameters besser beschreibt.

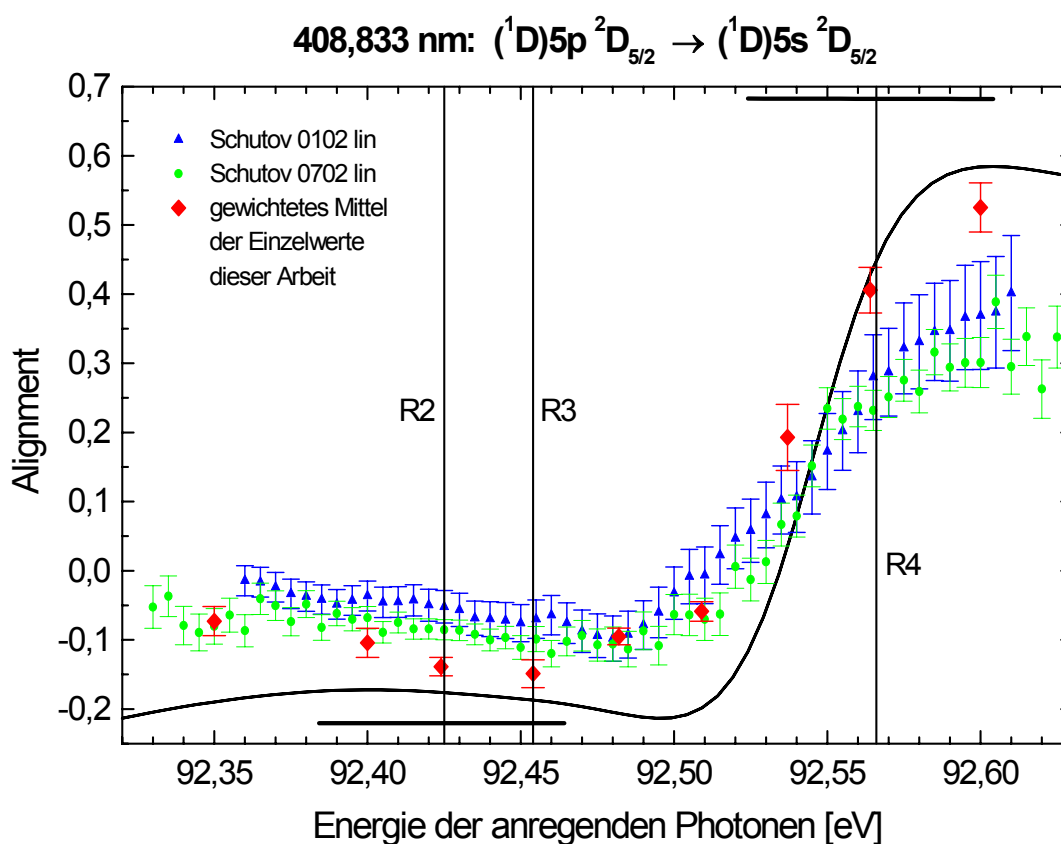


Abbildung 5.7: Alignmentparameter für die Besetzung des Kr II $4p^4\ (^1D)\ 5p\ ^2D_{5/2}$ - Zustandes durch resonanten Raman-Auger-Effekt im Energiebereich von R2 – R4. Vergleich der gemittelten Ergebnisse dieser Arbeit mit Ergebnissen von Schutov in verschiedenen Strahlzeiten bei BESSY II mit linear polarisierter Anregung [Lag03b]. Die Berechnungen mit durchgezogener Linie beziehen sich auf das Modell interferierender Resonanzen. Die Einzelwerte im Zweistufen-Modell sind auf R2 und R4 durch Querbalken dargestellt. Die Angaben in den Legenden beziehen sich auf unterschiedliche Strahlzeiten bei BESSY II (z.B. 0702: Juli 2002).

Um R4 unterschreiten die experimentellen Werte des Orientierungsparameters beide Berechnungen deutlich und liegen auf R4 im Bereich des Einzelwertes im Zweistufen-Modell. Selbst unter Berücksichtigung des Gesamtfehlers der Einzelmessungen (Kapitel 6) werden die Werte der berechneten Energieverläufe nicht erreicht. Dabei ist zu bemerken,

dass besonders um R4 der Einfluss des Korrekturfaktors Korr. für Kaskaden und Depolarisation groß ist. Er liegt im Bereich von 40 - 55 % (Abbildung 5.3). Die Nichtbeachtung der Polarisation von Kaskaden in der Korrektur (Kapitel 4.9) und in der Fehlerbetrachtung (Kapitel 6.2.9) kann hier zu einer noch größeren Unsicherheit der Ergebnisse führen. Daher sollte auch die Polarisation von Kaskaden in zukünftigen Messungen experimentell untersucht werden.

In diesem Zusammenhang ist die Frage zu klären, ob eine Einbeziehung von R3 in die Berechnungen diese Diskrepanz klären kann.

Messungen des linearen bzw. zirkularen Polarisationsgrades im Zwischenbereich von R1 und R2 wären besonders in Hinsicht auf den Alignmentparameter A_{20} interessant, da sich die Energieverläufe im Zweistufen-Modell und im Modell interferierender Resonanzen deutlich unterscheiden. Wie jedoch in Kapitel 2.1.2 erwähnt, ist die direkte Anregung des betrachteten Kr II $4p^4 (^1D) 5p ^2D_{5/2}$ -Ausgangszustandes zu schwach, um Messungen vornehmen zu können, die zu verwertbaren Ergebnissen führen.

Die Partialwellenanalyse, die aus den gewichteten Mittelwerten der einzelnen Meßpunkte des Alignment- und Orientierungsparameters berechnet wurde, gibt die vom Modell interferierender Resonanzen vorhergesagten Anteile der beteiligten $d_{3/2}$, $d_{5/2}$ und $g_{7/2}$ Elektronen-Partialwellen gut wieder. Besonders wird die Dominanz der $d_{5/2}$ -Elektronen-Partialwelle im Bereich von R1 und R4 von den Experimenten unterstützt. Lediglich im Bereich von R2 – R4 sind Unterschiede zu erkennen, was an den abweichenden Werten des Orientierungsparameters in diesem Bereich liegt. Das berechnete Maximum der $g_{7/2}$ -Elektronen-Partialwelle zwischen R3 und R4 konnte experimentell bestätigt werden.

5.3 Analyse des Kr II $4p^4 (^1D) 5p ^2F_{7/2} \rightarrow 4p^4 (^1D) 5s ^2D_{5/2}$ - Fluoreszenzübergangs bei 457,720 nm

Die Analyse des Kr II $4p^4 (^1D) 5p ^2F_{7/2} \rightarrow 4p^4 (^1D) 5s ^2D_{5/2}$ -Fluoreszenzübergangs bei 457,720 nm verlangte die Berücksichtigung der Kaskadenlinien bei 371,802 nm ($(^1D) 5d ^2G_{9/2} \rightarrow (^1D) 5p ^2F_{7/2}$) und bei 448,998 nm ($(^1D) 6s ^2D_{5/2} \rightarrow (^1D) 5p ^2F_{7/2}$). Diese

Kaskadenlinien tragen auf allen untersuchten Resonanzen etwa zu gleichen Anteilen zum Korrekturfaktor $Korr.$ bei. Die Fluoreszenzübergänge bei 354,454 nm ($(^3P) 5d \ ^2F_{7/2} \rightarrow (^1D) 5p \ ^2F_{7/2}$), 356,968 nm ($(^3P) 5d \ ^2F_{5/2} \rightarrow (^1D) 5p \ ^2F_{7/2}$), und 381,897 nm ($(^1D) 5d \ ^2G_{7/2} \rightarrow (^1D) 5p \ ^2F_{7/2}$) waren in den gemessenen Fluoreszenzspektren nicht nachweisbar [Str68].

Die für die Korrektur der Kaskaden und Depolarisation verwendeten Korrekturfaktoren $Korr.$ sind in Abbildung 5.8 dargestellt.

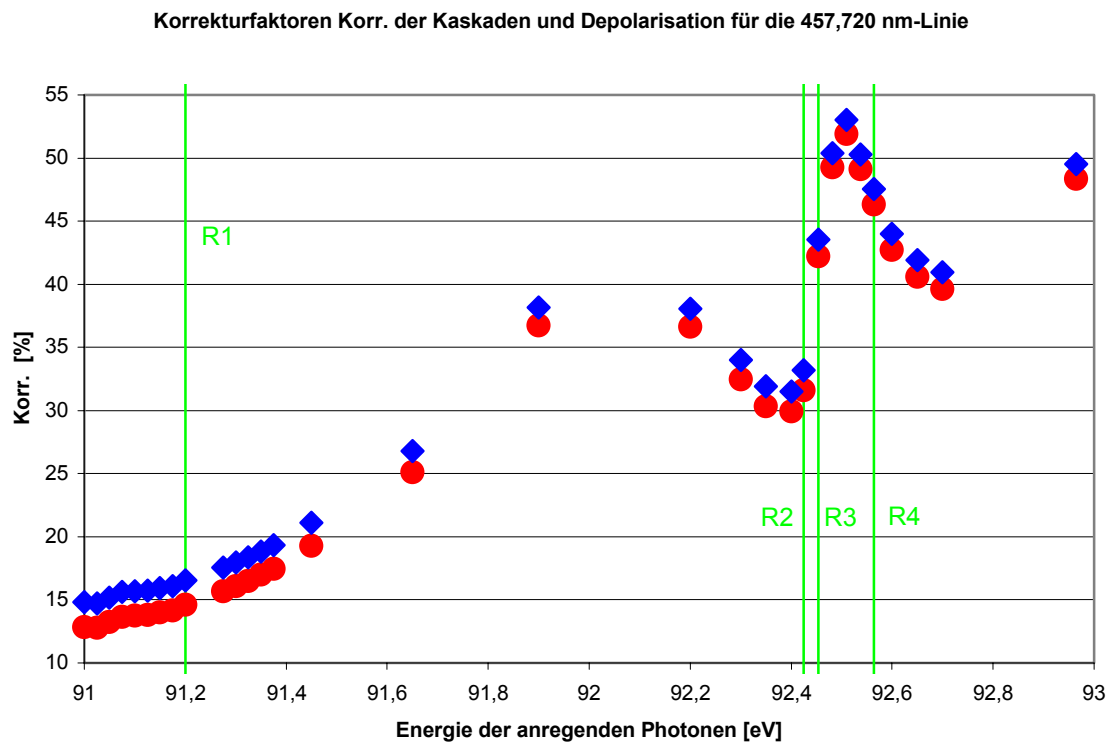


Abbildung 5.8: Korrekturfaktor $Korr.$ aus Gleichung 4.9 mit den Anteilen für Depolarisation von Alignment (blau) bzw. Orientierung (rot) für die 457,720 nm-Linie.

Messungen des Alignmentparameters für diesen Fluoreszenzübergang wurden bereits von Zimmermann am Sekundärmonochromator 1 unter Verwendung des Wollaston-Prismas durchgeführt [Zim00]. Die von der Theorie vorausgesagte Dominanz einer $g_{9/2}$ - Elektronen-Partialwelle wurde durch den gemessenen Alignmentparameter $A_{20} = -0,29(4)$

unterstützt. Da jedoch die partiellen Alignmentparameter für einen $J_i = 7/2$ - Ausgangszustand $a_{20}(j_{el}=5/2) = -0,65$, $a_{20}(j_{el}=7/2) = 0,87$ und $a_{20}(j_{el}=9/2) = -0,31$ betragen (Tabelle 4.1), kann alleine durch den gemessenen Alignmentparameter kein eindeutiger Schluss auf die Dominanz der $g_{9/2}$ -Elektronen-Partialwelle gezogen werden, da er rechnerisch auch aus einer Mischung der $d_{5/2}$ - und $g_{7/2}$ -Elektronen-Partialwelle resultieren kann.

Die zusätzliche Messung des Orientierungsparameters bietet die Möglichkeit, diesen eindeutigen Schluss ziehen zu können.

Abbildungen 5.9 und 5.10: *Besetzung des Kr II $4p^4$ (1D) $5p^2F_{7/2}$ -Zustandes durch resonanten Raman-Auger-Effekt in verschiedenen Energiebereichen.*

Oben: Mit dem Modell interferierender Resonanzen berechnete Anteile der Elektronen-Partialwellen und experimentelle Ergebnisse aus dem gewichteten Mittel aller Messungen mit Angabe des Standardfehlers des gewichteten Mittels.

Mitte: Theoretisch berechnete und experimentelle Werte des Alignment- (A_{20}) bzw. Orientierungsparameters O_{10} .

Unten: Berechnete Wirkungsquerschnitte in Mb.

Die Berechnungen mit durchgezogener Linie beziehen sich auf das Modell interferierender Resonanzen. Die unterbrochenen Linien beziehen sich auf mit dem energieabhängigen Wirkungsquerschnitt der Resonanz gewichtete Einzelwerte im Zweistufen-Modell. Die zur Berechnung verwendeten Einzelwerte im Zweistufen-Modell sind auf R1, R2 und R4 durch Querbalken dargestellt.

Die Angaben in den Legenden beziehen sich beim Alignment- bzw. Orientierungsparameter auf unterschiedliche Strahlzeiten bei BESSY II (z.B. 1203: Dezember 2003) und zusätzlich beim Alignmentparameter auf die Art der Anregung (linear oder zirkular polarisierte Synchrotronstrahlung).

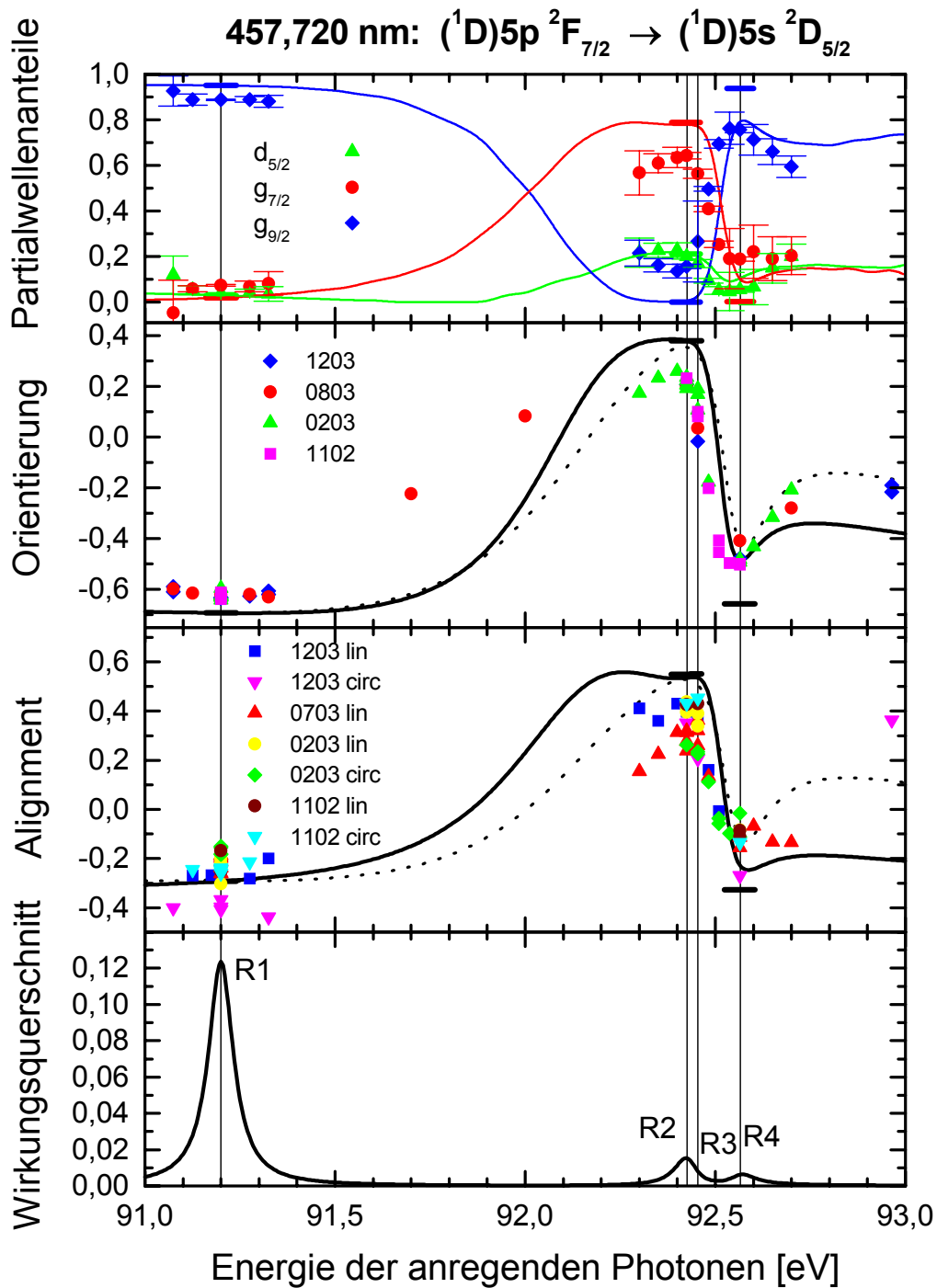


Abbildung 5.9: Besetzung des $Kr\ II\ 4p^4\ (^1D)\ 5p\ ^2F_{7/2}$ -Zustandes durch resonanten Raman-Auger-Effekt im Energiebereich von R1 – R4 (siehe auch Seite 74).

Mitte: Alle experimentell bestimmten Werte des Alignment- bzw. Orientierungsparameters.

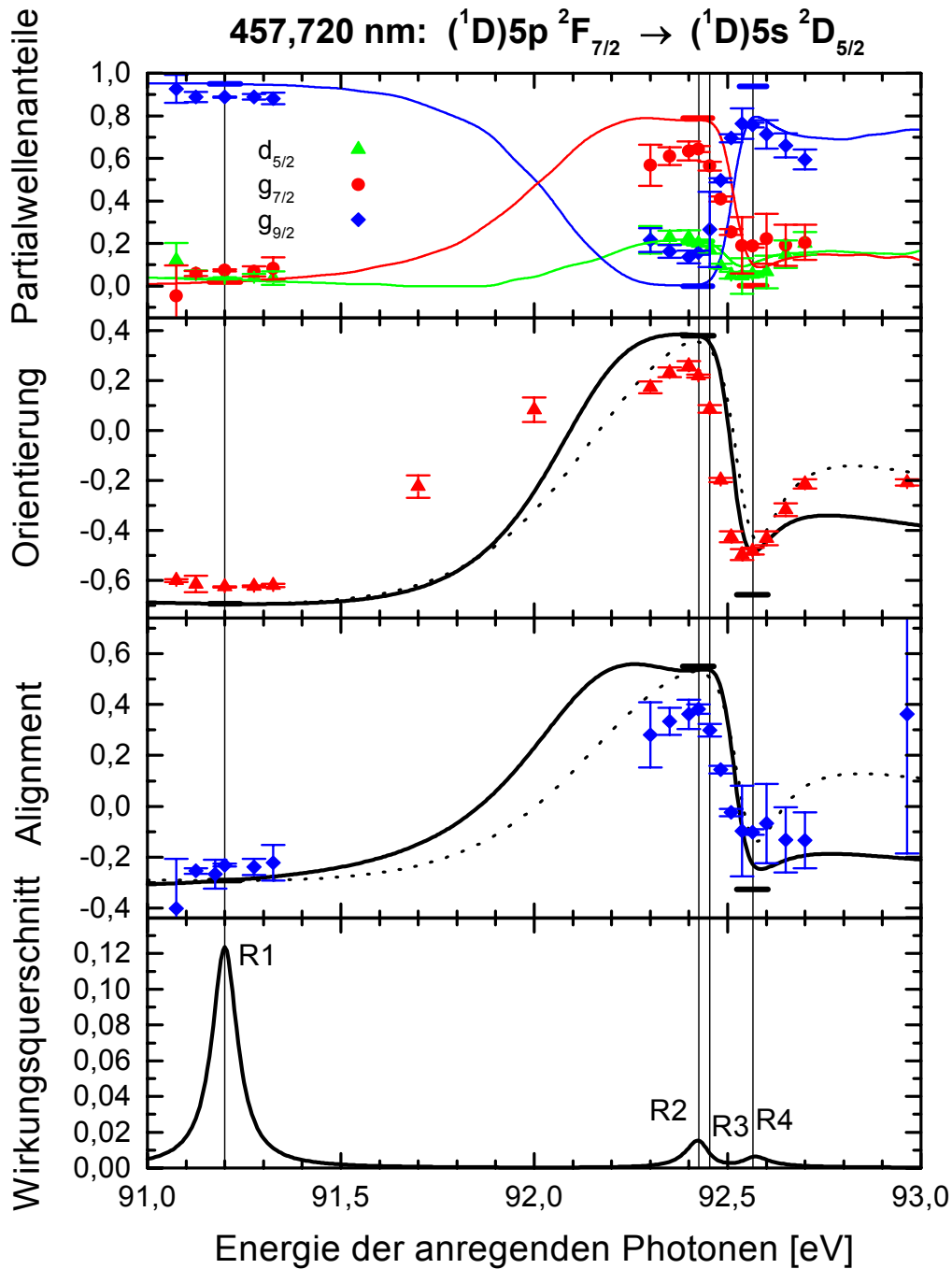


Abbildung 5.10: Besetzung des $Kr\ II\ 4p^4\ (^1D)\ 5p\ ^2F_{7/2}$ -Zustandes durch resonanten Raman-Auger-Effekt im Energiebereich von R1 – R4 (siehe auch Seite 74).

Mitte: Experimentell bestimmte Werte des Alignment- bzw. Orientierungsparameters aus dem gewichteten Mittel aller Messungen mit Angabe der Fehler.

Erste Messungen für den Kr II $3d^{10} 4p^4 ({}^1D) 5p {}^2F_{7/2}$ -Zustand mit dem polarisationsempfindlichen Detektorzweig ergaben $A_{20} = -0,30(3)$ bzw. $O_{10} = -0,70(7)$ und bestätigten die Dominanz der $g_{9/2}$ -Elektronen-Partialwelle mit den partiellen Orientierungsparametern aus Tabelle 4.2 [Sch03].

Experimentell bestimmte Werte für den Alignmentparameter A_{20} , den Orientierungsparameter O_{10} sowie für die Anteile der drei beteiligten Elektronen-Partialwellen für den Energiebereich aller untersuchten Resonanzen sind in den Abbildungen 5.9 und 5.10 im Vergleich zu den jeweiligen theoretisch berechneten Werten und dem Wirkungsquerschnitt dargestellt.

Da der Wirkungsquerschnitt der Besetzung des Kr II $4p^4 ({}^1D) 5p {}^2F_{7/2}$ -Zustandes auf R2 fast eine Größenordnung kleiner ist als auf R1, ist bei diesem Fluoreszenzübergang ein Einfluss von R2 auf R1 im Modell interferierender Resonanzen nicht zu erwarten. Daher unterscheiden sich die Energieverläufe im Zweistufen-Modell und im Modell interferierender Resonanzen im Bereich von R1 kaum. Auch im Bereich von R2 – R4 zeigen die beiden theoretischen Modelle keine größeren Unterschiede. Nur im Energiebereich oberhalb R4 berechnet das Modell interferierender Resonanzen für den Alignment- bzw. Orientierungsparameter deutlich negativere Werte als das Zweistufen-Modell, während das Modell interferierender Resonanzen unterhalb von R2 leicht positivere Werte liefert (Abbildung 5.9 und 5.10).

Die experimentellen Ergebnisse des Alignmentparameters A_{20} stimmen im Bereich von R1 gut mit den Berechnungen überein. Im Bereich von R2 – R4 sind sie im Betrag etwas kleiner und oberhalb von R4 tendieren sie eher zur Berechnung mit dem Modell interferierender Resonanzen.

Abbildung 5.11 zeigt einen Vergleich der Ergebnisse von Schutov mit den über das gewichtete Mittel berechneten Alignmentparameter dieser Arbeit im Bereich von R2 – R4 [Lag03b]. Dabei zeigt sich eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen von Schutov aus der Strahlzeit 0102 im gesamten Energiebereich und der

Strahlzeit 0702 im Bereich von R2 – R3, während die Ergebnisse aus der Strahlzeit 0702 im Bereich von R4 deutlich negativere Werte annehmen und vom Betrag etwa um den Faktor 2,5 größer sind als die Ergebnisse dieser Arbeit.

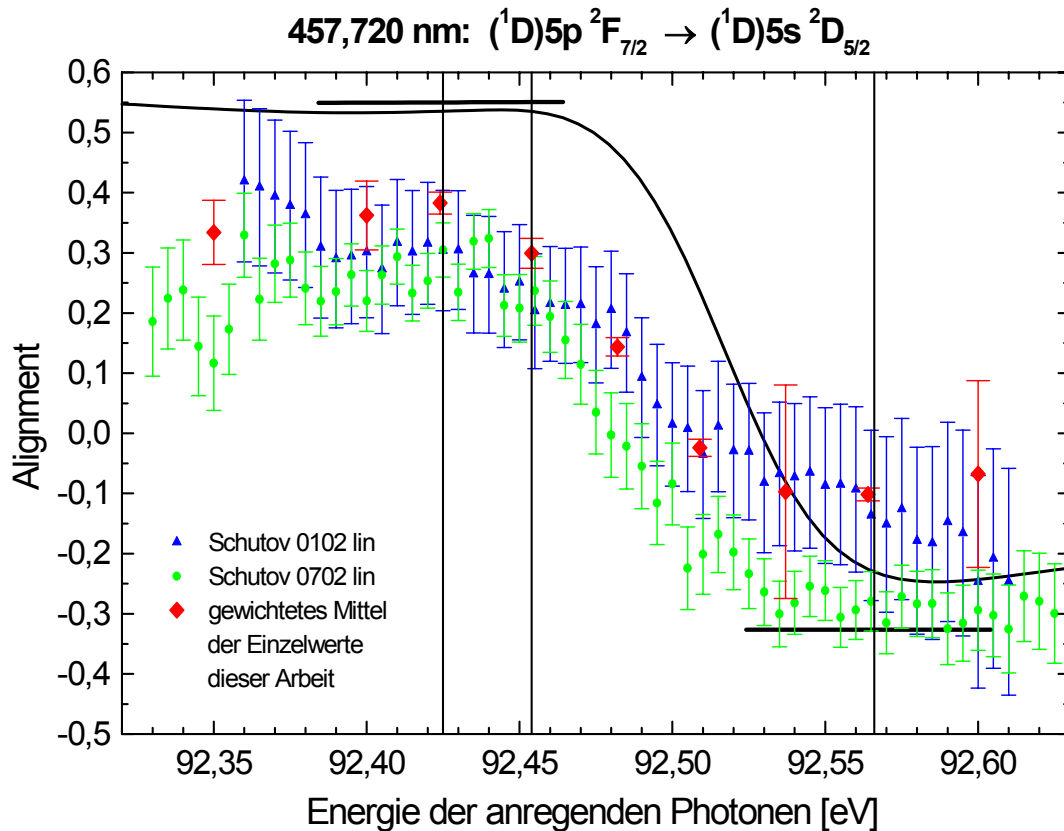


Abbildung 5.11: Alignmentparameter für die Besetzung des Kr II $4p^4\ (^1D)\ 5p\ ^2F_{7/2}$ - Zustandes durch resonanten Raman-Auger-Effekt im Energiebereich von R2 – R4. Vergleich der gemittelten Ergebnisse dieser Arbeit mit Ergebnissen von Schutov in verschiedenen Strahlzeiten bei BESSY II mit linear polarisierter Anregung [Lag03b]. Die Berechnungen mit durchgezogener Linie beziehen sich auf das Modell interferierender Resonanzen. Die Einzelwerte im Zweistufen-Modell sind auf R2 und R4 durch Querbalken dargestellt. Die Angaben in den Legenden beziehen sich auf unterschiedliche Strahlzeiten bei BESSY II (z.B. 0702: Juli 2002).

Die experimentellen Ergebnisse des Orientierungsparameters O_{10} sind im Bereich von R1 und R2 im Betrag kleiner als die theoretischen Berechnungen, während sie auf R4 gut mit diesen übereinstimmen. Oberhalb R4 tendieren der Orientierungsparameter eher zum Energieverlauf des Zweistufen-Modells (Abbildung 5.9 und 5.10).

Wie bei der Untersuchung der 408,833 nm-Linie in Kapitel 5.2 ist auch bei der 457,720 nm-Linie der Korrekturfaktor *Korr.* für Kaskaden und Depolarisation um R4 zu beachten. Er liegt dort ebenfalls im Bereich von 40 - 55 % (Abbildung 5.8). Die Nichtbeachtung der Polarisation von Kaskaden in der Korrektur (Kapitel 4.9) und in der Fehlerbetrachtung (Kapitel 6.2.9) kann auch bei der 457,720 nm-Linie zu einer noch größeren Unsicherheit der Ergebnisse führen. Daher ist auch für diesen Fluoreszenzübergang die Polarisation von Kaskaden in zukünftigen Messungen experimentell zu untersuchen.

Auffällig ist der Abfall der Werte für Alignment- und Orientierungsparameter zwischen R2 und R4, der bei kleineren Energien stattfindet als von den theoretischen Modellen vorhergesagt. In diesem Zusammenhang ist eine Berücksichtigung von R3 in den theoretischen Berechnungen zu diskutieren.

Auch für den Kr II $4p^4 (^1D) 5p^2 F_{7/2}$ -Ausgangszustand der 457,720 nm-Linie ist die direkte Anregung schwach. Messungen im Zwischenbereich von R1 und R2 und über R4 werden in Kapitel 5.4 diskutiert.

Die Ergebnisse der Elektronen-Partialwellenanalyse, die aus den gewichteten Mittelwerten der einzelnen Meßpunkte des Alignment- und Orientierungsparameters berechnet wurden, geben die vom Modell der interferierenden Resonanzen vorhergesagten Anteile der beteiligten $d_{5/2}$, $g_{7/2}$ und $g_{9/2}$ Partialwellen gut wieder. Die Dominanz der $g_{9/2}$ -Elektronen-Partialwelle im Bereich von R1 und R4 und der $g_{7/2}$ -Elektronen-Partialwelle im Bereich von R2 wird von den Experimenten bestätigt. Im Bereich von R2 ist im Vergleich zur Theorie ein leichter Austausch von $g_{7/2}$ - und $g_{9/2}$ -Anteilen zu erkennen, während der $d_{5/2}$ -Anteil mit der Theorie übereinstimmt.

5.4 Messungen abseits von Resonanzen

Für den Fluoreszenzübergang Kr II $4p^4 (^1D) 5p ^2F_{7/2} \rightarrow 4p^4 (^1D) 5s ^2D_{5/2}$ bei 457,720 nm wurden Messungen mit zirkular polarisierter Anregung bei einer Anregungsenergie von 91,7 eV, 92 eV und 92,564 eV vorgenommen (Abbildungen 5.9 und 5.10). Die normierten Amplitudenmodulationen dieser Messungen sind in Abbildung 5.12 dargestellt.

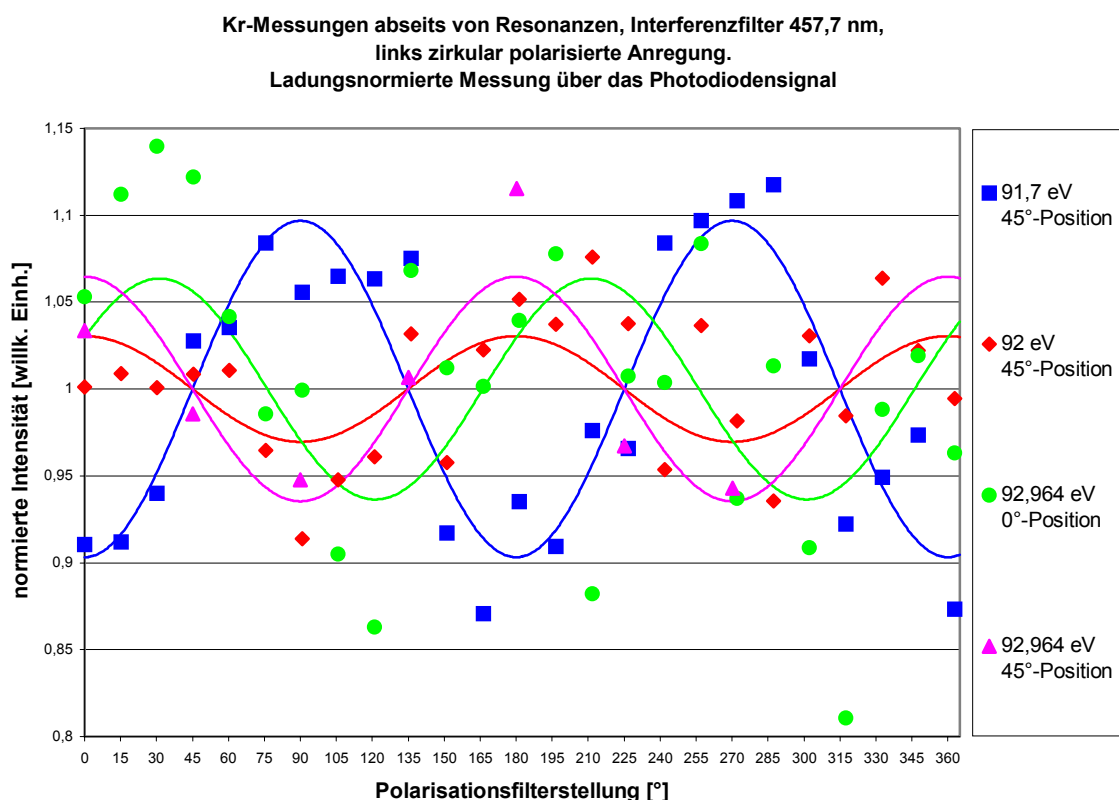


Abbildung 5.12: Normierte Amplitudenmodulation der 457,720 nm-Linie mit links zirkular polarisierter Anregung abseits von Resonanzen mit angegebener Winkel-Position des $\lambda/4$ -Plättchens im polarisationsempfindlichen Detektorzweig. Die Amplitudenmodulationen sind in 15° bzw. 45° -Schritten gemessen. Die eingezeichneten Kurven stellen die zugehörigen gefitteten Sinus-Funktionen dar.

Messungen in diesen Energiebereichen sind aufgrund der sehr schwachen direkten Anregung schwierig (Kapitel 2.1.2). Dennoch ist in den Amplitudenmodulationen eine sinusförmige Oszillation deutlich abzulesen. Der Untergrund der gemessenen Intensitäten

lag im Mittel etwa bei 20 %. Die beiden Messungen bei 92,964 eV lieferten nahezu identische Orientierungsparameter, so dass das gewichtete Mittel einen kleinen Fehler hat. Der Alignmentparameter bei 92,964 eV resultiert dagegen nur aus einer Messung mit $\lambda/4$ -Plättchen in 0° -Position und zirkularer Anregung. Sie hat daher den großen Fehler der Einzelmessung.

Um eine bessere Aussage in diesen Zwischenbereichen der Resonanzen treffen zu können, wären weitere Messungen nötig, die eine lange Meßzeit für eine ausreichend gute Statistik benötigen.

5.5 Beiträge der direkten Anregung

Wie in Kapitel 2.1.2 beschrieben, bot der für die Messungen verwendete experimentelle Aufbau die Möglichkeit, die Beteiligung der direkten Anregung beim resonanten Raman-Auger-Effekt der Kr II $4p^4 (^1D) 5p^2 D_{5/2}$ - und $4p^4 (^1D) 5p^2 F_{7/2}$ -Zustände zu untersuchen, die in den Berechnungen von Lagutin et al. als vernachlässigbar eingestuft wurden ([Lag03a], [Lag03b]).

Messungen mit dem ortsauflösenden Detektorsystem am Sekundärmonochromator 2 (siehe Kapitel 3.2) auf R1 und abseits von Krypton-Resonanzen bei 100 eV Anregungsenergie in den Wellenlängenbereichen, in denen die untersuchten Fluoreszenzlinien liegen, zeigen im direkten Vergleich die unterschiedliche Beteiligung der direkten Anregung für verschiedene Ausgangszustände im Fluoreszenzzerfall (Abbildungen 5.13 und 5.14). Der Wirkungsquerschnitt für die direkte Anregung ist im Bereich von 100 eV sehr schwach energieabhängig, so dass diese Messungen auch eine Aussagekraft für die direkte Besetzung der Ausgangszustände im Zwischenbereich der vier untersuchten Resonanzen haben.

Dabei ergibt sich für die untersuchten 2D - und 2F -Zustände, deren fluoreszenter Zerfall bei 408,833 nm bzw. bei 457,720 nm untersucht wurde, dass ein Einfluss der direkten Anregung vernachlässigbar klein ist.

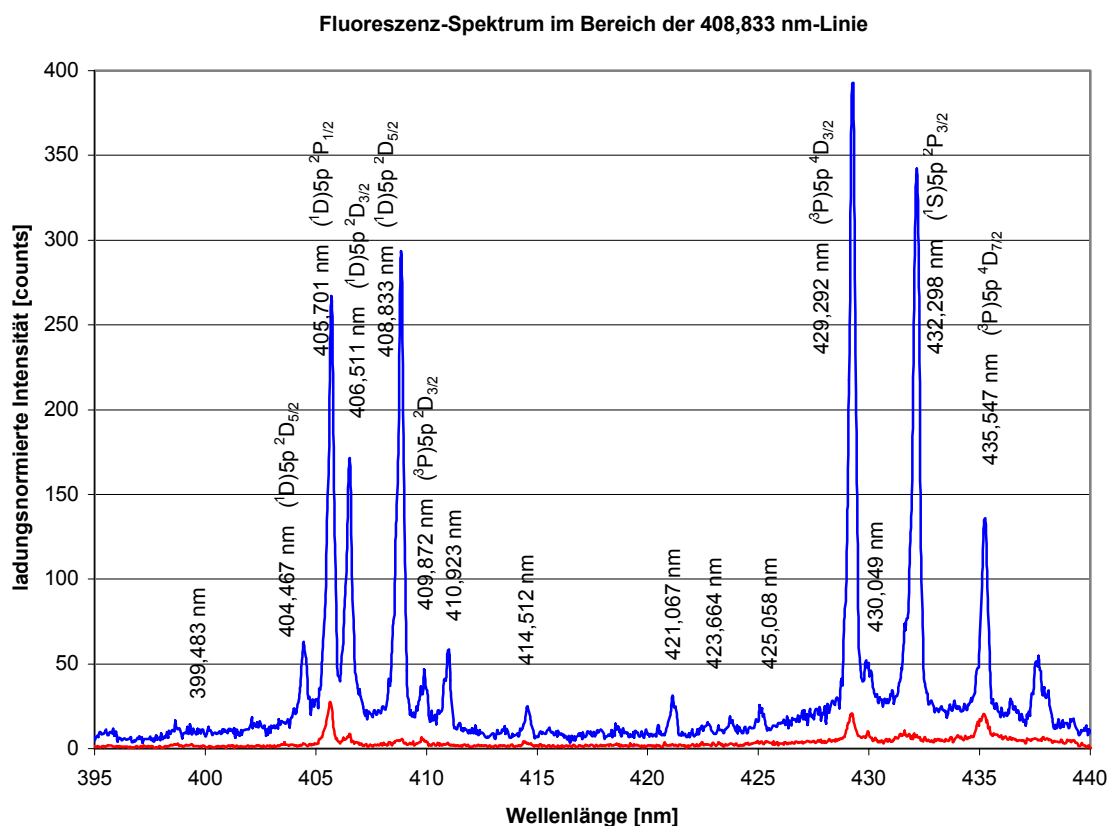


Abbildung 5.13: Mit linearer Anregung gemessenes Fluoreszenz-Spektrum um 415 nm auf R1 (blau) und bei 100 eV (rot) mit zugeordneten Wellenlängen und ausgewählten Ausgangszuständen des Fluoreszenzzerfalls.

Im Gegensatz dazu werden 2P -Zustände relativ stark durch direkte Anregung besetzt. Dies lässt sich in Abbildung 5.13 anhand der 405,701 nm-Linie und in Abbildung 5.14 anhand der 447,500 nm-Linie dokumentieren, deren Ausgangszustand im Fluoreszenzzerfall ein 2P -Zustand ist.

Die in Abbildung 5.13 festzustellende relativ starke direkte Anregung des als $Kr\ II\ 3d^{10}\ 4p^4\ (^3P)\ 5p\ ^4D_{3/2}$ bezeichneten Ausgangszustandes des Fluoreszenzzerfalls nach $Kr\ II\ 3d^{10}\ 4p^4\ (^3P)\ 5s\ ^4P_{3/2}$ bei 429,292 nm kann darauf zurückzuführen sein, dass der Ausgangszustand nach Lagutin et al. die in der Bezeichnung verwendete LS-Kombination nur zu 67 % enthält und in den übrigen 33 % eventuell $^2P_{3/2}$ -Komponenten enthalten sind [Lag03a].

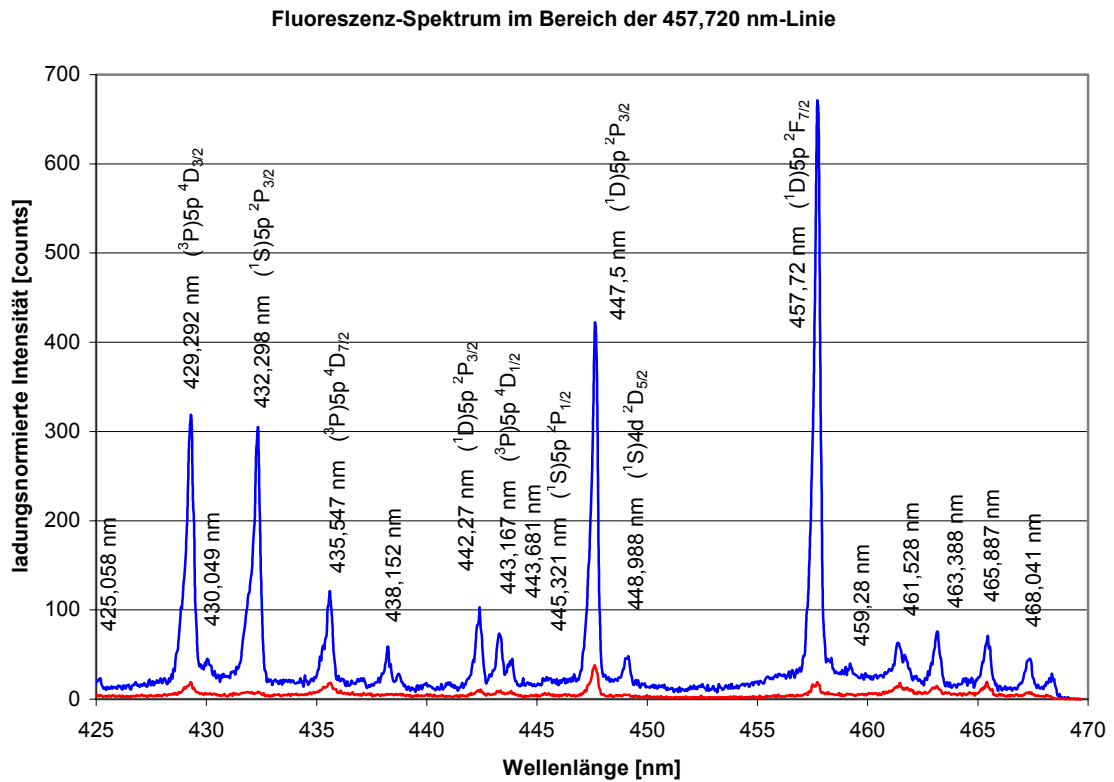


Abbildung 5.14: Mit linearer Anregung gemessenes Fluoreszenz-Spektrum um 445 nm auf R1 (blau) und bei 100 eV (rot) mit zugeordneten Wellenlängen und ausgewählten Ausgangszuständen des Fluoreszenzzerfalls.

6 Fehlerbetrachtung

Die Fehler der Einzelmessungen von Alignment- und Orientierungsparameter setzen sich aus dem systematischen und statistischen Gesamtfehler zusammen, die in den Kapiteln 6.1 und 6.2 behandelt werden. Diese werden entsprechend Gleichung 6.1 bzw. Gleichung 6.2 zum Gesamtfehler quadratisch addiert:

$$\Delta A_{20}(k) = \sqrt{\Delta A_{20}(sta.)^2 + \Delta A_{20}(sys.)^2} \quad (6.1)$$

$$\Delta O_{10}(k) = \sqrt{\Delta O_{10}(sta.)^2 + \Delta O_{10}(sys.)^2} \quad (6.2)$$

Um die Fehler der über das gewichtete Mittel berechneten Alignment- bzw. Orientierungsparameter aus Gleichung 4.4 bzw. 4.5 zu bestimmen, wird der Standardfehler des gewichteten Mittels berechnet:

$$\Delta A_{20}(gew.) = \sqrt{\frac{\sum_k 1/[\Delta A_{20}(k)]^2 \cdot [A_{20}(k) - A_{20}(gew.)]^2}{(n-1) \cdot \sum_k 1/[\Delta A_{20}(k)]^2}} \quad (6.3)$$

bzw.

$$\Delta O_{10}(gew.) = \sqrt{\frac{\sum_k 1/[\Delta O_{10}(k)]^2 \cdot [O_{10}(k) - O_{10}(gew.)]^2}{(n-1) \cdot \sum_k 1/[\Delta O_{10}(k)]^2}} \quad (6.4)$$

Dabei ist n die Anzahl der Messungen, die zur Berechnung von $A_{20}(gew.)$ bzw. $O_{10}(gew.)$ verwendet wurden.

6.1 Statistische Fehlerbetrachtung

Die Grundlage für die statistische Fehlerbetrachtung bilden die vom verwendeten Fit-Programm angegebenen Absolutfehler der in Kapitel 4.5 eingeführten Parameter des Sinus-Fits aus Gleichung 4.3: Mittelwert (I_{MW}), Amplitude (A) und Winkelshift (W). Das Programm berechnet die Fehler entsprechend der Güte des Fits, die durch die Varianz des Einzelwertes (χ^2) bestimmt wird:

$$\chi^2 = \frac{\sum_i (y_i^m - y_i^s)^2}{\text{Anzahl der Datenpunkte} - \text{Anzahl der freien Parameter}}, \quad (6.5)$$

wobei die Meßwerte (m) und Sinus-Fitwerte (s) mit Indizes gekennzeichnet sind. Die Fehler ΔI_{MW} , ΔA und ΔW , die vom Programm für die Fitparameter angegeben werden, sind Berechnungen für die Standardabweichung. Dabei geht die absolute Größe des Meßsignals, d.h. der rein statistische Fehler $\frac{\sqrt{N}}{N}$, nicht in die Fehlerbehandlung ein.

Die Fehlerbetrachtung für die sinusförmige Fit-Funktion aus Gleichung 4.3 liefert damit:

$$\begin{aligned} \Delta I &= \left| \frac{\partial I}{\partial I_{MW}} \cdot \Delta I_{MW} \right| + \left| \frac{\partial I}{\partial A} \cdot \Delta A \right| + \left| \frac{\partial I}{\partial W} \cdot \Delta W \right| \\ &= |\Delta I_{MW}| + |\Delta A \cdot \sin(2(x+W))| + |\Delta W \cdot 2A \cdot \cos(2(x+W))| \end{aligned} \quad (6.6)$$

Dabei wird der Fehler der Winkelshift ΔW vom Fit-Programm in Grad angegeben, geht aber in Gleichung 6.6 im Bogenmaß ein, da ΔI einheitslos ist.

Für die Fehlerbetrachtung der Gleichungen 2.11 und 2.20 ist der Fehler für einen Quotienten $\pi = \frac{I_1 - I_2}{I_1 + I_2}$ zu bestimmen. Für die gefittete Sinus-Funktion aus Gleichung 4.3

gilt $\Delta I_1 = \Delta I_2$, wenn die Intensitäten I_1 und I_2 an Positionen der Oszillation abgelesen werden, die 90° auseinanderliegen, da der Absolutbetrag der Steigung in der Funktion für diese Punkte gleich ist. Dies trifft für die im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Intensitäten bei 0° und 90° in Gleichung 2.11 sowie für die Intensitäten bei 45° und 135° in Gleichung 2.20 immer zu und es gilt:

$$\frac{\Delta \pi}{|\pi|} = \frac{2\Delta I_1}{|I_1 - I_2|} + \frac{2\Delta I_1}{|I_1 + I_2|} \quad (6.7)$$

6.1.1 Statistischer Fehler des Alignmentparameters bei linearer horizontal polarisierter Anregung

Mit Gleichung 6.7 ergibt sich der Fehler für linear horizontal polarisierte Anregung für den linearen Polarisationsgrad π_{lin} aus Gleichung 2.11 zu:

$$\Delta\pi_{lin} = \left(\frac{2\Delta I_{\parallel}}{|I_{\parallel} - I_{\perp}|} + \frac{2\Delta I_{\parallel}}{|I_{\parallel} + I_{\perp}|} \right) \cdot |\pi_{lin}| \quad (6.8)$$

Damit lässt sich der Fehler für den Winkelasymmetrieparameter der Fluoreszenzstrahlung $\beta_2(fl)$ aus Gleichung 2.15 berechnen:

$$\Delta\beta_2(fl) = \left| \frac{\partial\beta_2(fl)}{\partial\pi_{lin}} \cdot \Delta\pi_{lin} \right| = \left| \frac{-6\cos^2\theta}{(3\cos^2\Theta(1-\pi_{lin}) + 2\pi_{lin})^2} \cdot \Delta\pi_{lin} \right| \quad (6.9)$$

Und für den Alignmentparameter A_{20} in Gleichung 2.16 ergibt sich:

$$\Delta A_{20} = |A_{20}| \cdot \left| \frac{\Delta\beta_2(fl)}{\beta_2(fl)} \right| \quad (6.10)$$

6.1.2 Statistischer Fehler des Alignmentparameters bei zirkular polarisierter Anregung

Für zirkular polarisierte Anregung ergibt sich der Fehler für den linearen Polarisationsgrad π_{lin} wie in Gleichung 6.8. Der Fehler des Winkelasymmetrieparameters $\beta_2(fl)$ aus Gleichung 2.18 ergibt sich zu:

$$\Delta\beta_2(fl) = \left| \frac{\partial\beta_2(fl)}{\partial\pi_{lin}} \cdot \Delta\pi_{lin} \right| = \left| \frac{12\sin^2\theta}{(3\sin^2\Theta(1-\pi_{lin}) + 2\pi_{lin})^2} \cdot \Delta\pi_{lin} \right| \quad (6.11)$$

Der Fehler des Alignmentparameters A_{20} bei zirkularer Anregung berechnet sich analog zu Gleichung 6.10.

6.1.3 Statistischer Fehler des Orientierungsparameters bei zirkular polarisierter Anregung

Der Fehler für den zirkularen Polarisationsgrad π_{circ} mit zirkular polarisierter Anregung aus Gleichung 2.20 lässt sich mit Gleichung 6.7 berechnen:

$$\Delta\pi_{circ} = \left(\frac{2\Delta I_L}{|I_L - I_R|} + \frac{2\Delta I_L}{|I_L + I_R|} \right) \cdot |\pi_{circ}| \quad (6.12)$$

Damit lässt sich der Fehler für den Orientierungsparameter O_{10} aus Gleichung 2.22 berechnen:

$$\Delta O_{10} = \left| \frac{\partial O_{10}}{\partial \pi_{circ}} \cdot \Delta\pi_{circ} \right| = \left| \frac{1}{\alpha_1 \cdot \cos \theta} \cdot \Delta\pi_{circ} \right| \quad (6.13)$$

6.2 Systematische Fehlerbetrachtung

In diesem Kapitel werden mögliche systematische Fehlerquellen innerhalb der Meßapparatur, insbesondere im polarisationsempfindlichen Detektorzweig und im Auswerteverfahren, diskutiert. Die in den systematischen Gesamtfehler eingehenden Beiträge werden quadratisch addiert.

6.2.1 Polarisation des anregenden Synchrotronstrahles

BESSY II stellt an den UE56-Undulator Beamlines ab einer Energie von etwa 90 eV einen zirkularen Polarisationsgrad der Synchrotronstrahlung von sehr nahe 1 zur Verfügung. Ein direkter Test, um diese Angaben zu überprüfen, stand nicht zur Verfügung. Ein Anhaltspunkt, dass der zirkulare Polarisationsgrad sehr nahe bei 1 liegt, liefert die Messung des Orientierungsparameters des 445,321 nm-Fluoreszenzübergangs auf R2 (Kapitel 5.1). Daher wird ein aus der Polarisation der Synchrotronstrahlung resultierender Fehler nicht weiter verfolgt.

6.2.2 Paralleler Strahlengang im polarisationsempfindlichen Detektorzweig

Der Güte des teleskopischen Strahlenganges im polarisationsempfindlichen Detektorzweig hängt von der Justage des Abstands der ersten Linse zum Synchrotronstrahl in der Gastargetzelle ab. Diese Linse mit einer Brennweite von $f = 15$ cm wurde mit einer Ungenauigkeit von etwa 5 mm eingebaut. Dadurch sind Abweichungen vom parallelen Strahlengang durch $\lambda/4$ -Plättchen, Polarisationsfilter und Interferenzfilter zu erwarten.

Durch die Berücksichtigung dieser Ungenauigkeit ergibt sich eine Abweichung vom parallelen Strahlengang im polarisationsempfindlichen Detektorzweig von etwa 1° .

Die im Experiment beobachtete Fluoreszenz entsteht nur im Bereich des Synchrotronstrahles. Dies wird dadurch belegt, dass die Sekundärmonochromatoren ohne Eintrittsspalt direkt auf die leuchtende Säule fokussiert werden können. Aufgrund der Ausmaße des Synchrotronstrahles in vertikaler Richtung von unter 1 mm, ist ein Einfluss auf den systematischen Fehler vernachlässigbar.

In horizontaler Richtung betrug die Weglänge der beobachteten Wechselwirkungszone etwa 11 mm. Daraus folgt eine Abweichung von einigen Grad vom parallelen Strahlengang im polarisationsempfindlichen Detektorzweig.

Um die Auswirkungen der Abweichungen vom parallelen Strahlengang im Experiment auf die Ableitung des Polarisationsgrades zu untersuchen, wurde ein Polarisationsfilter mit horizontaler Durchlassrichtung fest zwischen der Wechselwirkungszone und der Glasscheibe des polarisationsempfindlichen Detektorzweiges positioniert. Daraufhin wurden Messungen der Oszillation mit verschiedenen Interferenzfiltern auf R1 mit linear polarisierter Anregung durchgeführt, da R1 von allen untersuchten Resonanzen die größten Intensitäten im Fluoreszenzsignal liefert. Diese Messungen ergaben, dass der polarisationsempfindliche Detektorzweig die vom Polarisationsfilter in der Gastargetzelle zu 100 % linear polarisierte Strahlung nahezu perfekt analysiert (Abbildung 6.1).

Daher kann der Schluss gezogen werden, dass Abweichungen vom parallelen Strahlengang im Experiment die Analyse des Polarisationsgrades der Fluoreszenzstrahlung nicht nachweisbar beeinflussen und in der systematischen Fehlerrechnung vernachlässigbar sind.

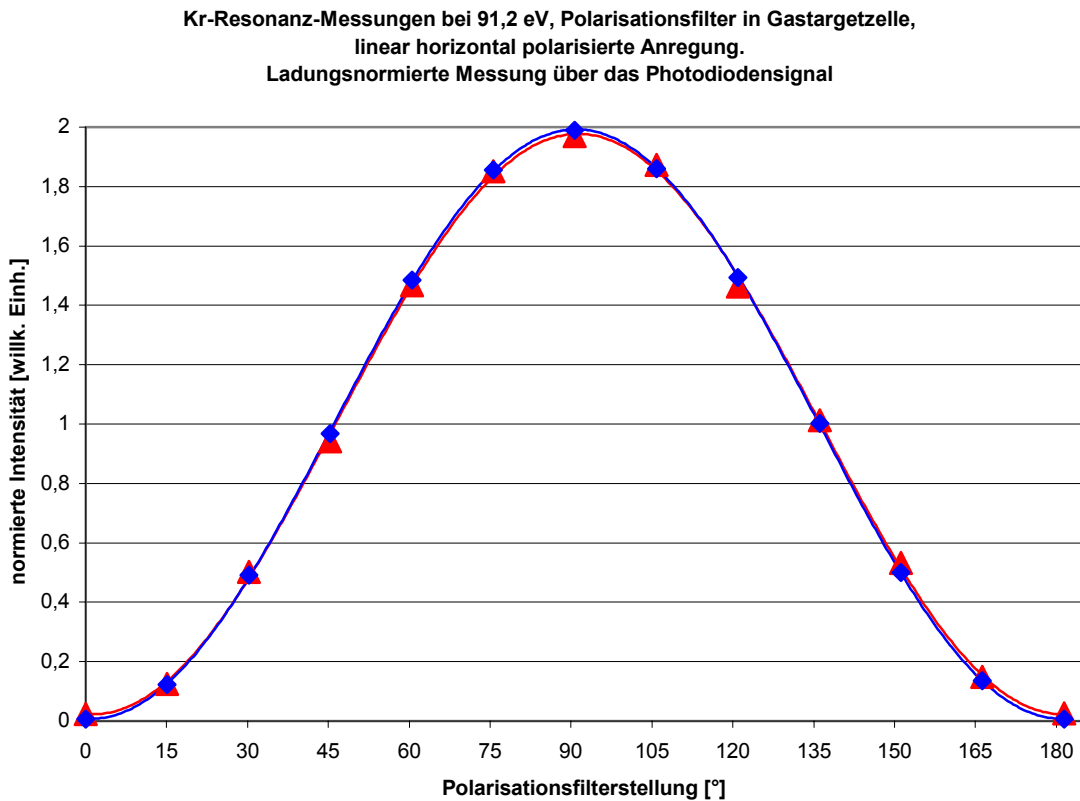


Abbildung 6.1: Oszillationsmessung auf R1 im polarisationsempfindlichen Detektorzweig mit einem Polarisationsfilter mit horizontaler Durchlassrichtung, der in der Gastargetzelle direkt hinter der Wechselwirkungszone eingebaut ist. Interferenzfilter für die 408,833 nm-Linie (rot) und die 457,720 nm-Linie (blau).

6.2.3 Polarisationsfilterstellung

Wie in Kapitel 5.1 angesprochen, ist eine Fehlstellung des Polarisationsfilters von etwa 1° zu berücksichtigen. Im Gegensatz zu den Fehlern der Fitparameter aus Gleichung 6.6, die miteinander korreliert sind, hat eine fehlerhafte Polarisationsfilterstellung keinen Einfluss auf den Mittelwert und die Amplitude der sinusförmigen Oszillation. Daher geht dieser Fehler für Gleichung 4.3 auf die gleiche Weise wie in Gleichung 6.6 ein. Für alle Messungen wird ein $\Delta W = 1^\circ$ (für die Fehlerrechnung im Bogenmaß) angenommen.

$$\Delta I = \left| \frac{\partial I}{\partial W} \cdot \Delta W \right| = \left| \Delta W \cdot 2A \cdot \cos(2(x + W)) \right| \quad (6.14)$$

Der Fehler des Alignment- bzw. Orientierungsparameters ergibt sich, wie in Kapitel 6.1 beschrieben, analog zu den Gleichungen 6.8 - 6.13.

6.2.4 Stellung des $\lambda/4$ -Plättchens

Für die Messungen des Alignment- bzw. Orientierungsparameters mit zirkular polarisierter Anregung war ein $\lambda/4$ -Plättchen im polarisationsempfindlichen Detektorzweig eingebaut. Eine mögliche Fehlstellung der Winkelposition des $\lambda/4$ -Plättchens ist für eine Fehlerbetrachtung nur sehr schwer zu berücksichtigen, da die Winkelposition des $\lambda/4$ -Plättchens zur Bestimmung von Alignment- bzw. Orientierungsparameter in Kapitel 2.3 in keiner Gleichung verwendet wird. Das $\lambda/4$ -Plättchen befindet sich in einem Tubus, der fest mit dem Schrittmotorgehäuse des Polarisationsfilters verschraubt ist. Es kann im Tubus um 45° gedreht werden. Dieses Schrittmotorgehäuse wurde für die Messungen und die Justage mit einer skalierten Wasserwaage ausgerichtet, deren Genauigkeit in Kapitel 6.2.6 angegeben ist.

Die Justage des $\lambda/4$ -Plättchens in diesem Tubus erfolgte im parallelen Strahlengang auf einer waagrecht ausgerichteten optischen Bank zwischen zwei feststehenden Polarisationsfiltern mit einer 1° -Einteilung, deren Durchlassrichtung parallel zueinander stand, unter Verwendung eines Interferenzfilters einer beliebigen Wellenlänge. Das bedeutet, dass die tatsächliche Phasenshift des $\lambda/4$ -Plättchens für die Justage nicht relevant ist. Wird das $\lambda/4$ -Plättchen gedreht, ergeben Simulationsrechnungen eine Oszillation, die in Abbildung 6.2 gezeigt wird. Eine von 90° abweichende Phasenshift des $\lambda/4$ -Plättchens ändert dabei nur die Amplitude der Oszillation, nicht aber deren Phase.

In Abbildung 6.2 in der 0° -Position des $\lambda/4$ -Plättchens ist zu sehen, dass die gesamte Intensität, wenn sie entlang einer Hauptachse eingestrahlt wird, durch das $\lambda/4$ -Plättchen transmittiert, während in der 45° -Position des $\lambda/4$ -Plättchens aus der linear polarisierten Strahlung zirkular polarisierte Strahlung wird, deren Projektion auf eine Hauptachse des $\lambda/4$ -Plättchens (50 % der eingestrahnten Intensität) durchgelassen wird. D.h., dass sich die

Oszillation bei einer Drehung des $\lambda/4$ -Plättchens um 45° zwischen zwei benachbarten Extrema bewegt, worüber sich das $\lambda/4$ -Plättchen im Strahlengang justieren lässt.

Dieses Justageverfahren kann auf eine Genauigkeit von etwa 2° abgeschätzt werden.

Durch Simulationsrechnungen auf Basis der Gleichungen von Berry et al. [Ber77] konnte ein möglicher Fehler bei Messungen mit $\lambda/4$ -Plättchen in der 45° -Position als vernachlässigbar klein eingestuft werden ($\Delta\pi_{\text{circ}} < 0,1\%$).

Bei Messungen in der 0° -Position des $\lambda/4$ -Plättchens sind drei Fälle zu unterscheiden:

1. Unpolarisiertes Licht wird vom $\lambda/4$ -Plättchen nicht beeinflusst, so dass die Ableitung des linearen bzw. zirkularen Polarisationsgrades der Fluoreszenzstrahlung durch ein beliebig eingebautes $\lambda/4$ -Plättchen nicht verfälscht werden kann.
2. Zirkular polarisiertes Licht wird von einem $\lambda/4$ -Plättchen immer in linear polarisiertes Licht umgewandelt (90° Phasenshift vorausgesetzt). Eine von 0° abweichende Winkelposition bedeutet eine Winkelshift in der Analyse durch den Polarisationsfilter vom gleichen Wert. D.h., dass die gemessene Amplitudenmodulation genau um den Winkel verschoben ist, den das $\lambda/4$ -Plättchen von der 0° -Position abweicht.
3. Linear polarisiertes Licht wird in der 0° -Position des $\lambda/4$ -Plättchens mit 90° Phasenshift in zirkulares umgewandelt. Simulationsrechnungen ergaben, dass bei 2° Abweichung in der Winkelposition die Phase der gemessenen Oszillation ebenfalls um ungefähr 2° geshiftet wird, während die Intensität nahezu unverändert bleibt.

Für die systematische Fehlerbetrachtung ist also ein Fehler von 2° in der Winkelposition des $\lambda/4$ -Plättchens in sehr guter Näherung gleichwertig mit einem Fehler von 2° in der Winkelposition des Polarisationsfilters und kann durch diesen rechnerisch ersetzt werden.

Der systematische Fehler für Messungen mit $\lambda/4$ -Plättchen in der 0° -Position wird analog zu Gleichung 6.14 in Kapitel 6.2.3 mit $\Delta W = 2^\circ$ (für die Berechnung im Bogenmaß) in der Fehlerbetrachtung berücksichtigt.

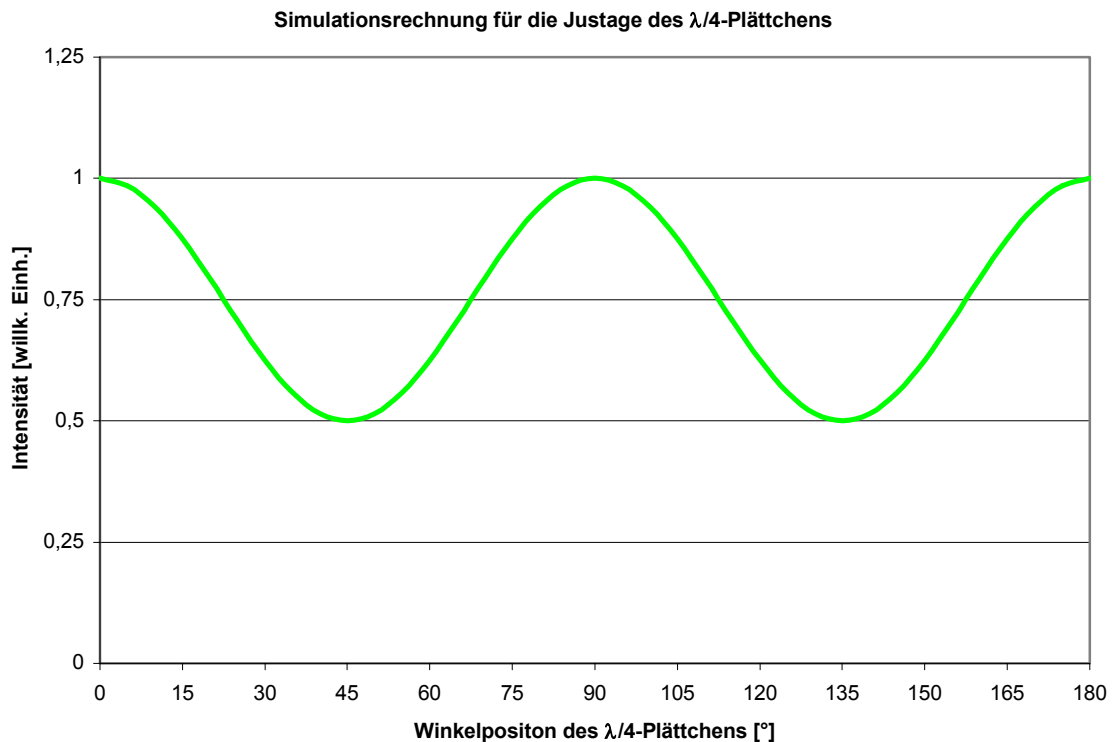


Abbildung 6.2: Simulationsrechnung für ein sich drehendes $\lambda/4$ -Plättchen (Phasenshift 90°) zwischen zwei Polarisationsfiltern, deren Durchlassrichtungen parallel zueinander stehen, im parallelen Strahlengang. Die Intensität der linear polarisierten Strahlung hinter dem ersten Polarisationsfilter beträgt 1.

6.2.5 Beobachtungswinkel θ

Der polarisationsempfindliche Detektorzweig erfasst einen gewissen Raumwinkel in dem die Intensität der Fluoreszenzstrahlung gemessen wurde. Der mittlere eingestellte Beobachtungswinkel θ betrug 54° . Die Gleichungen zur Berechnung des Alignment- bzw. Orientierungsparameters in Kapitel 2.3 enthalten Kombinationen der Funktionen $\cos^2\theta$, $\sin^2\theta$ und $\cos\theta$. Diese Funktionen haben um $\theta = 54^\circ$ eine große Steigung, so dass sich Beiträge aus kleineren Beobachtungswinkeln als $\theta = 54^\circ$ mit Beiträgen aus größeren

Beobachtungswinkeln als $\theta = 54^\circ$ ungefähr kompensieren. D.h., dass nur die Unsicherheit der mittleren Einstellung des Beobachtungswinkels θ in der systematischen Fehlerbetrachtung berücksichtigt werden muss.

Die Einstellung des mittleren Beobachtungswinkels θ zwischen dem polarisationsempfindlichem Detektorzweig und der Ausbreitungsrichtung des Synchrotronstrahles erfolgte auf etwa 2° genau. Damit lassen sich der Fehler für den Winkelasymmetrieparameter der Fluoreszenzstrahlung $\beta_2(fl)$ mit $\Delta\theta = 2^\circ$ (für die Fehlerrechnung im Bogenmaß) aus Gleichung 2.15 für linear horizontal polarisierte Anregung

$$\Delta\beta_2(fl) = \left| \frac{\partial\beta_2(fl)}{\partial\theta} \cdot \Delta\theta \right| = \left| \frac{-12\pi_{lin} \sin\theta \cos\theta(1 - \pi_{lin})}{(3\cos^2\Theta(1 - \pi_{lin}) + 2\pi_{lin})^2} \cdot \Delta\theta \right| \quad (6.15)$$

und aus Gleichung 2.18 für zirkular polarisierte Anregung berechnen.

$$\Delta\beta_2(fl) = \left| \frac{\partial\beta_2(fl)}{\partial\theta} \cdot \Delta\theta \right| = \left| \frac{-24\pi_{lin} \sin\theta \cos\theta(1 - \pi_{lin})}{(3\sin^2\Theta(1 - \pi_{lin}) + 2\pi_{lin})^2} \cdot \Delta\theta \right| \quad (6.16)$$

Der Fehler des Alignmentparameters ergibt sich analog Gleichung 6.10.

Für zirkular polarisierte Anregung ergibt sich der Fehler des Orientierungsparameters in Gleichung 2.22 direkt zu:

$$\Delta O_{10} = \left| \frac{\partial O_{10}}{\partial\theta} \cdot \Delta\theta \right| = \left| \frac{\pi_{circ} \cdot \alpha_1 \cdot \sin\theta}{(\alpha_1 \cdot \cos\theta)^2} \cdot \Delta\theta \right| \quad (6.17)$$

6.2.6 Winkel ϕ des polarisationsempfindlichen Detektorzweiges zur Speicherringebene

Die Speicherringebene von BESSY II wird ebenso wie die Lage des Synchrotronstrahles als ideal ausgerichtet angenommen. Der Beobachtungswinkel zwischen dem polarisationsempfindlichen Detektorzweig und der Speicherringebene, der $\Phi = 0^\circ$ gesetzt wurde, wurde mit einer skalierten Wasserwaage eingestellt, die pro Teilstrich eine Abweichung von 0,3 mm / 1 m angibt. Die Einstellung erfolgte auf einen Teilstrich genau. Dies entspricht einem Winkelfehler von $\Delta\Phi = \sim 0,02^\circ$. Der Einfluss dieses Fehlers in

Gleichung 2.11 bzw. 2.12 ist vernachlässigbar und geht nicht in die Berechnung der systematischen Fehler ein.

6.2.7 Dunkelzählraten des polarisationsempfindlichen Detektorzweiges

Die Messung und Korrektur der Dunkelzählrate wird mit einem Fehler von etwa 10 % angenommen. Exemplarisch wurde der Fall einer sinusförmigen Oszillation mit geringer Zählrate (408,833 nm-Linie auf R4) und vergleichsweise hoher Dunkelzählrate von etwa 2,2 counts/s untersucht. Es ergibt sich eine relative Änderung des Alignmentparameters um 0,5 %. Im Vergleich dazu ergibt die Untersuchung der 457,720 nm-Linie auf R1 mit höherer Zählrate und geringer Dunkelzählrate von etwa 0,9 counts/s eine relative Änderung des Alignmentparameters um 0,04 %. Daher ist der Fehler der Korrektur der Dunkelzählrate für alle gemessenen Oszillationen vernachlässigbar klein und geht nicht in die Berechnung der systematischen Fehler ein.

6.2.8 Transmissionsverhalten der verwendeten Interferenzfilter

Die Fehler der Korrektur für das Transmissionsverhalten der Interferenzfilter ist für die beiden Interferenzfilter der 408,833 nm-Linie und der 457,720 nm-Linie getrennt zu betrachten.

Mögliche Fehler resultieren aus der Messung der Intensitäten von Haupt- und Nachbarlinien ohne Polarisationsanalyse und einem vernachlässigten Polarisationsgrad der Nachbarlinien. Ein Fehler in Bezug auf Wellenlänge und Transmission in den Transmissionskurven der Interferenzfilter, die in den Abbildungen 4.4, 4.5 und 4.6 zu sehen sind, ist vernachlässigbar klein.

Wie in Abbildung 6.3 für den Interferenzfilter der 408,833 nm-Linie zu sehen, resultiert im Bereich von R4 etwa $1/70$ der transmittierten Intensität von benachbarten Linien. Den weitaus größten Beitrag dieser benachbarten Linien liefert die 409,870 nm-Linie. Im Bereich der anderen untersuchten Resonanzen ist dieser Anteil noch geringer. Durch einen Fehler in der Intensität I_{Linie} , der mit etwa 10 % abzuschätzen ist, und einem Einfluss durch

die Polarisation von weniger als 1/70 der gemessenen Intensität für alle betrachteten Energien, entsteht ein Fehler für die Korrektur, der für die Ergebnisse irrelevant ist.

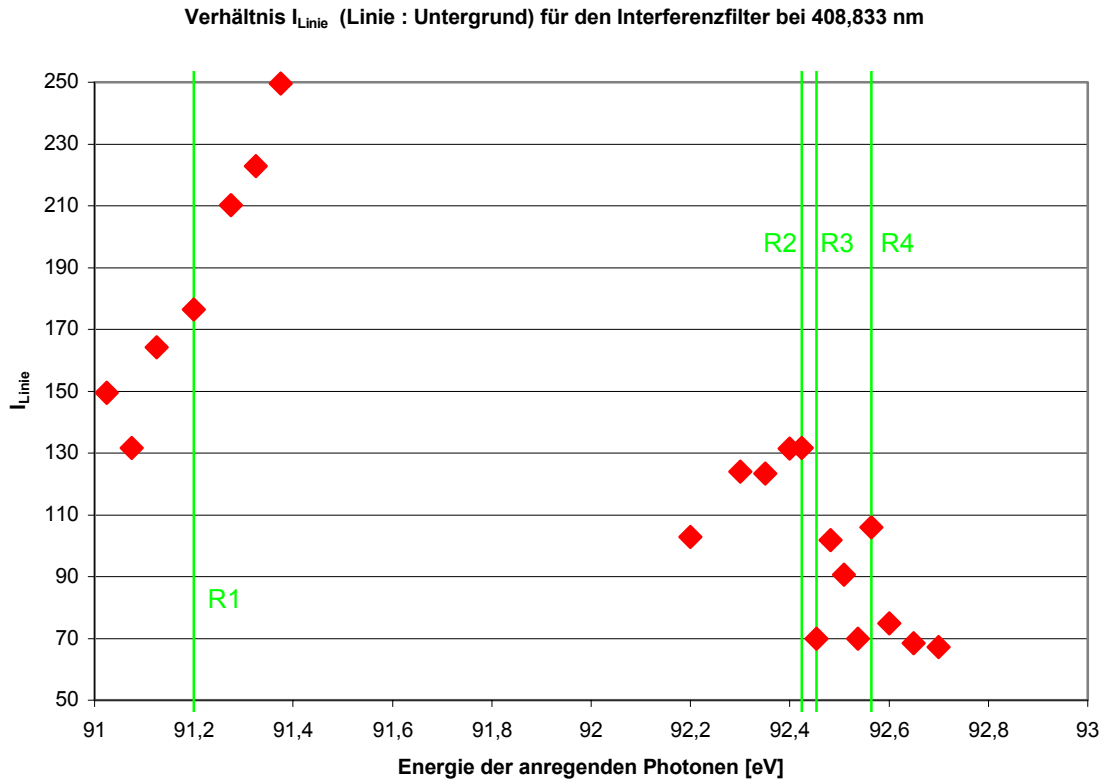


Abbildung 6.3: Verhältnis I_{Linie} (Linie : Untergrund) zur Korrektur von benachbarten Linien in Gleichung 4.2, die neben der 408,833 nm-Hauptlinie durch den Interferenzfilter transmittieren.

Im Falle des Interferenzfilters für die 457,720 nm-Linie tragen hauptsächlich die benachbarten Fluoreszenzlinien bei 459,28 nm und 461,528 nm zu etwa gleichen Anteilen zur Korrektur bei. Wie in Abbildung 6.4 zu sehen, beträgt im Bereich von R1 der Anteil der benachbarten Linien weniger als 1/10 der Gesamtintensität. In diesem Bereich ist der Fehler der Korrektur noch vernachlässigbar klein. Im Bereich von R2 – R4 beträgt dieser Anteil etwa 1/4 der Gesamtintensität. Der Fehler in der Intensität I_{Linie} ist wie beim Interferenzfilter der 408,833 nm-Linie mit etwa 10 % abzuschätzen, so dass sich daraus für die korrigierten Werte ein Fehler von etwa 2,5 % ergibt. Um den Fehler durch die

vernachlässigte Polarisation der Nachbarlinien in der Korrektur grob abschätzen zu können, wurden Messungen mit zirkular polarisierter Anregung mit dem Sekundärmonochromator 2 in 45°-Position im Bereich der 457,720 nm-Linie auf R3 ausgewertet. Sie zeigt für die Fluoreszenzlinie bei 459,280 nm einen linearen Polarisationsgrad von $\pi_{\text{lin}} = \sim 20\%$ und einen zirkularen Polarisationsgrad von $\pi_{\text{circ}} = \sim 5\%$. Für die Fluoreszenzlinie bei 461,528 nm ergibt sich ein linearer Polarisationsgrad von $\pi_{\text{lin}} = \sim 5\%$ und ein zirkularer Polarisationsgrad von $\pi_{\text{circ}} = \sim 5\%$. Damit ergibt sich durch die Polarisation der Nachbarlinien ein Fehler in der Korrektur von etwa 3% für die Berechnung des Alignment- und von etwa 1% für die Berechnung des Orientierungsparameters.

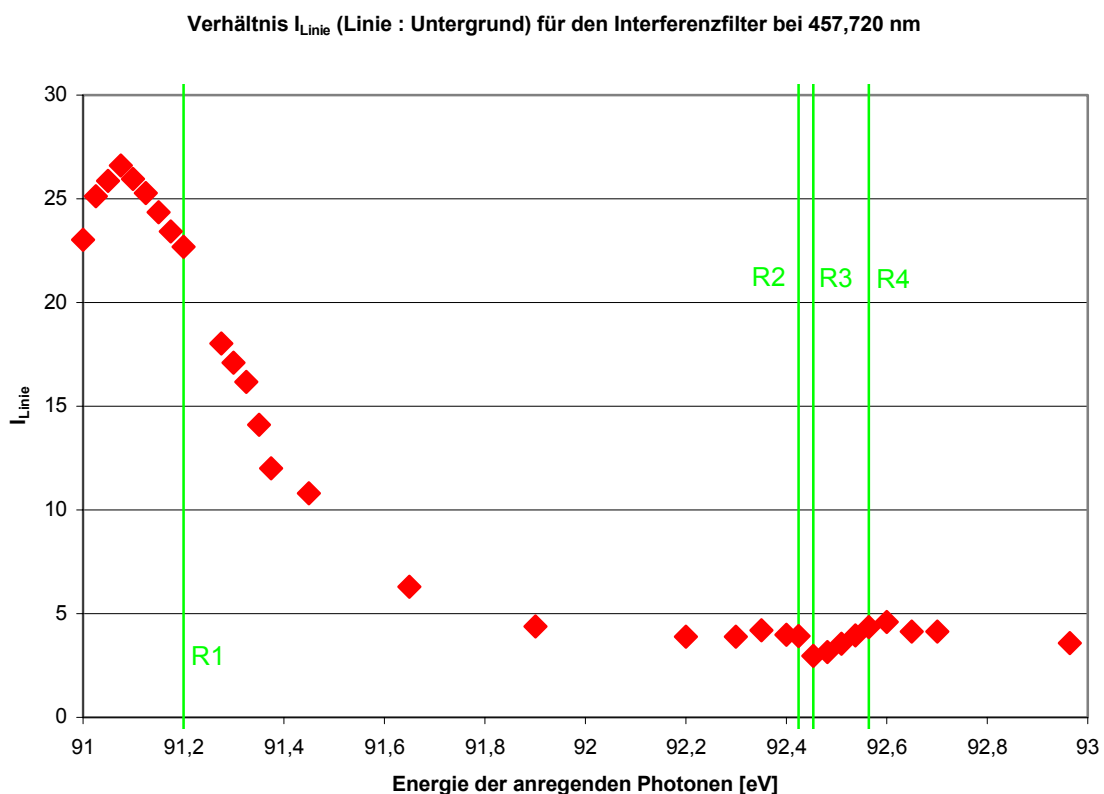


Abbildung 6.4: Verhältnis I_{Linie} (Linie : Untergrund) zur Korrektur von benachbarten Linien in Gleichung 4.2, die neben der 457,720 nm-Hauptlinie durch den Interferenzfilter transmittieren.

Daher ergibt sich für die exemplarische Abschätzung insgesamt ein relativer Fehler für die Korrektur bei Berechnung des Alignmentparameters von etwa 6 % und von etwa 4 % bei Berechnung des Orientierungsparameters. Der Fehler fließt nicht in die Berechnung des systematischen Gesamtfehlers ein.

Der Einfluss der Polarisierung benachbarter Fluoreszenzlinien bedarf bei Messungen mit dem Interferenzfilter für die 457,720 nm-Linie einer weiteren, genaueren Untersuchung für den gesamten Energiebereich von R2 – R4. Für zukünftige Messungen sollte ein Interferenzfilter mit kleinerer Halbwertsbreite verwendet werden.

6.2.9 Kaskadenkorrektur

Der Fehler für den Faktor der Kaskadenkorrektur $Korr.$ aus Gleichung 4.9 ist in erster Linie durch den Fehler der relativen Quanteneffizienz des verwendeten ortsauflösenden Detektorsystems bestimmt, die in Abbildung 4.12 zu sehen ist. Er kann über einen Fehler in der Intensitätsmessung von I_{Linie} und $I_{Kasc.}$ und einen Fehler in der Bestimmung der relativen Quanteneffizienz QE auf etwa 20 % abgeschätzt werden. Dabei ist jedoch ein Fehler, der durch die in der Rechnung vernachlässigte Polarisierung der Kaskadenlinien entsteht, noch nicht berücksichtigt.

Wie in den Abbildungen 5.3 und 5.8 zu sehen, ist im Bereich von R4 der Korrekturfaktor $Korr.$ maximal und beträgt für beide untersuchten Fluoreszenzlinien etwa 52 %. Davon resultieren etwa 45 % aus Kaskadenlinien, während die übrigen 7 % aus der Depolarisation für Alignment bzw. Orientierung stammen. Man kann daher schließen, dass besonders in diesem Energiebereich die Vernachlässigung von polarisierten Kaskadenlinien einen gravierenden Einfluss auf den systematischen Fehler haben kann.

Messungen mit dem Sekundärmonochromator 2 in 45°-Position mit linear horizontal polarisierter Anregung im Bereich der 457,720 nm-Linie auf R2 ergaben für die Hauptkaskade der 457,720 nm-Linie bei 448,988 nm einen Polarisationsgrad von etwa 2 %. Um eine Korrektur vornehmen zu können, die die Polarisierung aller Kaskaden berücksichtigt, oder um den Fehler der Korrektur in dieser Arbeit besser abschätzen zu

können, sind weitere Untersuchung im gesamten Energiebereich der Messungen notwendig.

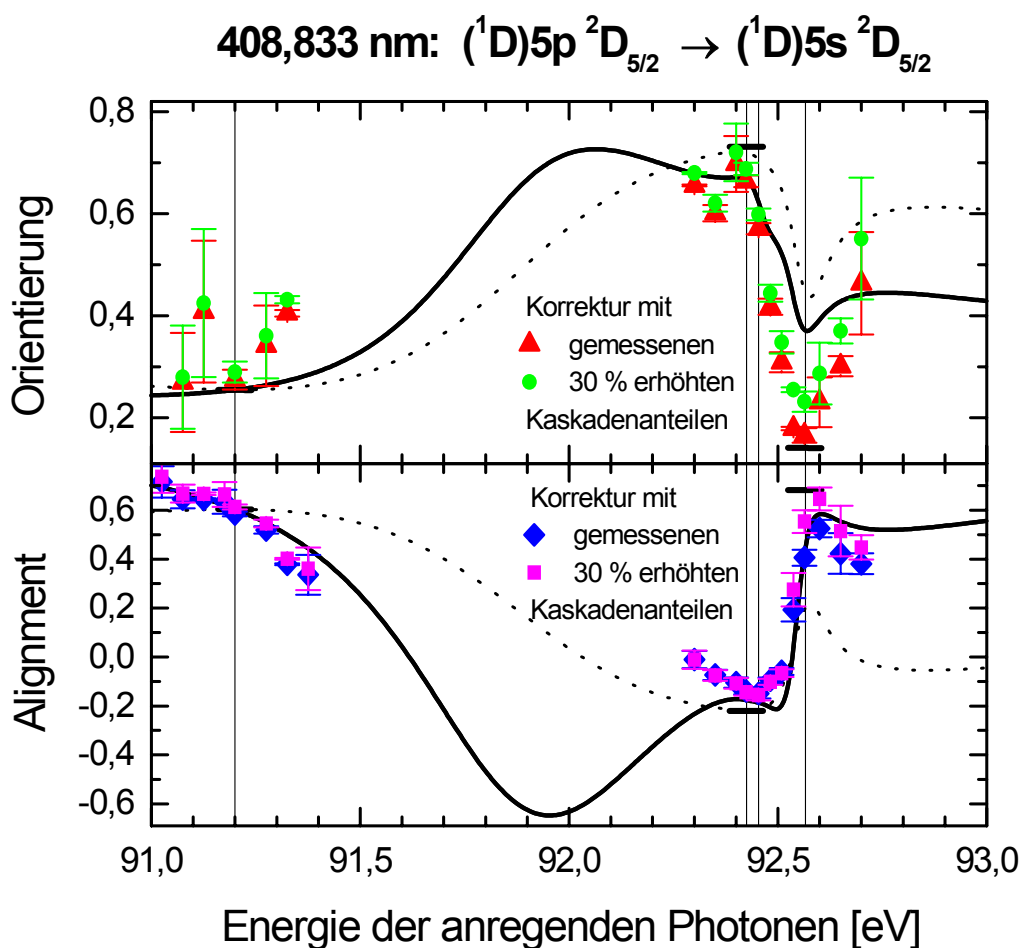


Abbildung 6.5: Vergleich des gewichteten Mittel aller Messungen für den Alignment- bzw. Orientierungsparameter der 408,833 nm-Linie mit den tatsächlich gemessenen Kaskadenanteilen und mit um 30 % erhöhten Kaskadenanteilen.

Die Berechnungen mit durchgezogener Linie beziehen sich auf das Modell interferierender Resonanzen. Die unterbrochenen Linien beziehen sich auf mit dem energieabhängigen Wirkungsquerschnitt der Resonanz gewichtete Einzelwerte im Zweistufen-Modell. Die zur Berechnung verwendeten Einzelwerte im Zweistufen-Modell sind auf R1, R2 und R4 durch Querbalken dargestellt.

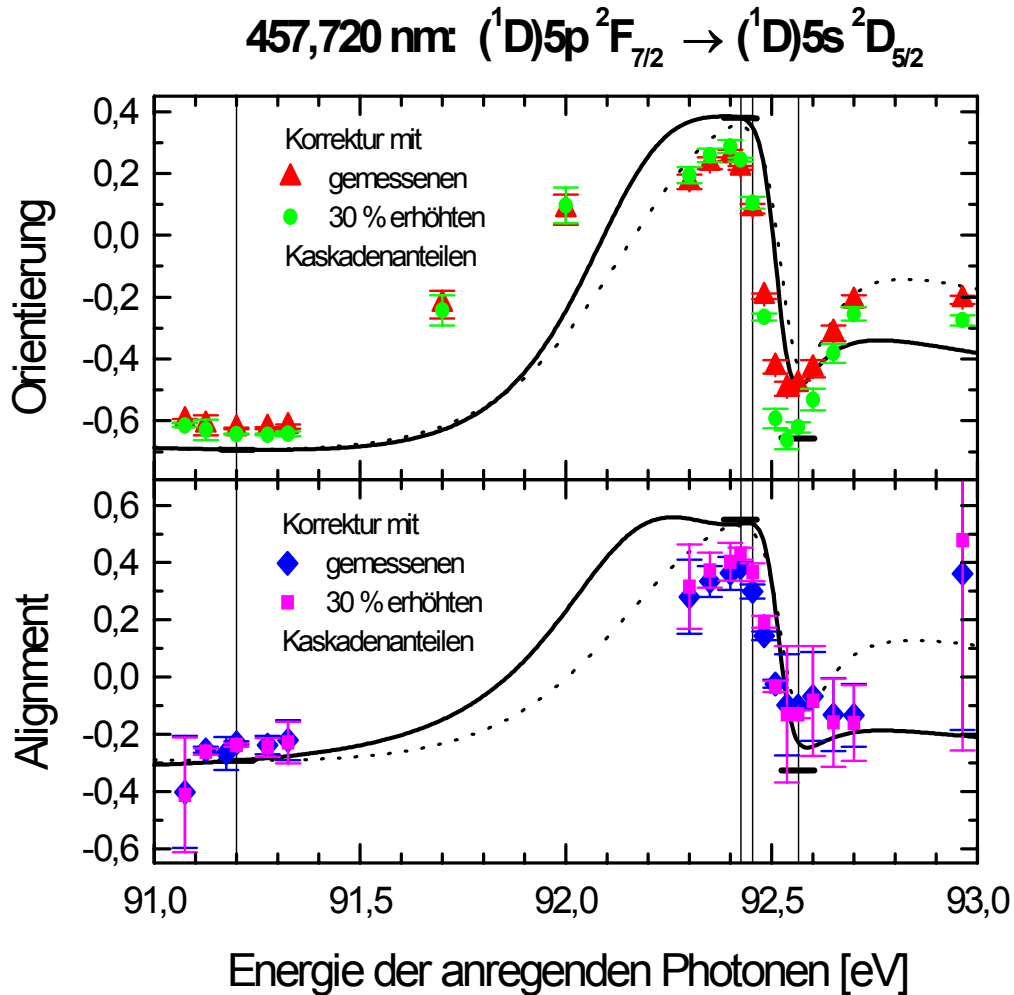


Abbildung 6.6: Vergleich des gewichteten Mittel aller Messungen für den Alignment- bzw. Orientierungsparameter der 457,720 nm-Linie mit den tatsächlich gemessenen Kaskadenanteilen und mit um 30 % erhöhten Kaskadenanteilen.

Die Berechnungen mit durchgezogener Linie beziehen sich auf das Modell interferierender Resonanzen. Die unterbrochenen Linien beziehen sich auf mit dem energieabhängigen Wirkungsquerschnitt der Resonanz gewichtete Einzelwerte im Zweistufen-Modell. Die zur Berechnung verwendeten Einzelwerte im Zweistufen-Modell sind auf R1, R2 und R4 durch Querbalken dargestellt.

Weiterhin ist es nicht sicher, dass alle zur Kaskadenkorrektur beitragenden Fluoreszenzübergänge berücksichtigt wurden. Daher wird der Fehler der Kaskadenkorrektur in dieser Arbeit bei der Berechnung des systematischen Gesamtfehlers nicht berücksichtigt. Statt dessen zeigen die Abbildungen 6.5 und 6.6 die Ergebnisse für den Alignment- bzw. Orientierungsparameter der beiden untersuchten Fluoreszenzübergänge aus Kapitel 5.2 bzw. 5.3 mit der tatsächlich gemessenen Korrektur der Kaskaden im Vergleich zu den Ergebnissen, die sich ergeben würden, wenn der energieabhängige Kaskadeneinfluss (Kask. in Gleichung 4.9) noch 30% größer wäre.

6.3 Fehlerbetrachtung der Elektronen-Partialwellenanalyse

Die Fehler der Elektronen-Partialwellenanalyse ergeben sich aus dem linearen Gleichungssystem der Gleichungen 4.11, 4.12 und 4.13, wobei jeweils die Alignment- und Orientierungsparameter als $A_{20}(\text{gew.}) + \Delta A_{20}(\text{gew.})$ und $O_{10}(\text{gew.}) + \Delta O_{10}(\text{gew.})$, $A_{20}(\text{gew.}) + \Delta A_{20}(\text{gew.})$ und $O_{10}(\text{gew.}) - \Delta O_{10}(\text{gew.})$, $A_{20}(\text{gew.}) - \Delta A_{20}(\text{gew.})$ und $O_{10}(\text{gew.}) + \Delta O_{10}(\text{gew.})$ bzw. $A_{20}(\text{gew.}) - \Delta A_{20}(\text{gew.})$ und $O_{10}(\text{gew.}) - \Delta O_{10}(\text{gew.})$ eingesetzt werden. $\Delta A_{20}(\text{gew.})$ bzw. $\Delta O_{10}(\text{gew.})$ ist dabei der Standardfehler der gewichteten Mittels des Alignment- bzw. Orientierungsparameters aus den Gleichungen 6.3 und 6.4. Die daraus resultierende maximale Abweichung von der ursprünglich berechneten Elektronen-Partialwellenanalyse gibt den jeweiligen Maximalfehler für eine der drei Elektronen-Partialwellen an.

7 Zusammenfassung

Der resonante Raman-Auger-Effekt wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit bei BESSY II anhand von Kr I $3d^9 4p^6 5p / 6p$ -Resonanzen zwischen 91 und 93 eV untersucht. Die Resonanzen wurden durch linear horizontal polarisierte sowie durch zirkular polarisierte Synchrotronstrahlung innerhalb ihrer natürlichen Linienbreite angeregt. Der fluoreszente Zerfall von drei im nachfolgenden Auger-Prozess entstehenden Kr II $3d^{10} 4p^4 5p$ -Zuständen in Kr II $3d^{10} 4p^4 5s$ -Zustände wurde im Bezug auf die Polarisation untersucht. Dieses Verfahren der Anregung durch Photonen und Analyse der Fluoreszenzstrahlung bezeichnet man als photoneninduzierte Fluoreszenzspektroskopie (PIFS).

Die Polarisationsanalyse erfolgte mit einem polarisationsempfindlichen Detektorzweig, bestehend aus $\lambda/4$ -Plättchen, Polarisationsfilter, Interferenzfilter für die zu untersuchende Wellenlänge der Fluoreszenzstrahlung und Photomultiplier. Die dazu notwendigen apparativen Komponenten waren aufzubauen und zu quantifizieren. Parallel dazu konnten Fluoreszenzen von Kaskaden durch ein ortsauflösendes Detektorsystem an einem Sekundärmonochromator experimentell erfasst werden. Diese Kaskadenbeiträge wurden zur Korrektur der im polarisationsempfindlichen Detektorzweig gemessenen Intensitäten verwendet. Aus den korrigierten Intensitäten ließen sich lineare und zirkulare Polarisationsgrade bestimmen, woraus sich der Alignment- bzw. Orientierungsparameter der untersuchten Kr II $3d^{10} 4p^4 5p$ -Zustände ableiten ließ. Eine auf Basis der gemessenen Alignment- und Orientierungsparameter vorgenommene Elektronen-Partialwellenanalyse ermöglichte die Bestimmung der relativen Anteile der drei beteiligten Elektronen-Partialwellen im vorausgegangenen Auger-Zerfall.

Die experimentellen Ergebnisse wurden mit theoretischen Berechnungen im Zweistufen-Modell und im Modell interferierender Resonanzen verglichen. Letzteres ist gleichbedeutend mit einem Einstufen-Modell, das die Separierbarkeit der von Anregung und Zerfall aufgibt. Dabei ist hervorzuheben, dass die Messung von Alignment- bzw.

Orientierungsparameter bei Variation der Anregungsenergie innerhalb der natürlichen Linienbreite den Vergleich mit den theoretischen Modellen bis zur Verteilung der Elektronen-Partialwellen-Anteile erlaubt.

Die Untersuchung des fluoreszenten Zerfalls des $4p^4 ({}^1S) 5p {}^2P_{1/2}$ -Zustandes, der kein Alignment besitzt, ergab eine Orientierung, die der theoretischen Aussage der alleinigen Beteiligung der $d_{3/2}$ -Elektronen-Partialwelle sehr nahe kommt.

Für den Fluoreszenzübergang $4p^4 ({}^1D) 5p {}^2F_{7/2}$ -Zustand zeigen die Berechnungen im Energiebereich der Resonanzen R1 – R4 keinen merklichen Einfluss von Interferenzeffekten. Lediglich bei Energien oberhalb der Kr I $3d^9_{5/2} 6p_{3/2}$ -Resonanz (R4) weichen Zweistufen-Modell und das Modell interferierender Resonanzen voneinander ab. Bis auf diesen schwer meßbaren Unterschied bestätigen die Ergebnisse die theoretischen Voraussagen. Im Energiebereich der Kr I $3d^9_{3/2} 5p_{1/2}$ -Resonanz (R2) weichen jedoch Experiment und Berechnung signifikant voneinander ab. Die Vernachlässigung der dicht benachbarten Kr I $3d^9_{3/2} 5p_{3/2}$ -Resonanz (R3) sollte daher mit Hilfe von Simulationsrechnungen überprüft werden. Beim Überstreichen der Kr I $3d^9_{5/2} 5p_{3/2}$ -Resonanz (R1) wird keine Energieabhängigkeit der Elektronen-Partialwellen-Anteile innerhalb der Linienbreite beobachtet.

Für die Besetzung des $4p^4 ({}^1D) 5p {}^2D_{5/2}$ -Zustandes wird eine Energieabhängigkeit innerhalb der bisher als isoliert angesehenen Kr I $3d^9_{5/2} 5p_{3/2}$ -Resonanz (R1) vorhergesagt und vom Experiment auch erstmalig bestätigt. Damit wird ein Einfluss der Kr I $3d^9_{3/2} 5p_{1/2}$ -Resonanz (R2) über einen energetischen Abstand, der dem 15fachen der natürlichen Linienbreite entspricht, nachgewiesen. Auch im Energiebereich der anderen untersuchten Resonanzen ist die Übereinstimmung von Voraussage und experimenteller Überprüfung zumindest qualitativ sehr gut. Insbesondere, da ein von der Theorie berechnetes Maximum-Verhalten des Anteils der $g_{7/2}$ Elektronen-Partialwelle bestätigt wird. Quantitativ beurteilt, ergeben sich Unterschiede bei der Überprüfung der berechneten Alignment- und Orientierungsparameter, die sich auf den Vergleich von experimentell abgeleiteter und berechneter Elektronen-Partialwellenverteilung kaum auswirken.

Zukünftige experimentelle Untersuchungen des resonanten Raman-Auger-Effekts sollten eine experimentelle Polarisationsanalyse der beteiligten Kaskadenübergänge einschließen, die in der vorliegenden Arbeit als unpolarisiert angenommen wurden, da dies die Ergebnisse im Bereich der untersuchten Kr I $3d^9_{5/2} 6p_{3/2}$ -Resonanz (R4) maßgeblich beeinflussen kann.

In der theoretischen Behandlung des resonanten Raman-Auger-Effekts sollte in künftigen Berechnungen der als schwach angesehenen und für die Berechnungen in dieser Arbeit vernachlässigte Einfluss der Kr I $3d^9_{3/2} 5p_{3/2}$ -Resonanz (R3) überprüft werden.

Die experimentelle Untersuchung der Besetzung von 2P -Ausgangszuständen kann aufgrund der erlaubten direkten Anregung die Möglichkeit eröffnen, nicht nur die Interferenz von Resonanzen, die durch Lebensdauerbreiterung überlappen, sondern auch die Interferenz des resonanten mit dem direkten Prozess zu studieren. Für den Einfluss der direkten Anregung sagen die Berechnungen eine glockenförmige Variation von Alignment- bzw. Orientierungsparameter innerhalb der natürlichen Linienbreite der Kr I $3d^9_{5/2} 5p_{3/2}$ -Resonanz (R1) voraus. Eine Überprüfung dieser Angabe steht aus. Die für die Messungen dieser Arbeit aufgebaute Apparatur und die erhaltenen Ergebnisse sind eine ausreichende Vorbereitung für die Einschätzung der Durchführbarkeit der anstehenden Messungen zum Nachweis der Interferenz von direkter und resonanter Anregung.

8 Anhang

Zur Vervollständigung folgen in diesem Kapitel Ergebnisse der gewichteten Alignment- bzw. Orientierungsparameter mit Angabe des Standardfehlers des gewichteten Mittels und einer exemplarischen Auswertung der Rohdaten für eine Strahlzeit in tabellarischer Form.

8.1 Ergebnis-Tabellen

Energie [eV]	O ₁₀ (gew.)	ΔO ₁₀ (gew.)	A ₂₀ (gew.)	ΔA ₂₀ (gew.)
91,025			0,7155	0,0639
91,075	0,2692	0,0970	0,6447	0,0370
91,125	0,4081	0,1390	0,6439	0,0052
91,175			0,6341	0,0490
91,2	0,2748	0,0194	0,5840	0,0095
91,275	0,3412	0,0789	0,5191	0,0150
91,325	0,4050	0,0065	0,3789	0,0035
91,375			0,3361	0,0812
92,3	0,6555	0,0019	-0,0105	0,0359
92,35	0,6011	0,0159	-0,0729	0,0209
92,4	0,6977	0,0548	-0,1042	0,0210
92,424	0,6640	0,0115	-0,1387	0,0133
92,454	0,5707	0,0110	-0,1489	0,0203
92,482	0,4177	0,0158	-0,0951	0,0119
92,509	0,3087	0,0195	-0,0588	0,0140
92,537	0,1787	0,0033	0,1928	0,0477
92,564	0,1654	0,0142	0,4057	0,0330
92,6	0,2305	0,0488	0,5252	0,0356
92,65	0,3010	0,0199	0,4231	0,0825
92,7	0,4637	0,1005	0,3812	0,0424

Tabelle 8.1: Energieabhängige Ergebnisse der gewichteten Alignment- bzw. Orientierungsparameter mit Angabe des Standardfehlers des gewichteten Mittels für den Kr II $4p^4 (^1D) 5p^2 D_{5/2} \rightarrow 4p^4 (^1D) 5s^2 D_{5/2}$ -Fluoreszenzübergang bei 408,833 nm in Kapitel 5.2.

Energie [eV]	$O_{10}(\text{gew.})$	$\Delta O_{10}(\text{gew.})$	$A_{20}(\text{gew.})$	$\Delta A_{20}(\text{gew.})$
91,075	-0,5998	0,0059	-0,4018	0,1953
91,125	-0,6139	0,0324	-0,2542	0,0109
91,175			-0,2670	0,0573
91,2	-0,6250	0,0024	-0,2313	0,0056
91,275	-0,6233	0,0032	-0,2387	0,0319
91,325	-0,6193	0,0072	-0,2215	0,0699
91,7	-0,2240	0,0451		
92	0,0833	0,0492		
92,3	0,1723	0,0233	0,2808	0,1288
92,35	0,2325	0,0194	0,3340	0,0534
92,4	0,2582	0,0188	0,3621	0,0574
92,424	0,2177	0,0059	0,3827	0,0183
92,454	0,0865	0,0154	0,2992	0,0249
92,482	-0,1976	0,0086	0,1437	0,0153
92,509	-0,4254	0,0224	-0,0239	0,0141
92,537	-0,4959	0,0225	-0,0972	0,1775
92,564	-0,4827	0,0134	-0,1017	0,0105
92,6	-0,4310	0,0278	-0,0676	0,1554
92,65	-0,3162	0,0254	-0,1320	0,1275
92,7	-0,2129	0,0185	-0,1342	0,1100
92,964	-0,2081	0,0129	0,3621	0,5477

Tabelle 8.2: Energieabhängige Ergebnisse der gewichteten Alignment- bzw. Orientierungsparameter mit Angabe des Standardfehlers des gewichteten Mittels für den $\text{Kr II } 4p^4 (^1D) 5p^2 F_{7/2} \rightarrow 4p^4 (^1D) 5s^2 D_{5/2}$ -Fluoreszenzübergang bei 457,720 nm in Kapitel 5.3.

8.2 Auswertung der BESSY II-Strahlzeit 1203

Die Fit-Werte der Strahlzeit 1203 (Tabelle 8.3) beziehen sich auf einen Sweep. Eine unterschiedliche Anzahl der Sweeps in den Einzelmessungen und eine unterschiedliche Ladungsnormierung ist dabei für einen Vergleich zu berücksichtigen. Die Abbildungen 8.1 – 8.6 im Anschluß an Tabelle 8.3 zeigen zugehörige normierte Amplitudenmodulationen der Strahlzeit 1203.

Tabelle 8.3 (auf den folgenden Seiten): Exemplarische Auswertung der Rohdaten der Strahlzeit 1203 bei BESSY II.

Filename			KrPM010	KrPM027	KrPM028
Helizität	[]		lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)
$\lambda/4$ -Position	[°]		weg	weg	weg
Interferenzfilter	[nm]		445,3	408,8	457,9
Phasenshift-Korrekturfaktor			-	-	-
α_1			1	0,2928	0,982
α_2			1	-0,427618	0,327327
Resonanz-Nr.	[]		2	1	1
Anregungsenergie	[eV]		92,424	91,2	91,2
Sweep-Anzahl	[]		8	4	3
Zeitdauer 1. Step	[s]		39	40	48
Zeitdauer letzter Step	[s]		57	47	56
PaForDos cfg-File			360	360	360
Ladungsnormierung Q	[1000 counts]		10	10	10
I_{MW}	[Mittelwert]		13685,41	4679,91	11976,24
ΔI_{MW}	[Mittelwert]		7,59	6,32	16,86
A	[Amplitude]		-10,91	559,04	427,00
ΔA	[Amplitude]		10,58	8,74	23,31
W	[°]		30,32	45,00	45,00
ΔW	[°]		28,54	0,00	0,00
$I_{par.}=I_{0^\circ}$	[counts]	Auswertungsrechnung	13675,90	5238,95	12403,24
I_{45°	[counts]		13680,06	4679,91	11976,24
$I_{sen.}=I_{90^\circ}$	[counts]		13694,93	4120,87	11549,23
I_{135°	[counts]		13690,76	4679,91	11976,24
π_{circ}	[%]	Auswertungsrechnung	-	-	-
O_{10} korr. exact	[%]		-	-	-
π_{lin}	[%]		-0,07	11,95	3,57
β	[%]		0,13	-20,75	-6,66
A_{20} korr. exact	[%]		0,13	48,52	-20,34
π_{circ} casc. korr.	[%]	Kask.+Depol. korr. Ergebnisse	-	-	-
O_{10} korr. Exact casc. korr.	[%]		-	-	-
π_{lin} casc. korr.	[%]		-0,07	15,40	4,27
β casc. korr.	[%]		0,13	-26,00	-7,93
A_{20} korr. Exact casc. korr.	[%]		0,13	60,80	-24,22
$\Delta\pi_{circ}$ casc. korr.	[%]	statistischer Gesamtfehler	-	-	-
ΔO_{10} korr. Exact casc. korr.	[%]		-	-	-
$\Delta\pi_{lin}$ casc. korr.	[%]		0,16	0,48	0,42
$\Delta\beta$ casc. korr.	[%]		0,31	0,71	0,75
ΔA_{20} korr. Exact casc. korr.	[%]		0,31	1,65	2,29
$\Delta(O_{10} \text{ sys. ges.})$	[%]	systematischer Gesamtfehler	-	-	-
$\Delta(A_{20} \text{ sys. ges.})$	[%]		0,01	4,32	2,14
$\Delta(O_{10} \text{ ges.})$	[%]	Gesamtfehler	-	-	-
$\Delta(A_{20} \text{ ges.})$	[%]		0,31	4,63	3,13

KrPM119	KrPM083	KrPM084	KrPM086	KrPM087	KrPM088	KrPM089	KrPM090	KrPM091
lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)
weg	weg	weg	weg	weg	weg	weg	weg	weg
408,8	457,9	408,8	408,8	457,9	457,9	408,8	408,8	457,9
-	-	-	-	-	-	-	-	-
0,2928	0,982	0,2928	0,2928	0,982	0,982	0,2928	0,2928	0,982
-0,427618	0,327327	-0,427618	-0,427618	0,327327	0,327327	-0,427618	-0,427618	0,327327
1	1	1	1-	1-	1-	1-	1,2	1,2
91,2	91,2	91,2	91,175	91,175	91,125	91,125	91,275	91,275
16	4	4	4	3	4	5	8	10
11	117	125	58	61	64	67	69	76
12	126	132	61	64	67	70	75	84
180	Null	Null	Null	Null	Null	Null	Null	Null
1	10	10	10	10	10	10	10	10
748,05	19346,91	7489,55	5565,75	13366,13	4437,89	1741,28	1605,01	4037,80
1,72	33,78	20,40	9,69	44,56	11,95	12,80	3,00	9,34
89,40	719,49	836,59	697,64	530,41	177,73	233,59	170,17	166,61
2,33	44,69	26,98	12,83	58,94	15,81	16,94	3,97	12,35
45,00	45,00	45,00	45,00	45,00	45,00	45,00	45,00	45,00
0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
837,46	20066,40	8326,13	6263,39	13896,54	4615,62	1974,88	1775,19	4204,41
748,05	19346,91	7489,55	5565,75	13366,13	4437,89	1741,28	1605,01	4037,80
658,65	18627,42	6652,96	4868,12	12835,72	4260,16	1507,69	1434,84	3871,20
748,05	19346,91	7489,55	5565,75	13366,13	4437,89	1741,28	1605,01	4037,80
-	-	-	-	-	-	-	-	-
-	-	-	-	-	-	-	-	-
11,95	3,72	11,17	12,53	3,97	4,00	13,42	10,60	4,13
-20,76	-6,94	-19,53	-21,66	-7,38	-7,45	-23,02	-18,62	-7,67
48,54	-21,19	45,66	50,66	-22,56	-22,76	53,82	43,55	-23,43
-	-	-	-	-	-	-	-	-
-	-	-	-	-	-	-	-	-
15,41	4,46	14,40	16,16	4,73	4,75	16,65	13,75	5,01
-26,01	-8,25	-24,51	-27,11	-8,74	-8,78	-27,81	-23,52	-9,23
60,83	-25,22	57,32	63,41	-26,70	-26,84	65,05	55,01	-28,20
-	-	-	-	-	-	-	-	-
-	-	-	-	-	-	-	-	-
0,81	0,51	0,93	0,61	0,97	0,78	2,47	0,64	0,68
1,19	0,90	1,40	0,88	1,71	1,38	3,58	0,97	1,21
2,78	2,76	3,28	2,07	5,23	4,21	8,36	2,27	3,68
-	-	-	-	-	-	-	-	-
4,32	2,22	4,16	4,44	2,34	2,35	4,51	4,04	2,46
-	-	-	-	-	-	-	-	-
5,14	3,54	5,29	4,90	5,73	4,82	9,50	4,64	4,43

KrPM092	KrPM093	KrPM099	KrPM100	KrPM101	KrPM102	KrPM103	KrPM104	KrPM105
lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)
weg	weg	weg	weg	weg	weg	weg	weg	weg
457,9	408,8	457,9	408,8	408,8	457,9	457,9	408,8	408,8
-	-	-	-	-	-	-	-	-
0,982	0,2928	0,982	0,2928	0,2928	0,982	0,982	0,2928	0,2928
0,327327	-0,427618	0,327327	-0,427618	-0,427618	0,327327	0,327327	-0,427618	-0,427618
1,2	1,2	2	2	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2
91,325	91,325	92,424	92,424	92,3	92,3	92,35	92,35	92,4
9	3	4	5	6	4	4	6	7
87	100	67	70	75	80	81	84	88
100	108	70	73	80	81	84	89	94
Null	Null	Max	Max	Max	Max	Max	Max	Max
10	10	10	10	10	10	10	10	10
1710,85	878,54	3685,39	4604,48	671,04	539,81	1166,81	1529,24	4570,51
6,39	7,30	18,05	14,72	6,81	2,26	1,51	3,22	6,89
48,70	63,31	-155,91	-150,76	-15,29	-23,35	-45,89	-21,73	-97,30
8,45	9,65	18,05	14,72	6,81	2,26	1,51	3,22	6,89
45,00	45,00	45,00	45,00	45,00	45,00	45,00	45,00	45,00
0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
1759,55	941,84	3529,48	4453,72	655,75	516,46	1120,92	1507,50	4473,21
1710,85	878,54	3685,39	4604,48	671,04	539,81	1166,81	1529,24	4570,51
1662,16	815,23	3841,31	4755,24	686,33	563,16	1212,69	1550,97	4667,82
1710,85	878,54	3685,39	4604,48	671,04	539,81	1166,81	1529,24	4570,51
-	-	-	-	-	-	-	-	-
-	-	-	-	-	-	-	-	-
2,85	7,21	-4,23	-3,27	-2,28	-4,33	-3,93	-1,42	-2,13
-5,35	-13,03	8,50	6,52	4,49	8,70	7,88	2,78	4,19
-16,35	30,47	25,96	-15,24	-10,50	26,57	24,06	-6,50	-9,80
-	-	-	-	-	-	-	-	-
-	-	-	-	-	-	-	-	-
3,49	9,52	-6,33	-4,01	-2,80	-6,55	-5,78	-1,72	-2,58
-6,52	-16,87	12,98	8,03	5,54	13,46	11,78	3,38	5,10
-19,91	39,45	39,65	-18,78	-12,96	41,12	35,98	-7,91	-11,93
-	-	-	-	-	-	-	-	-
-	-	-	-	-	-	-	-	-
1,10	2,79	1,56	0,81	2,56	1,35	0,40	0,52	0,37
1,99	4,55	3,39	1,69	5,21	2,96	0,87	1,04	0,76
6,08	10,63	10,37	3,96	12,19	9,04	2,65	2,42	1,77
-	-	-	-	-	-	-	-	-
1,79	3,15	4,30	1,95	1,31	4,48	3,86	0,79	1,20
-	-	-	-	-	-	-	-	-
6,34	11,09	11,23	4,42	12,26	10,09	4,68	2,54	2,14

KrPM106	KrPM107	KrPM108	KrPM110	KrPM111	KrPM112	KrPM113	KrPM114	KrPM115
lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)
weg	weg	weg	weg	weg	weg	weg	weg	weg
457,9	457,9	408,8	408,8	457,9	457,9	408,8	408,8	408,8
-	-	-	-	-	-	-	-	-
0,982	0,982	0,2928	0,2928	0,982	0,982	0,2928	0,2928	0,2928
0,327327	0,327327	-0,427618	-0,427618	0,327327	0,327327	-0,427618	-0,427618	-0,427618
1,2	3	3	2,3	2,3	3,4	4	4+	4+
92,4	92,454	92,454	92,482	92,482	92,509	92,564	92,6	92,7
6	4	5	7	7	11	20	16	13
93	99	103	58	63	64	63	72	82
101	103	109	61	64	65	71	80	92
Max	Max	Max	Max	Max	Max	Max	Max	Max
10	10	10	10	10	10	10	10	10
3327,41	1875,94	2296,49	1279,98	1530,80	1686,14	1173,79	663,14	172,74
17,33	7,04	6,39	6,31	3,35	6,48	1,18	6,71	1,06
-155,63	-60,85	-67,45	-26,54	-20,19	0,99	61,80	45,17	8,61
17,33	7,04	6,39	6,31	3,35	6,48	1,18	6,71	1,06
45,00	45,00	45,00	45,00	45,00	45,00	45,00	45,00	45,00
0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
3171,78	1815,09	2229,04	1253,44	1510,60	1687,13	1235,59	708,31	181,35
3327,41	1875,94	2296,49	1279,98	1530,80	1686,14	1173,79	663,14	172,74
3483,04	1936,79	2363,94	1306,52	1550,99	1685,16	1111,99	617,98	164,13
3327,41	1875,94	2296,49	1279,98	1530,80	1686,14	1173,79	663,14	172,74
-	-	-	-	-	-	-	-	-
-	-	-	-	-	-	-	-	-
-4,68	-3,24	-2,94	-2,07	-1,32	0,06	5,26	6,81	4,98
9,44	6,45	5,83	4,08	2,58	-0,11	-9,68	-12,36	-9,19
28,83	19,72	-13,63	-9,54	7,87	-0,34	22,65	28,91	21,50
-	-	-	-	-	-	-	-	-
-	-	-	-	-	-	-	-	-
-6,83	-5,74	-3,73	-2,73	-2,66	0,12	11,30	12,41	8,39
14,07	11,71	7,45	5,40	5,26	-0,24	-19,74	-21,47	-15,01
42,98	35,78	-17,41	-12,64	16,08	-0,73	46,16	50,20	35,11
-	-	-	-	-	-	-	-	-
-	-	-	-	-	-	-	-	-
1,62	1,41	0,73	1,33	0,91	1,64	0,48	4,15	2,23
3,57	3,03	1,51	2,71	1,84	3,15	0,76	6,43	3,71
10,92	9,25	3,54	6,33	5,61	9,64	1,78	15,04	8,67
-	-	-	-	-	-	-	-	-
4,71	3,84	1,80	1,28	1,63	0,07	3,56	3,79	2,87
-	-	-	-	-	-	-	-	-
11,89	10,01	3,97	6,46	5,84	9,64	3,98	15,51	9,13

KrPM116	KrPM118	KrPM120	KrPM122	KrPM123	KrPM124	KrPM127	KrPM128	KrPM002
lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)	lin (hor.)	pos
weg	weg	weg	weg	weg	weg	weg	weg	0
408,8	408,8	408,8	408,8	408,8	408,8	408,8	408,8	457,9
-	-	-	-	-	-	-	-	1
0,2928	0,2928	0,2928	0,2928	0,2928	0,2928	0,2928	0,2928	0,982
-0,427618	-0,427618	-0,427618	-0,427618	-0,427618	-0,427618	-0,427618	-0,427618	0,327327
4+	1	1-	1,2	1,2	1-	1-	1,2	1
92,65	91,2	91,125	91,275	91,325	91,075	91,025	91,375	91,2
3	90	65	32	41	15	17	13	5
93	10	12	29	34	43	51	55	22
97	11	13	34	40	47	56	59	27
Max	Max	Max	Max	Max	Max	Max	Max	360
10	1	1	5	5	5	5	5	10
888,39	750,30	233,50	709,80	307,72	442,95	230,05	145,79	11056,12
16,84	0,57	0,61	0,82	0,53	1,17	1,03	0,97	10,65
47,98	88,18	31,27	67,96	21,14	61,75	35,04	8,55	-3511,29
16,84	0,57	0,61	0,82	0,53	1,17	1,03	0,97	15,38
45,00	45,00	45,00	45,00	45,00	45,00	45,00	45,00	85,16
0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,12
936,37	838,49	264,76	777,76	328,86	504,70	265,10	154,34	10466,03
888,39	750,30	233,50	709,80	307,72	442,95	230,05	145,79	14517,47
840,41	662,12	202,23	641,83	286,58	381,20	195,01	137,25	11646,22
888,39	750,30	233,50	709,80	307,72	442,95	230,05	145,79	7594,78
-	-	-	-	-	-	-	-	-31,31
-	-	-	-	-	-	-	-	-54,24
5,40	11,75	13,39	9,58	6,87	13,94	15,23	5,86	-5,34
-9,92	-20,45	-22,98	-16,97	-12,46	-23,81	-25,75	-10,73	-10,88
23,21	47,81	53,73	39,68	29,14	55,69	60,21	25,08	-33,25
-	-	-	-	-	-	-	-	-36,66
-	-	-	-	-	-	-	-	-63,52
9,63	15,16	16,61	12,42	9,07	17,22	18,60	8,00	-6,39
-17,05	-25,63	-27,77	-21,48	-16,14	-28,64	-30,59	-14,37	-13,04
39,88	59,94	64,94	50,23	37,75	66,98	71,55	33,61	-39,84
-	-	-	-	-	-	-	-	0,41
-	-	-	-	-	-	-	-	0,71
7,41	0,23	0,75	0,34	0,49	0,77	1,29	1,95	0,32
12,04	0,34	1,09	0,52	0,81	1,10	1,82	3,27	0,65
28,16	0,79	2,56	1,22	1,89	2,57	4,25	7,64	2,00
-	-	-	-	-	-	-	-	3,26
3,18	4,28	4,51	3,79	3,04	4,59	4,77	2,77	19,55
-	-	-	-	-	-	-	-	3,34
28,34	4,36	5,18	3,98	3,58	5,26	6,39	8,12	19,65

KrPM003	KrPM004	KrPM012	KrPM016	KrPM023	KrPM051	KrPM052	KrPM054	KrPM055
pos	pos	pos	pos	pos	pos	pos	pos	pos
0	0	0	0	0	0	0	0	0
457,9	408,8	445,3	408,8	408,8	457,9	408,8	408,8	457,9
1	1,015	1	1,015	1,015	1	1,015	1,015	1
0,982	0,2928	1	0,2928	0,2928	0,982	0,2928	0,2928	0,982
0,327327	-0,427618	1	-0,427618	-0,427618	0,327327	-0,427618	-0,427618	0,327327
1	1	2	1	4	1	1	2	2
91,2	91,2	92,424	91,2	92,564	91,2	91,2	92,424	92,424
5	4	5	5	3	3	3	4	4
27	33	35	34	46	29	32	32	38
33	39	47	45	59	32	36	37	45
360	360	360	360	360	360	360	360	360
10	10	10	10	10	10	10	10	10
11205,47	4522,93	12142,37	4431,17	725,98	11421,05	4587,83	2979,70	2257,59
11,27	10,35	7,87	6,60	7,51	10,74	14,40	6,58	3,95
-3538,23	-431,56	-3123,95	-422,48	-33,49	-3606,12	-455,19	278,72	203,10
16,27	14,43	11,38	9,18	10,47	15,52	20,09	9,50	5,67
85,01	30,57	87,56	32,93	30,27	85,50	30,42	83,73	77,62
0,13	0,98	0,10	0,64	9,20	0,12	1,30	0,94	0,77
10592,63	4144,98	11877,10	4045,66	696,82	10856,51	4190,35	3040,22	2342,65
14690,22	4314,62	15255,03	4258,32	709,52	14982,71	4366,00	2707,64	2073,16
11818,31	4900,88	12407,64	4816,68	755,14	11985,59	4985,31	2919,18	2172,52
7720,71	4731,25	9029,71	4604,02	742,44	7859,39	4809,67	3251,77	2442,02
-31,10	4,67	-25,63	3,96	2,30	-31,19	4,91	9,27	8,17
-53,88	27,16	-43,61	23,00	13,37	-54,03	28,52	53,85	14,15
-5,47	-8,36	-2,18	-8,70	-4,02	-4,94	-8,66	2,03	3,77
-11,15	-17,05	-4,45	-17,75	-8,19	-10,08	-17,68	4,14	7,67
-34,07	39,87	-4,45	41,51	19,15	-30,79	41,34	-9,67	23,43
-36,42	5,91	-27,74	5,01	4,85	-36,52	6,21	11,12	11,95
-63,09	34,35	-47,20	29,09	28,16	-63,27	36,06	64,62	20,70
-6,55	-10,78	-2,18	-11,22	-8,62	-5,92	-11,17	2,49	5,64
-13,36	-22,00	-4,45	-22,90	-17,60	-12,08	-22,81	5,06	11,47
-40,83	51,44	-4,45	53,56	41,15	-36,89	53,33	-11,84	35,05
0,43	0,91	0,23	0,58	6,79	0,40	1,25	0,81	0,83
0,74	5,29	0,39	3,36	39,47	0,69	7,28	4,70	1,43
0,34	0,95	0,17	0,61	7,04	0,31	1,31	0,74	0,79
0,68	1,95	0,34	1,25	14,39	0,63	2,69	1,50	1,61
2,09	4,55	0,34	2,92	33,65	1,93	6,28	3,51	4,92
3,25	5,41	2,30	5,49	4,30	3,22	5,63	3,35	1,30
19,46	3,80	4,17	3,68	3,01	19,37	3,97	4,29	6,48
3,34	7,56	2,34	6,44	39,70	3,29	9,20	5,77	1,93
19,57	5,93	4,19	4,70	33,78	19,46	7,43	5,55	8,13

KrPM057	KrPM058	KrPM060	KrPM061	KrPM063	KrPM068	KrPM072	KrPM073	KrPM077
pos	pos	pos	pos	pos	pos	pos	pos	pos
0	0	0	0	0	0	0	0	0
457,9	408,8	408,8	457,9	457,9	408,8	457,9	457,9	408,8
1	1,015	1,015	1	1	1,015	1	1	1,015
0,982	0,2928	0,2928	0,982	0,982	0,2928	0,982	0,982	0,2928
0,327327	-0,427618	-0,427618	0,327327	0,327327	-0,427618	0,327327	0,327327	-0,427618
3	3	4	4	4+	1-	1-	1,2	1,2
92,454	92,454	92,564	92,564	92,964	91,075	91,075	91,325	91,325
5	8	8	7	2	4	4	4	1
42	32	19	24	30	52	40	49	29
49	41	24	30	32	64	46	59	30
360	360	360	360	360	360	360	360	360
10	10	10	10	10	10	10	10	10
1237,15	1474,31	799,45	1744,75	112,06	637,88	1587,21	1387,49	478,83
2,60	3,28	2,32	2,84	1,62	2,30	4,06	3,93	3,70
23,93	109,14	-40,26	-261,32	7,12	-68,19	-490,41	-412,83	-38,36
3,60	4,74	3,22	4,11	2,31	3,20	5,86	5,68	5,20
36,60	82,53	35,98	85,63	13,78	34,68	84,93	84,42	23,88
4,48	1,19	2,38	0,43	9,09	1,39	0,33	0,38	3,92
1260,06	1502,46	761,17	1705,01	115,36	574,06	1500,83	1307,64	450,43
1244,06	1368,86	786,99	2003,03	118,37	613,84	2069,95	1792,52	453,05
1214,24	1446,16	837,73	1784,48	108,76	701,70	1673,59	1467,34	507,23
1230,23	1579,76	811,91	1486,46	105,75	661,92	1104,47	982,46	504,62
-0,56	7,26	1,58	-14,80	-5,63	3,83	-30,41	-29,19	5,47
-0,97	42,18	9,20	-25,65	-9,76	22,23	-52,69	-50,57	31,76
1,85	1,91	-4,79	-2,28	2,94	-10,00	-5,44	-5,76	-5,93
3,77	3,89	-9,76	-4,64	5,99	-20,42	-11,10	-11,74	-12,10
11,52	-9,09	22,83	-14,18	18,29	47,75	-33,90	-35,86	28,29
-0,97	9,03	3,33	-27,58	-10,91	4,63	-35,23	-34,96	7,08
-1,68	52,47	19,36	-47,78	-18,90	26,92	-61,03	-60,56	41,14
3,28	2,42	-10,28	-4,34	5,82	-12,36	-6,45	-7,05	-7,83
6,68	4,93	-20,98	-8,85	11,85	-25,23	-13,15	-14,38	-15,98
20,40	-11,53	49,07	-27,03	36,21	59,00	-40,18	-43,94	37,37
1,02	0,84	1,79	1,02	9,02	1,32	1,07	1,23	3,25
1,77	4,89	10,42	1,77	15,63	7,64	1,85	2,13	18,90
1,05	0,78	1,90	0,84	8,77	1,41	0,84	0,98	3,29
2,14	1,60	3,88	1,71	17,82	2,88	1,72	2,00	6,73
6,55	3,73	9,08	5,22	54,44	6,73	5,26	6,12	15,74
0,45	2,79	4,88	2,41	1,25	5,97	3,15	3,17	4,27
1,12	3,50	3,08	14,39	5,98	3,90	18,81	18,80	3,52
1,82	5,63	11,51	2,99	15,68	9,70	3,65	3,82	19,38
6,64	5,12	9,59	15,31	54,77	7,77	19,53	19,77	16,13

KrPM146	KrPM064	KrPM071	KrPM074	KrPM080
pos	pos	pos	pos	pos
0	45	45	45	45
408,8	457,9	457,9	457,9	457,9
1,015	1	1	1	1
0,2928	0,982	0,982	0,982	0,982
-0,427618	0,327327	0,327327	0,327327	0,327327
1	4+	1-	1,2	1,2
91,2	92,964	91,075	91,325	91,275
1	10	3	7	4
34	32	30	60	33
37	35	32	67	35
360	Null	Null	Null	Null
10	10	10	10	10
6123,25	114,56	1531,01	1390,50	3145,36
24,52	1,38	7,96	5,87	6,25
-577,67	7,40	448,93	415,24	958,99
32,82	1,82	10,54	7,77	8,26
30,96	45,00	45,00	45,00	45,00
1,80	0,00	0,00	0,00	0,00
5613,56	121,96	1979,94	1805,74	4104,35
5851,36	114,56	1531,01	1390,50	3145,36
6632,94	107,15	1082,08	975,26	2186,37
6395,14	114,56	1531,01	1390,50	3145,36
4,51	-6,46	-29,32	-29,86	-30,49
26,19	-11,20	-50,80	-51,74	-52,82
-8,32	-	-	-	-
-16,98	-	-	-	-
39,72	-	-	-	-
5,70	-12,51	-33,96	-35,76	-36,16
33,11	-21,68	-58,84	-61,96	-62,65
-10,73	-	-	-	-
-21,91	-	-	-	-
51,24	-	-	-	-
1,59	6,08	1,88	1,59	0,74
9,26	10,54	3,25	2,76	1,29
1,65	-	-	-	-
3,36	-	-	-	-
7,87	-	-	-	-
5,36	1,04	2,83	2,98	3,01
3,73	-	-	-	-
10,70	10,59	4,31	4,06	3,27
8,71	-	-	-	-

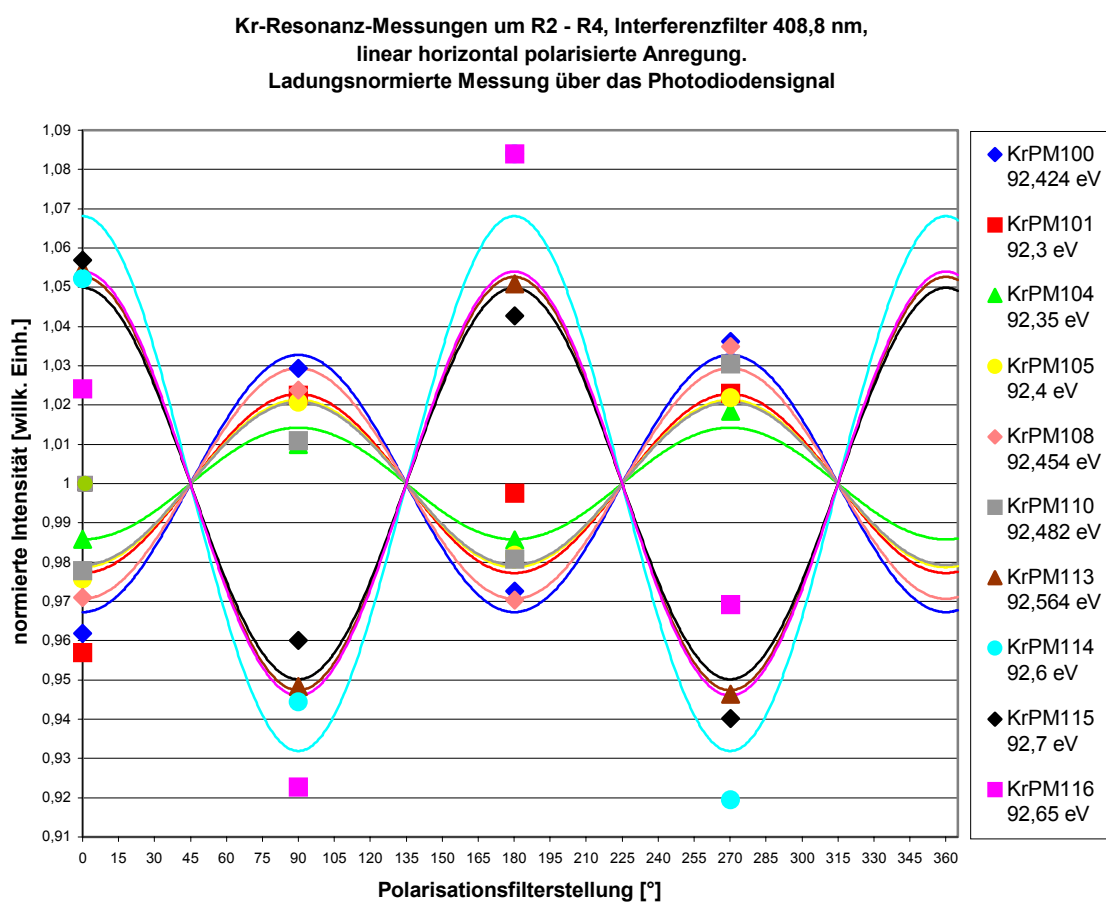


Abbildung 8.1: Normierte Amplitudenmodulationen der 408,833 nm-Linie mit linear horizontal polarisierter Anregung um R2 – R4. Die Amplitudenmodulationen sind in 90°-Schritten gemessen. Die eingezeichneten Kurven stellen die zugehörigen gefitteten Sinus-Funktionen dar.

Die mit linear horizontal polarisierter Anregung gemessenen Amplitudenmodulationen der 408,833 nm-Linie KrPM027 -118, -119, -120, -122, -123, -124, -127, -128 um R1 aus Tabelle 8.3 sind in Abbildung 5.6 dargestellt.

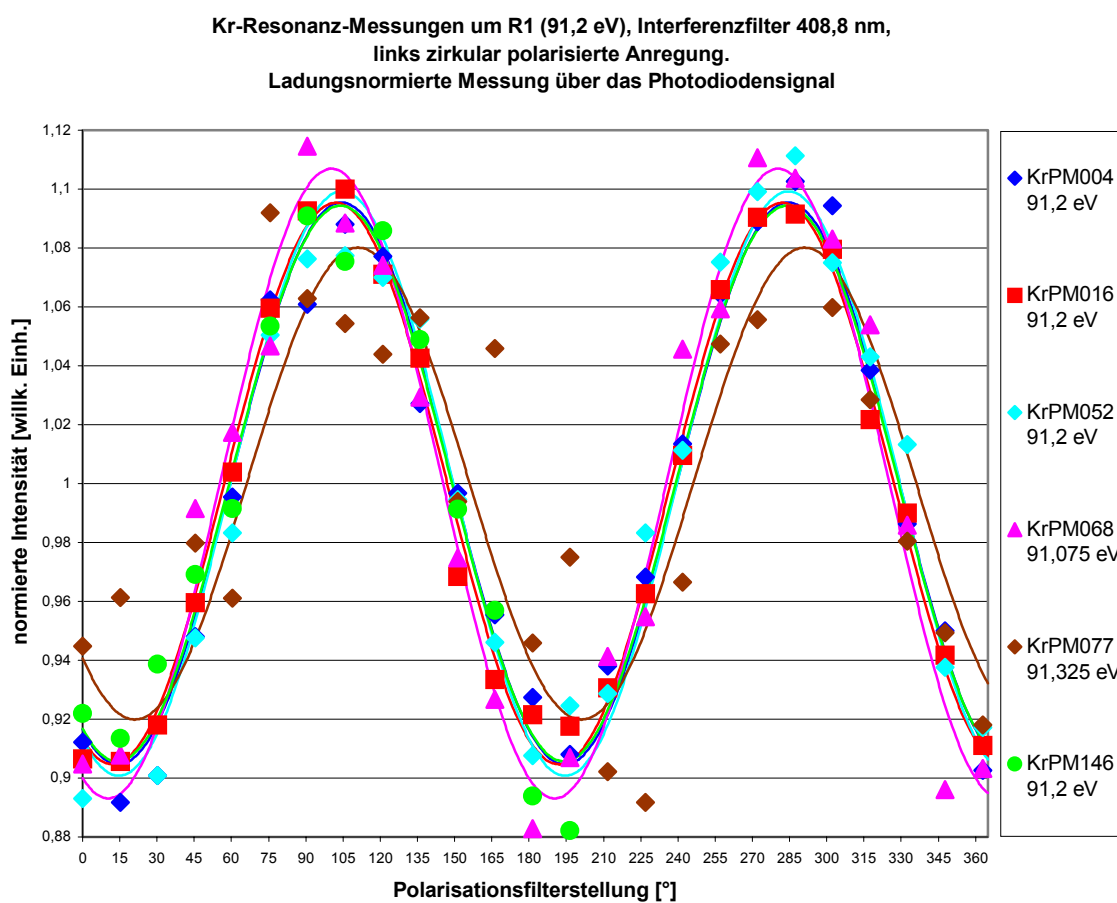


Abbildung 8.2: Normierte Amplitudenmodulationen der 408,833 nm-Linie mit links zirkular polarisierter Anregung und $\lambda/4$ -Plättchen im polarisationsempfindlichen Detektorzweig in 0° -Position um R1. Die Amplitudenmodulationen sind in 15° -Schritten gemessen. Die eingezeichneten Kurven stellen die zugehörigen gefitteten Sinus-Funktionen dar.

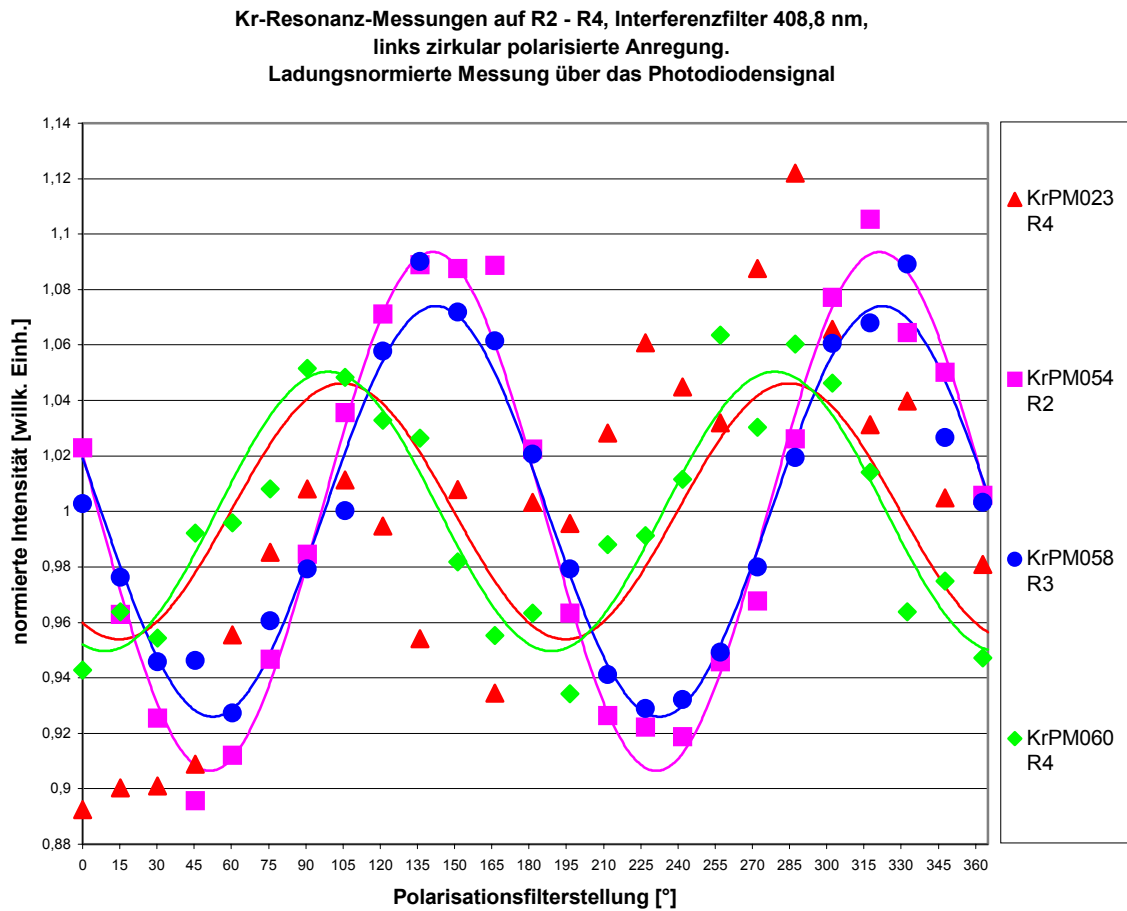


Abbildung 8.3: Normierte Amplitudenmodulationen der 408,833 nm-Linie mit links zirkular polarisierter Anregung und $\lambda/4$ -Plättchen im polarisationsempfindlichen Detektorzweig in 0° -Position auf R2 – R4. Die Amplitudenmodulationen sind in 15° -Schritten gemessen. Die eingezeichneten Kurven stellen die zugehörigen gefitteten Sinus-Funktionen dar.

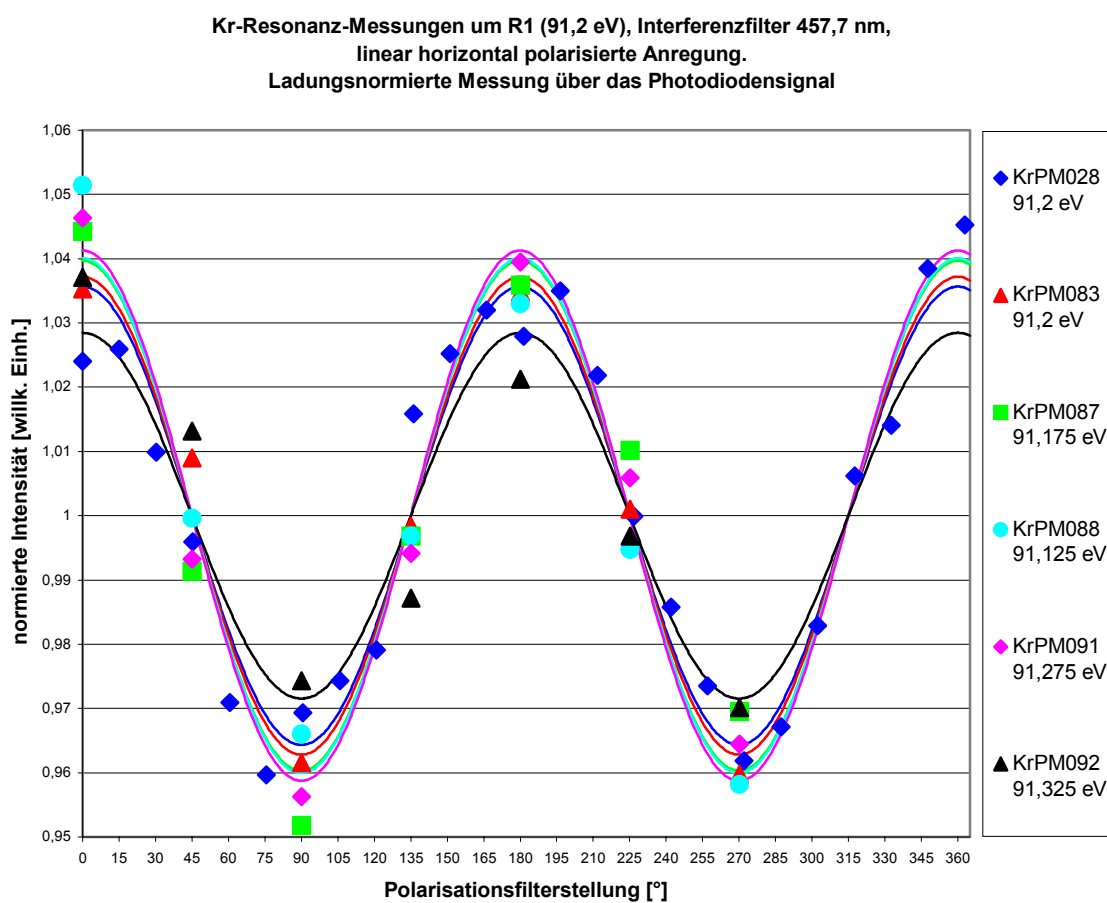


Abbildung 8.4: Normierte Amplitudenmodulationen der 457,720 nm-Linie mit linear horizontal polarisierter Anregung um R1. Die Amplitudenmodulationen sind in 15°- bzw. 45°-Schritten gemessen. Die eingezeichneten Kurven stellen die zugehörigen gefitteten Sinus-Funktionen dar.

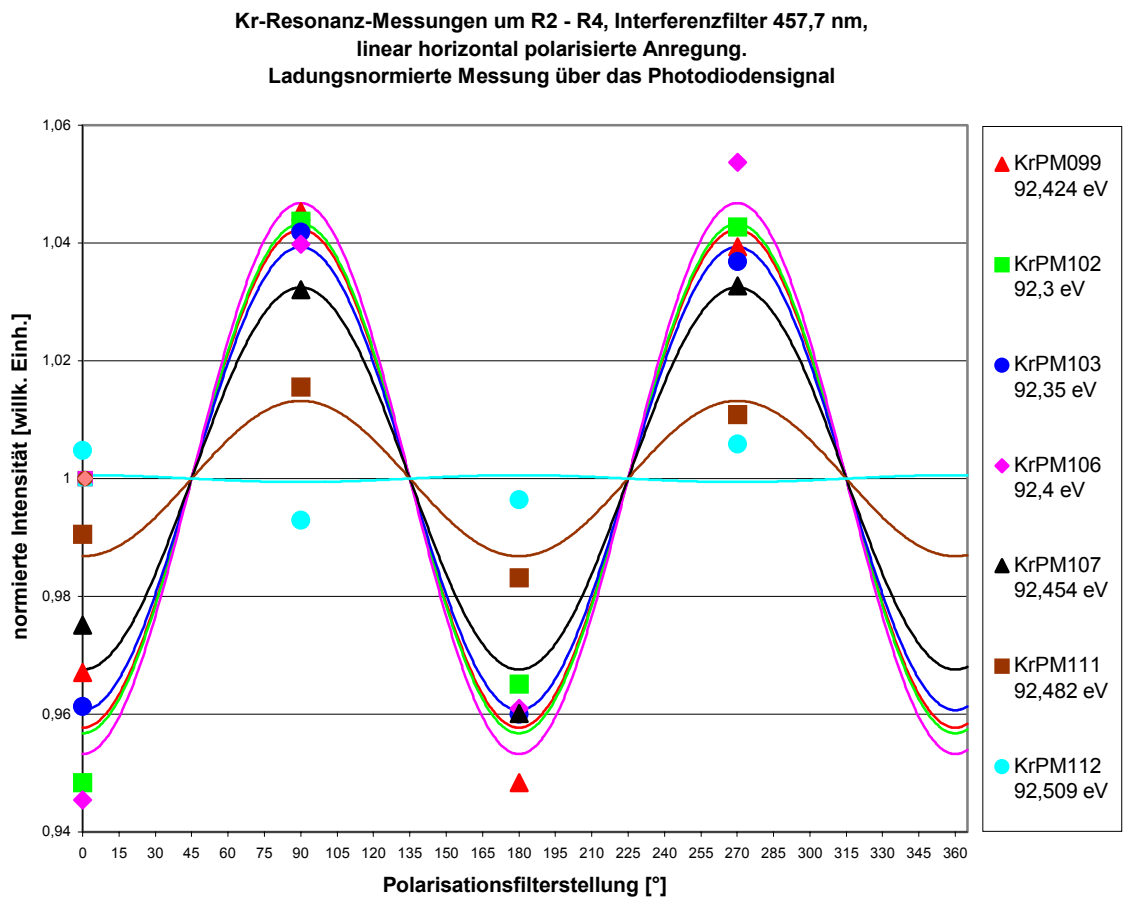


Abbildung 8.5: Normierte Amplitudenmodulationen der 457,720 nm-Linie mit linear horizontal polarisierter Anregung um R2 – R4. Die Amplitudenmodulationen sind in 90°-Schritten gemessen. Die eingezeichneten Kurven stellen die zugehörigen gefitteten Sinus-Funktionen dar.

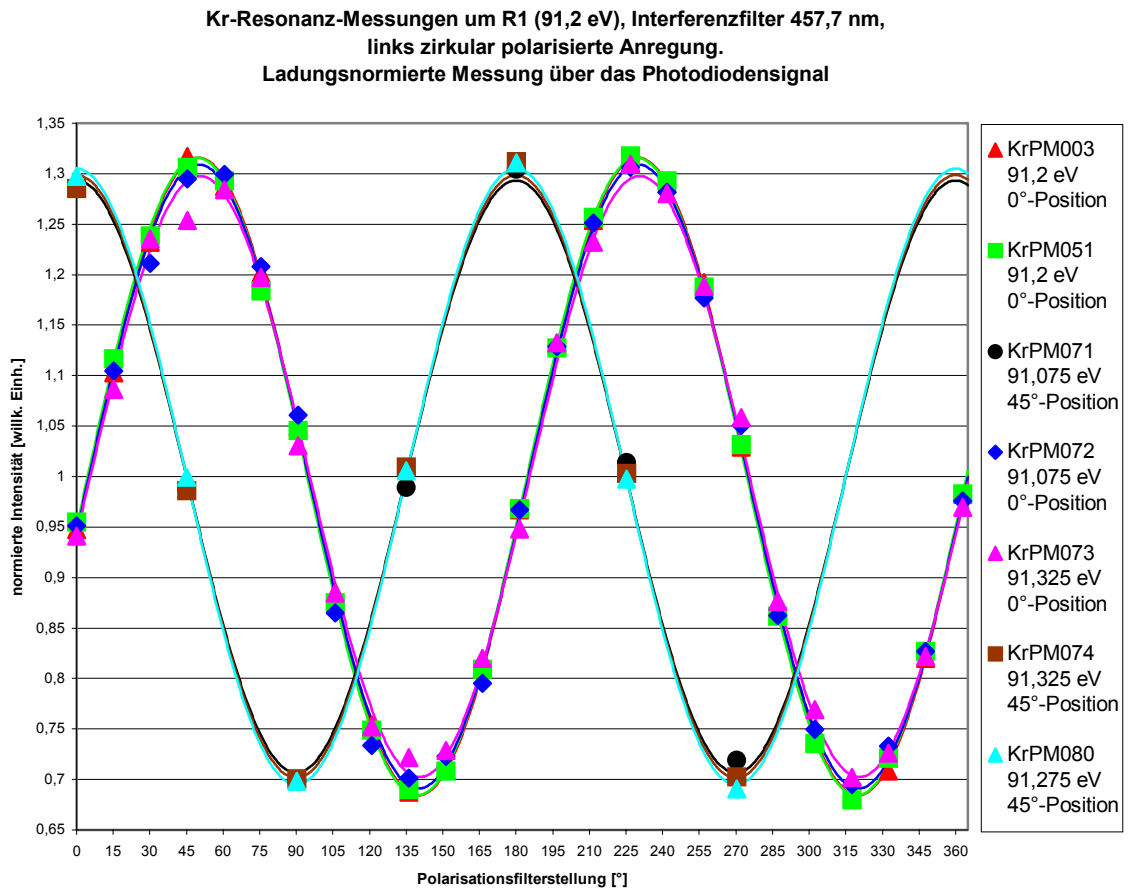


Abbildung 8.6: Normierte Amplitudenmodulationen der 457,720 nm-Linie mit links zirkular polarisierter Anregung um R1 mit angegebener Winkel-Position des $\lambda/4$ -Plättchens im polarisationsempfindlichen Detektorzweig. Die Amplitudenmodulationen sind in 15° - bzw. 45° -Schritten gemessen. Die eingezeichneten Kurven stellen die zugehörigen gefitteten Sinus-Funktionen dar.

Die mit links zirkular polarisierter Anregung gemessenen Amplitudenmodulationen der 457,720 nm-Linie aus Tabelle 8.3 KrPM063, -064 abseits der Resonanzen sind in Abbildung 5.12 und KrPM002, -055, -057, -061 auf R1 – R4 sind in Abbildung 4.11 dargestellt.

Literaturverzeichnis

- [Aks96a] H. Aksela, J. Jauhiainen, E. Kukkk, E. Nommiste, S. Aksela and J. Tulkki. *Electron correlation in the decay of resonantly excited $3d^1_{3/2,5/2} 5p$ states of krypton*. Phys. Rev. A, **53**: 290 (1996).
- [Aks96b] H. Aksela, J. Jauhiainen, E. Nommiste, S. Aksela, S. Sundin, A. Ausmees and S. Svensson. *Angular anisotropy of the Kr $3d^1_{3/2,5/2} 5p \rightarrow 4p^{-2} 5p$ resonant Auger decay studied by utilizing the Auger resonant Raman effect*. Phys. Rev. A, **54**: 605 (1996).
- [Arm00] G.B. Armen, H. Aksela, T. Aberg, and S. Aksela. *The resonant Auger effect*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **33**: R49 (2000).
- [Ber77] H.G. Berry, G. Gabrielse and A.E. Livingston. *Measurement of the Stokes parameters of light*. Appl. Optics, **16**: 3200 (1977).
- [Blu81] K. Blum. *Density Matrix Theory and Application*. Plenum, New York, (1981).
- [Bor65] M. Born. *Optik, ein Lehrbuch der elektromagnetischen Lichttheorie, zweite Auflage*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York (1965).
- [Cam96] R. Camilloni, M. Žitnik, C. Comicioli, K.C. Price, M. Zacchigna, C. Crotti, C. Ottaviani, C. Quaresima, and P. Perfetti. *Interference Effects in the Auger Decay of the Resonantly Excited $2p^{-1}_{3/2} 3d$ State of Argon*. Phys. Rev. Lett., **77**: 2646 (1996).

- [Dit76] R.W. Ditchburn. *Light, Third Edition, Vol.1*. Academic Press, London, New York, San Francisco (1976).
- [Dri78] W.G. Driscoll and W. Vaughan. *Handbook of Optics, Section 10, Polarization by J.M. Bennett and H.E. Bennett*. New York: McGraw-Hill Book Company (1978).
- [Ebe78] W. Eberhardt, G. Kalkoffen, C. Kunz. *Measurement of the Auger Decay after Resonance Excitation of Xe 4d and Kr 3d Resonance Lines*. Phys. Rev. Lett., **41**: 156 (1978).
- [Fey91] R.P. Feynman, R.B. Lighton und M. Sands. *Vorlesungen über Physik, Band 1: Mechanik, Strahlung, Wärme*. R. Oldenbourg Verlag (1991).
- [Hec74] E. Hecht. *Optics, second Edition*. Addison-Wesley Publishing Company (1988).
- [Kam04] S. Kammer. *Resonanzen bei photoneninduzierter schwellennaher Ar⁺ 4s-Satelliten Produktion. Dissertation*,
I. Physikalisches Institut der Justus-Liebig-Universität Giessen (2004).
- [Kab03] N.M. Kabachnik. Private Mitteilungen (2003).
- [Kee03] P. O' Keeffe, S. Aloise, M. Meyer, and A.N. Grum-Grzhimailo. *Circular polarization of ion fluorescence completing the analysis of resonant Xe* 4d¹_{5/2} 6p Auger decay*. Phys. Rev. Lett., **90**: 023002 (2003).

- [Kit01] M. Kitajima, M. Okamoto, Y. Shimizu, H. Chiba, S. Fritzsche, N.M. Kabachnik, I.P. Sazhina, F. Koike, T. Hayaishi, H. Tanaka, Y. Sato and K. Ueda. *Experimental and theoretical study of the Auger Cascade following $3d \rightarrow 5p$ photoexcitation in Kr*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **34**: 3829 (2001).
- [Kiv93] A. Kivimäki, A. Aes de Brito, S. Aksela, H. Aksela, O.-P. Sairanen, A. Ausmees, S.J. Osborne, L.B. Dantas, S. Svensson. *Subnatural linewidth in the Kr $M_5N_{2,3}N_{2,3}$ and Xe $N_5O_{2,3}O_{2,3}$ resonant Auger spectra*. Phys. Rev. Lett., **71**: 4307 (1993)
- [Lag00] B.M. Lagutin, I.D. Petrov, Ph.V. Demekhin, V.L. Sukhorukov, F. Vollweiler, H. Liebel, A. Ehresmann, S. Lauer, H. Schmoranzer, O. Wilhelmi, B. Zimmermann and K.-H. Schartner. *Alignment of ions after autoionization decay of atomic resonances: I. The $4d^9_{5/2} 6p_{3/2} (J = 1)$ resonance in Xe*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **33**: 1337 (2000).
- [Lag03a] B.M. Lagutin, Ph.V. Demekhin, V.L. Sukhorukov, A. Ehresmann and H. Schmoranzer. *Interference effects in Auger spectra at the $3d^9 np$ resonances in Kr*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **36**: L163 (2003).
- [Lag03b] B.M. Lagutin, I.D. Petrov, V.L. Sukhorukov, Ph.V. Demekhin, B. Zimmermann, S. Mickat, S. Kammer, K.-H. Schartner, A. Ehresmann, Yu.A. Shutov and H. Schmoranzer. *The interference effects in the alignment and orientation of the Kr II $4p^4 5p$ states following Kr I $3d^9 np$ resonance excitation*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **36**: 3251 (2003).
- [Lag04] B.M. Lagutin. Private Mitteilungen (2004).

- [Lie01] H. Liebel. *Spektroskopische Untersuchungen der Neutraldissoziation des Sauerstoffs nach Anregung mit monochromatisierter Synchrotronstrahlung: Absolute und relative Emissionsquerschnitte im Fluoreszenzbereich von 90 nm bis 130 nm. Dissertation,*
Fachbereich Physik, Universität Kaiserslautern (2001).
- [Mar97] N. Mårtensson, M. Weinelt, O. Karis, M. Magnuson, N. Wassdahl, A. Nilsson, J. Stöhr, and M. Samant. *Coherent and incoherent processes in resonant photoemission.* Appl. Phys. A, **56**: 159 (1997).
- [Mar01] R.R.T. Marinho, B. Björneholm, S.L. Sorensen, I. Hjelte, S. Sundin, M. Bässler, S. Svensson, and A. Naves de Brito. *Interference between direct and resonant channels in near-resonance photoemission in Argon.* Phys. Rev. A, **63**: 032514 (2001)
- [Men98] G. Mentzel. *Resonanzverstärkung und Alignment bei der Photoproduktion von $Ar^+ 3s^2 3p^4 4p$ -Satelliten. Dissertation,*
I. Physikalisches Institut der Justus-Liebig-Universität Giessen (1998).
- [Mic04] S. Mickat. Private Mitteilungen (2004).
- [Rub96] J.-E. Rubensson, M. Neeb, A. Bringer, M. Biermann, and W. Eberhardt. *Electronic state-lifetime interference observed at Ne K inter-resonance excitation.* Chem. Phys. Lett., **257**: 447 (1996).
- [Sch03] R.H. Schill, D. Hasselkamp, S. Kammer, S. Mickat, B. Zimmermann, K.-H. Schartner, A. Ehresmann, H. Schmoranzler, M. Schlüter, Yu.A. Schutov, B.M. Lagutin and V.L. Sukhorukov. *Partial wave analysis of the $Kr I 3d^9_{5/2} 5p_{3/2} \rightarrow Kr II 4p^4 (^1D)5p^2 F_{7/2}$ decay, based on orientation and alignment transfer.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **36**: L57 (2003).

- [Sch92] V. Schmidt. *Photoionization of atoms using synchrotron radiation*. Rep. Prog. Phys., **55**:1483 (1992).
- [Sta94] U. Staude. *Entwicklung und Anwendung eines modularen Programms zur zweidimensionalen Spektrenaufnahme und Spektrenanalyse*. **Diplomarbeit**, I. Physikalisches Institut der Justus-Liebig-Universität Giessen (1994).
- [Sto63] J.M. Stone. *Radiation and Optics*. New York: McGraw-Hill Book Company (1963).
- [Str52] J. Strong. *Procedures in experimental physics*. Plenum, New York-Washington (1952).
- [Str68] A.R. Striganov, N.S. Sventitskii. *Tables of spectral lines of neutral and ionized atoms*. New York.: Prentice-Hall (1968).
- [Tul94] J. Tulkki, H. Aksela and N.M. Kabachnik. *Influence of the initial- and final-state configuration interaction on the anisotropy of the resonant Auger decay of Kr $3d^1 5p$ and Xe $4d^1 6p$ states*. Phys. Rev. A, **50**: 2366 (1994).
- [Wil92] K. Wille. *Physik der Teilchenbeschleuniger und Synchrotron-Strahlungsquellen*. Teubner Studienbücher (1992).
- [Wil99] O. Wilhelmi. *Fluoreszenzspektroskopische Untersuchung der Ionisation und Anregung von atomarem und molekularem Sauerstoff*. **Dissertation**, I. Physikalisches Institut der Justus-Liebig-Universität Giessen (1999).
- [Zim98] B. Zimmermann. *Fluoreszenzspektroskopische Messungen der photoneninduzierten $Ne^+ 2s^2 2p^4 3p (^2,4P)$ -Satellitenproduktion im Bereich der Anregungsschwellen*. **Diplomarbeit**, I. Physikalisches Institut der Justus-Liebig-Universität Giessen (1998).

- [Zim00] B. Zimmermann, O. Wilhelmi, K.-H. Schartner, F. Vollweiler, H. Liebel, A. Ehresmann, S. Lauer, H. Schmoranzer, B.M. Lagutin, I.D. Petrov and V.L. Sukhorukov. *Alignment of ions after autoionization decay of atomic resonances: II. The $3d^{\circ}_{5/2} 5p$ ($J = 1$) resonance in Kr.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **33**: 2467 (2000)
- [Zim03] B. Zimmermann. *Dynamische Prozesse bei der photoneninduzierten Satellitenproduktion: Direkte Besetzung und Autoionisation doppelt angeregter Zustände. Dissertation,*
I. Physikalisches Institut der Justus-Liebig-Universität Giessen (2003).

Danksagung

Die vorliegende Arbeit wurde am I. Physikalischen Institut der Justus-Liebig-Universität Gießen, das unter der Leitung von Herrn Prof. Dr. B. Meyer steht, und bei der Berliner Elektronenspeicherring-Gesellschaft für Synchrotronstrahlung mbH (BESSY II) angefertigt.

An dieser Stelle möchte ich allen danken, die zur Fertigstellung dieser Arbeit hilfreich beigetragen haben.

In erster Linie gilt mein Dank Herrn Prof. Dr. K.-H. Schartner für die Möglichkeit, diese Arbeit in seiner Arbeitsgruppe anzufertigen, die interessante Themenstellung, die umfassende Betreuung sowie für die vielen hilfreichen und verständnisfördernden Diskussionen. Sein mehr als nur vorbildliches Engagement war die Grundlage für den erfolgreichen Abschluss dieser Arbeit. Im Rahmen dieser Arbeit ermöglichte mir Herr Prof. Dr. K.-H. Schartner immer wieder, meine Ergebnisse auf nationalen und internationalen Konferenzen zu präsentieren und stellte die dafür erforderlichen Mittel zur Verfügung.

Herrn Prof. Dr. D. Hasselkamp danke ich besonders für viele hilfreiche Diskussionen und Hilfestellungen bei der Beschreibung und Simulation von optischen Analysemethoden, beim Verständnis der Gleichungen für das Detektor-Koordinatensystem und der Fehlerrechnung.

Ausnahmslos allen Mitgliedern unserer Arbeitsgruppe möchte ich für die stets gute und freundschaftliche Zusammenarbeit, das angenehme Arbeitsklima, die konstruktiven Diskussionen und die vielfältigen Hilfestellungen danken. Besonders dankbar bin ich Herrn Dr. Sven Kammer für sein Engagement im Bezug auf die konstruktive Weiterentwicklung der Berliner Meßapparatur. Ebenso bin ich ihm und Herrn Dipl.-Phys. Sascha Mickat für die Unterstützung auf den Meßzeiten bei BESSY II zu großem Dank

verpflichtet. An dieser Stelle bedanke ich mich auch bei unserem Techniker Herrn Günther Trylat, der bei technischen und konstruktiven Fragen in Gießen und Berlin immer mit Rat und Tat zur Seite stand. Diesen Kollegen ist es zu verdanken, dass die Experimente in Berlin trotz zahlreicher Probleme immer wieder ein voller Erfolg waren. Nicht zu vergessen sind natürlich auch Herr Dr. Bernd Zimmermann, Herr Dipl.-Phys. Uwe Bursik und unsere Sekretärin Helga Walbott.

Herrn Dr. B.M. Lagutin und Herrn Prof. Dr. V.L. Sukhorukov von der Universität Rostov danke ich für die gute Zusammenarbeit hinsichtlich der theoretischen Begleitung dieser Arbeit.

Für die gute Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe aus Kaiserslautern bedanke ich mich bei Herrn Priv. Doz. Dr. A. Ehresmann, Herrn Prof. Dr. H. Schmoranzler, sowie den Kollegen Y. Schutov, M. Schlüter, L. Werner und S. Klumpp.

Frau Priv. Doz. Dr. Angelika Polity danke ich für das immer dringende und schnell erledigte Ausmessen der verwendeten Interferenzfilter.

Den Leitern der Werkstätten Herrn H. Hausner, Herrn W. Kuhl, Herrn J. Becker, Herrn T. Nimmerfroh und deren Mitarbeitern, von denen ich besonders Herrn Peter Schneider, Herrn Udo Bachmann und Herrn Björn Bellof erwähnen möchte, danke ich für ihre Beratung und die Ausführung der technischen Aufträge.

Zu guter Letzt möchte ich mich bei meinen Eltern, Ingrid und Walter Schill, meiner Schwester Ulrike, sowie allen meinen Freunden bedanken, die mich während des gesamten Studiums immer vorbehaltlos unterstützt haben und ohne die dieser von mir eingeschlagene Weg undenkbar gewesen wäre.