

Resonanzen bei photoneninduzierter schwelennaher

Ar^+ 4s-Satelliten Produktion

Sven Kammer

(Dissertation, Universität Giessen, April 2004)



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

Resonanzen bei photoneninduzierter schwellennaher

Ar⁺ 4s-Satelliten Produktion

Inauguraldissertation

zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften

der Justus – Liebig – Universität Giessen

Fachbereich 07

(Mathematik und Informatik, Physik, Geographie)

vorgelegt von

Sven Kammer
aus Hungen – Steinheim

I. Physikalisches Institut
der Justus - Liebig – Universität Giessen
April 2004

Dekan: Prof. Dr. V. Metag

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

II. Berichterstatter: Prof. Dr. A. Müller

Tag der mündlichen Prüfung: 14.05.2004

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Einleitung | 1 |
| 2 | Theoretische Grundlagen | 5 |
| 2.1 | Wechselwirkung von Photonen mit Atomen | 5 |
| 2.2 | Beobachtungsgrößen der Fluoreszenzstrahlung | 7 |
| 2.3 | Beschreibung atomarer Spektren | 10 |
| 2.3.1 | Rydbergserien und Quantendefekte | 11 |
| 2.3.2 | Das Wirkungsintegral im Rahmen der halbklassischen Näherung | 14 |
| 2.3.3 | Die Bohr-Sommerfeldsche Quantisierungsvorschrift | 16 |
| 2.3.4 | Berechnung der Energieniveaus E_n für spezielle Fälle | 17 |
| 2.3.5 | Störer in Rydbergserien | 19 |
| 2.4 | Theoretischer Ansatz der Berechnung von Photoionisationswirkungsquerschnitten | 22 |
| 3 | Experiment | 25 |
| 3.1 | Synchrotronstrahlung | 25 |
| 3.1.1 | Erzeugung von intensiver Strahlung in Undulatoren | 26 |
| 3.1.2 | Polarisierung der Synchrotronstrahlung | 26 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 3.1.3 | Speicherringe zur Erzeugung von Synchrotronstrahlung | 30 |
| 3.1.3.1 | Dipolmagnete | 31 |
| 3.1.3.2 | Quadrupolmagnete | 32 |
| 3.1.3.3 | Sextupolmagnete | 34 |
| 3.1.4 | Beamlines | 35 |
| 3.2 | Apparativer Aufbau | 36 |
| 3.2.1 | Veränderungen am Traggestell | 37 |
| 3.2.1.1 | Modifikationen an der Tragkonstruktion | 37 |
| 3.2.1.2 | Gleitfüße zur Justage | 39 |
| 3.2.2 | Strahldiagnostikelemente | 40 |
| 3.3 | Gastargetzellenblock | 40 |
| 3.3.1 | Vakuumtechnische Veränderungen | 41 |
| 3.3.2 | Strahldiagnostik im Targetzellenblock | 42 |
| 3.3.3 | Zusätzliche Beobachtungsöffnungen im Targetzellenblock | 44 |
| 3.3.4 | Gastargetzelleneinschub | 46 |
| 3.4 | Elektronenkanonenwürfel | 46 |
| 3.5 | Monochromatoren und Detektionssysteme | 48 |
| 3.5.1 | Die Monochromatoren und Detektoren | 48 |
| 3.5.2 | Optische Systeme | 50 |
| 3.6 | Magnetfelder | 52 |
| 4 | Messmethode | 55 |
| 4.1 | Photoneninduzierte Fluoreszenzspektroskopie | 55 |
| 4.2 | Geometrie des Aufbaus | 56 |
| 4.2.1 | Bestimmung des Winkelasymmetrieparameters aus den experimentellen Daten | 58 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 4.3 | Verarbeitung der Messdaten | 60 |
| 4.4 | Absolutkalibrierung der Energie der anregenden Photonen | 61 |
| 4.5 | Absolutkalibrierung der Wirkungsquerschnitte | 62 |
| 4.5.1 | Die $\text{Ar}^+ 4s \ ^2,4L_J$ Satelliten | 62 |
| 4.5.2 | Die Absorptionsmessungen | 68 |
| 4.6 | Fehlerbetrachtung | 70 |
| 4.6.1 | Wirkungsquerschnitte | 70 |
| 4.6.2 | Energielagen der Autoionisationsresonanzen | 71 |
| 5 | Ergebnisse / Diskussion | 73 |
| 5.1 | Überblick des untersuchten Energie- und Wellenlängenbereichs | 73 |
| 5.2 | Wirkungsquerschnitte und Energieabhängigkeit von $\text{Ar}^+ 4s$ – Satelliten untersucht mit hoher Primärauflösung | 79 |
| 5.2.1 | Der gesamte untersuchte Primärenergiebereich | 80 |
| 5.2.2 | Der Primärenergiebereich um 32,5 eV | 87 |
| 5.2.3 | Der Primärenergiebereich von 32,6 bis 32,8 eV | 90 |
| 5.2.4 | Untersuchungen im Bereich des $4s \ (^2D) 5p$ – Störers und der 2P – Schwelle | 95 |
| 5.2.5 | Intensitätsverlauf der 4P und 2P – Satelliten im Primärenergiebereich von 32,82 bis 32,96 eV – Beobachtung der Intensität I_{90° | 103 |
| 5.3 | Absorptionsmessungen mit höchster Primärauflösung | 105 |
| 5.4 | Zusammenfassende Diskussion der Ergebnisse der $\text{Ar}^+ 4s$ – Satellitenmessungen | 107 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 5.5 | Bestimmung des Winkelasymmetrieparameters der Ar^+ ($4p - 4s$) Fluoreszenzstrahlung | 108 |
| 5.5.1 | Übergänge aus Zuständen mit Gesamtdrehimpuls $J_i = 1/2$ | 111 |
| 5.5.2 | Übergänge aus Zuständen mit Gesamtdrehimpuls $J_i = 3/2$ | 113 |
| 5.5.3 | Übergänge aus Zuständen mit Gesamtdrehimpuls $J_i = 5/2$ | 117 |
| 6 | Zusammenfassung | 121 |
| 7 | Anhang | 125 |
| 7.1 | Energieabhängigkeit von Ar^+ $4s, 3d$ – Satelliten und Winkelverteilung der emittierten Fluoreszenzstrahlung untersucht mit mittlerer Primärauflösung | 125 |
| 7.1.1 | Übergänge aus Zuständen mit Gesamtdrehimpuls $J_i = 1/2$ | 129 |
| 7.1.2 | Übergänge aus Zuständen mit Gesamtdrehimpuls $J_i = 3/2$ in Zustände mit $J_f = 3/2$ | 133 |
| 7.1.3 | Übergänge aus Zuständen mit Gesamtdrehimpuls $J_i = 3/2$ in Zustände mit $J_f = 1/2$ | 137 |
| 7.1.4 | Übergänge aus Zuständen mit Gesamtdrehimpuls $J_i = 5/2$ in Zustände mit $J_f = 3/2$ | 142 |
| 7.1.5 | Übergänge deren Wellenlängen nicht spektroskopisch getrennt werden können | 146 |
| 7.2 | Technische Zeichnungen Gastargetzelle | 151 |
| 7.2.1 | Aluminiumgastargetzelleneinschub | 152 |
| 7.2.2 | Mu-Metallgastargetzelleneinschub | 154 |
| 7.2.3 | Gastargetzellenblock | 160 |
| | Literaturverzeichnis | 163 |

1 Einleitung

Die Untersuchung der Wechselwirkung von Photonen mit Atomen dient in jüngster Zeit als Testfall für das Studium von Elektronenkorrelationen. Bei der Anregung von Atomen mit Photonen handelt es sich um eine Dipolanregung und aufgrund des Charakteristikums des Dipoloperators um eine Einelektronenanregung. Zeigen sich in Experimenten Phänomene wie Satellitenzustände oder Autoionisation, also Zweielektronenprozesse, so ist die Möglichkeit der Untersuchung von Elektronenkorrelationsprozessen gegeben. Damit kann man die Abweichungen vom Modell unabhängiger Elektronen erforschen. Die zur Verfügung stehenden experimentellen Methoden reichen von einfachen totalen Absorptionsmessungen über die klassische Photoelektronenspektroskopie (PES) bis zur Fluoreszenzspektroskopie (PIFS). Dieses hier verwendete Analyseverfahren ist als Alternative zu der Photoelektronenspektroskopie zu sehen. Die Anwendung von fluoreszenzspektroskopischen Methoden erlaubt in Verbindung mit intensiven und brillanten Synchrotronstrahlungsquellen zunächst eine Untersuchung der energetischen Strukturen des Anregungs- und Ionisationswirkungsquerschnitts von Atomen.

Experimente dazu werden im Rahmen dieser Arbeit im Schwellenenergiebereich der Ar^{+*} – Satelliten durchgeführt. Die in diesem Bereich häufig auftretenden Resonanzen kann man in Rydbergserien zusammenfassen. Die Resonanzstrukturen sind komplex, da sich Rydbergserien zu allen drei Core - Werten ^1S , ^1D und ^3P der $3s^23p^4$ – Konfiguration ausbilden. Eine Fülle dieser Rydbergserien wurde bereits früh mittels totaler Absorptionsmessungen [Mad69], [Bai92] identifiziert. Diese Experimente liefern jedoch keine Informationen über die Zerfallskanäle, die zur Besetzung der einzelnen Satellitenzustände führen. Eine Analyse der partiellen Kanäle wurde erstmals durch Synchrotronstrahlungsquellen der zweiten Generation möglich. Es wurden sowohl PES – [Bec88], [Hal89], [Wil89], als auch PIFS – Messungen [Sch88] durchgeführt.

Aus Gründen der damaligen Primärauflösung ist man nicht in der Lage diese Daten auf der Basis von isolierten Autoionisationsresonanzen zu interpretieren. Jedoch sind diese früheren Experimente als Orientierungshilfe bei der Auswahl von interessanten Energiebereichen für detailliertere Untersuchungen sehr hilfreich. Diese Arbeit konzentriert sich auf die niedrigsten Satellitenzustände. Dazu sind im Argon die $\text{Ar}^+ 3s^2 3p^4 (^3P) 4s$ – Satelliten zu zählen. Bei höherenergetischen Satelliten entsteht aufgrund des Überlapps der Rydbergserien ein komplexes Resonanzspektrum.

Die $\text{Ar}^+ 4s$ – Satellitenzustände zerfallen unter Aussendung von Photonen im Spektralbereich des Vakuumultravioletten auf das $\text{Ar}^+ 3s^2 3p^5 ^2P_J$ – Niveau. In dem Energiebereich direkt an der Schwelle der Satellitenzustände treten keine Kaskaden aus höher angeregten Ar^+ – Zuständen auf. Von besonderem Interesse sind die Besetzungsunterschiede der 2L_J – Kanäle und der 4L_J – Kanäle. Bei Vernachlässigung relativistischer Effekte (Spin-Bahn-Kopplung) ist die Besetzung der 4L_J – Kanäle verboten.

Theoretische Betrachtungen des energieabhängigen Emissionswirkungsquerschnitts unter besonderer Berücksichtigung von Autoionisationsresonanzen existieren für die hier untersuchten $\text{Ar}^+ 4s$ – Satellitenzustände leider nicht. Solche Berechnungen sind jedoch für die vergleichbaren $\text{Kr}^+ 5s$ – Satellitenzustände z.B. von [Suk94] durchgeführt worden und zwar mit einer Kombination aus Konfigurationswechselwirkung (CI) und Vielteilchenstörungstheorie (MBPT) durchgeführt. Basierend auf dieser Methode sind auch $\text{Ar}^+ 3s$ – Photoionisationswirkungsquerschnitte ermittelt worden [Lag99]. Am Argon existieren weiterhin theoretische Beschreibungen des Wirkungsquerschnitts der $4p$ – Satellitenzustände von [Har99] mittels einer Erweiterung der R – Matrix Methode durch Multikonfigurations- Hartree – Fock (MCHF) Orbitale. Für Neon sind die Arbeiten von [Gor98] und [Sch96] mit einer Kombination aus R – Matrix Methode und Mehrkanal Quantendefekttheorie (MQDT) für die vergleichbare $\text{Ne}^+ 2s^2 2p^4 (^3P) 3s$ – Konfiguration verfügbar.

Diese Arbeit soll durch Messung absoluter photoneninduzierter Emissionswirkungsquerschnitte eine komplette Datenbasis für eine theoretische Behandlung der Besetzungs- und Zerfallswege der Ar^+ 4s – Satellitenzustände liefern.

Um nun die Dynamik der Elektronen beim Photoionisationsprozess detailliert experimentell zu untersuchen, muss man die Besetzung der Partialwellen messen, die über Bahndrehimpuls und totalen Drehimpuls der Photoelektronen unterschieden werden. Es stehen folgende alternative experimentelle Möglichkeiten zu deren Analyse zur Verfügung:

- Die klassische Photoelektronenspektroskopie (PES) mit Spinanalyse.
- Die photoneninduzierte Fluoreszenzspektroskopie (PIFS) mit Bestimmung des Alignmentparameters A_{20} und des Orientierungsparameters O_{10} .

Messungen von A_{20} und O_{10} sind im sichtbaren Spektralbereich der emittierten Fluoreszenzstrahlung gut möglich. Problematisch ist zur Zeit allerdings die Messung von O_{10} , da zirkular polarisierte anregende Strahlung bei BESSY II im benötigten Primärenergiebereich nur an Dipolbeamlines mit zu geringem Primärfluss zur Verfügung steht.

Die Untersuchung der Ar^+ 4s – Satellitenzustände wirft durch die Zerfallskanäle im Bereich des VUV das Problem der Polarisationsanalyse der emittierten Strahlung auf. Bei der Verwendung des Verfahrens der sukzessiven um 90° gedrehten Polarisations Ebene der anregenden linear polarisierten Strahlung kann man das Problem der Polarisationsanalyse der Fluoreszenzstrahlung umgehen. Durch Vergleich der Fluoreszenzintensitäten lässt sich mit dieser Methode der Alignmentparameter A_{20} bestimmen. Dieses Verfahren ist in [Mag95] und [Men98] angewandt.

Die niedrigsten Ar^+ – Satellitenzustände, bei denen Übergänge in ein tieferes Niveau unter Emission im sichtbaren Spektralbereich stattfinden, sind die Ar^+ $3s^23p^4$ (3P) $4p$ 2,4L_J – Zustände. An diesen Zuständen wurden zahlreiche Experimente zur Partialwellenanalyse mittels PIFS durchgeführt (z.B. [Men98],

[Yen97], [Yen01] und [McL02]). In den Ergebnissen von Mentzel [Men98], aus Strahlzeiten bei BESSY I, zeigt sich eine starke Variation von A_{20} im engen Energiebereich um 36,6 eV. Sie lässt eindeutig auf eine Änderung der Partialwellenzusammensetzung, bis hin zur Dominanz einer $s_{1/2}$ Partialwelle, schließen. Im Rahmen dieser Arbeit sollte bei der gesteigerten Auflösung von BESSY II untersucht werden, ob diese resonanzartige Änderung von A_{20} an Deutlichkeit gewinnt. Hierzu war das von Mentzel eingesetzte, oben beschriebene Verfahren durch die Verwendung eines Wollastonprismas zu ersetzen. Dies erlaubt die simultane Messung der beiden Polarisationskomponenten der Fluoreszenzstrahlung.

Obwohl bei den niedrigen Anregungsenergien dieser Arbeit nicht direkt anwendbar, sollten die apparativen Weiterentwicklungen der photoneninduzierten Fluoreszenzspektroskopie die Voraussetzungen für eine komplette Partialwellenanalyse mit Hilfe der Fluoreszenz – Polarimetrie schaffen (Messung von O_{10} und A_{20}). Die Apparatur wurde bei der fluoreszenzspektroskopischen und -polarimetrischen Analyse des Zerfalls der $\text{Kr}^+ 3d^9 5p$ – Resonanzen, welche bei Anregungsenergien um 92 eV liegen, innerhalb der Arbeitsgruppe erfolgreich eingesetzt [Sch03].

Der Beschreibung dieses experimentellen Aufbaus wird ein kurzer theoretischer Überblick der untersuchten Wechselwirkungsprozesse vorangestellt. In diesem Teil werden die Beobachtungsgrößen der Fluoreszenz – Polarimetrie eingeführt und die Interpretation atomarer Spektren von Mehrelektronensystemen erläutert. An den experimentellen Teil anschließend findet man die Ergebnisse und deren Diskussion.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 Wechselwirkung von Photonen mit Atomen

Bei der Wechselwirkung von Photonen mit dem Edelgasatom Argon, im folgenden mit Target bezeichnet, sind zwei Prozesse dominant:

- Ionisation des Targetatoms
- Anregung des Targetatoms.

Diese beiden Prozesse sind im Rahmen der Dipolnäherung verständlich. Im ersten Fall handelt es sich um eine Kontinuumsanregung, im zweiten Fall muss der Resonanzbedingung genüge getan werden.

Die in dieser Arbeit untersuchten wesentlich schwächeren Prozesse sind jedoch nicht mehr in Dipolnäherung zu verstehen, da es sich immer um photoneninduzierte Zweielektronen – Anregungen handelt. Es können dabei entweder

- zwei Elektronen entfernt und damit doppelt ionisiertes Argon produziert,
- ein Elektron ins Kontinuum und ein anderes in einen angeregten Zustand gebracht oder
- beide Elektronen in angeregte Zustände gesetzt werden.

Dabei kann in einem Folgeschritt Fluoreszenzstrahlung emittiert werden. Diese Strahlung trägt die Information des abgelaufenen Ionisations- und Anregungsprozesses mit sich, so dass man durch genaue Analyse der Fluoreszenz etwas über das Targetatom/-ion, oder auch über das eventuell emittierte Photoelektron erfahren kann. Im Rahmen dieser Arbeit werden nur Prozesse betrachtet, bei denen ein System aus Targetion und Photoelektron entsteht. Die Information über das Photoelektron erhält man indirekt.

Beobachtet man die Fluoreszenzstrahlung, so kennt man den Ausgangszustand des Ions. In Verbindung mit der Kenntnis der Energie des anregenden Photons ist damit auch die Energie des emittierten Photoelektrons bekannt.

Unter Berücksichtigung von Drehimpuls- und Paritätserhaltung können drei mögliche Photoelektronenpartialwellen entstehen (Targetatom im Grundzustand, Wechselwirkung mit einem Photon).

Messungen des Orientierungsparameters O_{10} und des Alignmentparameters A_{20} (siehe Kap. 2.2) erlauben es Aussagen über die relative Beteiligung dieser drei Partialwellen zu treffen.

Den einfach angeregten Zuständen des Ions (Satelliten genannt) stehen im hier betrachteten Anregungsprozess prinzipiell zwei Besetzungswege offen. Zum einen die direkte Anregung, bei der durch ein Photon die Ionisation und Anregung des Targetatoms verursacht wird. Zum anderen die indirekte Anregung über Autoionisation, bei der das eine Photon im ersten Schritt zwei Elektronen gleichzeitig anregt. Dieser doppelt angeregte Zustand zerfällt analog zum Augerprozess unter Emission eines Elektrons z.B. in einen angeregten Ionenzustand. Das Intensitätsverlauf des Wirkungsquerschnitts in Abhängigkeit der Primärenergie zeigt in diesem Fall eine untergrundfreie, resonanzartige Struktur. Treten beide Besetzungsmechanismen in vergleichbarer Größenordnung auf, so sollte man im beobachteten Fluoreszenzsignal Interferenzstrukturen sehen, die sich als asymmetrische Fanoprofile zeigen.

Der Besetzungsmechanismus der in den folgenden Kapiteln beschriebenen Satellitenzuständen ist dominiert von der Autoionisationen doppelt angeregter Zustände. Ist die Energie dieses doppelt angeregten Zustands höher als die Summe der Ionisierungsenergie des Atoms und der Energie des Satellitenzustands im Ion, so kann der Zustand durch Autoionisation besetzt werden. Als Beispiel ist in Abb. 2.1 der Autoionisationsprozess für die Ar $3s^2 3p^4 4s^2 P_j np$ – Rydbergserien skizziert.

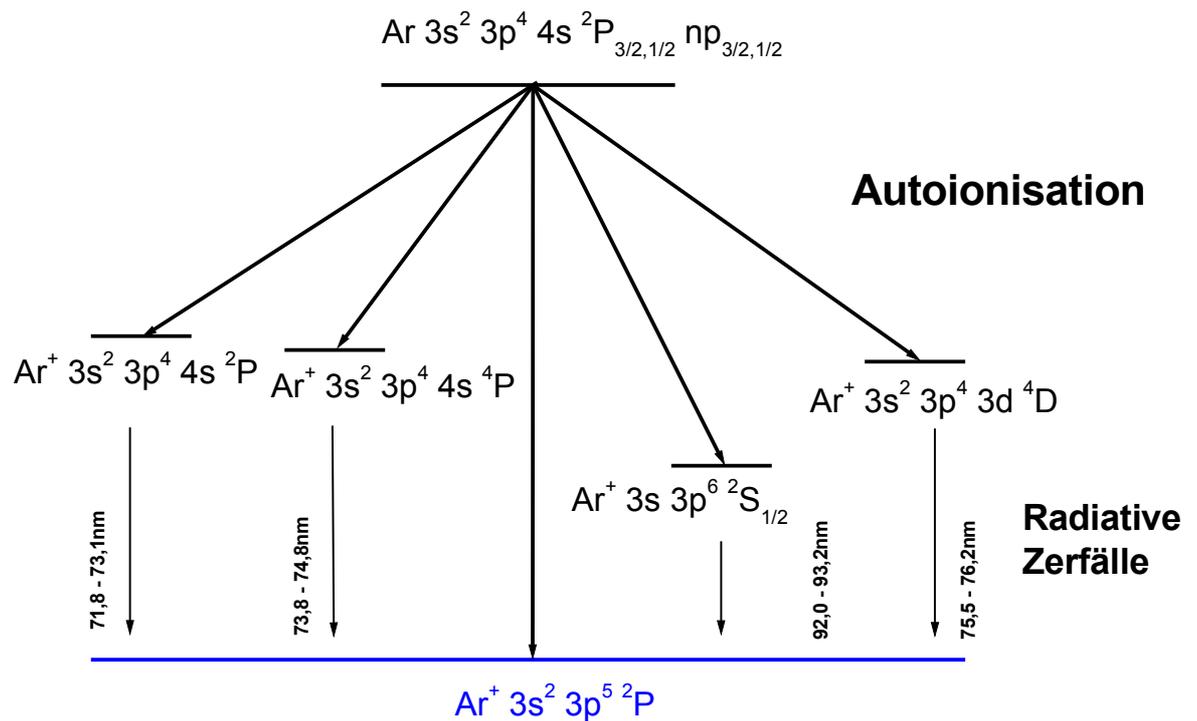


Abb. 2.1: Zerfallskanäle der $\text{Ar } 3s^2 3p^4 4s \ ^2P_j \ np \ ^1P$ Rydberg – Zustände.

2.2 Beobachtungsgrößen der Fluoreszenzstrahlung

Die Anzahl der unabhängigen Messgrößen eines Fluoreszenzexperimentes ist abhängig von den experimentellen Bedingungen. Unabhängig von der Polarisation der anregenden Strahlung kann der Anregungs- und Ionisationswirkungsquerschnitt in Abhängigkeit der Energie der anregenden Photonen bestimmt werden. Die dabei auftretenden Strukturen lassen Rückschlüsse auf den Besetzungsmechanismus zu (siehe Kap.2.1).

Bei Anregung mit linear polarisierter oder unpolarisierter Strahlung sind zwei unabhängige Größen, der Wirkungsquerschnitt und der Winkelasymmetrieparameter $\beta_1(\text{fl})$ (bzw. der Alignmentparameter A_{20}), bestimmbar. Regt man hingegen mit zirkular polarisierter Strahlung an, so kann man zusätzlich noch den Orientierungsparameter O_{10} bestimmen. Zur Definition von O_{10} und A_{20} siehe [Sch92].

Der Winkelasymmetrieparameter β_{fl} muss je nach im Experiment verwendeter anregender Strahlung als $\beta_1(fl)$ (Anregung mit linearer Strahlung) oder $\beta_2(fl)$ (Anregung mit zirkularer Strahlung) bezeichnet werden. Die β – Parameter sind mit dem Orientierungs- bzw. Alignmentparameter verknüpft: (Allgemeine Herleitung der Intensitäten der Fluoreszenzstrahlung in [Sch92])

$$\beta_1(fl) = \alpha_1(fl)O_{10} \tag{2.1}$$

$$\beta_2(fl) = \alpha_2(fl)A_{20} \tag{2.2}$$

Diese Definitionen sind unter verschiedenen Annahmen bezüglich der Quantisierungsachse gemacht. In Gleichung (2.1) liegt als Quantisierungsachse die Ausbreitungsrichtung der anregenden Strahlung zugrunde, während in (2.2) dazu die Schwingungsrichtung des E – Vektors der anregenden Strahlung verwendet wird. Die beiden Parameter $\alpha_{1,2}$ sind Strukturparameter, die man aus rein geometrischen Überlegungen erhält [Zim03].

Im Rahmen dieser Arbeit wurden nur Experimente mit linear polarisierter anregender Strahlung durchgeführt. Es wird im weiteren Verlauf nicht mehr auf den Orientierungsparameter und den damit verknüpften Winkelasymmetrieparameter $\beta_1(fl)$ eingegangen. Anstatt $\beta_2(fl)$ wird im folgenden einfach nur β_{fl} verwendet. Als Quantisierungsachse wird im Fall der Anregung mit linear polarisierter Strahlung aus Vereinfachungsgründen die Schwingungsrichtung des E – Vektors der anregenden Strahlung gewählt (das theoretisch zu beschreibende Problem wird dadurch rotationssymmetrisch). Um den Winkelasymmetrieparameter zu berechnen definiert man den linearen Polarisationsgrad [Sch92]:

$$\Pi_{lin}(\alpha) = \frac{I_{||}(\alpha) - I_{\perp}(\alpha)}{I_{||}(\alpha) + I_{\perp}(\alpha)} = \frac{-\frac{3}{2}\beta_{fl} \sin^2 \alpha}{I_{fl}^{(0)}(\alpha)} \tag{2.3}$$

wobei mit

$$I_{\text{fl}}^{(0)}(\alpha) = 1 + \beta_{\text{fl}} P_2(\cos \alpha) \quad (2.4)$$

die Winkelverteilung der Fluoreszenzstrahlung gegeben ist.

Mit α ist der Beobachtungswinkel bezüglich der Schwingungsrichtung des E – Vektors der anregenden Strahlung bezeichnet.

$P_2(\cos \alpha)$ ist das Legendre – Polynom zweiten Grades.

Die beiden Größen I_{\parallel} und I_{\perp} sind die Komponenten der emittierten Fluoreszenzstrahlung, deren Polarisation parallel bzw. senkrecht bezüglich des E – Vektors der anregenden (linear polarisierten) Strahlung ist.

Aus (2.3) folgt für die in Kap. 3 und 4 beschriebene Detektionsgeometrie und $\alpha = 90^\circ$ (Beobachtung senkrecht von unten)

$$\Pi_{\text{lin}} = \frac{I_{\parallel} - I_{\perp}}{I_{\parallel} + I_{\perp}} = -\frac{\frac{3}{2}\beta_{\text{fl}}}{1 - \frac{\beta_{\text{fl}}}{2}} = -\frac{3\beta_{\text{fl}}}{2 - \beta_{\text{fl}}}. \quad (2.5)$$

Löst man (2.3) nach dem Winkelasymmetrieparameter β_{fl} auf, so lässt sich β_{fl} bzw. der Alignmentparameter A_{20} (vgl. (2.2)) wie folgt bestimmen:

$$\beta_{\text{fl}} = \alpha_2 A_{20} = \frac{I_{\perp} - I_{\parallel}}{2I_{\perp} + I_{\parallel}} = \frac{2\Pi_{\text{lin}}}{3 + \Pi_{\text{lin}}}. \quad (2.6)$$

Mittels Gleichung (2.6) kann man die Experimente bezüglich β_{fl} und A_{20} auswerten, da die Größen I_{\parallel} und I_{\perp} im Experiment bestimmt werden können. In Tabelle 2.1 sind die partiellen $A_{20}(l_j)$ – und $\beta_{\text{fl}}(l_j)$ – Parameter zu den möglichen l_j – Kombinationen für die in dieser Arbeit untersuchten J_1 eingetragen. Die dort angegebenen $A_{20}(l_j)$ – und $\beta_{\text{fl}}(l_j)$ – Parameter sind die Werte, die man messen würde, wenn nur die eine entsprechende Photoelektronenpartialwelle emittiert würde.

Eine sehr genaue Beschreibung der eingeführten Beobachtungsgrößen der Photoionisation, sowie der Wechselwirkungsmechanismen in Photoionisationsexperimenten ist bereits in [Zim03] und [Men98] enthalten. Deshalb wird dieser Punkt hier nicht mehr weiter erläutert. Viel mehr soll im folgenden Kapitel etwas näher auf die Beschreibung der Spektren von Atomen mit einzelnen hochangeregten Elektronen eingegangen werden.

| J_i | $A_{20}(lj)$ | | | | $J_i \rightarrow J_f$ | α_2 | $\beta_n(lj)$ | | | |
|-------|--------------|-----------|-----------|-----------|-----------------------|------------|---------------|-----------|-----------|-----------|
| | $s_{1/2}$ | $d_{3/2}$ | $d_{5/2}$ | $g_{7/2}$ | | | $s_{1/2}$ | $d_{3/2}$ | $d_{5/2}$ | $g_{7/2}$ |
| 3/2 | -1 | 0,8 | -0,2 | - | 3/2 \rightarrow 1/2 | 0,5 | -0,5 | 0,4 | -0,1 | - |
| | | | | | 3/2 \rightarrow 3/2 | -0,4 | 0,4 | -0,32 | 0,08 | - |
| | | | | | 3/2 \rightarrow 5/2 | 0,1 | -0,1 | 0,08 | -0,02 | - |
| 5/2 | - | -0,75 | 0,86 | -0,27 | 5/2 \rightarrow 3/2 | 0,37 | - | -0,28 | 0,32 | -0,1 |
| | | | | | 5/2 \rightarrow 5/2 | -0,43 | - | 0,32 | -0,37 | 0,11 |
| | | | | | 5/2 \rightarrow 7/2 | 0,13 | - | -0,1 | 0,11 | -0,04 |

Tab. 2.1: Partielle $A_{20}(lj)$ – und $\beta_n(lj)$ – Parameter zu den möglichen lj – Kombinationen für die in dieser Arbeit untersuchten J_i .

2.3 Beschreibung atomarer Spektren

Die Beschreibung atomarer Spektren von Mehrelektronensystemen ist bis heute nur approximativ zu lösen. Man versucht deshalb für spezielle Probleme einfache Zugänge zu erhalten. Ein sehr spezieller Fall ist das hier behandelte Problem der Wechselwirkung eines Photons mit einem Edelgasatom. Dabei wird ein Elektron ins Kontinuum gebracht und ein Elektron besetzt einen hochangeregten Zustand (vgl. Abb. 4.1). Das theoretisch zu lösende Problem beschränkt sich damit auf ein Ein-Elektron-Problem im Edelgasion. Es wird angenommen, dass die inneren Elektronen vom Prozess der Wechselwirkung nicht beeinflusst werden. Daher kann man die Berechnung mit einem angepassten Potential, in dem sich das angeregte Elektron

bewegt, durchführen. Die inneren Elektronen werden durch gebundene Wellenfunktionen nahe am Kernort beschrieben und das eine äußere Elektron wird asymptotisch angebunden. Diese asymptotische Anbindung geschieht über das langreichweitige Coulombpotential. Allerdings werden dann Modifikationen in der bekannten Rydbergformel (2.7) notwendig.

2.3.1 Rydbergserien und Quantendefekte

Mit Hilfe der Rydbergformel

$$E_n = I - \frac{R}{n^2} \quad (2.7)$$

lassen sich Spektren wasserstoffähnlicher Atome sehr gut erklären. Die E_n bilden dabei die sogenannte Rydbergserie. In diesem Fall sind R die Rydbergkonstante, I die Kontinuumschwelle und n nimmt die Werte $l+1, l+2, \dots$ an. Die E_n , also die Energiepositionen der angeregten Zustände, sind die Energieeigenwerte der Lösungen der radialen Schrödingergleichung (vgl. [Fri90])

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right) \phi_l(r) = E \phi_l(r). \quad (2.8)$$

Die Funktion ϕ ist dabei nur noch vom Abstand r abhängig, sowie von der Bahndrehimpulsquantenzahl l . Mit m ist die Masse des Elektrons bezeichnet. Die oben bezeichneten Energieeigenwerte E_n erhält man, wenn man in (2.8) als $V(r)$ das reine Coulombpotential für ein Elektron mit Bahndrehimpulsquantenzahl l einsetzt.

$$V_c(r) = I - \frac{Ze^2}{r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \quad (2.9)$$

Die Größen sind wie oben bezeichnet; zusätzlich ist Z die Kernladungszahl und e die Elementarladung. Im beschriebenen Fall der Ein-Elektronen-Anregung reicht es

aus das reine Coulombpotential durch eine kurzreichweitige Störung zu modifizieren. Damit erhält man

$$V(r) = V_C(r) + V_{Kr}(r), \quad \text{mit} \quad \lim_{r \rightarrow \infty} r^2 V_{Kr}(r) = 0. \quad (2.10)$$

Benutzt man diese Form des Potentials sind die Energieeigenwerte immer noch in der Form (2.7) darzustellen. Allerdings muss man dann die effektive Quantenzahl n^* einführen. Damit erhält (2.7) die Form

$$E_n = I - \frac{R}{(n^*)^2}, \quad \text{wobei} \quad n^* = n - \mu_n. \quad (2.11)$$

Die μ_n sind die Quantendefekte, welche für genügend große n im Normalfall nicht wesentlich von n abhängen. Damit sind auch die Spektren größerer Mehrelektronensysteme mit nur einem angeregten Elektron sehr gut und relativ einfach zu beschreiben.

Als wesentliche Punkte bleiben festzuhalten:

- Quantendefekte sind nur schwach von der Hauptquantenzahl n abhängig.
- Diese Abhängigkeit wird durch einen linearen Zusammenhang beschrieben.
- Der Absolutwert der Quantendefekte nimmt mit zunehmendem Bahndrehimpuls l ab.

Wünschenswert ist nun eine Möglichkeit zur theoretischen Berechnung der Quantendefekte. Einen Zugang dazu erhält man in der folgenden Weise. Als Voraussetzung wird die Annahme einer halbklassischen Näherung (vgl. [Fri90] und Kap. 2.3.2), sowie die Bohr-Sommerfeldsche Quantisierungsvorschrift (Kap. 2.3.3) gemacht. Die Quantendefekte sind gegeben durch

$$\mu_n = \frac{1}{2\pi\hbar} S_{Kr}(E_n). \quad (2.12)$$

Dabei ist mit S_{Kr} das Wirkungsintegral, welches das kurzreichweitige Potential berücksichtigt, bezeichnet, auf das später nochmals genauer eingegangen wird. Um nun die μ_n zu berechnen, benötigt man dieses Wirkungsintegral, gegeben durch

$$S_{Kr}(E) = 2 \int_a^b \sqrt{2m(E - V(r))} dr - 2 \int_a^b \sqrt{2m(E - V_C(r))} dr. \quad (2.13)$$

Hierbei ist mit $V(r)$ das modifizierte Potential (2.10) und mit $V_C(r)$ das Coulombpotential (2.9) bezeichnet. Das Problem an diesem Zugang ist nun, dass in (2.10) das unbekannte kurzreichweitige Potential $V_{Kr}(r)$ steckt und damit der allgemeine theoretische Zugang versperrt ist. Man kann nun wieder Näherungsmethoden und Erfahrungswerte einfließen lassen und damit zu einer Lösung kommen.

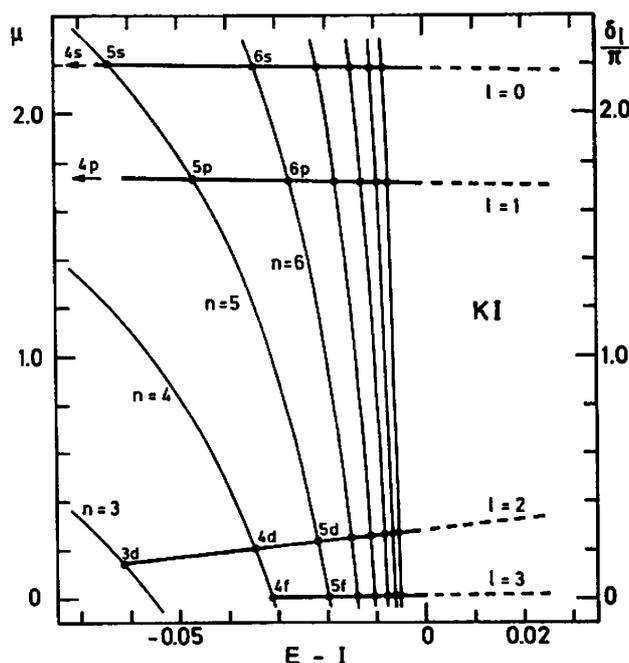


Abb. 2.2:
Festlegung der Quantendefekte von gebundenen Zuständen im Kaliumatom. Die horizontalen Geraden sind die jeweiligen Quantendefektfunktionen (2.14). Die Schnittpunkte mit der Kurvenschar (2.15) markieren die Energiewerte der gebundenen Zustände. [Fri90]

Die eigentliche Stärke liegt aber genau in der umgekehrten Anwendung der Formeln. Man versucht durch sehr geschickte Messungen die Quantendefekte μ_n so genau wie möglich aus den experimentellen Daten zu bestimmen und lernt damit etwas über das Potential $V(r)$ und damit über die Vorgänge im Atom.

Durch die oben festgestellten Eigenschaften, kaum Variation mit der Hauptquantenzahl n und Beschreibung dieses Zusammenhangs durch eine lineare

Funktion, liegt es nahe, die diskreten Werte μ_n aus (2.12) zu einer sogenannten Quantendefektfunktion $\mu(E)$ zu erweitern. Damit sind die Bezeichnungen in (2.13) auch wieder korrekt. Es gilt dann analog zu (2.12)

$$\mu(E) = \frac{1}{2\pi\hbar} S_{\text{Kr}}(E) \quad (2.14)$$

Die Energiewerte E_n ergeben sich dann als Schnittpunkte der Quantendefektfunktion (2.14) mit der Schar von Kurven $\mu^{(n)}$, wobei sich aus der Rydbergformel (2.11) für jedes n

$$\mu^{(n)} = n - \sqrt{\frac{R}{I-E}} \quad (2.15)$$

ergibt. Im Allgemeinen werden die Kurven dann in einer Grafik wie Abb. 2.2 dargestellt. Man sieht dort die Quantendefektfunktionen mit den zugehörigen Quantendefekten und Energiepositionen E_n von neutralem Kalium. Aufgetragen sind die Größen in Abhängigkeit von $E-I$, d.h. an der Stelle 0 befindet sich die Kontinuumschwelle. Die Quantendefektfunktionen $\mu(E)$ sind die fast horizontalen Geraden. Die Kurven $\mu^{(n)}$ sind von $n=3$ bis $n=10$ gezeichnet.

Nun folgen noch einige Erläuterungen der oben genannten Begriffe.

2.3.2 Das Wirkungsintegral im

Rahmen der halbklassischen Näherung

Die halbklassische Näherung verknüpft das Konzept der Wellenfunktion mit einem beinahe klassischen Impuls. Führt man diese Berechnung durch und macht die entsprechenden Vereinfachungen (vgl. [Fri90]), so erhält man für das Wirkungsintegral

$$S(E) = 2 \int_a^b p(x) dx . \quad (2.16)$$

Die Herleitung ergibt sich wie folgt. Man kann die allgemein gültige Beziehung

$$E_{\text{ges}} = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} \quad (2.17)$$

ausnutzen.

Nun kann man die kinetische Energie durch den Impuls p darstellen

$$E_{\text{kin}} = \frac{p^2}{2m} . \quad (2.18)$$

Damit ergibt sich

$$E_{\text{ges}} = \frac{p^2}{2m} + E_{\text{pot}} \quad (2.19)$$

und somit

$$p = \sqrt{2m(E_{\text{ges}} - E_{\text{pot}})} . \quad (2.20)$$

Die Verknüpfung mit dem Wirkungsintegral (2.16) geschieht über die Einführung einer Wellenfunktion $\Psi(x)$, welche die Bewegung eines Massepunkts der Masse m in einem Potential $V(x)$ beschreibt. Die Wellenfunktion $\Psi(x)$ enthält eine Amplitude $A(x)$ und eine Phase $s(x)$.

$$\Psi(x) = A(x) \cdot e^{\frac{i}{\hbar}s(x)} \quad (2.21)$$

Diese Phase $s(x)$ hat die Dimension einer Wirkung. Setzt man nun die Wellenfunktion $\Psi(x)$ in die stationäre Schrödingergleichung

$$\Psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))\Psi(x) = 0 \quad (2.22)$$

ein, so erhält man unter Vernachlässigung der zweiten Ableitung der Amplitude und der Tatsache, dass der Real- und Imaginärteil jeweils für sich gleich Null sein müssen:

$$s'(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}. \quad (2.23)$$

Mit E ist die Gesamtenergie des Systems bezeichnet. Vergleicht man nun (2.23) mit (2.20), so kann man auch schreiben

$$s'(x) = p(x). \quad (2.24)$$

Damit wird mit $p(x)$ eine Funktion im Wellenbild definiert, die lokal dem klassischen Impuls p eines Teilchens der Masse m entspricht. Das Wirkungsintegral S ergibt sich also als Integral über den "Impuls" des Elektrons.

2.3.3 Die Bohr-Sommerfeldsche Quantisierungsvorschrift

Die Bohr-Sommerfeldsche Quantisierungsvorschrift verknüpft das Integral über den beinahe klassischen Impuls bzw. die integrierte Wirkung $S(E)$ mit der Beschreibung der stationären gebundenen diskreten Zustände eines Systems. Das System wird charakterisiert durch das Potential V und die Gesamtenergie E . Es gilt:

$$S(E) = 2 \int_a^b p(x) dx = 2\pi\hbar(n + \alpha). \quad (2.25)$$

Damit ist jedes Energieniveau E_n durch eine ganze Zahl n charakterisiert. Ein gebundener Zustand entsteht bei einer Anzahl n ($n=0,1,2,\dots$) von Knoten der Wellenfunktion im klassisch erlaubten Bereich (siehe Abb.2.3). Die Konstante α wird zur Anpassung der Formel an verschiedene Potentiale benötigt.

2.3.4 Berechnung der Energieniveaus E_n für spezielle Fälle

Gibt man ein bekanntes Potential V , sowie die Gesamtenergie E des Systems vor, so möchte man die Energiepositionen E_n der gebundenen Zustände berechnen. Im Potential V ist die Kontinuumschwelle I zu finden, von der die E_n abhängen werden. Man kann aus der Kenntnis von V und E das Wirkungsintegral $S(E)$ formulieren (vgl. 2.13).

$$S(E) = 2 \int_a^b \sqrt{2m(E - V(r))} \quad (2.26)$$

Was bedeuten nun die Grenzen a und b in diesem Integral?

Die Grenzen a und b sind die klassischen Umkehrpunkte des Teilchens im Potential $V(r)$ (2.10). Diese Punkte werden bestimmt durch die Form des Potentials $V(r)$ und durch die Gesamtenergie E . Nimmt man als speziellen Fall ein reines Coulombpotential mit einem in Kernnähe repulsiven Anteil an (vgl. Abb. 2.3), so wird der innere Umkehrpunkt a nur schwach von der Energie E abhängen (es gilt $a = 0$ für $l = 0$). Der äußere Umkehrpunkt b wird für $E \rightarrow 0$ (bzw. $E \rightarrow I$) gegen unendlich gehen und wie folgt von der Energie E abhängen

$$b(E) = \frac{Ze^2}{I - E}. \quad (2.27)$$

Man hat nun die Konstante b durch eine Funktion festgelegt, welche wiederum abhängig von E und I ist. Führt man die Integration von (2.26) für den einfachen Fall $l=0$ durch, so erhält man $S(E)$ in Abhängigkeit von b :

$$S(E) = 2\pi \sqrt{\frac{b(E)mZe^2}{2}} \quad (2.28)$$

Setzt man in (2.28) den Zusammenhang (2.27) ein, so ergibt sich S direkt in Abhängigkeit von E und I (und damit von V):

$$S(E) = 2\pi \sqrt{\frac{mZ^2e^4}{2(I-E)}} \quad (2.29)$$

Damit ist man jedoch immer noch nicht in der Lage die E_n anzugeben. Hier kommt nun die Bohr-Sommerfeldsche Quantisierungsvorschrift (2.25) (vgl. Kap. 2.3) ins Spiel. Ersetzt man in (2.29) $S(E)$ entsprechend (2.25), so ergibt sich nach einer einfachen Umformung

$$E_n = I - \frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{(n+\alpha)^2}. \quad (2.30)$$

Mit der Rydbergkonstanten

$$R = \frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2} \quad (2.31)$$

und der Konstanten $\alpha=0$ ergibt sich die Rydbergformel (2.7). Dieser einfache Zusammenhang gilt jedoch nur für Bahndrehimpuls $l = 0$ in (2.9) und lässt damit eine einfache Auswertung von (2.26) zu. Nimmt man nun die allgemeineren Fälle $l > 0$ und ein modifiziertes Coulombpotential an, so ist (2.26) nicht mehr einfach analytisch zu lösen. Hierbei macht man die Annahme, dass der innere Umkehrpunkt a auch in diesen Fällen nicht stark mit der Energie E variiert und kann die im einfachen Fall erhaltenen Lösungen durch Modifikation der Konstanten α in der Bohr-Sommerfeldschen Quantisierungsvorschrift (2.25) in eine Rydbergformel überführen. Damit erhält man eine äquivalente Darstellung von (2.11) und hat die Quantendefekte μ_n eingeführt.

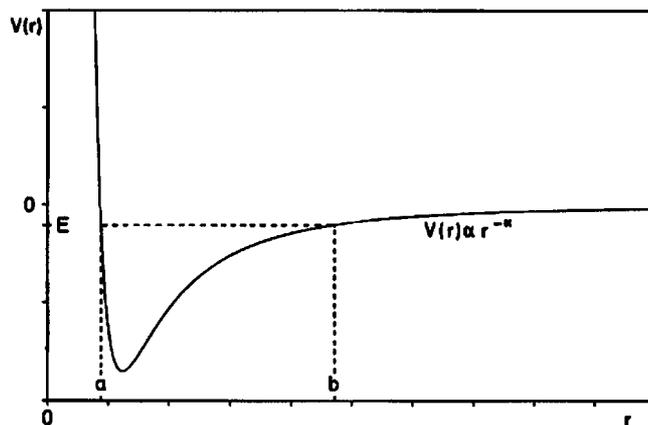


Abb. 2.3:
Beispiel für ein
Coulombpotential
mit repulsivem An-
teil für kleine r .
Innerer und äußerer
Umkehrpunkt a und
 b . [Fri90]

2.3.5 Störer in Rydbergserien

Ein Störer in einer Rydbergserie macht sich bemerkbar, indem die in den vorangehenden Kapiteln beschriebene Zuordnung der Energiepositionen der Rydbergzustände nicht in der gegebenen Form über die Quantendefekte, welche nur schwach von der Energie abhängen, möglich ist. Außerdem ist unter Umständen eine starke Erhöhung der Oszillatorstärke, d.h. in dem hier behandelten Fall der Intensität des beobachteten Fluoreszenzzerfalls möglich (vgl. Abb. 5.7 und Abb. 5.9 Kap. 5.2.1).

Die Energiewerte E_n ergeben sich analog zu Kap. 2.3.1 als Schnittpunkte der Quantendefektfunktion (2.14) mit der Schar der Kurven (2.15). Allerdings ist die Quantendefektfunktion $\mu(E)$ nun keine lineare Funktion mehr und auch die zu vernachlässigende Variation mit der Hauptquantenzahl ist nicht mehr gegeben. Die Quantendefektfunktion wird nun wie folgt beschrieben

$$\tilde{\mu}(E) = \mu(E) - \frac{1}{\pi} \arctan \frac{\Gamma/2}{E - E_R}, \quad (2.32)$$

wobei $\mu(E)$ die Quantendefektfunktion (2.14), sowie E_R die Energieposition der autoionisierenden Resonanz ist. D.h. $E - E_R$ gibt die relative Lage zur Resonanz an und $\Gamma/2$ die halbe Breite der Resonanz. Die Breite Γ der Resonanz ist dadurch charakterisiert, dass die Phase δ , gegeben durch die Funktion

$$\delta = -\arctan \left(\frac{\Gamma/2}{E - E_R} \right) \quad (2.33)$$

bei den Energien $E = E_R \pm \Gamma$ bereits 1/4 bzw. 3/4 des Anstiegs durchlaufen hat (vgl. Abb. 2.4). Mit der Quantendefektfunktion (2.32) ergibt sich ein ähnliches Szenario wie in Abb. 2.2 gezeigt. Jedoch muss man bei der Interpretation der Abb. 2.5 genau auf die Lage des Störers achten.

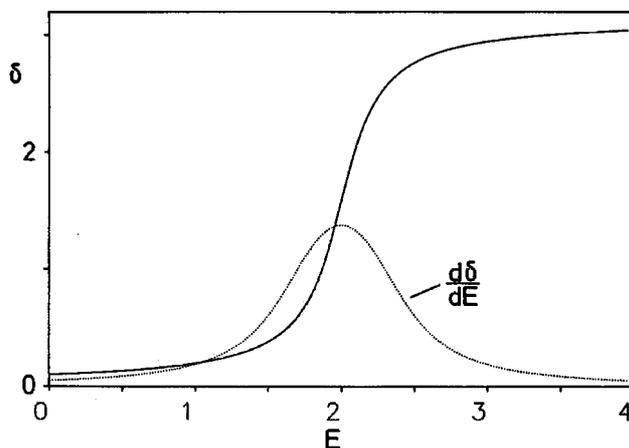


Abb. 2.4:
Phase δ in der Nähe
einer Resonanz
(durchgez. Linie).
 $E_R = 2,0$, Breite
 $\Gamma = 0,4$. [Fri90]

In dem hier behandelten Fall eines Störers direkt in einer Rydbergserie spricht man nicht mehr von einer autoionisierenden Resonanz, sondern von einem zusätzlichen gebundenen Zustand, der sich als Störung in der Rydbergserie bemerkbar macht. Wie sich diese Störung bemerkbar macht ist in Abb. 2.5 zu sehen und lässt sich grob in drei Teile einteilen:

- Unterhalb der Energie des Störers liegen die Quantendefekte auf der wenig energieabhängigen Funktion $\mu(E)$ (2.14) und der Fall lässt sich wie in Kap. 2.1 beschrieben behandeln.
- In der Nähe der Störung (bei der Energie E_R) wird ein relativ schneller Sprung der Quantendefekte um 1 nach oben stattfinden, d.h. dort werden die Quantendefekte μ_n zunehmen, womit die effektiven Quantenzahlen n^* (2.11) und dadurch auch die Energien der gebundenen Zustände dichter liegen als im ungestörten Fall.
- Oberhalb der Störung sind die Quantendefekte um eins nach oben verschoben. Dies macht sich nicht in der Energielage der Zustände bemerkbar, aber die Nummerierung ist um eins höher als in einer Serie ohne Störer. Der n -te Zustand der ungestörten Serie ist nun bereits der $n+1$ -te Zustand.

Das Energiespektrum der gebundenen Zustände ist auf der Breite Γ der „Resonanz“ so zusammengestaucht, dass ein gebundener Zustand zusätzlich auftreten kann. Die energetischen Verläufe der Emissionswirkungsquerschnitte in Kap. 5.2 können jedoch immer noch nicht mit den hier beschriebenen Mitteln hinreichend genau beschrieben werden. Dies liegt daran, dass hier mehrere Rydbergserien miteinander in Wechselwirkung treten und zusätzlich die resonante Störung auftritt.

In den experimentellen Energieverläufen der Emissionswirkungsquerschnitte dieser Arbeit ist der starke Anstieg der Oszillatorstärke und die Variation in den Quantendefekten sehr gut zu sehen. Jedoch läuft diese Variation nicht nach dem oben beschriebenen Schema ab, dies dürfte an den anderen beteiligten Rydbergserien liegen.

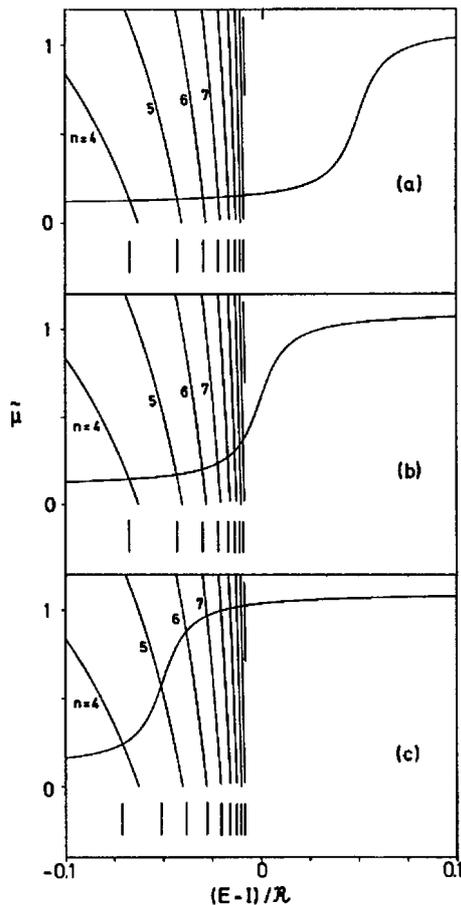


Abb. 2.5:
Quantendefektfunktion (2.32) für einen isolierten resonanten Störer der Breite $\Gamma = 0,02R$. Die Lage des Störers ist

(a) $E_R = I + 0,05R$,

(b) $E_R = I$ und

(c) $E_R = I - 0,05R$.

Für $E < I$ geben die Schnittpunkte der Quantendefektfunktion (2.32) mit der Kurvenschar (2.15) die Energien der gebundenen Zustände. Nochmals als vertikale Striche unten in den Abb. eingezeichnet. [Fri90]

2.4 Theoretischer Ansatz der Berechnung von Photoionisationswirkungsquerschnitten

Die Berechnung von Photoionisationswirkungsquerschnitten, wie sie in dieser Arbeit gemessen werden, ist ein Problem, bei der die Wechselwirkung von vielen Resonanzen (gebundene Zustände) mit vielen Kontinuumszuständen behandelt werden muss. Hierbei ist der Interferenzprozess zwischen dem direkten Photoionisationsprozess und dem der indirekten Ionisation über Autoionisation doppelt angeregter Zustände zu berücksichtigen. Für den gesamten Drehimpuls des Kontinuumszustands aus Elektron und Ion gilt aufgrund der Dipolanregung $J = 1$, da der Argon Grundzustand ein 1S_0 – Zustand ist. Für den Gesamtdrehimpuls j des Elektrons ergeben sich aus der Beziehung für den Drehimpulserhalt

$$\vec{j}_\omega = \vec{J} + \vec{j}. \quad (2.34)$$

die drei Werte für den Drehimpuls des Elektrons $j = \bar{J} \pm 1, \bar{J}$. Mit j_ω ist der Drehimpuls des Photons bezeichnet. \bar{J} steht für den Drehimpuls des entstandenen Ions. Der Bahndrehimpuls des Elektrons folgt aus dem Erhalt der Parität. Beispielfhaft können bei dem hier untersuchten $\text{Ar}^+ 3s^2 3p^4 ({}^3P) 4s {}^4P_{3/2}$ – Zustand die $p_{1/2}$, $p_{3/2}$ und $f_{5/2}$ – Partialwellen auftreten.

Der energieabhängige totale Wirkungsquerschnitt für die photoneninduzierte Besetzung eines speziellen Ionenzustands \bar{EJ} ergibt sich als Summe über die partiellen Wirkungsquerschnitte:

$$\sigma_{\bar{EJ}}(\omega) = \sum_{lj} \sigma_{\bar{EJ}}^{lj}(\omega) \quad (2.35)$$

Diese lassen sich mit folgender Gleichung [Sch97] für die möglichen Photoelektronenpartialwellen (charakterisiert über die Energie ε , den Bahndrehimpuls l und den Gesamtdrehimpuls j) berechnen:

$$\sigma_{\bar{EJ}}^{lj}(\omega) = \frac{4}{3} \pi^2 \alpha a_0^2 \omega \left| \langle \bar{EJ} \varepsilon l j | D | 0 \rangle + \sum_{EJ} \frac{\langle \bar{EJ} \varepsilon l j | H^{ee} | EJ \rangle \langle EJ | D | 0 \rangle}{(\varepsilon + \bar{E} - E) + i\Gamma(EJ)/2} \right|^2 \quad (2.36)$$

Der erste Summand ist das Matrixelement für den direkten Photoionisationsprozess ($|0\rangle$ beschreibt die Wellenfunktion des Grundzustands, D ist der effektive Übergangsoperator, der die Vielelektronen – Effekte berücksichtigt. Der Endzustand des entstandenen Ions ist gekennzeichnet durch \bar{EJ} , das Photoelektron durch $\varepsilon l j$, zusammen koppeln diese wieder zum Gesamtdrehimpuls J). Der zweite Term beschreibt den Prozess der Autoionisation von doppelt angeregten Zuständen. Ausgehend von der Grundzustandswellenfunktion $|0\rangle$ erreicht man mit dem Operator D die Wellenfunktion des doppelt angeregten Zustands $|EJ\rangle$. Diese wird durch den Elektron – Elektron Wechselwirkungsoperator H^{ee} in die Wellenfunktion des Endzustands $|\bar{EJ} \varepsilon l j\rangle$ überführt. Der Nenner dieses Summanden genügt der

Resonanzbedingung, $i\Gamma(EJ)/2$ ist die Halbwertsbreite des autoionisierenden doppelt angeregten Zustands. Insgesamt muss über alle doppelt angeregten Zustände summiert werden, auch wenn sie sich langreichweitig überlappen.

Eine explizite Anwendung von (2.36) wurde für die hier ausgewählten $3s^23p^4$ (3P) $4s$ $^{2,4}P$ Zustände des Argon Ions bisher nicht beschrieben. Die Leistungsfähigkeit der störungstheoretischen Behandlung wurde an den der Konfiguration nach vergleichbaren $Kr^+ 4s^24p^4$ (3P) $5s$ Zuständen belegt ([Sch93], [Suk94], [Lag94], [Sch97]). Bei diesen Berechnungen wurde eine Kombination aus Konfigurationswechselwirkung (CI) und Vielteilchenstörungstheorie (MBPT) angewandt. Die Energieeigenwerte und Eigenfunktionen der Endzustände werden auf Basis der CI berechnet und die Übergangsamplituden mit den Methoden der MBPT [Suk94]. Die Gruppe um Sukhorukov sollte damit auch Argon als Target behandeln können. Für dieses Edelgas wurden von Lagutin et al. [Lag99] bisher nur Berechnungen der Resonanzstruktur des Ar $3s$ – Photoionisationswirkungsquerschnitts durchgeführt.

Auch alternative Methoden wie die R – Matrixtheorie wurden auf die $4s$ – Besetzung von Ar^+ nicht angewendet. Dagegen wurden mit dieser Methode Wirkungsquerschnitte für resonante und direkte Besetzung der analogen $Ne^+ 2s^22p^4$ (3P) $3s$ Zustände berechnet und mit Messungen verglichen ([Gor98] und [Sch96]). Für diesen Vergleich stehen jedoch keine absoluten experimentellen Wirkungsquerschnitte zur Verfügung, wie sie für Argon in dieser Arbeit gemessen werden sollen.

Motiviert durch die Messungen absoluter Wirkungsquerschnitte [Men98], sowie des Alignmentparameters A_{20} [Men98], [Yen97] und des Orientierungsparameters O_{10} [Yen01], [McL02] sind Berechnungen der $Ar^+ 3s^23p^4$ (3P) $4p$ – Zustände mittels einer Erweiterung der R – Matrix Methode durch Multikonfigurations- Hartree – Fock (MCHF) Orbitale durchgeführt worden [Har99], [Har02].

3 Experiment

In diesem Kapitel werden die experimentellen Grundlagen und Voraussetzungen der Experimente zur photoneninduzierten Fluoreszenzspektroskopie beschrieben. Im ersten Teil wird die Strahlungsquelle erläutert, im zweiten Teil (Kap. 3.2 – 3.6) werden die Weiterentwicklungen der Messapparatur erklärt. Diese Apparatur wird in gemeinsam durchgeführten Strahlzeiten von den Arbeitsgruppen Prof. Dr. Schartner und Prof. Dr. Schmoranzer genutzt. Der 24 h Betrieb bei BESSY II lässt sich nur durch die Teilnahme von mindestens vier Mitarbeitern effizient nutzen.

3.1 Synchrotronstrahlung

Um die Experimente zur Bestimmung der Wirkungsquerschnitte und deren energetischen Strukturen an Atomen und an Molekülen (letzteres in erster Linie Themengebiet der AG Schmoranzer Uni Kaiserslautern) durchführen zu können, benötigt man eine durchstimmbare Lichtquelle, welche über einen weiten Energiebereich hohe Photonenflüsse bei gleichzeitig hoher Auflösung bietet. Diese Eigenschaften erfüllen heute Synchrotronstrahlungsquellen der dritten Generation. Synchrotronstrahlung entsteht wenn ein schnelles Elektron auf eine Kreisbahn gezwungen wird und damit eine beschleunigte Bewegung ausführt, wie es in den Speicherringen (siehe Kap. 3.1.3) der Synchrotronstrahlungsquellen an den Dipolmagneten auftritt. Die Grundlagen der Synchrotronstrahlung sind bereits an anderer Stelle ausführlich beschrieben ([Zim03], [Zim98], [Wil92], [Men98]), deshalb soll hier nicht mehr auf die Theorie der Erzeugung der Strahlung eingegangen werden. Als wichtige Eigenschaften der Synchrotronstrahlung bleiben festzuhalten:

- Hohe Intensität, durch eine starke Bündelung der abgestrahlten Leistung in Vorwärtsrichtung tangential zum Elektronenorbit.
- Breites Frequenzspektrum vom Infraroten bis in den harten Röntgenbereich.
- Einstellbare Polarisationsrichtungen: Linear, zirkular, elliptisch.

3.1.1 Erzeugung von intensiver Strahlung in Undulatoren

Die Erzeugung von Synchrotronstrahlung in Speicherringen mit Hilfe der Dipolmagnete liefert für eine Vielzahl von Experimenten einen zu geringen Photonenfluss. Zum Erreichen hoher Photonenflüsse sind in den geraden Stücken des Speicherrings Undulatoren eingebaut. Ein Undulator besteht im einfachsten Fall aus zwei periodisch angeordneten Magnetstrukturen, welche einen festen Periodenabstand λ_U haben und deren Abstand g variiert werden kann (vgl. Abb. 3.1). Diese periodische Anordnung der Permanentmagneten bewirkt innerhalb des Undulators ein periodisches magnetisches Feld entlang des Elektronenorbits, wodurch die Elektronen auf eine wellenförmige Bahn gezwungen werden. Durch die permanente Richtungsänderung an jedem Punkt der Elektronenbewegung entsteht Synchrotronstrahlung, welche sich kohärent überlagert, so dass sich die Intensität bei einem Undulator mit n Perioden nicht auf das n -fache, sondern auf das n^2 -fache erhöht. Durch die Veränderung des Abstands g der Magnetstrukturen kann die Energie und damit die Wellenlänge der emittierten Strahlung eingestellt werden. Es ist üblich nicht die Wellenlänge des Lichtes anzugeben, sondern dessen Energie in eV. Deshalb ist auf allen Diagrammen in den Kapiteln 4, 5 und 7 dieser Arbeit die Energie der anregenden Photonen in eV auf den Achsen aufgetragen.

3.1.2 Polarisierung der Synchrotronstrahlung

Bewegen sich die Elektronen im Speicherring auf ihrem Orbit und werden an den Dipolen abgelenkt, so ist die dort entstehende Synchrotronstrahlung linear polarisiert, wenn man sie in der Ebene des Elektronenorbits beobachtet. Die Polarisierungsrichtung ist horizontal, da die Elektronen, welche im Dipolmagnet abgelenkt werden, im mitbewegten Koordinatensystem wie ein horizontaler Oszillator schwingen. Beobachtet man jedoch die Strahlung außerhalb der Ringebene, sieht man zirkular bzw. elliptisch polarisiertes Licht.

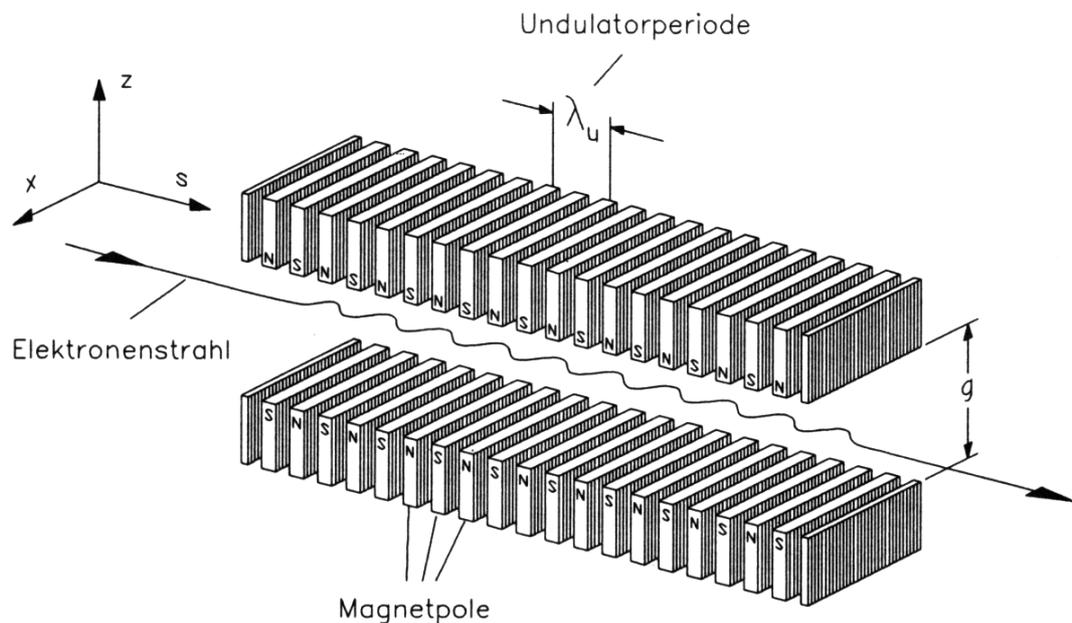


Abb. 3.1: Schematischer Aufbau eines Undulators zur Erzeugung von linear horizontal polarisierter Strahlung. [Wil92]

In Undulatoren ist die Polarisierung des Lichts abhängig von der Art und der Bauweise. Einen typischen Aufbau eines Undulators, welcher zur Erzeugung von linear horizontal polarisierter Strahlung verwendet wird zeigt Abb. 3.1. Solch ein Undulatortyp wird bei BESSY II an der Beamline U125/1 PGM eingesetzt, an der die in Kap. 5.2 beschriebenen Experimente durchgeführt wurden.

Benötigt man eine andere Polarisationsrichtung für die Experimente, z.B. eine andere lineare Polarisationskomponente zur Messung des Alignments oder zirkular polarisierte Strahlung zur Bestimmung des Orientierungsparameters, sind andere Undulatoren notwendig. An dem Speicherring BESSY I war deshalb ein sogenannter gekreuzter Undulator installiert. Dieser besteht aus zwei Undulatoren des obigen Typs, wobei einer bezüglich seiner Längsachse um 90° gedreht aufgebaut ist und deswegen linear vertikal polarisiertes Licht erzeugt (siehe z.B. [Men98]). Die Experimente in Kap. 7.1, in denen der β_{\parallel} Parameter angegeben ist, wurden am Speicherring BESSY I an der Beamline U2-FSGM durchgeführt [Mag95].

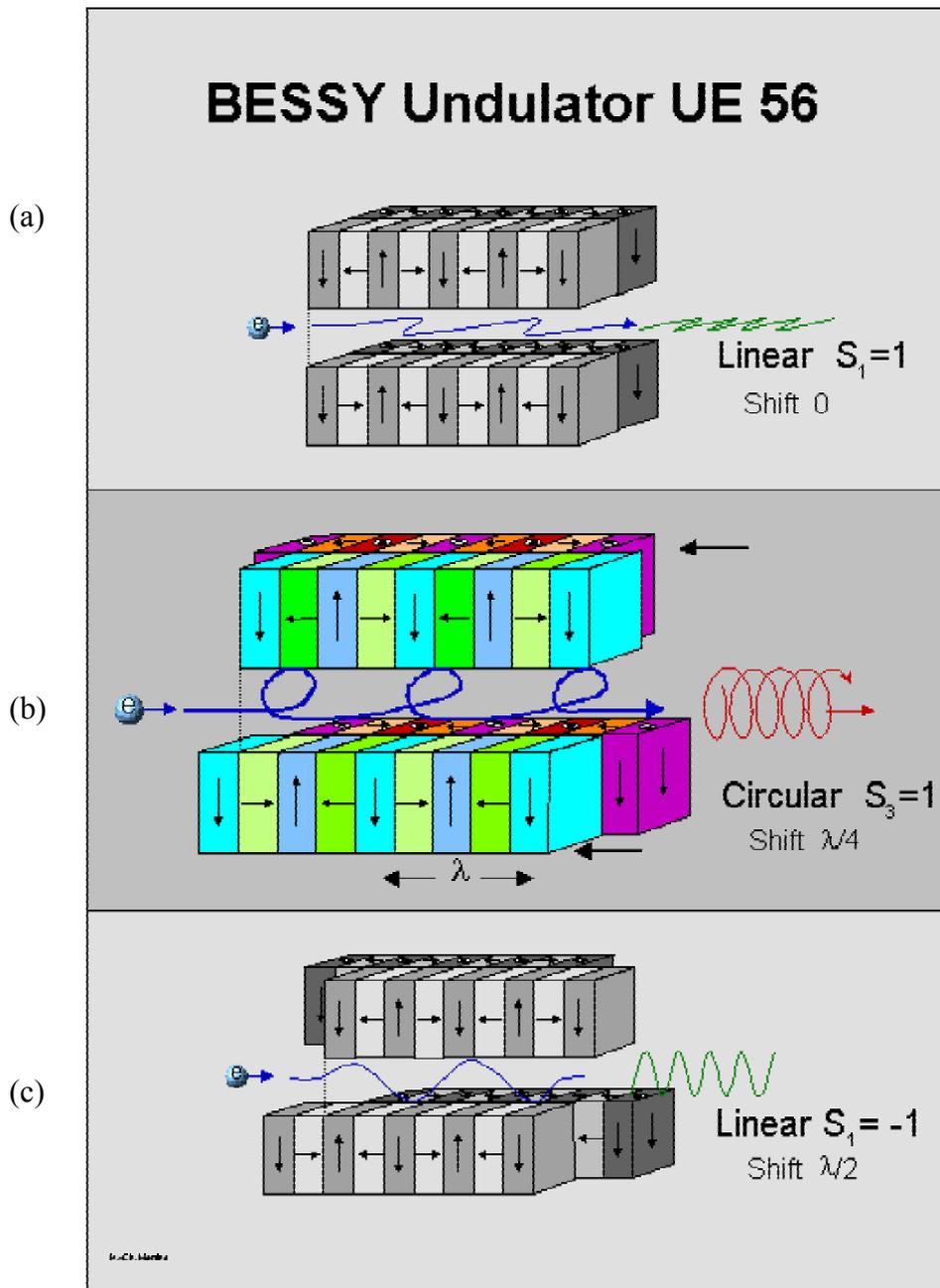


Abb. 3.2: Schematischer Aufbau der BESSY II UE56 Undulatoren [Bes04]

(a) Erzeugung von linear horizontal polarisierter Synchrotronstrahlung

(b) Erzeugung von zirkular polarisierter Synchrotronstrahlung

(c) Erzeugung von linear vertikal polarisierter Synchrotronstrahlung

Bei BESSY II stehen solche Undulatoren nicht zur Verfügung. Hier hat man zur Erzeugung von beliebig linear, sowie zirkular polarisierter Strahlung einen anderen Aufbau der Undulatoren gewählt. Die dortigen Undulatoren vom Typ Apple II sind wie in Abb. 3.2 aufgebaut und haben sowohl in der oberen, als auch in der unteren Magnetbank nicht nur vertikal angeordnete Permanentmagnete wie der in Abb. 3.1 gezeigte Typ, sondern zwischen diesen Magneten befinden sich zusätzlich in Strahlrichtung und gegen Strahlrichtung angeordnete Permanentmagnete. Zusätzlich sind die beiden Magnetbänke genau in der Mitte, über bzw. unter dem Elektronenorbit, geteilt. Zwei Teile stehen fest im Raum während die anderen beiden Teile parallel in Strahlrichtung bzw. gegen Strahlrichtung verschiebbar sind. Die Undulatoren UE56/1 und UE56/2 sind durch das Verschieben der beiden Bänke um eine viertel Undulatorperiode λ_U in Strahlrichtung bzw. gegen Strahlrichtung in der Lage, positiv bzw. negativ zirkular polarisierte Strahlung zu erzeugen (vgl. Abb. 3.2 (b)). Das Verschieben der Magnetbänke in dieser Weise erzeugt am Ort des Elektronenstrahls ein schraubenförmiges Feld, welches je nach Abstand g der oberen und unteren Bänke eine zirkulare oder elliptische Flugbahn der Elektronen verursacht und damit auch zirkular oder elliptisch polarisierte Synchrotronstrahlung entstehen lässt. Verschiebt man die Bänke um eine halbe Undulatorperiode, so entsteht linear vertikal polarisierte Strahlung (siehe Abb. 3.2 (c)). Somit kann an den UE56 Undulatoren bei BESSY II zirkulare, elliptische, linear horizontal und linear vertikal polarisierte Synchrotronstrahlung erzeugt werden.

Seit einiger Zeit stehen bei BESSY II mit den Undulatoren UE52 und UE46 Strahlungsquellen für den höher energetischen Bereich zur Verfügung, die auch linear polarisierte Strahlung in beliebigen Raumrichtungen erzeugen können. Diese Undulatoren sind im Prinzip wie die Apple II Typen UE56 aufgebaut. Jedoch ist man hier in der Lage die beiden beweglichen Magnetbänke in entgegengesetzte Richtungen zu verschieben (siehe Abb. 3.3). Dadurch entsteht keine Phasendifferenz zwischen dem horizontalen und vertikalen Magnetfeld und die Synchrotronstrahlung bleibt unter frei einstellbaren Winkeln linear polarisiert.

| Elektronenstrahlparameter BESSY II | Bunchgröße | | |
|--|-------------|------------|--------------|
| | horizontal | vertikal | longitudinal |
| Gerade Sektionen, lang (z.B. in U 125) | 310 μ m | 21 μ m | 15mm (50ps) |

Tabelle 3.2: Auswahl typischer Elektronenstrahlparameter von BESSY II. [Fol04]

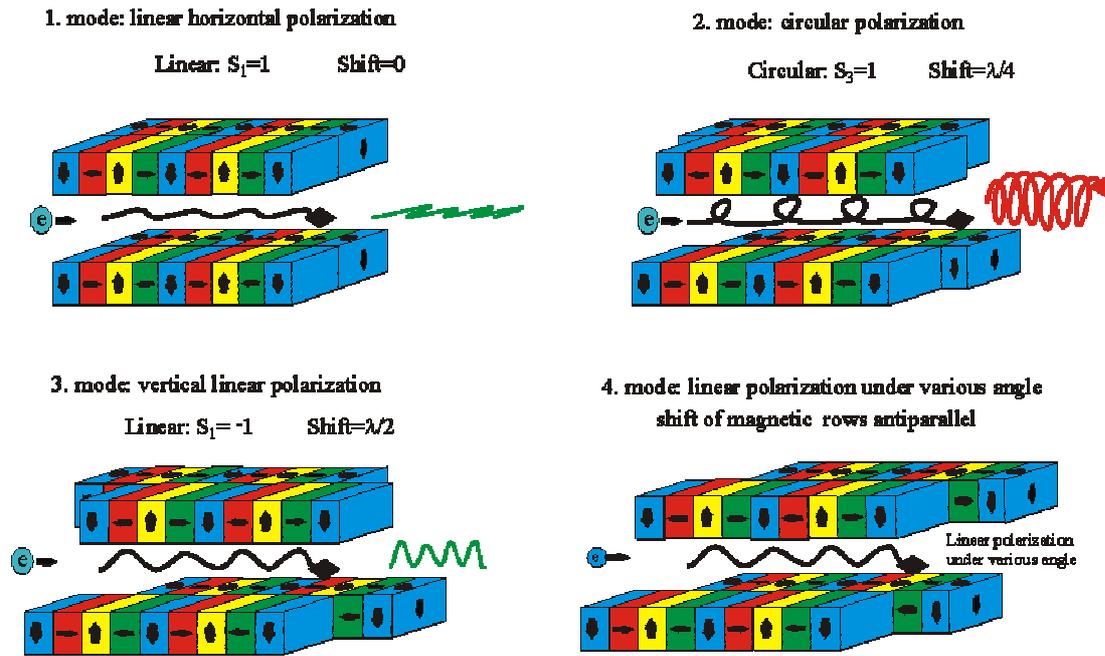


Abb. 3.3: Schematischer Aufbau der BESSY II UE46 und UE 52 Undulatoren

1. bis 3. Vergleiche Abb. 3.2 (a) bis (c)

4. Erzeugung von linear polarisierter Synchrotronstrahlung in beliebigen Raumrichtungen [Bes04].

3.1.3 Speicherringe zur Erzeugung von Synchrotronstrahlung

Die heutigen Speicherringe zur Erzeugung von Synchrotronstrahlung sind darauf optimiert eine möglichst hohe Brillanz aufzuweisen, d.h. möglichst viele Photonen in einem sehr kleinen Raumwinkel zur Verfügung stellen zu können. Diese Forderung bedingt eine möglichst große Teilchenzahl an einem Ort während des Durchlaufs durch die Strahlerzeugungselemente. Die Teilchen (in diesem Fall Elektronen) kreisen in Paketen im Speicherring. Diese Pakete werden „Bunche“ genannt. Es ist daher notwendig, eine möglichst hohe Zahl an Elektronen in einem Bunch zusammenzufassen (BESSY II ca. 10^{10}) und diesen Einzelbunch so klein und kurz wie möglich zu halten (siehe Tab. 3.1). Zum anderen soll der Verlust an Elektronen bei einem Umlauf so gering wie möglich gehalten werden, um eine möglichst lange Messzeit zwischen den Injektionen zur Verfügung stellen zu können.

Diese beiden Forderungen widersprechen sich, da durch die starke Bündelung der Elektronen die abstoßenden Kräfte immer größer werden und damit der Verlust an Teilchen im Orbit ebenfalls größer wird. Man muss immer einen Kompromiss zwischen den beiden Forderungen anstreben. Aus diesem Grund werden bei BESSY II als typische Betriebsparameter alle acht Stunden Neuinjektionen mit einem Ringstrom von 250 mA gewählt.

Um die Elektronen auf ihrem Orbit über viele Stunden zu halten, ist es entscheidend, möglichst wenig Restgas im Strahlführungssystem zu haben. Vor allem ist die Strahlführung so zu optimieren, dass sämtliche Störeinflüsse, die z.B. durch die Undulatoren hervorgerufen werden, kompensiert werden. Dazu sind verschiedene Magnete, die als Strahlfokussierungselemente wirken, in einem Speicherring eingebaut, welche sich in drei Klassen einteilen lassen:

- Dipolmagnete
- Quadrupolmagnete
- Sextupolmagnete

Details zum Aufbau eines Speicherrings, sowie zu den verwendeten Magneten, sind in [Ros94] und [Mar94] enthalten.

3.1.3.1 Dipolmagnete

Mit den Hauptdipolmagneten wird die Ablenkung zwischen den geraden Stücken des Speicherrings realisiert, so dass eine geschlossene Bahn entsteht. Diese Magnete sind, wie alle Führungsmagnete, Elektromagnete. Sie sind in Reihe geschaltet und werden gemeinsam angesteuert. Neben diesen Hauptdipolen gibt es aber auch noch eine Reihe von Korrekturdipolen. Diese sind einzeln ansteuerbar und im Normalfall in den Sextupolen (vgl. 3.1.3.3) integriert. Die Korrekturdipole werden Steerer genannt. Sie werden eingesetzt um an einem bestimmten Ort definierte Bahndeformationen zu erzeugen. Diese Bahndeformationen sind nötig um z.B. einen lokalen Einfluss eines Undulators zu korrigieren ohne sofort die gesamten Einstellungen des Rings verändern zu müssen.

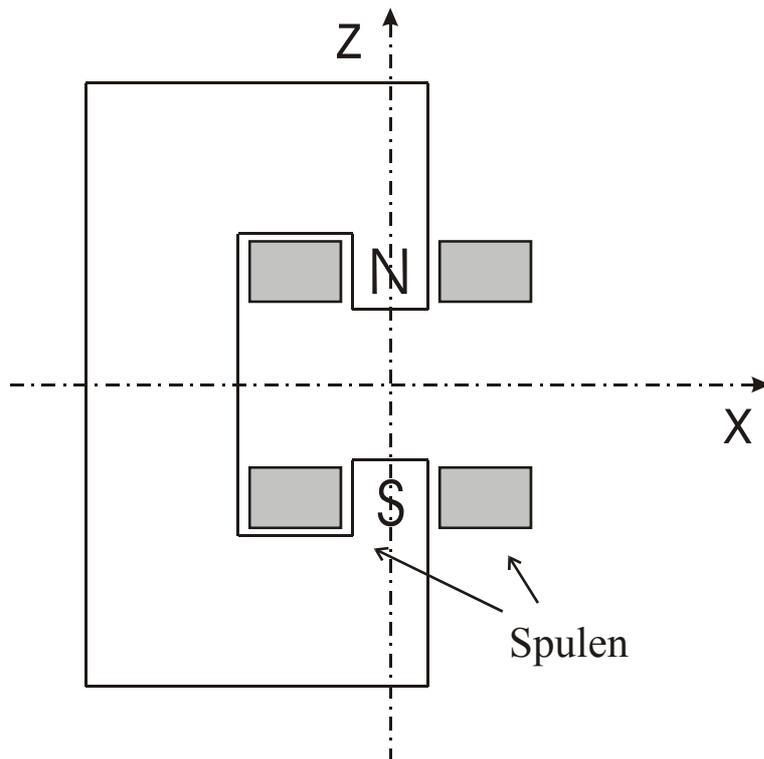


Abb. 3.4: Schematischer Aufbau eines elektrischen Dipolmagnets für Speicherringe.

3.1.3.2 Quadrupolmagnete

Die Quadrupolmagnete dienen zur Fokussierung des Elektronenstrahls. Diese Fokussierung ist permanent notwendig, da sich die stark gebündelten Elektronen im Bunch durch die Coulombkräfte abstoßen und nach kurzer Zeit verloren gehen würden. Ein Quadrupol wirkt wie eine Sammellinse. Alle Teilchen die parallel zu seiner Mittelachse laufen, werden auf einen Punkt im Abstand f fokussiert. Das bedeutet, dass das Magnetfeld proportional zum Abstand von der Mittelachse anwächst. Wichtig hierbei ist, dass ein Quadrupolmagnet immer nur in einer Ebene fokussiert. In der dazu senkrechten Ebene wirkt er wie eine Zerstreuungslinse. Kombiniert man nun zwei Quadrupole, welche senkrecht zueinander angeordnet sind, so hat man einen fokussierenden und einen defokussierenden Magneten in jeder Raumrichtung.

Diese Kombination wirkt insgesamt fokussierend, wenn man den Abstand der beiden Magnete $< f/2$ wählt. Das Problem bei der Verwendung von Quadrupolen ist die Impulsabhängigkeit ihrer Stärke. Je größer der Impuls des Teilchens, desto schwächer wirkt der Quadrupolmagnet. Dies wird zum Problem, da die Teilchen in den Bunchen nicht alle die gleichen Impulse haben, sondern ein Impulsintervall überdecken. Dies würde ohne Kompensation (siehe Kap. 3.1.3.3) zu einer verringerten Lebensdauer des Strahls führen, da sich die Impulsverbreiterung mit jedem Durchlauf verstärken würde und die Elektronen dann nicht mehr auf ihrem Orbit gehalten werden können.

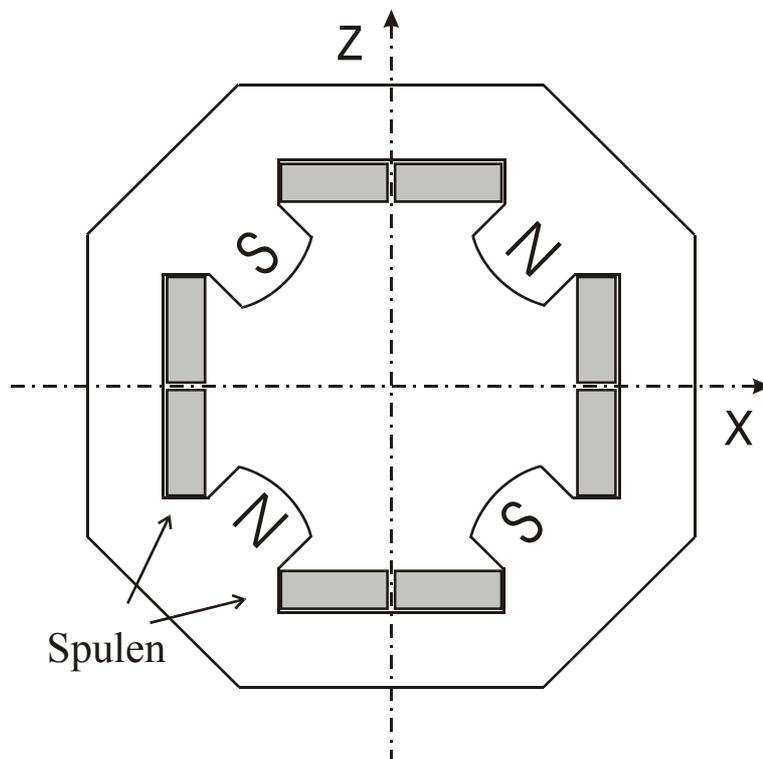


Abb. 3.5: Schematischer Aufbau eines elektrischen Quadrupolmagnets für Speicherringe.

3.1.3.3 Sextupolmagnete

Die Kompensation dieser Effekte geschieht mit Hilfe von Sextupolmagneten. Diese Magnete haben eine impulsabhängige Fokussierung, d.h. Teilchen mit einem abweichenden Impuls werden zusätzlich (positiv oder negativ) fokussiert und damit wieder an die Elektronen mit dem Sollimpuls herangeführt. Da Sextupole im Prinzip wie Quadrupole wirken, werden für jede Raumrichtung eigene Sextupole eingesetzt. Diese baut man immer in räumlicher Nähe zu den entsprechenden Quadrupolen ein. Man ist somit in der Lage die künstlich durch die anderen Strahlführungselemente, sowie die natürlich durch die Coulombkräfte im Bunch erzeugten Geschwindigkeitsvariationen auszugleichen und die Elektronen dicht zusammen zu halten.

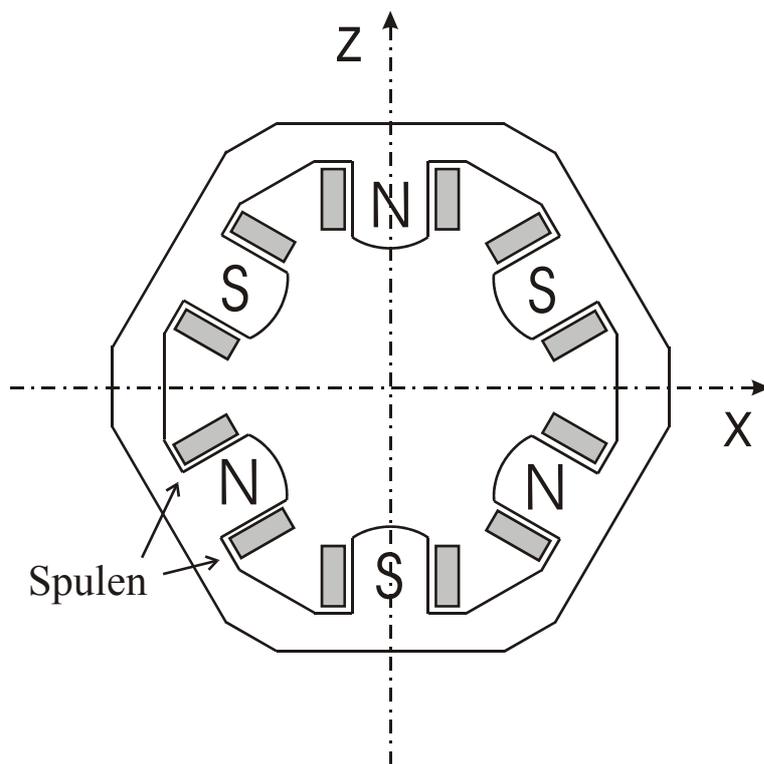


Abb. 3.6: Schematischer Aufbau eines elektrischen Sextupolmagnets für Speicherringe.

3.1.4 Beamlines

Die an Undulatoren oder Dipolen erzeugte Synchrotronstrahlung kann an verschiedenen Strahlrohren (Beamlines) experimentell genutzt werden. Der Aufbau dieser Beamlines ist im Prinzip über verschiedene Spiegel zur Fokussierung und ein Gitter zur spektralen Zerlegung des Lichtes in allen Fällen ähnlich gelöst. Im Detail unterscheiden sich die Beamlines jedoch erheblich. Die in dieser Arbeit gezeigten Ergebnisse sind an drei verschiedenen Beamlines aufgenommen worden. Die zurückliegenden, im Anhang Kap. 7.1 zusammengefassten Experimente wurden bei BESSY I an der Beamline U2-FSGM (siehe [Lie01], [Men98] und [Zim98]) durchgeführt, während die aktuellen Messungen bei BESSY II an den Beamlines U125/1 PGM und UE56/2 PGM durchgeführt wurden. Die beiden Beamlines sind Plangittermonochromatoren, die sich lediglich in den verwendeten Spiegeln zur Strahlführung und Fokussierung unterscheiden. Für die Experimente wurde am U125/1 PGM Strahlrohr ein Gitter mit 300 Linien/mm verwendet, womit man bei ausreichendem Photonenfluss eine Auflösung von etwa 3,4 meV im Energiebereich um 32,5 eV erreichen kann. Nutzt man die Möglichkeiten der Beamline voll aus, so erreicht man bei sehr geringen Photonenflüssen Auflösungen in diesem Energiebereich von etwa 1,7 meV. Der Aufbau der Beamline soll hier nicht weiter erläutert werden, da sich bereits sehr detaillierte Beschreibungen in [Lie01] und [Zim03] befinden.

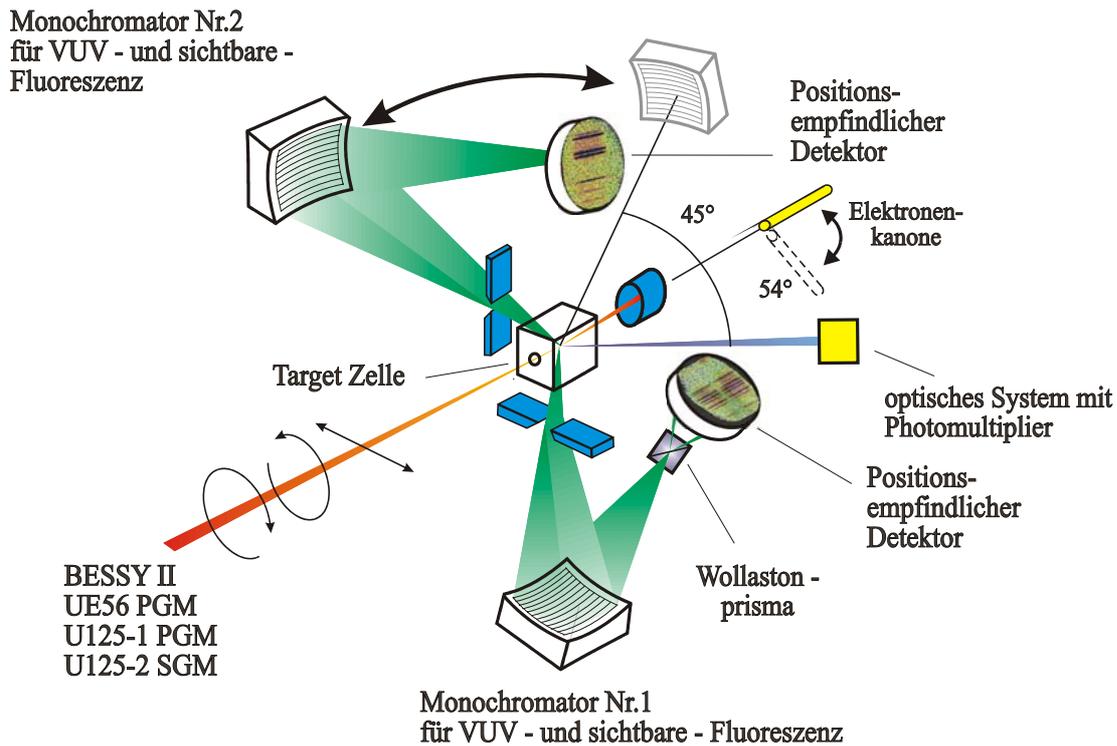


Abb. 3.7: Schematische Darstellung der Messapparatur

3.2 Apparativer Aufbau

Die Beschreibung des am Elektronenspeicherring BESSY II verwendeten Aufbaus zur photoneninduzierten Fluoreszenzspektroskopie (siehe Abb. 3.7) beschränkt sich auf die zu den Messphasen der vorliegenden Arbeit vorgenommenen Umbauten. Diese Maßnahmen dienen nicht nur den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Messungen. Sie sollen aber hier dokumentiert werden, da im Rahmen der durchgeführten Projekte wesentliche Verbesserungen entwickelt wurden. Die Grundkonzeptionen des Aufbaus werden nicht mehr beschrieben, sie sind bereits in [Zim03], [Mic02], [Lie01], [Men98] und [Zim98] aufgeführt.

3.2.1 Veränderungen am Traggestell

Entscheidende Verbesserungen bei Aufbau und Justage der Apparatur wurde durch den Umbau der Tragkonstruktion des gesamten experimentellen Aufbaus erreicht. Diese Umbauten beziehen sich im wesentlichen auf zwei Dinge. Erstens die Erweiterung der Stahlkonstruktion für den Aufbau mit zwei Monochromatoren samt Anbau für die Druckstufe zur Verwendung an den Strahlrohren mit sehr kurzem Fokusabstand (UE 56). Zweitens die Neukonstruktion der Justagefüße. Durch die wesentlich größere und damit schwerere Tragkonstruktion wurde eine Erweiterung des Verschiebeweges und eine stabilere Ausführung der Justagefüße notwendig. Diese sind mit einer Pressluftversorgung ausgestattet, die eine Unterstützung durch ein Luftkissen beim Verschieben des Aufbaus erlaubt. Es werden nun die Veränderungen an der Stahlkonstruktion zur Adaption an die verschiedenen Messaufgaben beschrieben.

3.2.1.1 Modifikationen an der Tragkonstruktion

Die Draufsicht der gesamten Unterkonstruktion ist in Abb. 3.8 gegeben. Zu erkennen sind die beiden Positionierungsmöglichkeiten der Druckstufe ((1) und (2)), sowie des Monochromators Nr. 2 ((6) und (7)). Der Umbau zur Positionierung der Druckstufe war nötig, da der Abstand Nutzerventil BESSY – Fokus an den UE56 – Strahlrohren lediglich 770 mm beträgt (inzwischen auf 990 mm geändert). An diesen Strahlrohren steht sowohl horizontal- und vertikal-linear polarisierte Strahlung, sowie zirkular polarisierte Strahlung zur Verfügung. Durch die zirkular polarisierte Strahlung werden Experimente zur Bestimmung des Orientierungsparameters möglich. Dazu muss jedoch die emittierte Fluoreszenzstrahlung außerhalb der Ebene senkrecht zur Ausbreitungsrichtung des Synchrotronstrahls beobachtet werden (vgl. Kap. 4.2). Der Aufbau wurde so modifiziert, dass eine Beobachtung unter 54° und 45° zur Ausbreitungsrichtung der Synchrotronstrahlung möglich ist ((7) und (8)).

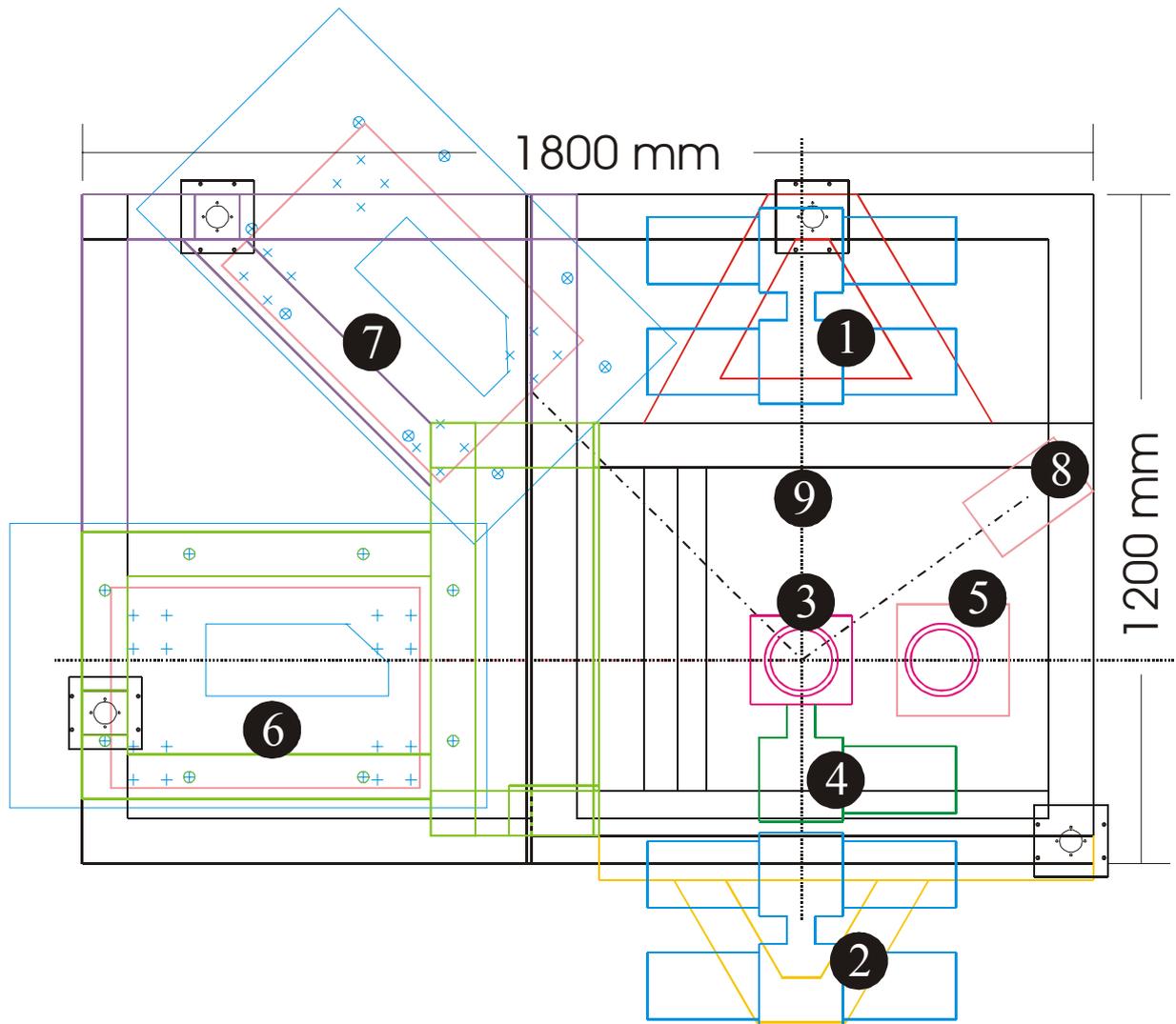


Abb. 3.8: Schematische Darstellung der Apparatur in Draufsicht.

- 1: Position der Druckstufe bei Messungen an den U125-Strahlrohren.
- 2: Position der Druckstufe bei Messungen an den UE56-Strahlrohren.
- 3: Gastargetzelle.
- 4: Elektronenkanone (nur möglich bei Position 1 der Druckstufe).
- 5: Sekundärmonochromator Nr.1; 1m-Normal-Incidence Typ McPherson 225 mit Detektorsystem.
- 6: Sekundärmonochromator Nr.2; 1m-Normal-Incidence Typ Eigenkonstruktion [Wil99] mit Detektorsystem in der Position 0° (vgl. Kap. 4.2).
- 7: Sekundärmonochromator Nr.2; 1m-Normal-Incidence Typ Eigenkonstruktion [Wil99] mit Detektorsystem in der Position 45° (vgl. Kap.4.2).
- 8: Optisches System zur Polarisationsanalyse mit Photomultiplier in der Position 54° (vgl. Kap.4.2).
- 9: Primärstrahl-, sowie Vakuumdiagnostik und verschiedene Vakuumbauteile.

3.2.1.2 Gleitfüße zur Justage

Die in Abb. 3.9 dargestellten Gleitfüße, auf denen der komplette Aufbau mittels Unterstützung durch ein Luftkissen verschoben werden kann, weisen dazu einen Druckluftanschluss auf. Dieser ist bei jedem Fuß individuell über einen Druckminderer an die zentrale Druckluftversorgung angeschlossen. Diese Konstruktion erlaubt es das Luftkissen der jeweiligen Belastung des Fußes anzupassen. In Kombination mit den dazugehörigen Justageplatten ist eine Verschiebung der Apparatur im messbereiten Zustand um 20 mm in jede Raumrichtung möglich.

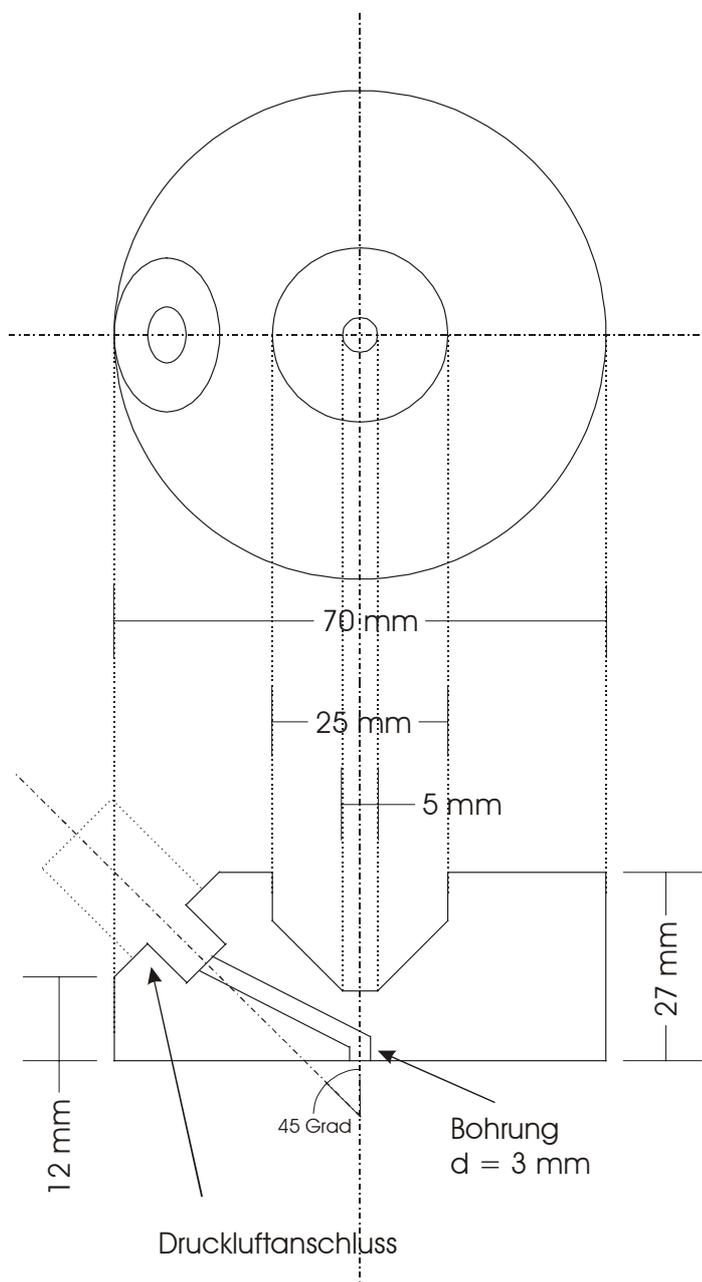


Abb. 3.9:
Gleitfuß zur
luftkissen-
unterstützten
Justage der
Apparatur.

3.2.2 Strahldiagnostikelemente

Die Kontrolle der Lage des Synchrotronstrahls während des Betriebs und während der Justage ist mittels dreier Photozellen und vier isoliert aufgebauter Blenden möglich. An den isoliert aufgebauten Blenden werden durch Auftreffen des Synchrotronstrahls Elektronen ausgelöst. Dieser Elektronenstrom ist über ein empfindliches Amperemeter messbar.

Die erste Photozelle zur Strahlkontrolle befindet sich direkt hinter dem BESSY-Nutzerventil in der Druckstufe des experimentellen Aufbaus, womit die Gesamtzahl der primär ankommenden Photonen bestimmbar wird. Eine weitere Zelle befindet sich im Targetzellenblock direkt vor der Wechselwirkungszone und die dritte direkt dahinter. Damit werden die Verluste der primären Photonen in der Druckstufe, sowie der Gastargetzelle messbar. Indirekt erlauben die Blenden des Gastargetzelleneinschubs dies ebenfalls. Die Unterbringung der Photozellen direkt im Targetzellenblock wurde durch die deutliche Verkürzung des Abstands zwischen Targetzellenblock und Druckstufe notwendig. Durch den geringen Abstand von Wechselwirkungszone und Detektionsfläche ist auch während des Betriebs eine exakte Primärstrahlmessung möglich. Diese wird in Kombination mit dem Spiegelstrom des letzten Beamlinespiegels zur Normierung der Messungen verwendet. Die Optimierung des Abstands zwischen der Druckstufe, welche mit ihren fünf Stufen den Druck unter allen Messbedingungen zur Beamline hin kleiner 5×10^{-9} mbar hält (vgl. [Lie01]), und des Gastargetzellenblocks wurde durch speziell für diesen Bereich angefertigte kleine und leichte Bauteile erreicht. Der Membranbalg und das T – Stück sind in der feinmechanischen Werkstatt angefertigt, das benötigte Kleinflanschventil ist die kleinste Standardausführung. Damit ist eine wesentlich leichtere Ausrichtung der Druckstufe auf die Gastargetzelle möglich.

3.3 Gastargetzellenblock

Die Grundkonzeption dieses Bauteils ist bereits in [Zim03] beschrieben. An diesem zentralen Bauteil wurden im Rahmen dieser Arbeit die meisten Modifikationen vorgenommen. Die Dokumentation ist in der feinmechanischen Werkstatt des

I. Physikalischen Instituts hinterlegt [Sch99-03]. Die Änderungen am Block dienen drei Zielen. Zum einen wurde eine Verbesserung des Vakuums in Monochromator Nr.2 beim Betrieb mit den Detektoren für den Vakuumultravioletten Spektralbereich [Wil99] angestrebt, zum anderen ist die Unterbringung von Strahldiagnostikelementen im Block nötig geworden (s.o.). Weitere gravierende Änderungen haben Messungen des Orientierungsparameters (vgl. Kap. 3.2.1.1) notwendig gemacht. Diese werden in Kap. 3.3.3 beschrieben.

3.3.1 Vakuumtechnische Veränderungen

Die Verbesserung des Vakuums im Monochromator Nr.2 wurde durch den Aufbau einer differentiellen Pumpstrecke und Änderungen direkt im Gastargetzelleneinschub erreicht. Die Gesamtkonstruktion besteht aus drei Blenden, die in ihren Abmessungen so berechnet sind, dass das Spektralgitter in einem Meter Abstand von der Wechselwirkungszone in beiden Dimensionen gerade noch voll ausgeleuchtet wird. Die genauen Abstände und Abmessungen sind in Tab. 3.2 angegeben. Vor der zweiten und dritten Blende ist jeweils eine Pumpe angebracht. Die erste Blende dient nur als Staustufe im Targetzelleneinschub. Um die Saugleistung vor der zweiten Blende zu realisieren wurde ein Loch mit 40 mm Durchmesser im Inneren des Blocks gefräst. Damit übernimmt die bereits am Gastargetzellenblock vorhandene Pumpe diese Aufgabe. Vor der dritten Blende ist eine Turbomolekularpumpe mit einer Saugleistung von 60 l/s installiert. In Kombination mit der am Monochromator angebrachten Pumpleistung von 210 l/s bleibt der Druck im Monochromator unter allen praktischen Bedingungen (Druck in der Wechselwirkungszone <150 mTorr) kleiner 7×10^{-6} mbar. Durch diese Maßnahmen ist ein reibungsloser Betrieb der VUV-Detektoren in Monochromator Nr.2 möglich.

Wegen des Einsatzes des Detektors Nr.4 (Tab. 3.3) für den sichtbaren Spektralbereich in diesem Monochromator ist als vierte Blende (Tab. 3.2) im Monochromatorgehäuse eine Streulichtblende zur Vermeidung von Reflexionen installiert worden. Um dieses Problem noch weiter zu minimieren, wurden die verbauten Aluminiumteile schwarz eloxiert, sowie die kritischen Edelstahlteile mit vakuumtauglichem schwarzen Mattlack lackiert.

| Blende Nr. | Beschreibung | Abstand vom Strahl | Breite | Höhe |
|------------|--|--------------------|---------|-------|
| 1 | Staublende im Targetzelleneinschub | 5 mm | 8 mm | 2 mm |
| 2 | Blende am Ausgang des Targetzellenblocks | 70 mm | 11,5 mm | 8 mm |
| 3 | Blende im T-Stück direkt am Targetzellenblock | 225 mm | 20 mm | 24 mm |
| 4 | Streulichtblende im Inneren des Monochromators Nr. 2 (Eintritts- und Austrittsarm) | ca. 800 mm | 60 mm | 80 mm |

Tabelle 3.2: Dimensionierung des Blendensystems zu Monochromator Nr.2.

3.3.2 Strahldiagnostik im Targetzellenblock

Die Unterbringung der Strahldiagnostik direkt im Gastargetzellenblock erforderte die Erweiterung durch jeweils einen Schwenkmechanismus für die Elemente vor und hinter der Wechselwirkungszone, sowie die nötigen elektrischen Durchführungen. An die Drehdurchführungen können je nach Aufbau und Anwendung Photozellen, sowie ein Cup zur Elektronenstrahldiagnostik angebracht werden. Damit wird die Freigabe der Strahlachse bei der Verwendung der Elektronenkanone und der Photozellen vor der Wechselwirkungszone zur Primärstrahlkontrolle ermöglicht. Die Entscheidung für Drehdurchführungen zum Wegschwenken der Bauteile gegenüber Standardlineardurchführungen wurde aus Platzgründen getroffen. Als Vakuumabdichtung wurde für jede Stange der Drehdurchführung eine Kombination aus zwei Simmerringen mit Vakuumfettschmierung gewählt.

Als Photozellen werden Si-Photodioden mit einer aktiven Fläche von etwa 4x4 mm gewählt. Der Gehäusetyp ist TO-5, die Abdeckung ist aus normalem Glas gefertigt. Um diesen Typ zur Diagnostik der Synchrotronstrahlung ($\lambda_{FI} < 40$ nm) einsetzen zu können, wurde die Glasabdeckung in der Feinmechanischen Werkstatt abgedreht. Die Empfindlichkeit der so veränderten Photozellen nimmt im Laufe einer Strahlzeit aufgrund der Belegung der Oberfläche durch Crack-Produkte und die Schädigung

des Halbleiters durch die sehr intensive Synchrotronstrahlung etwas ab, so dass ein routinemäßiger Austausch nach jeder Messperiode vorgenommen wird.

Der Cup zur Elektronenstrahldiagnostik (siehe Abb. 3.10) befindet sich, ebenfalls innerhalb des Targetzellenblocks. Diese Anordnung wurde gewählt, damit die Elektronen möglichst nah an der Wechselwirkungszone aufgefangen werden können um die Verluste und die damit einhergehenden Fehler zu minimieren. Der Cup ist aus diesem Grund sehr klein gebaut. Außerdem sind Pumpöffnungen realisiert, damit der Druck im Inneren durch den Gasanfall aus der Wechselwirkungszone nicht zu stark ansteigt. Vor dem eigentlichen Cup befinden sich drei Blenden. Im normalen Betrieb ist die Beschaltung folgendermaßen realisiert. Die erste Blende (direkt hinter der Wechselwirkungszone) ist aus Abschirmungsgründen geerdet. Die Zweite ist zur Vermeidung von Sekundärelektronenverlust aus dem Inneren des Cups mit -50 V vorgespannt und die Dritte ist als mechanischer Abschluss mit dem Cup verbunden.

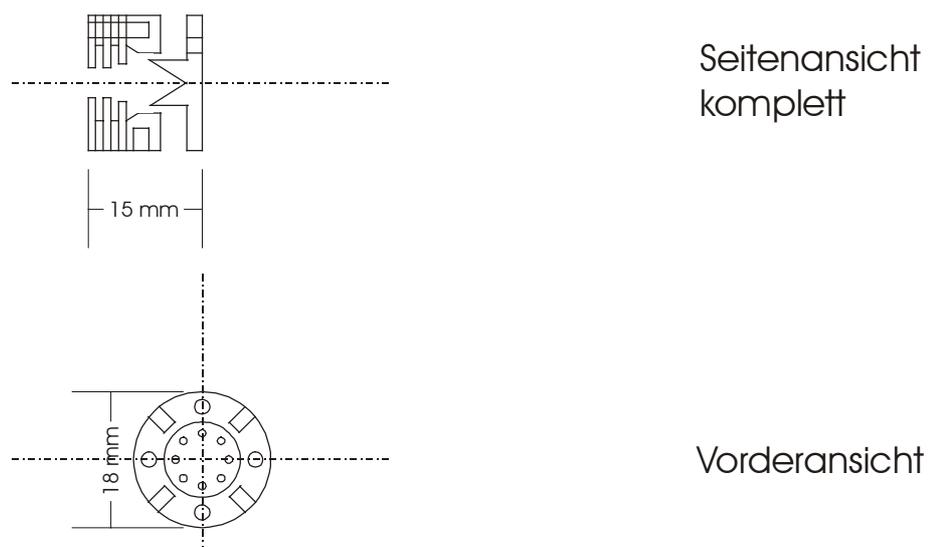


Abb. 3.10: Elektronencup aus Kupfer für den Einsatz im Targetzellenblock (vgl. Abb. 3.11).

3.3.3 Zusätzliche Beobachtungsöffnungen im Targetzellenblock

Die wesentlichen Änderungen am Targetzellenblock im Vergleich zu [Zim03] sind in Abb. 3.11 zu sehen. Wie bereits beschrieben ist zur Messung des Orientierungsparameters die Beobachtung der emittierten Fluoreszenzstrahlung außerhalb der Ebene senkrecht zur Ausbreitungsrichtung des Synchrotronstrahls notwendig. Dazu wurden zwei zusätzliche Beobachtungsöffnungen im Targetzellenblock realisiert, welche die Beobachtung der Fluoreszenz unter 54° und 45° zur Ausbreitungsrichtung der Synchrotronstrahlung ermöglichen.

In einer ersten Testphase wurde lediglich die Öffnung unter 54° in Kombination mit einem modifizierten, bereits vorhandenen Gastargetzelleneinschub realisiert. An diesem Ausgang wurden erste Messungen des Orientierungsparameters O_{10} am Krypton mit einem System aus Polarisationsanalyse, Interferenzfilter und Photomultiplier durchgeführt (Aufbau und Ergebnisse sind in [Sch03] veröffentlicht). Problematisch an den Umbauten waren die sehr beengten Platzverhältnisse, sowie die Gefahr mit den bereits vorhandenen Bohrungen und Fräsungen der Konstruktion eine Verbindung zu erreichen und dadurch die Vakuumdichtigkeit des Blocks zu zerstören. Es wurden deshalb in enger Zusammenarbeit mit den Mitarbeitern der feinmechanischen Werkstatt die erforderlichen Arbeitsschritte geplant und realisiert. Die neuen Bohrungen und Fräsungen wurden so berechnet, dass sich eine größtmögliche Ausnutzung der emittierten Fluoreszenz durch die verwendeten Detektionszweige ergibt.

In der zweiten Stufe des Umbaus wurde die Beobachtungsöffnung unter 45° realisiert. Damit ist nun eine effektivere Messung von O_{10} möglich, da an dieser Beobachtungsöffnung eine komplette Polarisationsanalyse in Kombination mit dem Sekundärmonochromator Nr.2 betrieben werden kann. Diese Umbauphase gestaltete sich noch wesentlich schwieriger als die Erste, da viel weiter in das Innere des Gastargetzellenblocks eingegriffen werden musste. Als Konsequenz dieser Modifikation musste wegen jetzt fehlender Dichtflächen die Möglichkeit aufgegeben werden einen direkten, vakuumdichten Abschluss des Targetzelleneinschubs in Richtung Monochromator Nr.2 unter 90° zu erreichen. Dies wurde in den zurückliegenden Messzeiten nicht genutzt und kann auch durch einen Abschluss am Block erreicht werden. Als einziger Nachteil ist der im Vergleich zur Methode des

direkten vakuumdichten Abschluss am Einschub höhere Gasverbrauch zu nennen, der jedoch im gleichen Rahmen wie bei Messungen im VUV - Spektralbereich liegt. Durch die Kombination dieser beiden zusätzlichen Beobachtungsöffnungen mit den bereits vorhandenen Beobachtungsöffnungen wurde die Neukonstruktion eines Targetzelleneinschubs nötig um die Apparatur so flexibel wie möglich zu halten. Dieser wird im folgenden Kapitel beschrieben.

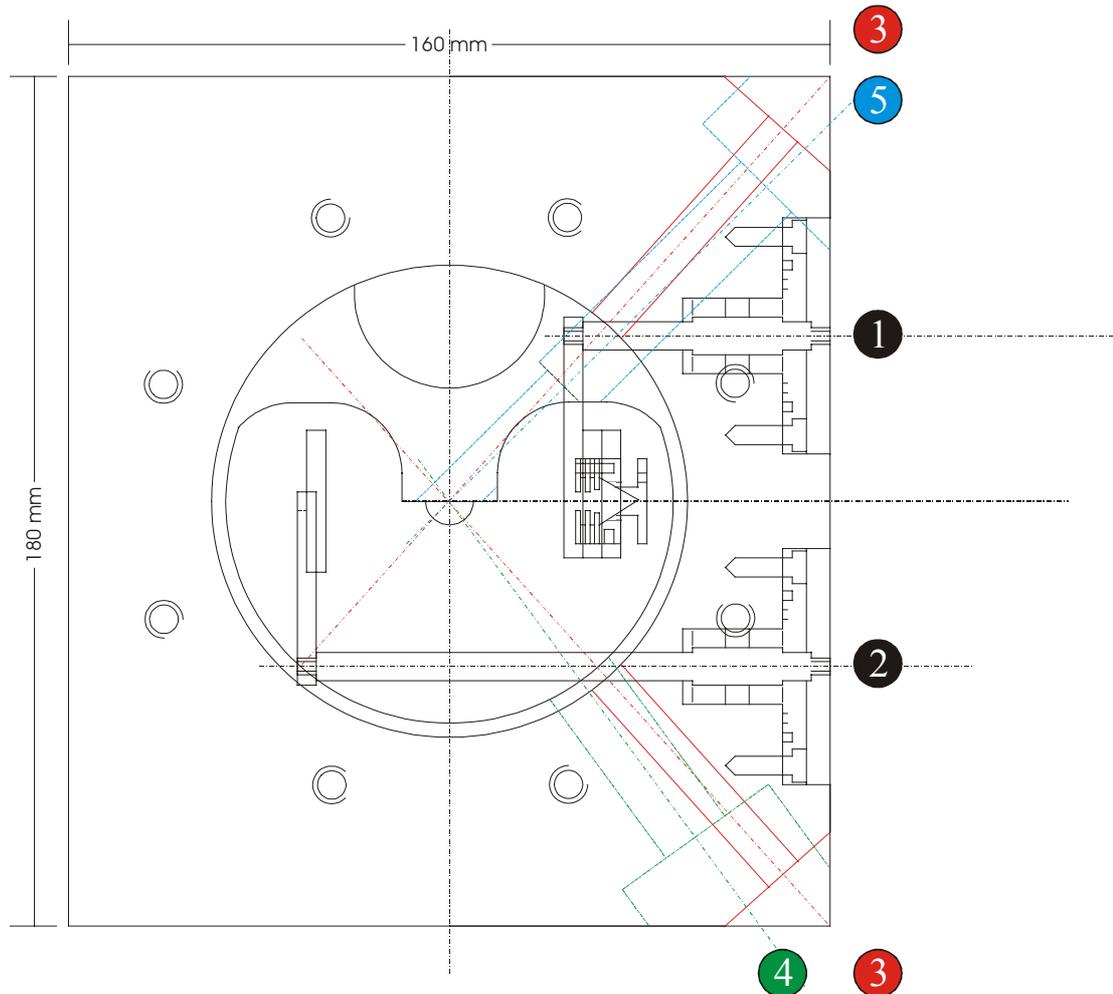


Abb. 3.11: Darstellung einiger Details des Targetzellenblocks in Draufsicht.

- 1: Schwenkmechanismus mit angebautem Elektronencup.
- 2: Schwenkmechanismus mit angebaute Photodiode.
- 3: Bohrungen der elektrischen Durchführungen für Elektronencup und Photodiode (insges. 4 Stück).
- 4: Beobachtungsöffnung unter 54° zur Ausbreitungsrichtung des Synchrotronstrahls.
- 5: Beobachtungsöffnung unter 45° zur Ausbreitungsrichtung des Synchrotronstrahls.

3.3.4 Gastargetzelleneinschub

Die sehr vielfältigen Einsatzbereiche des Messaufbaus haben eine Gastargetzelle mit modularem Aufbau entstehen lassen (siehe z.B. [Zim03]). Die eigentliche Wechselwirkungszone, der Gastargetzelleneinschub, sitzt auswechselbar im Gastargetzellenblock. Die verschiedenen Einschübe sind für den jeweiligen Einsatzzweck mit Glasabdeckungen (Spektroskopie im Sichtbaren) oder offenen Beobachtungsöffnungen (Spektroskopie im VUV) ausgerüstet. Die Neukonstruktion des Gastargetzelleneinschubs besitzt nun drei Beobachtungsöffnungen (vgl. Abb. 3.12). Eine zu dem Sekundärmonochromator Nr.1 **(a)**, sowie eine unter 54° **(b)** und eine unter 45° **(c)** zur Ausbreitungsrichtung des Synchrotronstrahls. Die Öffnung unter 90° (Monochromator Nr.2 unter 90° ; vgl. Abb. 3.8) ist nicht realisiert. Da eine Polarisationsanalyse in der verwendeten Form auf den sichtbaren Spektralbereich beschränkt ist, sind die Beobachtungsöffnungen **(b)** und **(c)** sowohl im Gastargetzelleneinschub, als auch im Gastargetzellenblock mit Quarzglasscheiben abgeschlossen.

Ein vollständiger Satz technischer Zeichnungen ist im Anhang in Kapitel 7.2 angefügt. Dort sind auch die Zeichnungen des Gastargetzelleneinschubs zur Magnetfeldabschirmung (vgl. Kap. 3.6) aufgeführt.

3.4 Elektronenkanonenwürfel

Wie bereits erwähnt ist auch der Abstand der Elektronenkanone zur Wechselwirkungszone so weit wie möglich reduziert worden um die durch die, nach längerer Flugstrecke entstehende, Aufweitung des Elektronenstrahls resultierenden Verluste zu minimieren. Die Elektronenkanone wird z.B. bei den Experimenten zu doppelt angeregten Heliumzuständen [Sch01] oder in Kalibrationsexperimenten eingesetzt. Die vorhandene Aufnahme der Kanone mit Manipulator und den elektrischen Durchführungen wurde dazu lediglich modifiziert. Komplet neu wurde jedoch der Würfel für die notwendige Pumpe und Vakuummessröhre, sowie das Verbindungsteil zum Targetzellenblock, konstruiert. Zwischen Elektronenkanone

und Targetzellenblock befindet sich eine Blende mit 4 mm Durchmesser, um den Gasanfall an der Elektronenkanone zu reduzieren. Dieser ist durch die räumliche Nähe zur Wechselwirkungszone im Vergleich zu der früheren Anordnung wesentlich größer.

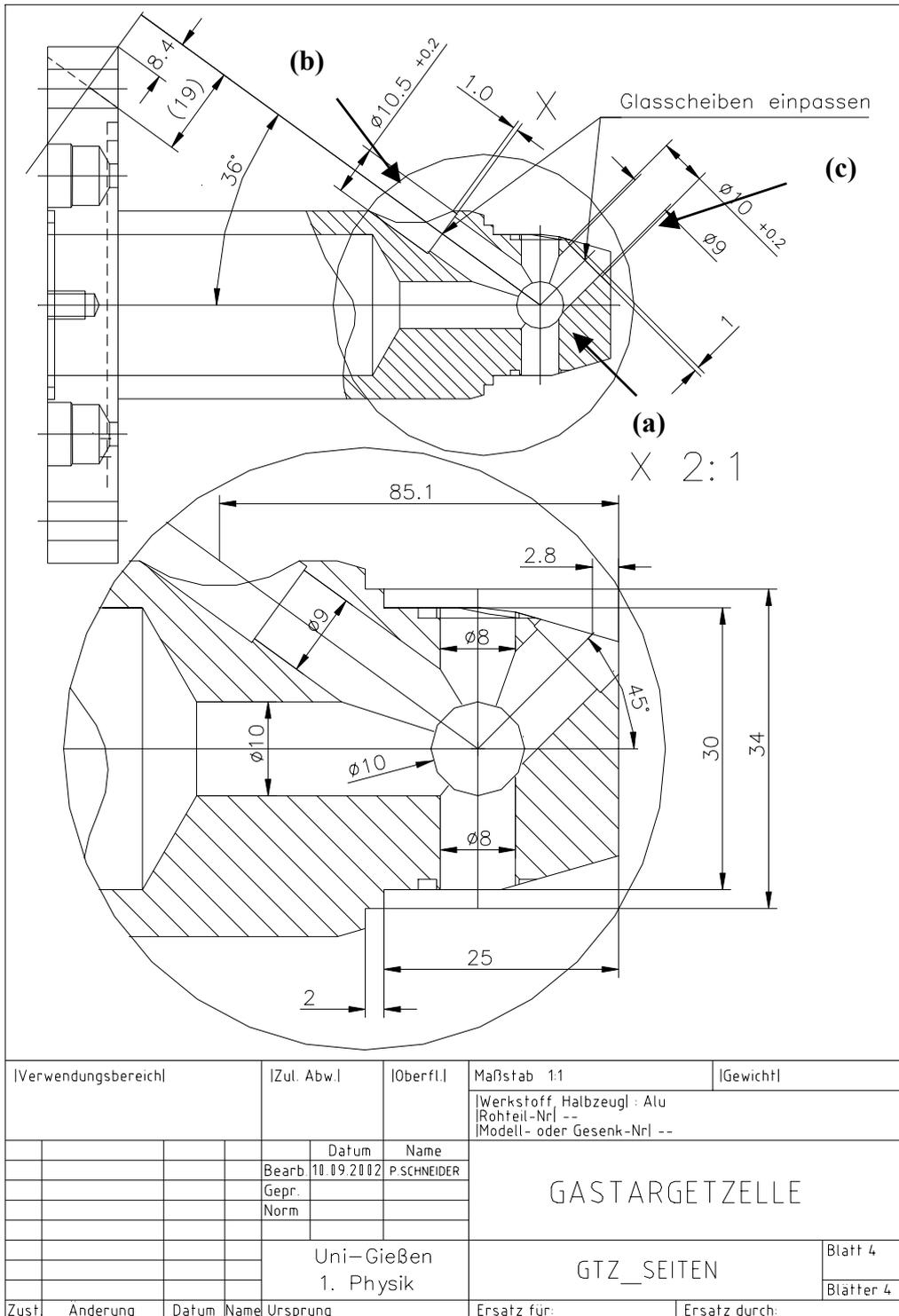


Abb. 3.12: Technische Zeichnung des Al – Gastargetzelleneischubs [Sch99-03].

3.5 Monochromatoren und Detektionssysteme

Für die unterschiedlichen Einsatzzwecke stehen zwei Monochromatoren mit vier verschiedenen Detektionssystemen, sowie zwei optische Systeme zur Polarimetrie zur Verfügung. Ein weiteres Detektionssystem bilden die Ein- und Austrittsblende des Gastargetzelleneinschubs. Die beiden isoliert aufgebauten Blenden (vgl. Kap. 3.2.2) werden dazu mit einer Spannung von etwa -10 V vorgespannt (Austrittsblende) und über das empfindliche BESSY – Strommessgerät geerdet (Eintrittsblende). Die negative Vorspannung der Austrittsblende verhindert zum einen das Auftreffen von Photoelektronen auf die direkt dahinter angebrachte Photozelle, zum anderen werden sie auf die Eintrittsblende gedrückt und können als Strom in Abhängigkeit der Energie der anregenden Photonen registriert werden. Damit steht eine weitere empfindliche Messmethode zeitgleich zur Registrierung der emittierten Fluoreszenz zur Verfügung. Man kann auf diese Weise das “total ion yield“, also den Wirkungsquerschnitt aller unter Elektronenemission möglichen Prozesse messen. Außerdem ist diese Messmethode sehr hilfreich bei der schnellen energetischen Lokalisierung von doppelt angeregten Zustände.

3.5.1 Die Monochromatoren und Detektoren

Beide Monochromatoren sind durch den Einsatz verschiedenster Gitter in Spektralbereichen von ca. 30 nm bis etwa 700 nm zu betreiben. Eine detaillierte Auflistung der Gitter ist in [Zim03] zu finden. Der Sekundärmonochromator Nr.1 (vgl. Kap. 3.2.1.1) ist ein kommerzieller 1m-Normal-Incidence Monochromator vom Typ McPherson 225. Der Monochromator Nr.2 ist eine Eigenkonstruktion [Wil99], in der jedoch sämtliche Gitter aus Monochromator Nr.1 betrieben werden können. Der Monochromator Nr.2 wurde oft als Testplattform für verschiedene Detektoren (siehe Tab. 3.3) verwendet. Dazu ist dieser Monochromator sehr gut geeignet, da sein modularer Aufbau im Ein- und Austrittsarm eine flexible Anpassung an die Detektoren ermöglicht. Es steht z.B. ein Manipulator für den CCD – Detektor unserer Arbeitsgruppe [Mei04] zur Verfügung.

Außerdem ist jetzt eine stabile Halterung für den Detektor Nr.4 (siehe Tab. 3.3) vorhanden. Um im sichtbaren Spektralbereich zu messen, wurden die in Kap. 3.3.1 beschriebenen Veränderungen zur Vermeidung der Streustrahlung vorgenommen.

Als Detektionssysteme für die beiden Monochromatoren stehen zwei offene Microchannelplate Detektoren für den Spektralbereich von etwa 30 bis 120 nm zur Verfügung. Diese Systeme sind Eigenkonstruktionen und z.B. in [Kra91] beschrieben. An diesen Spektralbereich anschließend ist ein abgeschmolzener Microchannelplate Detektor mit Cäsiumjodid beschichteter Photokathode und MgF_2 – Fenster [Lie01] aus der Arbeitsgruppe Schmoranzner (Universität Kaiserslautern) vorhanden. Sein Einsatzgebiet liegt im Spektralbereich von 115 bis etwa 200 nm. Ebenfalls aus dieser Arbeitsgruppe ist das Detektionssystem für den sichtbaren Spektralbereich [Men98]. Auf die Besonderheiten des Systems wird hier nicht mehr eingegangen, da es bereits in zahlreichen Arbeiten beschrieben ist (vgl. Kap. 3.2). Das Einsatzspektrum reicht von etwa 350 nm bis über 700 nm. Testmessungen an Monochromator Nr.2 (ohne die zum Einsatz auf Monochromator Nr.1 notwendige Optik) haben gezeigt, dass dieses Detektionssystem eine, wenn auch sehr geringe, Effizienz im Bereich bis 200 nm hat. Somit stehen fast für den gesamten oben erwähnten Spektralbereich sehr empfindliche und gleichzeitig untergrundarme Detektoren für den Fluoreszenznachweis zur Verfügung. Wünschenswert wäre jedoch noch die Schließung der Lücke von etwa 200 bis 300 nm. Eine Übersicht der Detektoren befindet sich in Tabelle 3.3.

| | Wellenlängenbereich | Fenstermaterial | Microchannelplates | Hersteller | Besonderheiten |
|---|---------------------|-----------------------|--------------------|------------|--|
| 1 | 30 – 120 nm | offen | 2 | Eigenbau | Betriebsdruck < 1×10^{-5} mbar |
| 2 | 30 – 120 nm | offen | 2 | Eigenbau | Austausch des obersten Plates gegen ein mit Kaliumbromid bedampftes. |
| 3 | 115 – 200 nm | Magnesium- fluorid | 5 | ITT | Betriebsdruck < 5×10^{-4} mbar |
| 4 | 300 – >700 nm | Quarz | 5 | ITT | Peltier- und Umlaufkühlung ca. -20 °C |

Tabelle 3.3: Eigenschaften der verschiedenen Detektoren.

3.5.2 Optische Systeme

Die optischen Systeme zur Polarimetrie bestehen in einem Fall aus einer Anordnung aus einer Linse, einem $\lambda/4$ – Plättchen, der rotierenden Polarisationsfolie mit Schrittmotor, austauschbaren Interferenzfiltern für verschiedene Wellenlängen, einer weiteren Linse und dem Photomultiplier (siehe [Sch03]). Im zweiten Fall ist das $\lambda/4$ – Plättchen und die rotierende Polarisationsfolie mit dem Monochromator Nr.2 und Detektor Nr.4 kombiniert.

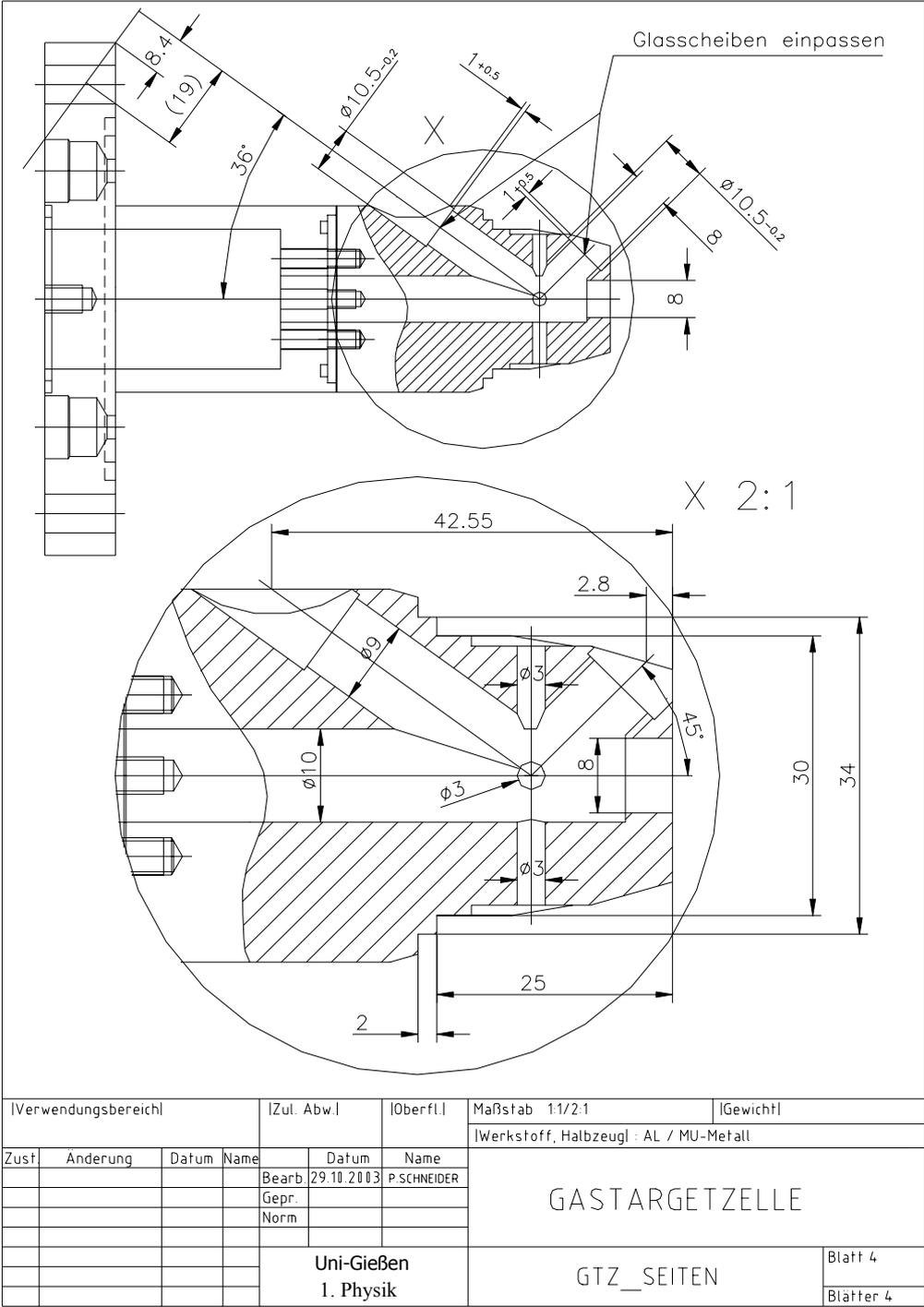


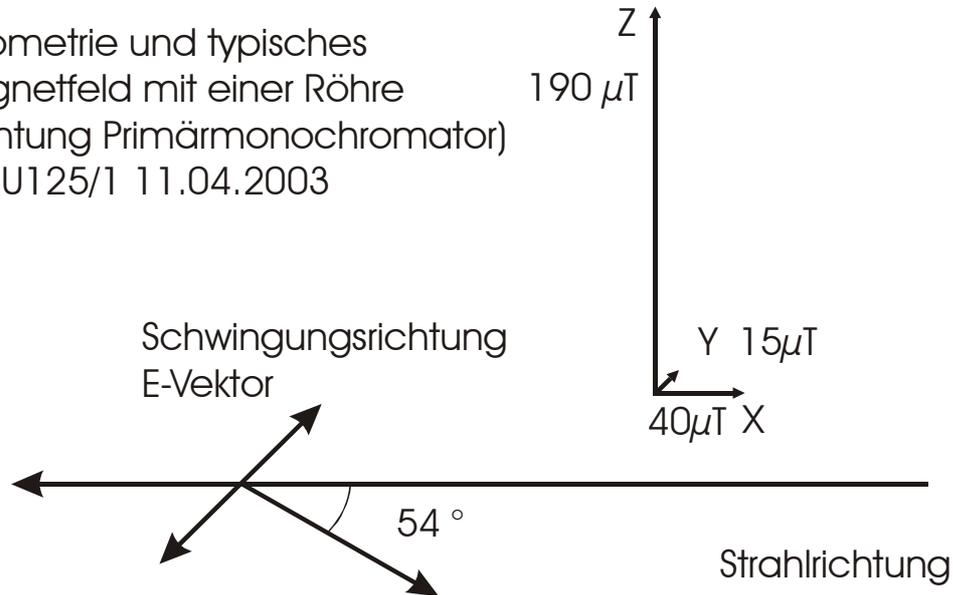
Abb. 3.13: Technische Zeichnung Mu – Metall Gastargetzelleneinschub [Sch99-03].

3.6 Magnetfelder

Die hochempfindlichen Messungen des Alignmentparameters A_{20} zeigten Störungen, die nur durch ein schwaches Magnetfeld am Ort der Wechselwirkung erklärt werden können. Dieses schwache Magnetfeld wird durch verschiedene Quellen hervorgerufen, welche nur schlecht oder prinzipiell gar nicht zu unterdrücken sind. Es entsteht einerseits durch die verwendeten schnelldrehenden Turbomolekular Pumpen und die Vakuumdiagnostik mittels Penning – Vakuummessröhren, andererseits durch das Magnetventil des Gasregelsystems. Als weiteres Problem stellte sich der verwendete Monochromator Nr.1 heraus, dessen Gussgehäuse leicht aufmagnetisiert ist. Einen kleinen Einfluss übt das Erdmagnetfeld aus. Die räumliche Verteilung des Magnetfeldes in der Wechselwirkungszone, gemessen mit einer Hallsonde, ist in Abb. 3.14 zu sehen. Die oben genannten Faktoren führten dazu, dass eine magnetische Abschirmung der Wechselwirkungszone vorzunehmen war. Eine erste Testphase wurde durch Modifikation des vorhandenen Gastargetzelleneinschubs mittels eines Röhrchens aus Mu – Metall im Inneren des Einschubs realisiert. Als Material wurde Rohmaterial der Fa. Vacuumschmelze Hanau (VAC) verwendet, welches nach der Bearbeitung in der Feinmechanischen Werkstatt durch Glühen in der VAC die gewünschten magnetischen Abschirmungseigenschaften erhalten hat. Der Testeinsatz dieser Konstruktion zeigte eine hervorragende Unterdrückung der Magnetfelder in der Wechselwirkungszone. Es bestehen allerdings einige gravierende Nachteile. Zum einen stehen nur die Beobachtungsöffnungen unter 54° (optisches System) und unter 0° (Monochromator Nr.2) zur Verfügung, zum anderen ist die Beobachtungslänge der Wechselwirkungszone zwischen Synchrotronstrahl und Targetgas eingeschränkt. Aus diesem Grund wurde eine Neukonstruktion eines Gastargetzelleneinschubs aus Mu – Metall realisiert. Die Fertigungsschritte und Materialauswahl sind wie bei der oben beschriebenen Modifikation des vorhandenen Al – Gastargetzelleneinschubs mittels eines Mu – Metallröhrchens durchgeführt worden.

Aufgrund von fertigungstechnischen Schwierigkeiten und der Materialbeschaffung wurde eine zweiteilige Ausführung des Gastargetzelleneinschubs entwickelt (vgl. Abb. 3.13 und Kap. 7.2.2). Die Schwierigkeit bestand in Bearbeitung des Materials, welches nicht mit konventionellen Werkstoffen vergleichbar ist. Andererseits war, aus der Notwendigkeit einer guten magnetischen Abschirmungseigenschaft heraus, die Vorgabe gesetzt, die Beobachtungsöffnungen so klein wie möglich zu halten. Aus diesem Grund war es nicht mehr möglich wie in den ursprünglichen Konstruktionen (Abb.3.12) die Öffnungen als Bohrungen auszuführen. Bis auf die Beobachtungsöffnung unter 54° , die in der traditionellen Weise gebohrt wurde, sind die anderen Öffnungen nun als Spalte von 3 mm Breite gefräst. Diese Maßnahmen führten zu dem in Abb. 3.13 gezeigten Gastargetzelleneinschub, der alle Beobachtungsöffnungen enthält. Diese Gastargetzelle unterdrückt das Magnetfeld in allen drei Raumrichtungen am Ort der Wechselwirkungszone bis auf einen nicht messbaren Restwert von weniger als $2 \mu\text{T}$.

Geometrie und typisches
Magnetfeld mit einer Röhre
(Richtung Primärmonochromator)
am U125/1 11.04.2003



Beobachtung in der Schwingungsebene des E-Vektors (horizontal)

Abb. 3.14: Komponenten der drei Raumrichtungen des Magnetfeldes in der Wechselwirkungszone ohne Magnetfeldabschirmung.

4 Messmethode

In diesem Kapitel wird die verwendete Messmethode und Ihre Anwendung auf den speziellen Fall dieser Messungen erläutert. Es werden die geometrischen Zusammenhänge zwischen Experiment und den gemessenen Größen beschrieben. Das Verfahren zur Verarbeitung der Rohdaten wird erläutert, insbesondere wird auf die Energiekalibrierung und die Absolutnormierung der Daten eingegangen.

4.1 Photoneninduzierte Fluoreszenzspektroskopie

Die für diese Experimente angewendete Messmethode ist die photoneninduzierte Fluoreszenzspektroskopie (PIFS). Dabei wird die von Edelgasionen, oder allgemein von Atomen und Molekülen, nach der Anregung mit Synchrotronstrahlung emittierte Fluoreszenzstrahlung spektral aufgelöst detektiert und z.B. nach ihren Polarisationskomponenten analysiert. Dies setzt voraus, dass sich nach der Anregung mit der Synchrotronstrahlung ein Elektron in einem angeregten Zustand i befindet und dann einen Übergang auf ein tieferliegendes Niveau f macht. Gleichzeitig dazu wird in den hier untersuchten Prozessen ein weiteres Elektron ins Kontinuum gebracht (siehe Abb. 4.1). Dieses Elektron wird bei der klassischen Photoelektronenspektroskopie (PES) analysiert. Aus den erhaltenen Daten der Fluoreszenzintensitäten und deren Winkelverteilung lässt sich der Wirkungsquerschnitt σ und der Winkelasymmetrieparameter der Fluoreszenzstrahlung β_{fl} in Abhängigkeit von der Energie der anregenden Photonen bestimmen.

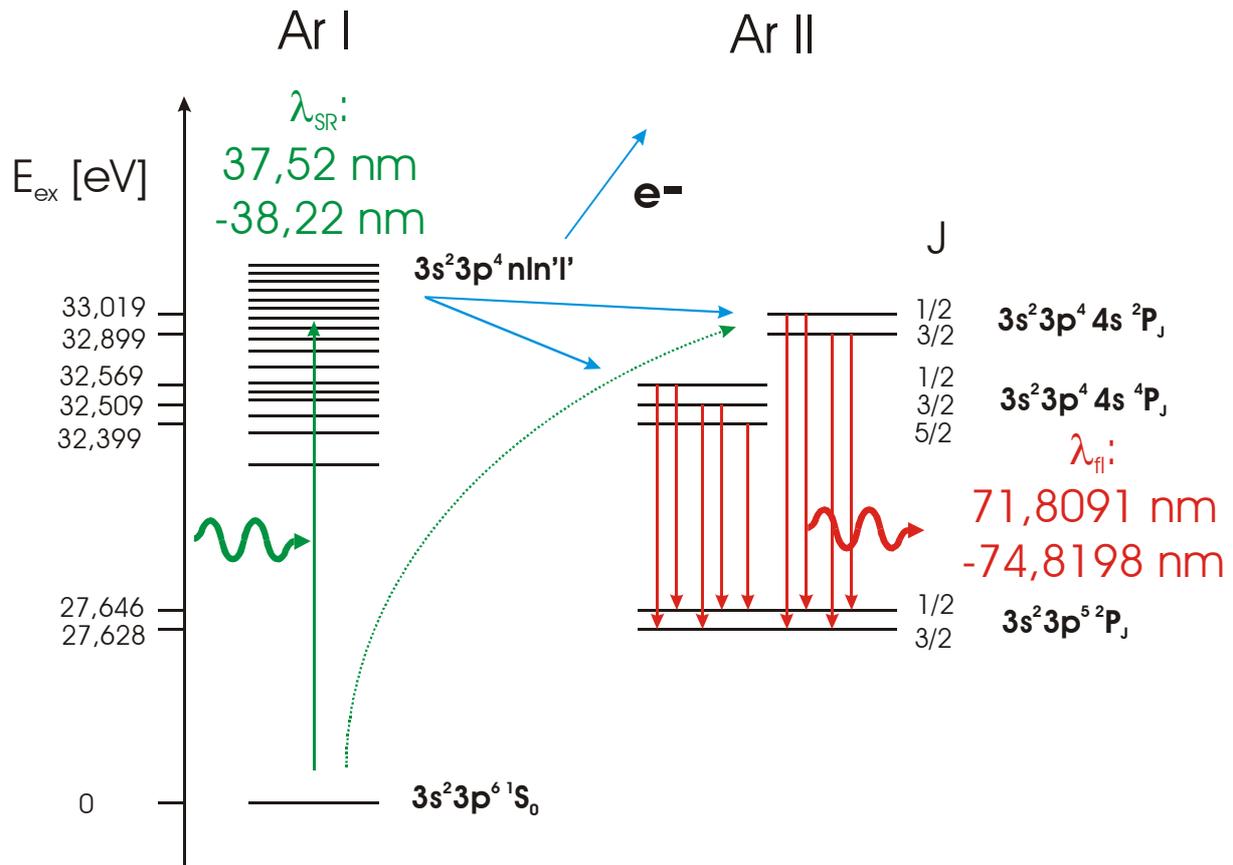


Abb. 4.1: Schematische Darstellung des untersuchten Prozesses.

4.2 Geometrie des Aufbaus

Der in Kap. 3.2 beschriebene experimentelle Aufbau mit den Monochromatoren und dem optischen Zweig ist in dieser Geometrie angeordnet, um die entsprechenden Messgrößen bestimmen zu können. Zur Bestimmung des Orientierungsparameters O_{10} ist es notwendig die Fluoreszenzstrahlung außerhalb der Ebene senkrecht zur Ausbreitungsrichtung der Synchrotronstrahlung zu detektieren. Deshalb sind die beiden Zweige zur Polarimetrie unter einem Winkel von 54° und 45° zur Ausbreitungsrichtung der Synchrotronstrahlung aufgebaut. Für diese Messungen muss zirkular polarisierte Synchrotronstrahlung (Kap.3.1.2) verwendet werden. Eine sinnvolle Quantisierungsachse stellt die Ausbreitungsrichtung der anregenden Strahlung dar. Die Beschriftungen und Bezeichnungen in Kap. 3.2.1.1 sind in Übereinstimmung mit diesen Quantisierungsvorschriften gewählt. Im Gegensatz dazu ist bei der Messung des Alignmentparameters A_{20} bzw. des

Winkelasymmetrieparameters β_{fl} aus Symmetriegründen als Quantisierungsachse die Schwingungsrichtung des E-Vektors der anregenden Synchrotronstrahlung zu bevorzugen. Da in den meisten Experimenten Synchrotronstrahlung mit horizontaler linearer Polarisation verwendet wurde, bezeichnet die Monochromatorposition 0° (von Monochromator Nr.2) eine Beobachtungsrichtung horizontal und senkrecht zur Ausbreitungsrichtung des Synchrotronstrahls. Die in diesem Zweig gemessenen Intensitäten werden mit I_{0° bezeichnet. Es ist in diesem Zweig nur möglich I_{\perp} zu messen (siehe Abb. 4.2).

Ist ein Monochromator mit seiner optischen Achse senkrecht zur Ausbreitungsrichtung des Synchrotronstrahls und senkrecht zur Schwingungsrichtung des E-Vektor der linear horizontal polarisierten Synchrotronstrahlung installiert, so werden die dort gemessenen Intensitäten mit I_{90° bezeichnet. In diesem Signal sind die Informationen der Intensitäten I_{\perp} und I_{\parallel} enthalten (siehe Abb. 4.2). Dies ist im Fall des verwendeten Aufbaus die Position von Monochromator Nr.1.

Prinzipiell ist es möglich mit dieser Apparatur die Intensitäten I_{\perp} und I_{\parallel} mit den beiden Monochromatoren gleichzeitig zu messen. Dies wurde auch im Fall der Spektroskopie im Vakuumultravioletten durchgeführt, da für jeden Monochromator Detektoren und Spektralgitter für diesen Wellenlängenbereich zur Verfügung stehen. Um aus diesen Daten jedoch den Alignmentparameter A_{20} bzw. den Winkelasymmetrieparameter β_{fl} zu bestimmen muss man die experimentellen Bedingungen sehr genau kennen. Insbesondere sollten die Bedingungen in den Detektionszweigen möglichst vergleichbar sein, um apparative Effekte ausschließen zu können. Dies ist jedoch nicht der Fall, da die Monochromatoren nicht identisch sind. Es stehen nur Gitter mit unterschiedlicher Bedampfung und Linienzahl zur Verfügung und auch die Detektoren sind nicht gleich empfindlich. Deshalb wird in Kapitel 5.2 auf die Auswertung der Daten bezüglich des β_{fl} – Parameters verzichtet.

Eine sehr gute Möglichkeit zur Messung des β_{fl} – Parameters ist im sichtbaren Spektralbereich durch die Verwendung eines Wollastonprismas gegeben (Ergebnisse in Kap. 5.5). Dieses Prisma zerlegt die ankommende Fluoreszenzstrahlung, bei entsprechender Ausrichtung seiner optischen Achsen, in die Komponenten I_{\perp} und I_{\parallel} , so dass diese gleichzeitig auf einem positionsempfindlichen Detektor registriert werden können. Damit sind die apparativen Bedingungen vergleichbar und man kann aus den gewonnenen Daten den β_{fl} – Wert berechnen. Das Wollastonprisma ist im

Austrittsarm von Monochromator Nr.1 eingebaut. Eine sehr detaillierte Beschreibung ist in [Zim98] enthalten.

Eine weitere Möglichkeit den Winkelasymmetrieparameter zu messen besteht darin, bei fester Beobachtungsrichtung der Fluoreszenzstrahlung die Polarisation der anregenden Synchrotronstrahlung in aufeinanderfolgenden Messungen zu variieren (siehe [Men98] und Abb. 4.2). Bei BESSY I wurde dies in den Messungen zu den Ergebnissen in Kap. 7.1 [Mag95] angewendet. Die optische Achse des Sekundärmonochromators ist horizontal und senkrecht zur Ausbreitungsrichtung des Synchrotronstrahls festgelegt. Der E-Vektor der anregenden Photonen schwingt einmal horizontal und einmal vertikal. Daraus ergeben sich auf dem Detektor die Intensitäten I_{0° und I_{90° aus denen die gewünschten Informationen entnommen werden können (siehe Kap 4.2.1).

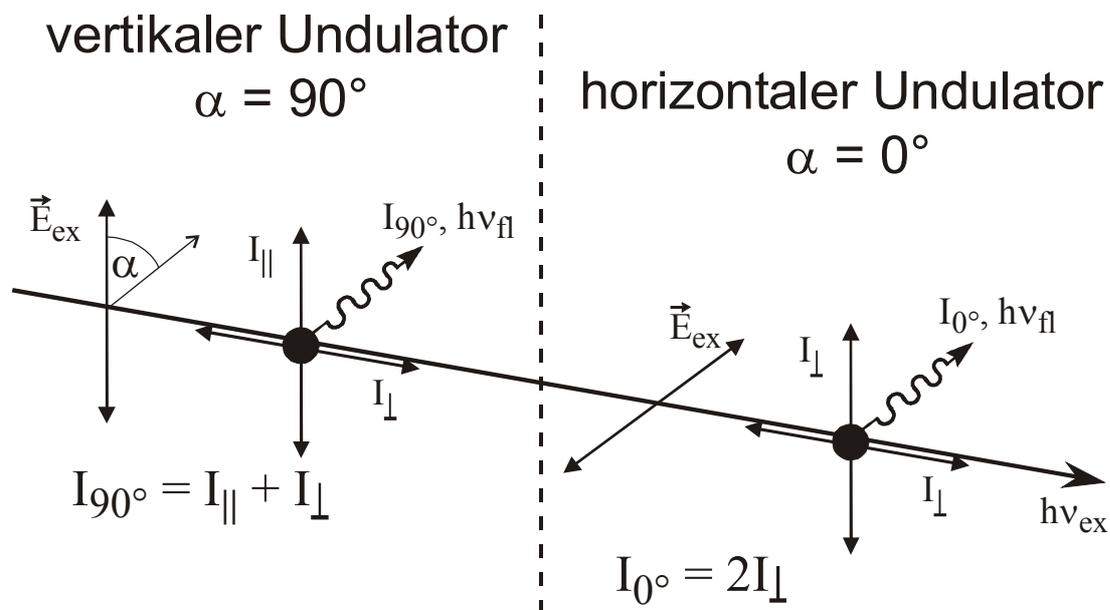


Abb. 4.2: Zusammenhang zwischen den gemessenen Intensitäten I_{0° , I_{90° und den Komponenten $I_{||}$, I_{\perp} der Fluoreszenzstrahlung [Men98].

4.2.1 Bestimmung des Winkelasymmetrieparameters aus den experimentellen Daten

In Abb. 4.2 ist der Zusammenhang zwischen den beobachteten Fluoreszenzintensitäten I_{0° , I_{90° und den in Kapitel 2 eingeführten Intensitäten $I_{||}$ und I_{\perp} gezeigt.

Die Messungen zur Bestimmung des β_{fl} – Parameters wurden, wie bereits erwähnt auf zwei Arten durchgeführt.

Bei den Messungen mit Wollastonprisma liegt im Prinzip der Fall im linken Teil der Abb. 4.2, mit vertikalem Undulator vor. Bei BESSY II ist allerdings die anregende Strahlung linear horizontal polarisiert und die Beobachtungsrichtung vertikal von unten auf die Wechselwirkungszone orientiert. Wichtig ist jedoch, dass wie in Abb. 4.2 gezeigt, prinzipiell die Intensitäten I_{\parallel} und I_{\perp} in dieser Beobachtungsrichtung detektiert werden können. Die Zerlegung in die Komponenten I_{\parallel} und I_{\perp} geschieht mittels des Wollastonsprismas (vgl. Kap. 4.2).

Bei den Messungen im VUV am gekreuzten Undulator von BESSY I liegen exakt die Bedingungen von Abb. 4.2 vor. Der Beobachtungswinkel α der Fluoreszenzstrahlung in Bezug zum E–Vektor der anregenden Strahlung wird, durch die Verwendung der beiden Undulatoren als Primärstrahlquelle, zwischen den Werten 0° und 90° variiert. Die dabei auf den Detektor treffenden Intensitäten ergeben sich wie folgt:

$$\begin{aligned} \alpha = 90^{\circ} & \quad \Rightarrow \quad I_{90^{\circ}} = I_{\parallel} + I_{\perp} \\ \alpha = 0^{\circ} & \quad \Rightarrow \quad I_{0^{\circ}} = 2I_{\perp}. \end{aligned} \tag{4.1}$$

Nach Kapitel 2 Gleichung (2.6) ist β_{fl} :

$$\beta_{fl} = \frac{I_{\perp} - I_{\parallel}}{2I_{\perp} + I_{\parallel}} \tag{4.2}$$

Mit (4.1) ergibt sich damit:

$$\beta_{fl} = \frac{I_{0^{\circ}} - I_{90^{\circ}}}{\frac{I_{0^{\circ}}}{2} + I_{90^{\circ}}} \tag{4.3}$$

Damit sind auch die Daten der Messungen mit gekreuztem Undulator bezüglich des Winkelasymmetrieparameters auswertbar.

4.3 Verarbeitung der Messdaten

In diesem Abschnitt wird die Datenauswertung, welche zu den Ergebnissen in Kap. 5 führt, erläutert. Die Datenaufnahme ist bereits in vorangegangenen Arbeiten (siehe z.B. [Men98]) erläutert und wird hier nicht mehr vorgestellt. Die Verarbeitung der so erhaltenen Rohdaten läuft nach folgendem Schema ab:

Die erstellten Listmode-Files (*.LST) enthalten die gesamten Informationen. Diese werden zuerst gesplittet, so dass für jeden Energiepunkt der Messreihe ein einzelnes *.LST – File entsteht. In diesen Einzel- *.LST – Files sind dann in der Regel die Informationen von mehreren Durchläufen einer Messung enthalten. Diese *.LST – Files enthalten die kompletten Informationen des 2D – Detektors, welche nun mittels PAFORDOS ([Sta94], [Sta98]) in Summenfiles (*.sum) umgewandelt werden und damit die bekannte Form eines Linienspektrums haben. Die *.sum – Files werden danach in dem Fitprogramm FitForX [Wer93] weiterbearbeitet, so dass für jede im Spektrum enthaltene Fluoreszenzwellenlänge ein energieabhängiges Signal entsteht. Die erhaltenen Daten werden auf den Fluss der anregenden Photonen normiert. Dazu werden die Informationen des BESSY II Steuerrechners benötigt, der unter anderem auch das Signal der nach der Wechselzone eingebauten Photozelle mitschreibt. Nun erfolgt die Absolutkalibrierung der Energie der anregenden Photonen (siehe Kap. 4.4) und die Absolutnormierung der Daten. Auf diese Weise erhält man als Messgröße den Wirkungsquerschnitt des betrachteten Fluoreszenzübergangs als Funktion der Energie der anregenden Synchrotronstrahlung (siehe Kap. 4.5).

Kann man nun aus den Daten auch den Winkelasymmetrieparameter bestimmen, so werden die Informationen von I_{\parallel} und I_{\perp} auf einen Übergang bezogen, welcher als Ausgangszustand ein Niveau mit Gesamtdrehimpuls $J = 1/2$ (Kugelsymmetrie) und damit einen Winkelasymmetrieparameter von Null (z.B. ein $s_{1/2}$ Zustand) besitzt. Dies ist notwendig um z.B. instrumentelle Effekte vom Wollastoprisma und vom Detektor zu eliminieren. Hat man die Daten entsprechend normiert kann man aus I_{\parallel} und I_{\perp} mit Hilfe von Formel (2.7) den β_{fl} – Parameter berechnen und ebenfalls in Abhängigkeit der Energie der anregenden Photonen auftragen (vgl. Kap. 5.5).

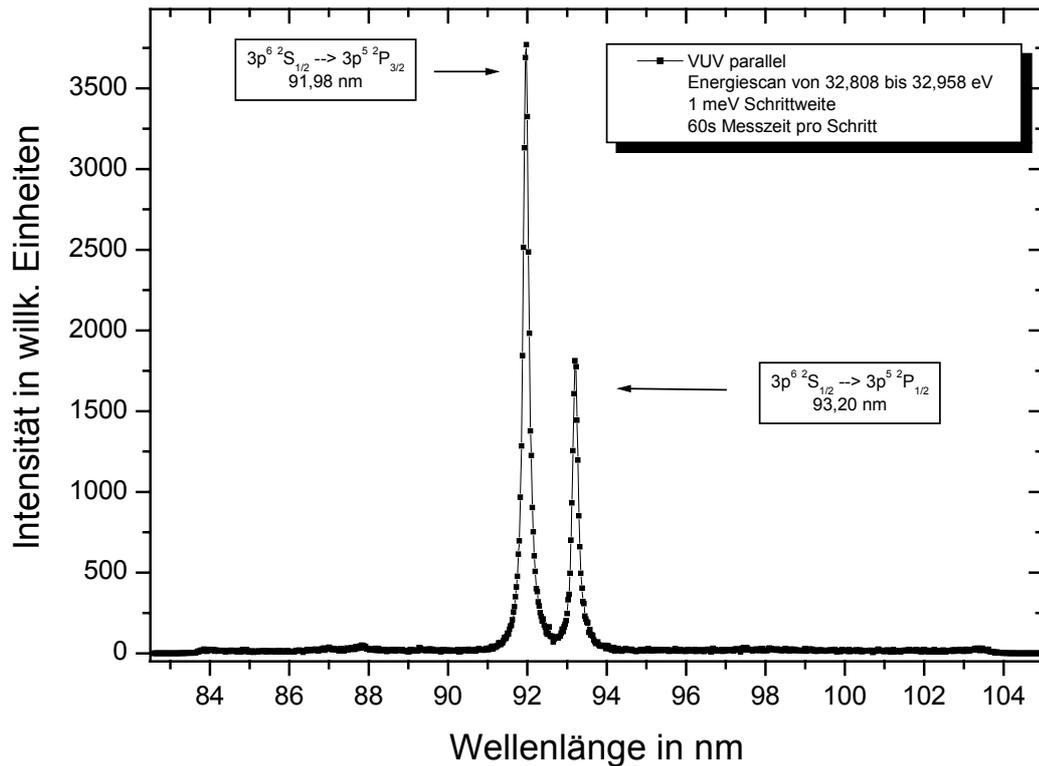


Abb. 4.3: Fluoreszenzspektrum von Argon nach Anregung mit linear horizontal polarisierter Synchrotronstrahlung.

4.4 Absolutkalibrierung der Energie der anregenden Photonen

Die Energievorgaben bei Messungen an den Beamlines von BESSY II stimmen im Normalfall nicht ganz genau. Es ergeben sich meist Abweichungen im Bereich von einigen 10 meV. Daher ist es notwendig die Daten bezüglich der Energie an die Literaturwerte anzupassen. Zur Kalibrierung der Daten in Kapitel 5 wurden Messungen durchgeführt, welche den gesamten Energiebereich in einem Durchlauf überstreichen. In dem erhaltenen Fluoreszenzspektrum ist der Übergang $\text{Ar}^+ 4s^2 P_{3/2} \rightarrow 3p^5 2P_{3/2}$ bei 72,34 nm gut zu identifizieren. Die Ionisationsschwelle dieses Satelliten liegt bei 32,899 eV (vgl. Tab. 5.1) und ist im energieabhängigen Fluoreszenzsignal sehr gut zu erkennen. Die Rohdaten wurden auf eine absolute

Energieskala an dem Fixpunkt 32,899 eV angepasst. Der so erhaltene energetische Verlauf (siehe Abb. 5.5) dient nun wiederum als Energienormal für die restlichen Ergebnisse in Kap. 5.2.

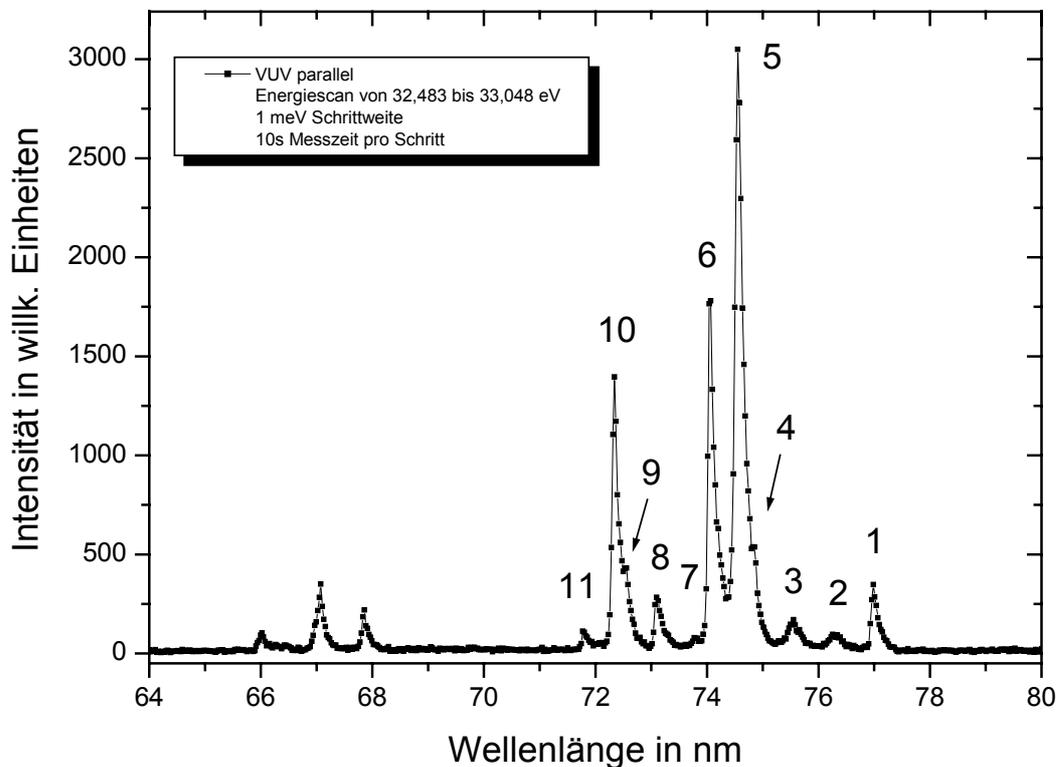


Abb. 4.4: Fluoreszenzspektrum von Argon nach Anregung mit linear horizontal polarisierter Synchrotronstrahlung. Zuordnung der Übergänge siehe Tab.5.1.

4.5 Absolutkalibrierung der Wirkungsquerschnitte

4.5.1 Die $\text{Ar}^+ 4s \ ^{2,4}L_J$ Satelliten

Um die Wirkungsquerschnitte der Argon $4s \ ^{2,4}P$ -Satelliten aus den gemessenen Fluoreszenzspektren zu erhalten, ist eine Absolutkalibrierung notwendig. Die Vorgehensweise wird in diesem Abschnitt beschrieben. Alle im Rahmen dieser Arbeit aus Fluoreszenzmessungen erhaltenen Wirkungsquerschnitte sind

Emissionswirkungsquerschnitte unter 0° (vgl. Kap. 2.2 und Kap. 5.2). Um die totalen Emissionswirkungsquerschnitte der beobachteten Übergänge zu erhalten, sind die in Kap. 5.2 beschriebenen Hinweise zu beachten.

Grundlage der Kalibrierung sind die bekannten Intensitätsverhältnisse der Fluoreszenzwellenlängen für Krypton bei einer Anregungsenergie von $h\nu=100$ eV [Bec91]. Verwendet werden die Zählraten der Übergänge $4s4p^6 \ ^2S_{1/2} \rightarrow 4s^24p^5 \ ^2P$. Hier wird im Speziellen der Übergang in den $4s^24p^5 \ ^2P_{3/2}$ Zustand betrachtet (Nr.2; Abb. 4.5), da die Wellenlänge dieses Übergangs bei 91,7427 nm liegt und damit direkt benachbart zu dem äquivalenten Übergang $3s3p^6 \ ^2S_{1/2} \rightarrow 3s^23p^5 \ ^2P_{3/2}$ im Ar^+ bei 91,9782 nm (Abb. 4.3) ist. Von diesem Zustand ist der Wirkungsquerschnitt im Bereich der Anregungsenergie um 33 eV bekannt [Möb93] und kann damit zur Kalibrierung verwendet werden. Das Argon Fluoreszenzspektrum dieses Wellenlängenbereichs ist in Abb. 4.3 gezeigt. Die daraus resultierenden energetischen Verläufe der Wirkungsquerschnitte sind in Abb. 4.7 (a) und Abb. 4.7 (b) aufgeführt. Die Summe der beiden Übergänge zur Anpassung an die Literaturwerte ist in Abb. 4.7 (c) zusammengefasst.

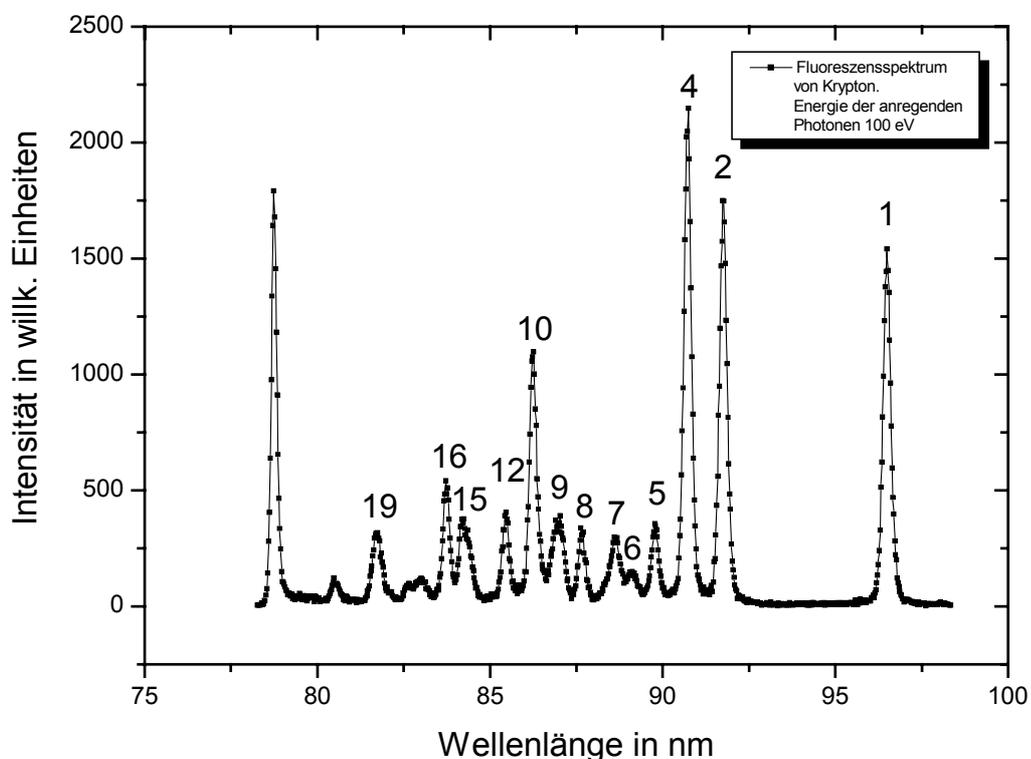


Abb. 4.5: Fluoreszenzspektrum von Krypton nach Anregung mit linear horizontal polarisierter Synchrotronstrahlung. Nomenklatur nach [Wil94].

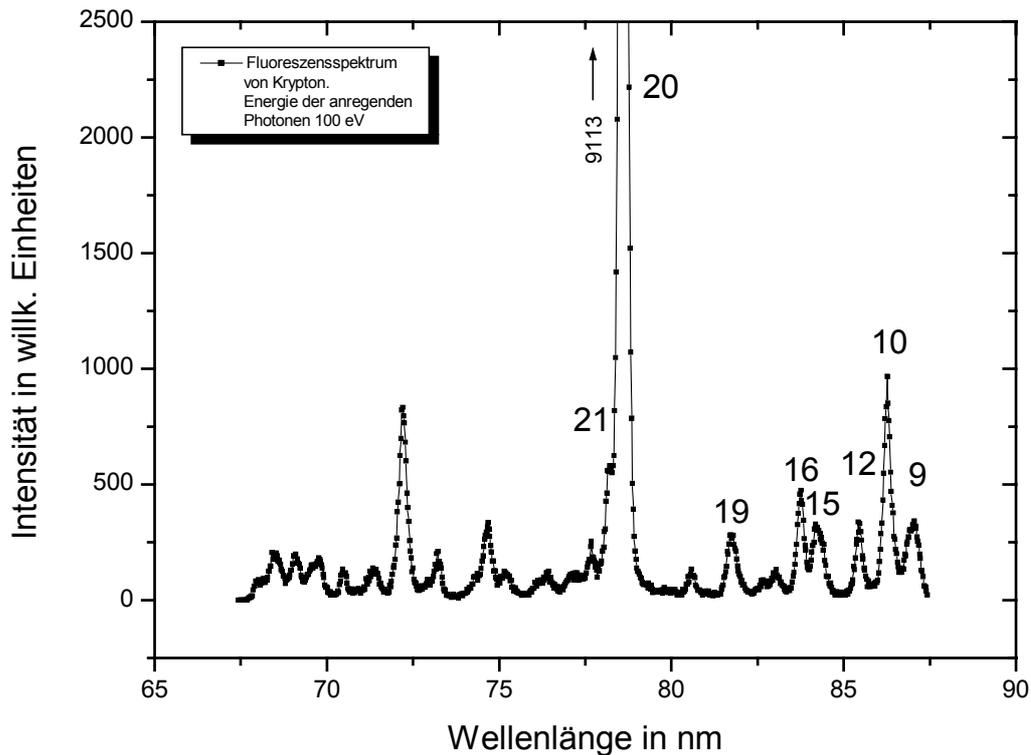


Abb. 4.6: Fluoreszenzspektrum von Krypton nach Anregung mit linear horizontal polarisierter Synchrotronstrahlung. Nomenklatur nach [Wil94].

Die Transmission des Spektrometer-Detektor Systems ist wellenlängenabhängig. Zur Kalibrierung des Wirkungsquerschnitts der Argon $4s\ 2,4P$ -Satelliten wird der bekannte Zustand $4s4p^5\ 1P_1$ im Kr^+ verwendet, dessen Übergang auf den $4s^24p^4\ 1D_2$ Zustand bei einer Wellenlänge von 78,5968 nm liegt (Nr. 20; Abb. 4.6). Diese Wellenlänge ist nahe am Wellenlängenbereich der Übergänge aus den Argon $4s\ 2,4P$ -Satelliten, welche zwischen 72 und 75 nm liegen (Spektrum siehe Abb. 4.4). Es ist zu erwarten, dass die Wellenlängenabhängigkeit des Systems im Bereich von lediglich etwa 5 nm zu vernachlässigen ist. Zumal ein Gitter verwendet wurde, welches bei 80 nm geblazed ist und die Wellenlängenabhängigkeit im Bereich der Blazewellenlänge nicht sehr stark ist (man befindet sich im Bereich des breiten Maximums der Effizienzkurve). Damit hat man eine Möglichkeit die Empfindlichkeit des Systems im Wellenlängenbereich um 74 nm absolut zu kalibrieren. In der Praxis wurden auf den Fluss der anregenden Photonen normierte Fluoreszenzspektren von Krypton bei der Anregungsenergie $h\nu = 100\ eV$ aufgenommen (siehe Abb. 4.5 und Abb. 4.6).

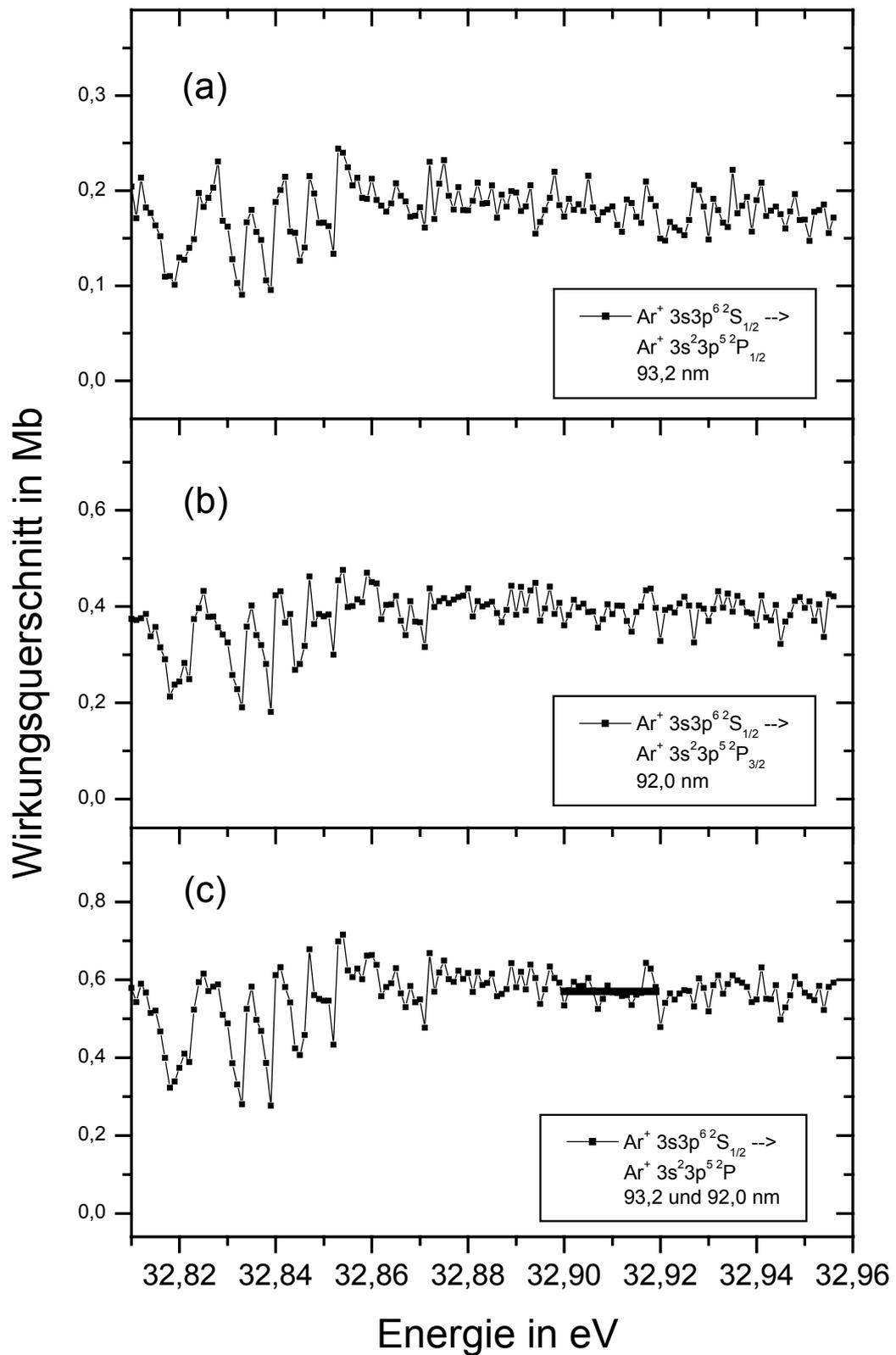


Abb. 4.7: Wirkungsquerschnitt der Ar^+ 3s Satelliten als Funktion der anregenden Photonenenergie. In Teil (c) ist bei 32,91 eV der Mittelwert über 20 meV markiert und auf den Literaturwert [Möb93] angepasst. Die Absolutwerte der Wirkungsquerschnitte der Einzelübergänge ergeben sich aus den Messdaten.

In diesen Fluoreszenzspektren steht die Linie, welche zur Auswertung verwendet wurde immer etwa in der Mitte der Detektorfläche und kann mit den Argonspektren verglichen werden. Eine Abhängigkeit der Intensität einer Linie von ihrer Position auf der Detektoroberfläche ist bis auf die Randgebiete im Bereich der Fehler nicht zu beobachten. Es ergibt sich aus den Daten von [Bec91] und aus den Abb. 4.5 und 4.6 eine Effizienz der Spektrometer-Detektor Kombination von 159% im Wellenlängenbereich um 74 nm relativ zur Wellenlänge bei 92 nm (vgl. Tabelle 4.1). Damit wurden die Daten auf den Wirkungsquerschnitt des $\text{Ar } 3s3p^6 \ ^2S_{1/2}$ Zustands absolut kalibriert. Die dabei erhaltenen energetischen Verläufe sind in den Abb. 4.7 und 4.8 zu sehen. Abb. 4.8 dient für die Ergebnisse in Kap. 5.2 als Referenzkurve. An diesen Wirkungsquerschnitt sind sämtliche Daten in Kap. 5.2 angepasst.

Die Vorgehensweise bei der Ermittlung der Intensitäten aus den PES Daten [Bec91] muss hier noch kurz erläutert werden. Betrachtet wird zuerst der Zustand $4s4p^6 \ ^2S_{1/2}$ im Kr^+ . Dieser ist in den PES – Daten als einzelner Peak zu sehen. In der Fluoreszenzspektroskopie werden jedoch zwei Übergänge aus diesem Zustand beobachtet, nämlich in den $4s^24p^5 \ ^2P_{3/2}$ und den $4s^24p^5 \ ^2P_{1/2}$ Zustand (Nr.2 und Nr.1; Abb. 4.5). Nutzt man das bekannte Verzweigungsverhältnis für diese Übergänge von etwa 1 zu 1,222 aus, so kann man aus dem einzelnen PES – Peak die Information für den Übergang auf das $4s^24p^5 \ ^2P_{3/2}$ Niveau separieren. Dieser Wert wird nun ins Verhältnis mit den Fluoreszenzdaten gesetzt und auf Eins normiert. Betrachtet man jetzt den Übergang $\text{Kr}^+ 4s4p^5 \ ^1P_1 \rightarrow 4s^24p^4 \ ^1D_2$ bei 78,5968 nm (Nr. 20; Abb. 4.6), so hat man in den PES – Daten vier Peaks zu berücksichtigen. Dies liegt an folgender Tatsache: Der beobachtete Zustand kann sowohl direkt besetzt werden, als auch als Kaskade des Übergangs $\text{Kr}^+ 4s^04p^6 \ ^1S_0 \rightarrow 4s4p^5 \ ^1P_1$ bei 90,7117 nm (Nr.4; Abb. 4.5). Die beiden Zustände $4s^04p^6 \ ^1S_0$ und $4s4p^5 \ ^1P_1$ sind in den PES – Spektren jeweils als zwei Linien zu sehen, da diese Zustände als Resultat eines Auger – Prozesses zur Auffüllung eines Loches in der $n=3$ Schale auftreten. Dieses Loch kann entweder durch das Entfernen eines $3d_{3/2}$ oder eines $3d_{5/2}$ Elektrons entstanden sein. Summiert man die Intensitäten dieser vier Linien der PES – Daten auf, setzt sie wie oben ($\text{Kr}^+ 4s4p^6 \ ^2S_{1/2}$ Zustand) ins Verhältnis zu den Fluoreszenzdaten und vergleicht die erhaltenen Zahlenwerte, so erhält man die in Tab. 4.1 angegebene relative Spektrale Effizienz des Detektors im für diese Messungen interessanten Wellenlängenbereich.

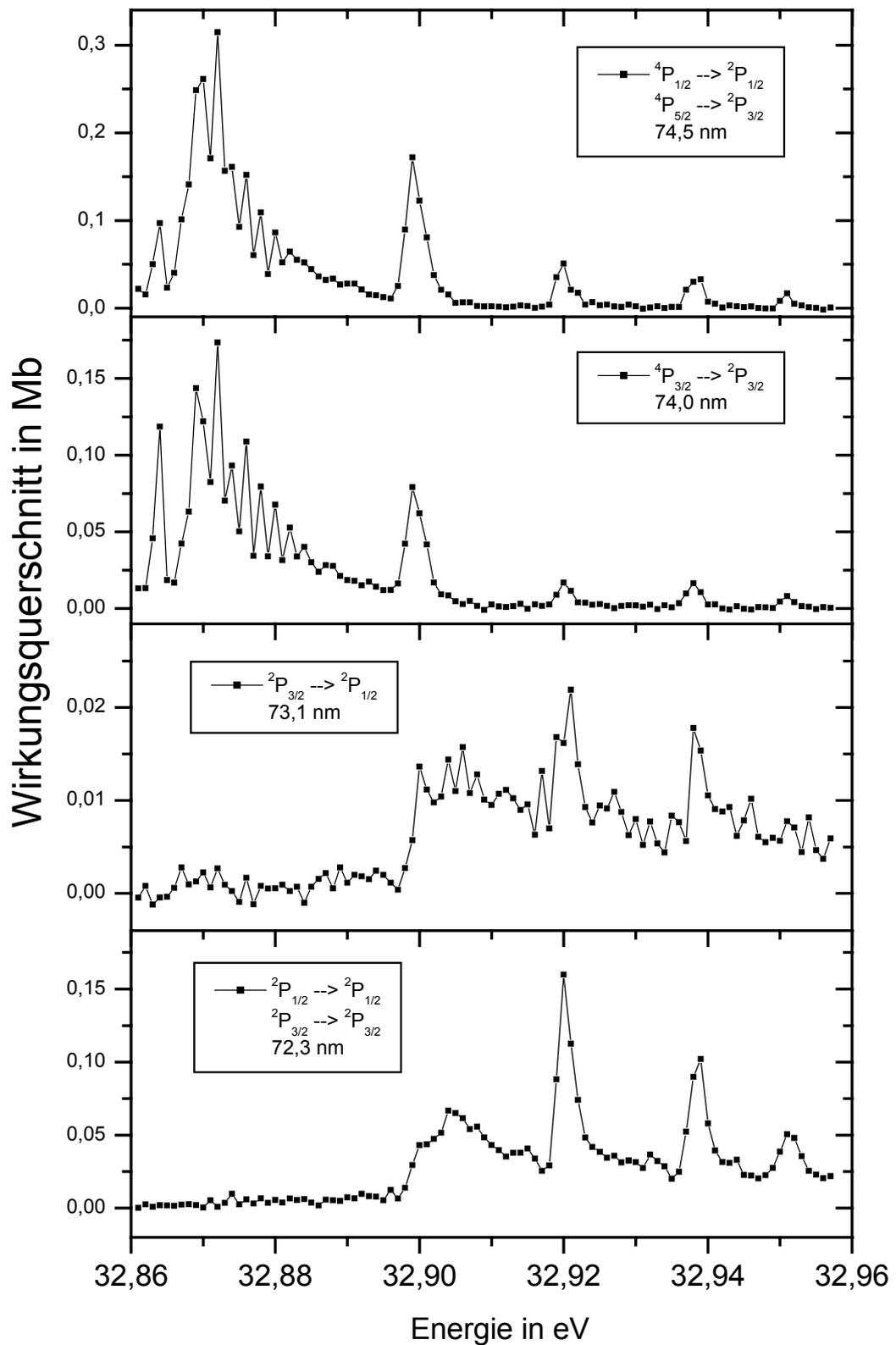


Abb. 4.8: Wirkungsquerschnitte der $\text{Ar}^+ 4s \ ^{2,4}L_J$ - Satelliten als Funktion der anregenden Photonenenergie.

Anmerkung zu der Auswahl der zu berücksichtigenden Linien in den PES – Daten:
 Die PES – Arbeiten beziehen sich in der Nomenklatur der Augerlabels auf [Wer72].
 In dieser Veröffentlichung sind die beiden Peaks für den $4s^0 4p^6 \ ^1S_0$ Endzustand bei einer kinetischen Energie von etwa 31 eV mit den Nummern 35 und 40 ausgezeichnet. In der etwa zeitgleich erschienenen Arbeit von [Meh72] wird die Auszeichnung dieser Zustände bei etwa 25 eV diskutiert, was in [Wer72] den Nummern 51 und 52 entspricht. Beide Dubletts haben eine Aufspaltung von 1,23 eV was sie als Kandidaten für die obigen Labels in Frage kommen lässt. In späteren Arbeiten wurde intensiv über das Problem diskutiert. Es ist mittlerweile klar, dass die Peaks 51 und 52 die richtige Auszeichnung darstellen [Aks84]. Bei der Kalibrierung sind nach der Nomenklatur von [Wer72] also die Peaks 51, 52 und 27, 30 für die beiden Zustände $4s^0 4p^6 \ ^1S_0$ und $4s 4p^5 \ ^1P_1$ verwendet worden.

| Übergang | $4s 4p^6 \ ^2S_{1/2} \rightarrow$ $4s^2 4p^5 \ ^2P_{3/2}$ | $4s 4p^5 \ ^1P_1 \rightarrow$ $4s^2 4p^4 \ ^1D_2$ | $4s^0 4p^6 \ ^1S_0 \rightarrow$ $4s 4p^5 \ ^1P_1$ |
|-------------------------------|--|--|--|
| Wellenlänge in nm | 91,7427 | 78,5968 | 90,7117 |
| Abbildung / Peak | Abb. 4.4 / Nr. 2 | Abb. 4.5 / Nr. 20 | Abb. 4.4 / Nr. 4 |
| Integral d. Fluoreszenzspeaks | 1599 | 8397 | 1856 |
| Integral des PES-Peaks | 174 | 574 | 202 |
| relative Spektrale Effizienz | 1,00 | 1,592 | 0,9998 |

Tabelle 4.1: Relative Spektrale Effizienz des VUV – Detektors in Kombination mit Monochromator Nr.2.

4.5.2 Die Absorptionsmessungen

Zur Absolutkalibrierung der Absorptionsdaten wurden Messungen in direkter zeitlicher Abfolge mit und ohne Gas in der Wechselwirkungszone in Abhängigkeit der anregenden Photonenenergie durchgeführt. Dies ist notwendig, um Schwankungen im Speicherring und damit in der Lage des Photonenstrahls in der Wechselwirkungszone auszuschließen. Die Messmethode des Absorptionssignals (vgl. Kap. 3.5) reagiert sehr empfindlich auf Strahlageschwankungen. Dies liegt

daran, dass sich auf der ersten Blende zwei konkurrierende Prozesse überlagern. Einmal werden durch das Auftreffen des Synchrotronstrahls Elektronen aus der Blende herausgeschlagen. Dies ist dann als positiver Strom messbar. Zum anderen treffen die Photoelektronen aus der Wechselwirkungszone auf die Blende und sind als negativer Strom messbar. Deshalb bestimmt man die Nulllinie des energetischen Verlaufs durch ein Experiment ohne Gas in der Wechselwirkungszone. Die in Abb. 4.9 gezeigte Messung wurde zur Anpassung an die Daten von Langer [Lan92] in direkter zeitlicher Abfolge nach einem Durchlauf ohne Gas in der Wechselwirkungszone gemacht. Zur Vergleichbarkeit wurden alle Ergebnisse auf einen Ringstrom von 130 mA normiert. Aus den Daten von Langer [Lan92] ergibt sich im Energiebereich um 33 eV ein Wirkungsquerschnitt von etwa 9 Mb für den totalen Photoionisationswirkungsquerschnitt. Die weiteren Absorptionsmessungen in Kap. 5 sind an Abb. 4.9 angepasst.

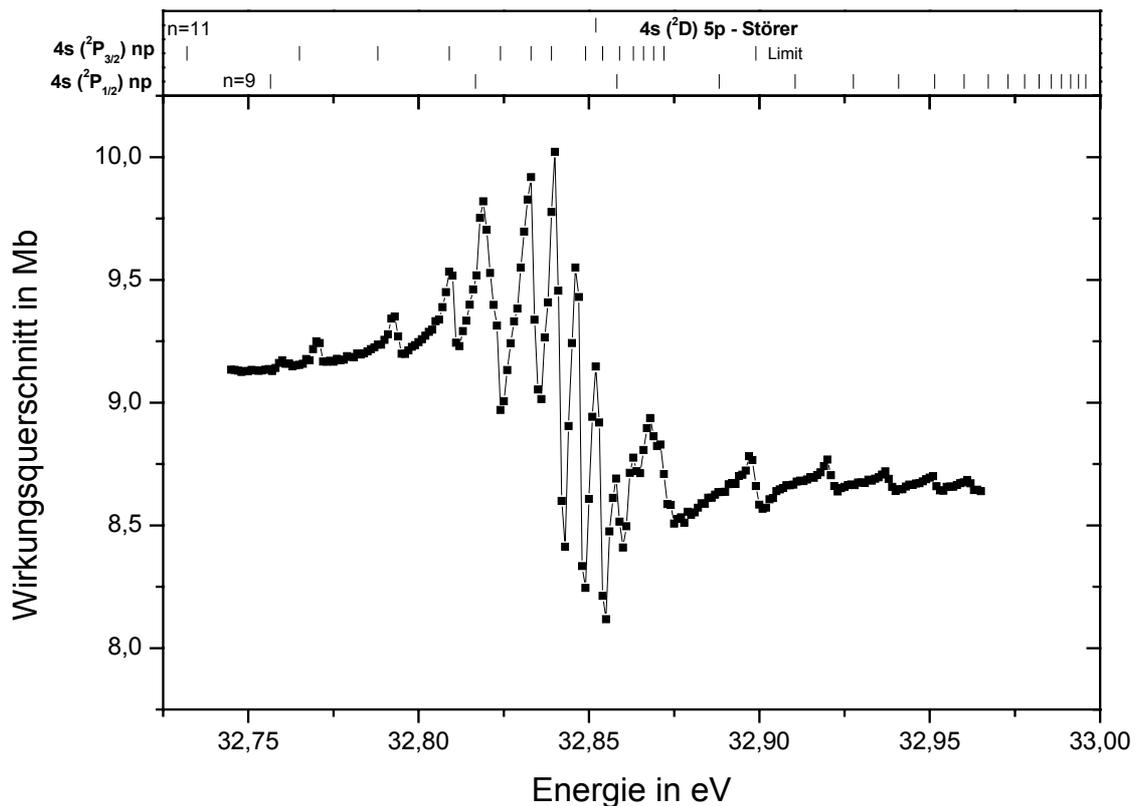


Abb. 4.9: Totaler Photoionisationswirkungsquerschnitt von Argon im Primärenergiebereich von 32,75 bis 32,97 eV.

4.6 Fehlerbetrachtung

4.6.1 Wirkungsquerschnitte

Die Unsicherheit der Wirkungsquerschnitte setzt sich aus vier Faktoren zusammen.

- Dem Fehler der Primärflussmessung.
- Dem statistischen Fehler der Messsignale.
- Dem Fehler der Bestimmung der relativen spektralen Detektoreffizienz.
- Dem absoluten Fehler der zur Normierung verwendeten Ar^+ 3s Wirkungsquerschnitte.

Die Fehler der Primärflussmessung werden in den folgenden Betrachtungen vernachlässigt. Die verwendeten Photozellen liefern einen gut messbaren Strom im μA – Bereich. Nach der Digitalisierung erhält man daraus sehr hohe Zählraten und damit einen sehr glatten Verlauf des Primärflusses in Abhängigkeit der Primärenergie, so dass der statistische Fehler zu vernachlässigen ist. Der durch die Schädigung der Photozelle hervorgerufene Fehler ist ebenfalls im Vergleich zu den weiteren Fehlern zu vernachlässigen. Es hat sich gezeigt, dass nach einer Messzeit von mehr als einer Woche die absolute Messwertdifferenz zwischen einer geschädigten und einer intakten Stelle auf dem Halbleiter bei etwa 10% liegt. Da man nicht auf die Absolutwerte zur Primärflusnormierung angewiesen ist, sondern nur auf den relativen Wert zu Beginn und bei Ende eines Messdurchlaufs, liegt der Fehler bei einer Messzeit von einigen Stunden weit unter 1%. Auch bei den ladungsnormierten Kalibrationsmessungen gilt diese Abschätzung, da die Messungen in direkter zeitlicher Abfolge durchgeführt wurden.

Die absoluten Fehler der Wirkungsquerschnitte sollen hier exemplarisch für einen beobachteten Übergang mit hoher Zählrate (> 1000 Ereignisse pro Primärenergiepunkt; ^4P – Übergang) und einen mit niedriger Zählrate (> 100 Ereignisse pro Primärenergiepunkt; ^4D – Übergang) diskutiert werden.

Der statistische Fehler der relativen Wirkungsquerschnitte wird mittels der doppelten Standardabweichung der Zählraten berechnet:

$$\frac{\Delta\sigma_{\text{rel}}}{\sigma_{\text{rel}}} = \frac{2\sqrt{\text{Zählrate}}}{\text{Zählrate}} \quad (4.4)$$

Man erhält für die Messungen mit hoher Zählrate einen Fehler $< 5\%$, für die Messungen mit niedriger Zählrate einen Fehler $< 20\%$.

Den Fehler der Bestimmung der relativen spektralen Detektoreffizienz wird mit 16% abgeschätzt. Dieser setzt sich nach quadratischer Addition aus einem Fehler von 15% für die PES – und aus einem Fehler von 5% für die PIFS – Daten zusammen. Dazu wurde wie oben die Unsicherheit über die doppelte Standardabweichung der Linie mit der geringsten Zählrate (Tab. 4.1) berechnet.

Um die relativen Fehler der absoluten Wirkungsquerschnitte zu erhalten muss der in [Möb93] angegebene Fehler von 18% für den absoluten $\text{Ar}^+ 3s$ Wirkungsquerschnitt einbezogen werden.

Nach quadratischer Addition dieser drei Einzelfehler ergibt sich für den Fall hoher Zählraten eine Gesamtunsicherheit von 25% und für den Fall geringer Zählraten von 31% .

4.6.2 Energielagen der Autoionisationsresonanzen

Der absolute Fehler der Energielagen der Autoionisationsresonanzen kann mit etwa 2 meV abgeschätzt werden. Dieser Fehler ergibt sich aus der Primärenergienormierung über die $^2\text{P}_{3/2}$ – Schwelle, die auf etwa 1 meV genau gemacht werden kann und der Unsicherheit der Bestimmung der Energielage der Einzelresonanz, die ebenso 1 meV beträgt. Die verwendete Primärauflösung von $3,4 \text{ meV}$ ist als Unsicherheit zu hoch gegriffen, da durch die Form der spektralen Verteilung der anregenden Strahlung auch Energielagen von Resonanzen unterhalb der Bandbreite sehr genau bestimmt werden können.

5 Ergebnisse / Diskussion

5.1 Überblick des untersuchten Energie- und Wellenlängenbereichs

In den frühen totalen Absorptionsmessungen an Argon [Mad69] kann man eine Vielzahl von Resonanzen aus doppelt angeregten Zuständen in einem weiten Anregungsenergiebereich beobachten. Es ist bereits in dieser Zeit versucht worden diese Resonanzserien in Rydbergserien zusammenzufassen. Die dabei gemachten Vorschläge dienen bis heute noch als Orientierungshilfe. In [Bai92] ist im Anregungsenergiebereich von 32,5 bis 36 eV eine große Zahl solcher Serien identifiziert. Auch diese Untersuchungen wurden mittels totaler Absorptionsmessungen durchgeführt (siehe Abb. 5.1). Die Daten sind zum Teil sehr hoch aufgelöst, bieten jedoch durch die verwendete Messmethode keine Möglichkeit der zustandsselektiven Interpretation. Außerdem ist es nicht möglich eine Partialwellenanalyse des auslaufenden Photoelektrons durchzuführen. Aus diesen Gründen führt man seit einigen Jahren zur weiteren Gewinnung von Informationen PES und PIFS Experimente (vgl. Kap. 1) durch.

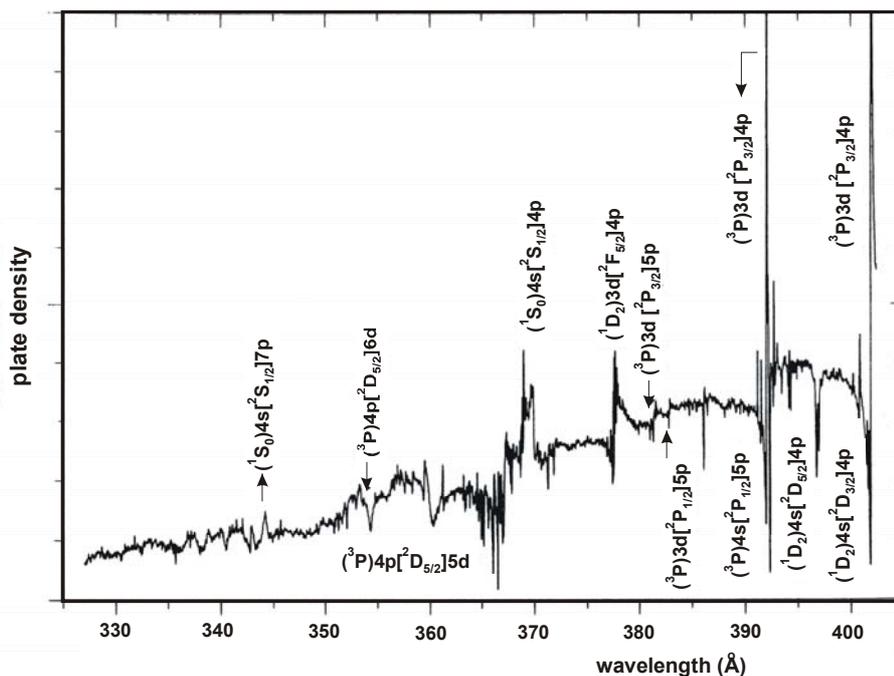


Abb. 5.1: Absorptionsspektrum von Ar zwischen 38,75 und 30,6 eV [Bai92].

Ergebnisse an Synchrotronstrahlungsquellen der zweiten Generation liefern einen ersten Eindruck des untersuchten Primärenergiebereichs. Die Strukturen, die um 1990 sowohl in PES, als auch in PIFS Messungen zu erkennen waren, sind in Abb. 5.2 zu sehen [KiSch96]. In der Abbildung aufgetragen ist der Wirkungsquerschnitt der photoneninduzierten Besetzung des $\text{Ar}^+ 3p^4 ({}^3P)4s {}^4P$ – Satelliten als Funktion der Photonenenergie. Man erkennt jeweils Einzelpeaks bei 32,5 und 32,8 eV, sowie eine breite Struktur zwischen 33 und 34 eV. Eine Zuordnung zu Autoionisationsresonanzen doppelt angeregter Zustände der einzelnen Peaks wurde damals diskutiert. Jedoch ist klar, dass die Strukturen nicht Einzelzuständen zugeordnet werden können.

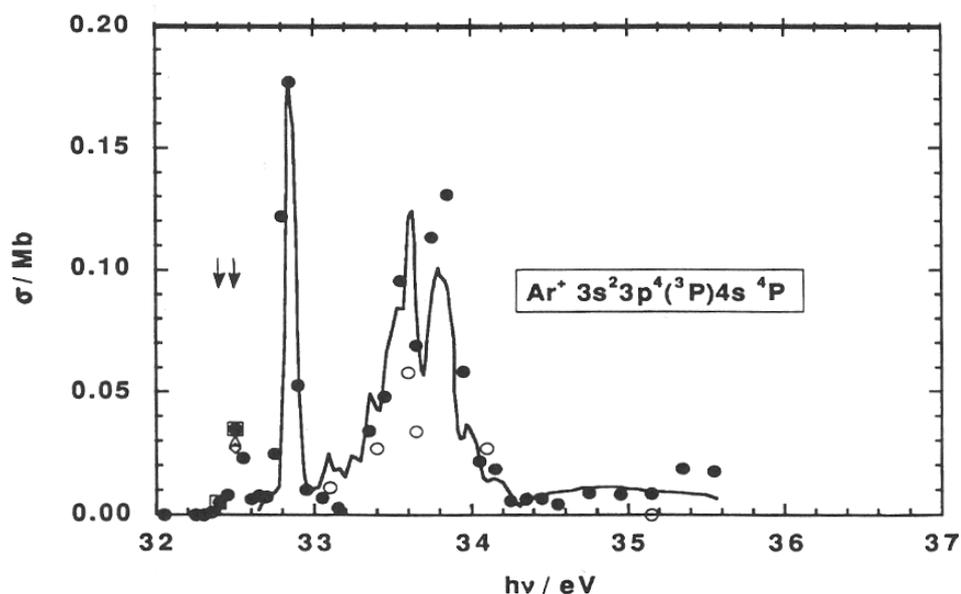


FIGURE 40. Cross sections for production of the $\text{Ar}^+ 3p^4 ({}^3P) 4s {}^4P$ and 2P satellites as a function of photon energy. PES: \circ , Langer⁽¹⁰⁷⁾; \diamond , Heimann^(8,109); Δ , Medhurst *et al.*⁽¹¹⁰⁾; \square , Heiser *et al.*⁽⁹⁾; —, Wills *et al.*⁽⁶¹⁾ normalized. PIFS: \bullet , Schartner *et al.*^(63,79) Positions of absorption resonances: \circ , Madden *et al.*⁽⁶²⁾; +, Baig *et al.*⁽⁹⁰⁾; —, Sukhorukov *et al.*⁽⁹⁵⁾

Abb. 5.2: Wirkungsquerschnitt des $\text{Ar}^+ 4s {}^4P$ – Satelliten in Abhängigkeit der Energie der anregenden Photonen [KiSch96].

In folgenden Messungen [Mag95] ist der Primärenergiebereich von etwa 32,8 bis 35,8 eV genauer untersucht worden. Dieser Messzyklus zielt vor allem auf die Analyse der in Abb. 5.2 zu sehenden breiten Struktur zwischen 33 und 34 eV ab. Durch die nun zur Verfügung stehenden neuen experimentellen Möglichkeiten konnte der Winkelasymmetrieparameter β_{fl} bestimmt werden, der einen ersten Schritt

zur Partialwellenanalyse der emittierten Photoelektronen darstellt. Eine komplette spektroskopische Übersicht dieses Primärenergiebereichs mit den energetischen Verläufen der β_{fl} – Parameter ist im Anhang in Kap. 7.1 gegeben. Um den Fortschritt der Messtechnik zu zeigen ist in Abb. 5.3 der energetische Verlauf der Ar^+ Übergänge $4s\ ^4P_{5/2} \rightarrow 3p^5\ ^2P_{3/2}$ und $4s\ ^4P_{1/2} \rightarrow 3p^5\ ^2P_{1/2}$ gezeigt. Dieser kann mit den in Abb. 5.2 gezeigten Daten verglichen werden.

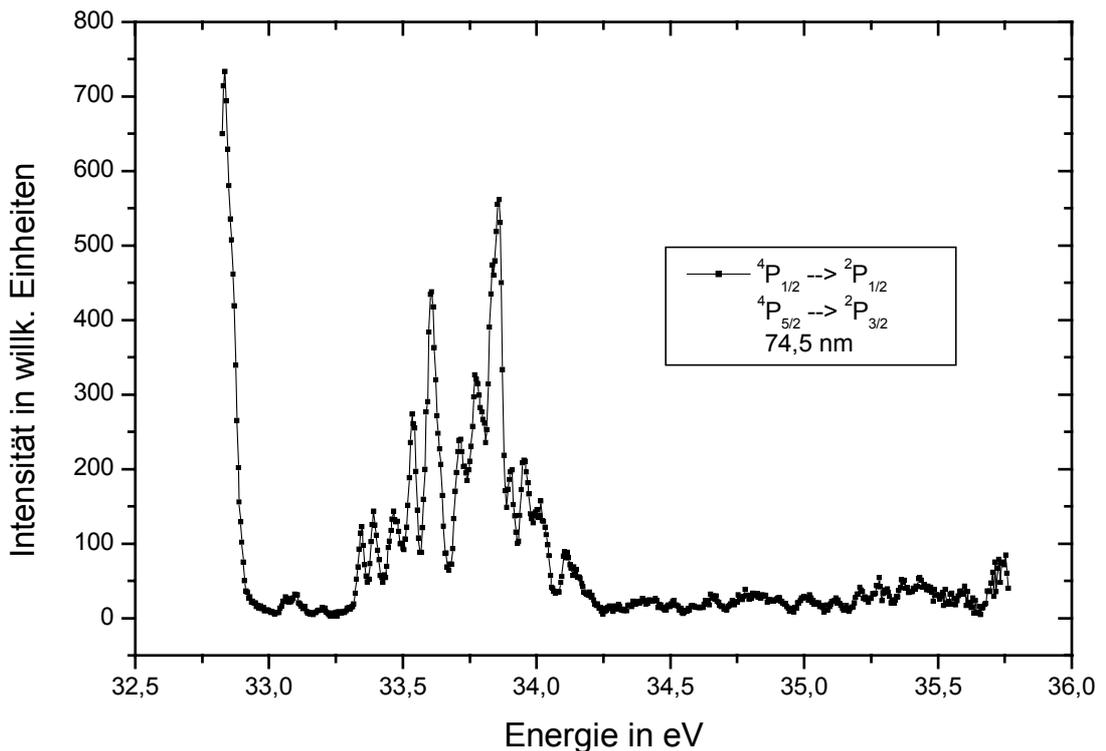


Abb. 5.3: Unpolarisierte Intensität der Ar^+ Übergänge $4s\ ^4P_{5/2} \rightarrow 3p^5\ ^2P_{3/2}$ und $4s\ ^4P_{1/2} \rightarrow 3p^5\ ^2P_{1/2}$.

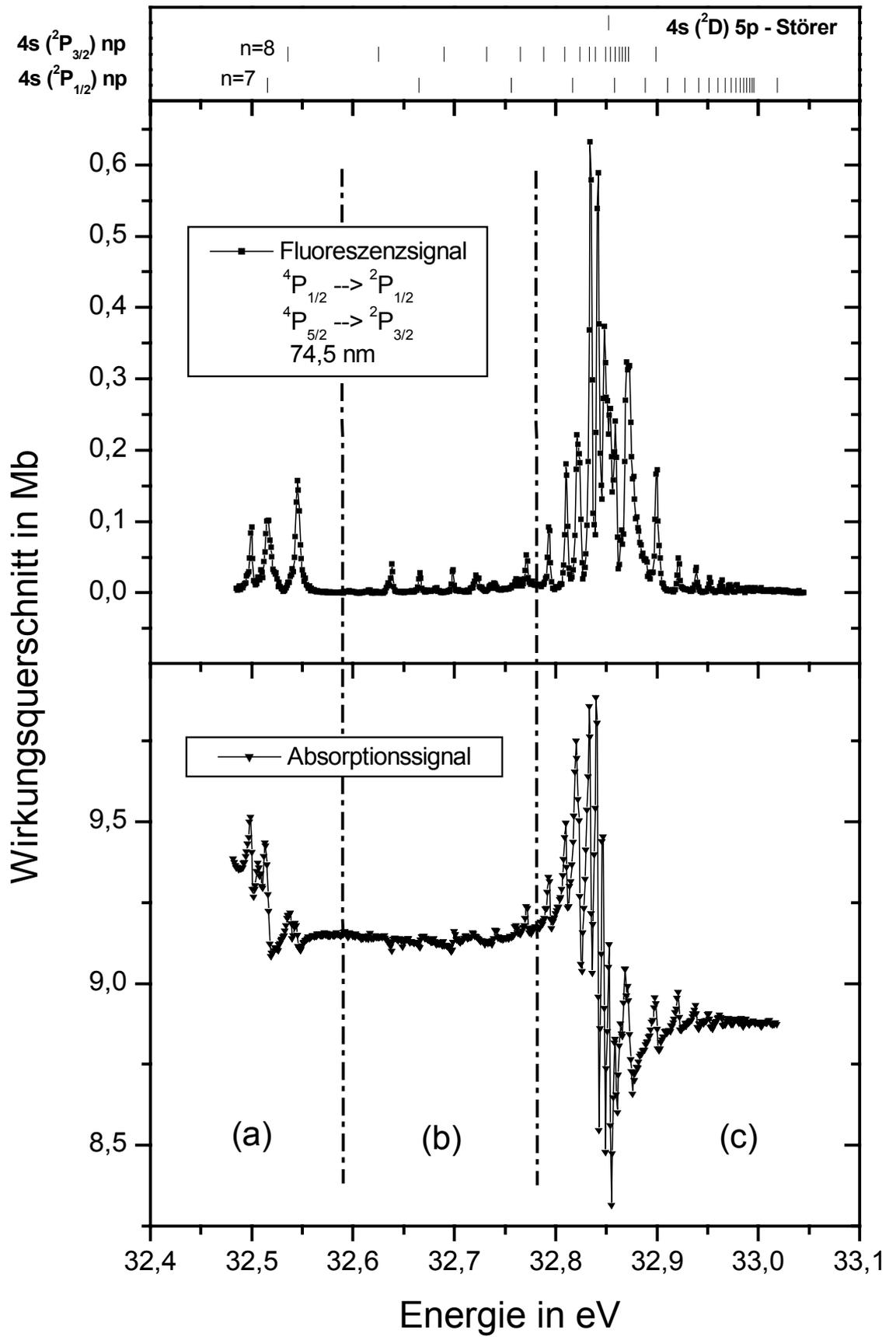
Aus verschiedensten Gründen sollte eine Untersuchung dieses Bereichs vorerst nicht weiter verfolgt werden. Zum einen liegen viele Rydbergserien in diesem Anregungsenergiebereich, welche die Interpretation der Daten erschweren (vgl. [KiSch96]). Zum anderen zeigte sich bei Testmessungen an der BESSY II Beamline U125/1 PGM mit wesentlich verbesserter Primärauflösung, dass eine Zuordnung von Autoionisationsresonanzen aus doppelt angeregten Zuständen nur bei Begleitung mit einer theoretischen Beschreibung möglich sein wird. Aus diesem Grund sind die folgenden hochaufgelösten Messungen (ca. 3,4 meV Bandbreite) auf den

interessanten Bereich der Ar^+ $4s\ 4P$ Schwellen beschränkt. Die Messungen reichen von den $4P$ – Schwellen bis zu den $2P$ – Schwellen (vgl. Tab.5.1). Gerade die in diesem Energieintervall liegende Region um den $3d\ ({}^2F_{5/2})\ 4p$ – Störer ist bis jetzt nur in Absorptionsmessungen [Mad69], [Bai92] hinreichend genau untersucht worden.

In neueren theoretischen Untersuchungen von van der Hart und Greene [Har98] ist dieser Störer jedoch als $4s\ ({}^2D)\ 5p$ bezeichnet, da der oben benannte Zustand in LS – Kopplung nicht erlaubt ist.

In Abb. 5.4 ist die Messung der Ar^+ Übergänge $4s\ 4P_{5/2} \rightarrow 3p^5\ 2P_{3/2}$ und $4s\ 4P_{1/2} \rightarrow 3p^5\ 2P_{1/2}$ an den energetischen Schwellen der Ausgangszustände gezeigt. Die in dieser Arbeit erreichte Verbesserung der Primärauflösung im Vergleich zu Abb. 5.2 ist in den energieabhängigen Wirkungsquerschnitten der Abb. 5.4 gut zu sehen. Im oberen Teil dieser und der folgenden Abbildungen ist die Rydbergserie $4s\ 2P_{3/2}\ np$, sowie der $4s\ ({}^2D)\ 5p$ – Störer eingezeichnet [Bai92]. Die Rydbergserien sind erstmals in einer fluoreszenzspektroskopischen Messung dieser Übergänge bis etwa $n = 20$ aufgelöst. Außerdem ist die Rydbergserie $4s\ 2P_{1/2}\ np$ markiert. Diese wurde mit der Rydbergformel berechnet. Zur Anpassung an die experimentellen Daten im Bereich der $4P$ – Schwellen ist ein Quantendefekt von 1,8 verwendet worden. Das gleichzeitig aufgenommene Absorptionssignal ist im unteren Teil der Abb. 5.4 gezeigt. Eine genaue Beschreibung dieser Messung ist in Kap. 5.2.1 gegeben.

Abb. 5.4: (Seite 77) Wirkungsquerschnitt der Ar^+ Übergänge $4s\ 4P_{5/2} \rightarrow 3p^5\ 2P_{3/2}$ und $4s\ 4P_{1/2} \rightarrow 3p^5\ 2P_{1/2}$ (oben). Wirkungsquerschnitt aller in diesem Primärenergiebereich offenen Zerfallskanäle (unten). Charakterisierung der Autoionisationsresonanzen mit den bekannten Rydbergserien und –zuständen ($4s\ ({}^2P_{3/2})\ np$ Serie aus [Bai92]; $4s\ ({}^2P_{1/2})\ np$ Serie eigene Berechnung). Einteilung des untersuchten Primärenergiebereichs in die drei Teile (a) – (c) der Kap. 5.2.2 bis 5.2.4. Die hier gezeigte Struktur entspricht den beiden schmalen Oszillationen bei $377\ \text{Å}$ und $381\ \text{Å}$ in Abb. 5.1.



Man sieht bereits in den in Abb. 5.4 gezeigten Daten einen Vorteil der Fluoreszenzmessungen gegenüber den Absorptionmessungen. Die auftretende Peakform in den Fluoreszenzspektren zeichnet sich durch eine resonanzartige Form aus und ist deshalb sehr gut geeignet die Energiepositionen der Autoionisationsresonanzen zu bestimmen. Es handelt sich bei der Peakform um einen normalen Gaußpeak, bei dem das Maximum die Position der Autoionisationsresonanz beschreibt und nicht wie in den Absorptionmessungen um ein Fanoprofil, das erst noch an die Daten angepasst werden muss. Zur Unterstützung der Daten wurden jedoch zusätzlich im Bereich um 32,5 eV und 32,8 eV Absorptionmessungen durchgeführt (siehe Kap.5.3). Diese Daten sind mit der besten Auflösung der U125/1 PGM – Beamline aufgenommen. Die Auflösung beträgt in den Messungen (vgl. Abb. 5.23 und 5.24) ca. 1,7 meV, der Fluss der anregenden Photonen ist allerdings so gering, dass es nicht möglich war simultan Fluoreszenzspektren zu detektieren.

Eine ausführliche Diskussion der Ergebnisse findet man in den Kapiteln 5.2 bis 5.4. Als Orientierungshilfe der nun folgenden umfassenden Präsentation der Fluoreszenzdaten soll Abb. 5.4 dienen. Folgende Abschnitte des dort gezeigten energetischen Verlaufs werden in den Unterkapiteln von 5.2 behandelt:

- Überblick über den gesamten untersuchten Primärenergiebereich: Kap. 5.2.1
- Teil (a) aus Abb. 5.4: Kap. 5.2.2
- Teil (b) aus Abb. 5.4: Kap. 5.2.3
- Teil (c) aus Abb. 5.4: Kap. 5.2.4

5.2 Wirkungsquerschnitte und Energieabhängigkeit von Ar^+ 4s – Satelliten untersucht mit hoher Primärauflösung

In den folgenden Kapiteln werden Daten aus fluoreszenzspektroskopischen Messungen, sowie Absorptionsdaten mit sehr hoher Primärauflösung präsentiert. In Tabelle 5.1 sind die Zustände mit den entsprechenden beobachteten Übergängen gezeigt. Sämtliche Wirkungsquerschnitte sind nach dem in Kap. 4 beschriebenen Verfahren ermittelt worden. Es ist zu beachten, dass es sich bei allen hier präsentierten Wirkungsquerschnitten (mit Ausnahme der totalen Photoionisationswirkungsquerschnitte, die über Absorptionsmessungen erhalten wurden) um Emissionswirkungsquerschnitte unter 0° handelt. Es können sich bei einem Beobachtungswinkel von 0° nach Formel (2.4) Abweichungen von diesen Werten für die totalen Emissionswirkungsquerschnitte von bis zu 50% ergeben. Dies ist abhängig vom beobachteten Übergang und der relativen Beteiligung der Elektronenpartialwellen. Die oben genannte Abweichung von 50% würde sich bei der Beobachtung eines $3/2 \rightarrow 1/2$ Übergangs unter Beteiligung einer reinen $s_{1/2}$ – Elektronenpartialwelle ergeben (vgl. Tab. 2.1).

Die Daten in den Kapiteln 5.2.1 bis 5.2.4 sind mit Monochromator Nr.2 aufgenommen und zeigen somit die Intensität I_0 . In Kap. 5.2.5 sind beispielhaft die aufgrund der spektralen Auflösung nur eingeschränkt verwendbaren Daten der Intensität I_{90} aufgeführt.

| Zustand | Übergang | Wellenlänge | Schwelle | Linien Nr. |
|------------------------|-------------------------------|-------------|-----------|------------|
| $3p^6\ ^2S_{1/2}$ | $\rightarrow 3p^5\ ^2P_{1/2}$ | 932,053 Å | 29,239 eV | Abb. 4.3 |
| | $\rightarrow 3p^5\ ^2P_{3/2}$ | 919,782 Å | | Abb. 4.3 |
| $(^3P)\ 3d\ ^4D_{5/2}$ | $\rightarrow 3p^5\ ^2P_{3/2}$ | 754,824 Å | 32,179 eV | 3 |
| $(^3P)\ 3d\ ^4D_{3/2}$ | $\rightarrow 3p^5\ ^2P_{1/2}$ | 762,200 Å | 32,199 eV | 2 |
| $(^3P)\ 4s\ ^4P_{5/2}$ | $\rightarrow 3p^5\ ^2P_{3/2}$ | 744,925 Å | 32,399 eV | 5 |
| $(^3P)\ 4s\ ^4P_{3/2}$ | $\rightarrow 3p^5\ ^2P_{1/2}$ | 748,198 Å | 32,509 eV | 4 |
| | $\rightarrow 3p^5\ ^2P_{3/2}$ | 740,270 Å | | 6 |
| $(^3P)\ 4s\ ^4P_{1/2}$ | $\rightarrow 3p^5\ ^2P_{1/2}$ | 745,323 Å | 32,569 eV | 5 |
| | $\rightarrow 3p^5\ ^2P_{3/2}$ | 737,457 Å | | 7 |
| $(^3P)\ 4s\ ^2P_{3/2}$ | $\rightarrow 3p^5\ ^2P_{1/2}$ | 730,929 Å | 32,899 eV | 8 |
| | $\rightarrow 3p^5\ ^2P_{3/2}$ | 723,361 Å | | 10 |
| $(^3P)\ 4s\ ^2P_{1/2}$ | $\rightarrow 3p^5\ ^2P_{1/2}$ | 725,550 Å | 33,019 eV | 9 |
| | $\rightarrow 3p^5\ ^2P_{3/2}$ | 718,091 Å | | 11 |

Tabelle 5.1: Ausgewählte Zustände von Ar^+ und ihre Zerfallskanäle. Nummerierung analog Abb. 4.4.

5.2.1 Der gesamte untersuchte Primärenergiebereich

Der detailliert untersuchte Ausschnitt erstreckt sich über das Energieintervall von 32,490 eV bis 33,050 eV. Die Primärenergieauflösung beträgt in allen Fluoreszenzmessungen von Kapitel 5.2 etwa 3,4 meV. Die Energiekalibrierung ist in Kapitel 4.4 beschrieben. In diesem Teil ist auch das komplette Fluoreszenzspektrum der detektierten Übergänge gezeigt (Abb.4.4). In Abb. 5.5 sind die energetischen Verläufe der Wirkungsquerschnitte sämtlicher beobachteter Übergänge zusammengefasst. In den Daten der Übergänge aus den 4P und 4D – Zuständen sieht man deutlich dass die Resonanzserien nicht wie erwartet eine Abnahme der Intensitäten mit wachsendem n zeigen. Gerade bei den n – Werten im Bereich des Störers ist ein starker Intensitätsanstieg in den Messungen zu sehen. Die Schwelle der 2P – Zustände und die Überhöhung des energetischen Verlaufs dieser Wirkungsquerschnitte durch Autoionisationsresonanzen ist klar zu erkennen.

Die ^4P und ^4D – Zustände zeigen wie erwartet keine direkte Besetzung. Um die Effekte etwas genauer zu sehen sind die energieabhängigen Emissionswirkungsquerschnitte, aufgeteilt nach Übergängen aus ^4D –, ^4P – und ^2P – Zuständen, in den Abbildungen 5.6 bis 5.8 gezeigt. Darüber hinaus ist eine Zusammenfassung sämtlicher Übergänge aus ^4D –, ^4P – und ^2P – Zuständen zur Vergleichbarkeit mit der Literatur (z.B. [Möb93] und [KiSch96]) in Abb. 5.9 aufgetragen. Zusätzlich ist in dieser Abbildung auch der energetische Verlauf des totalen Photoionisationswirkungsquerschnitts gezeigt. Die Daten wurden wie in Kap. 4.5.2 beschrieben auf den Wirkungsquerschnitt absolut kalibriert. Der starke Anstieg im niedrigen Primärenergiebereich ist wahrscheinlich nicht vollständig durch die Prozesse in der Wechselwirkungszone hervorgerufen. Er ergibt sich aus der in Kap. 4.5.2 beschriebenen Problematik der Lage des Synchrotronstrahls an den Blenden der Wechselwirkungszone. Am Beginn der Messung ist die Strahlage noch etwas instabil, was durch die beginnende Erwärmung der optischen Bauteile der Beamline hervorgerufen wird. Die hier gezeigte Messung ist nach einer kurzen Pause gestartet worden, wodurch ein solcher Effekt hervorgerufen werden kann.

Der energetische Verlauf der Wirkungsquerschnitte lässt sich grob in drei Teile einteilen (vgl. Abb. 5.4).

- Um 32,5 eV sieht man drei Peaks, welche bei genauerer Beobachtung noch weiter aufspalten.
- Ein Zwischenteil bei dem man einzelne kleine, aber relativ sauber getrennte Autoionisationsresonanzen erkennt.
- Ein Teil um den 4s (^2D) 5p – Störer [Har98], ([Mad69], [Bai92]) und die ^2P – Schwelle.

Diese drei Teile werden in den folgenden Unterkapitel einzeln aufgeführt.

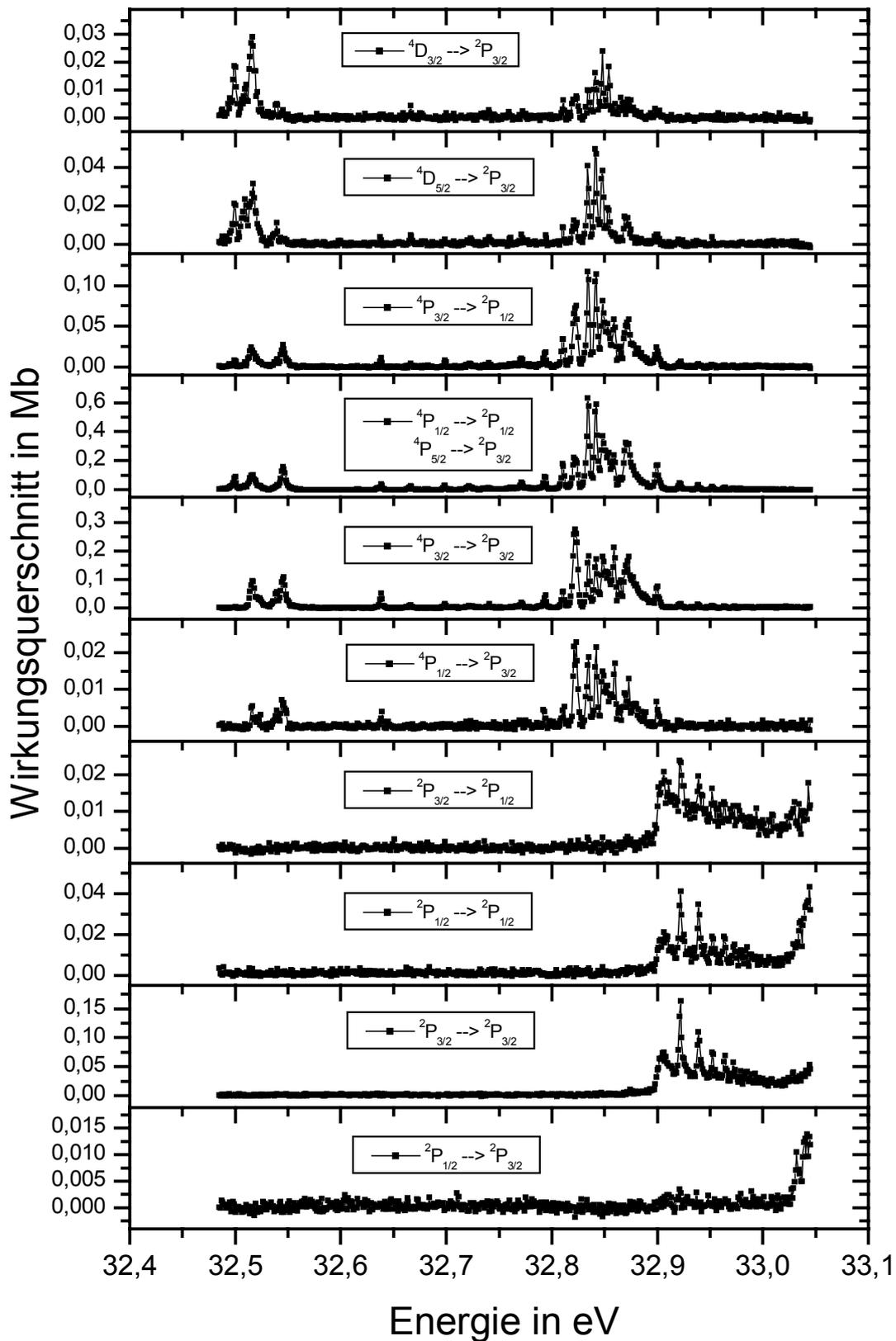


Abb. 5.5: Wirkungsquerschnitt aller beobachteten Übergänge im Energieintervall von 32,49 bis 33,05 eV.

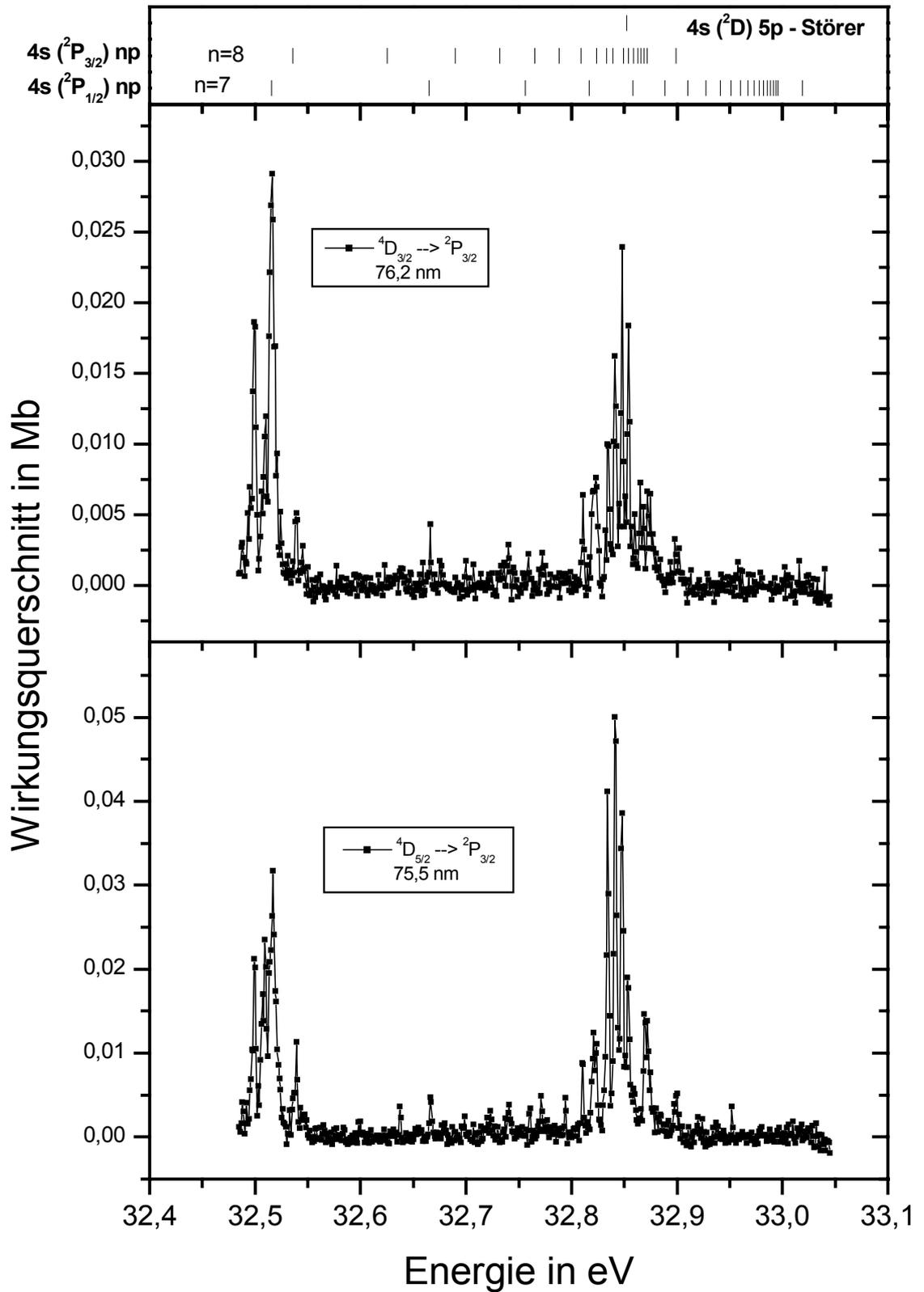


Abb. 5.6: Wirkungsquerschnitt der $\text{Ar}^+ 3d {}^4D$ – Satelliten im Primärenergiebereich von 32,49 bis 33,05 eV. Charakterisierung der Autoionisationsresonanzen mit den bekannten Rydbergserien und –zuständen ($4s ({}^2P_{3/2}) np$ Serie aus [Bai92]; $4s ({}^2P_{1/2}) np$ Serie eigene Berechnung).

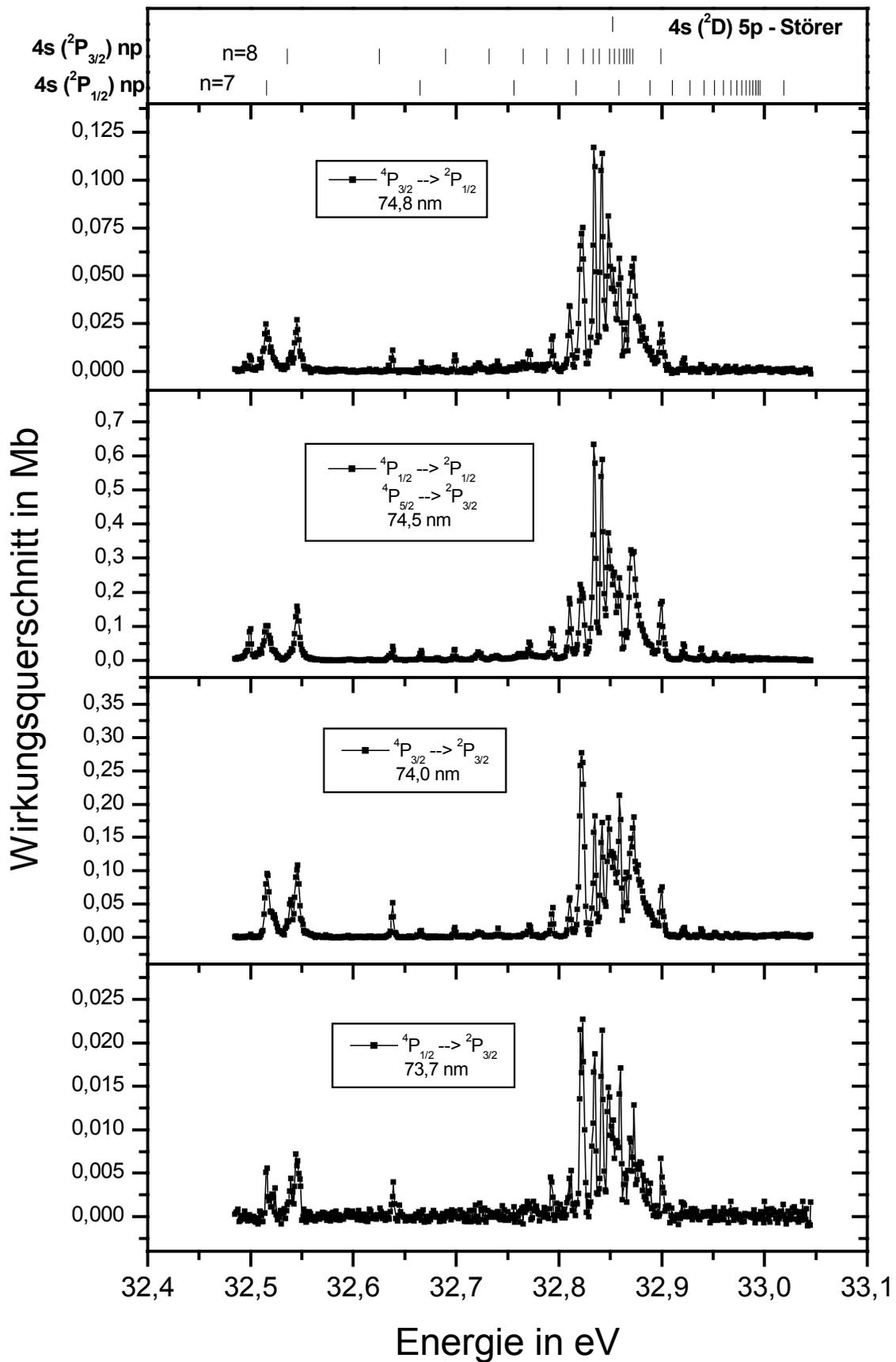


Abb. 5.7: Wirkungsquerschnitt der Ar^+ $4s {}^4P$ – Satelliten im Primärenergiebereich von 32,49 bis 33,05 eV. Charakterisierung der Autoionisationsresonanzen mit den bekannten Rydbergserien und –zuständen ($4s ({}^2P_{3/2}) np$ Serie aus [Bai92]; $4s ({}^2P_{1/2}) np$ Serie eigene Berechnung).

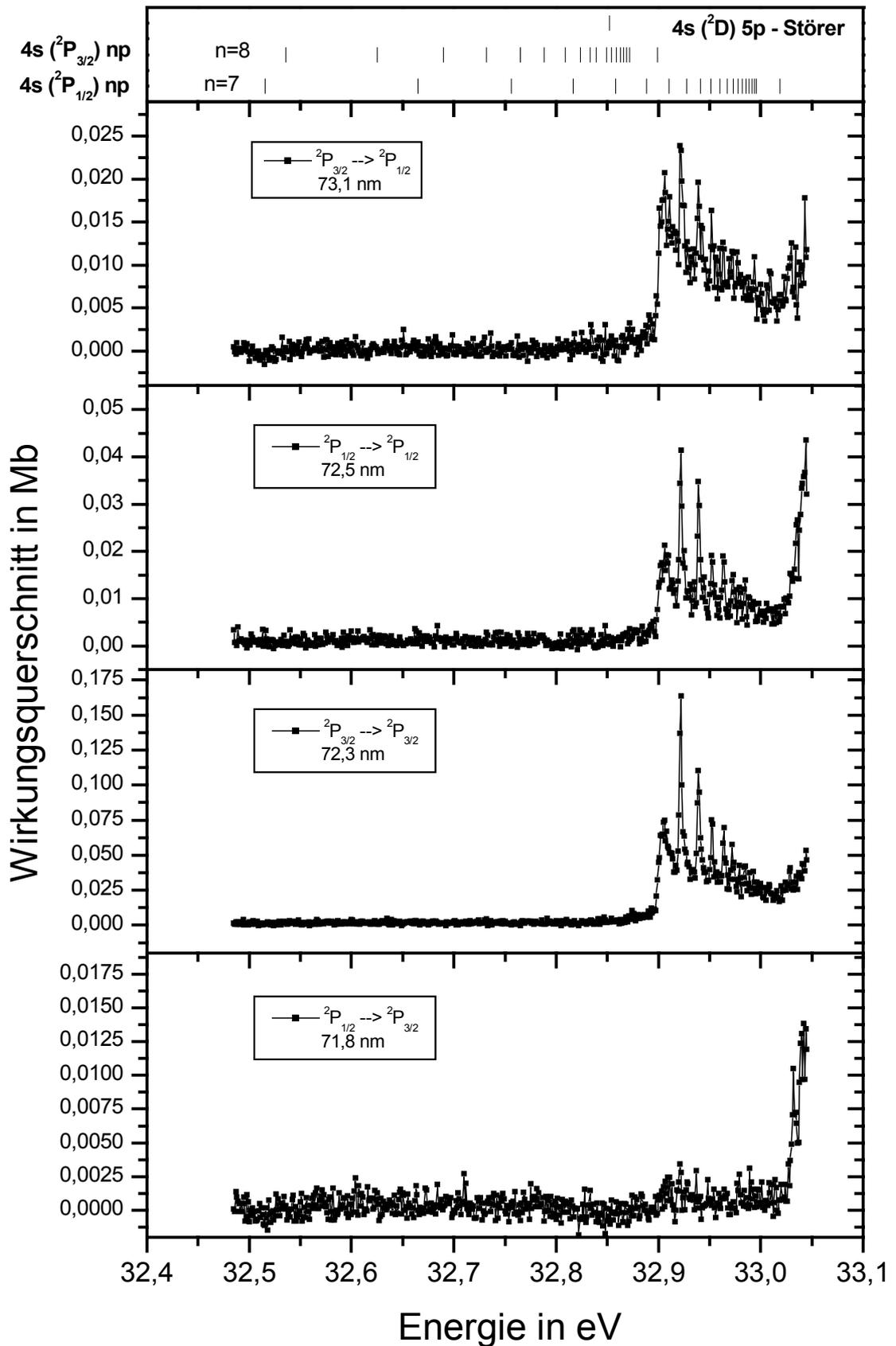


Abb. 5.8: Wirkungsquerschnitt der Ar^+ $4s\ 2P$ – Satelliten im Primärenergiebereich von 32,49 bis 33,05 eV. Charakterisierung der Autoionisationsresonanzen mit den bekannten Rydbergserien und –zuständen ($4s\ ({}^2P_{3/2})\ np$ Serie aus [Bai92]; $4s\ ({}^2P_{1/2})\ np$ Serie eigene Berechnung).

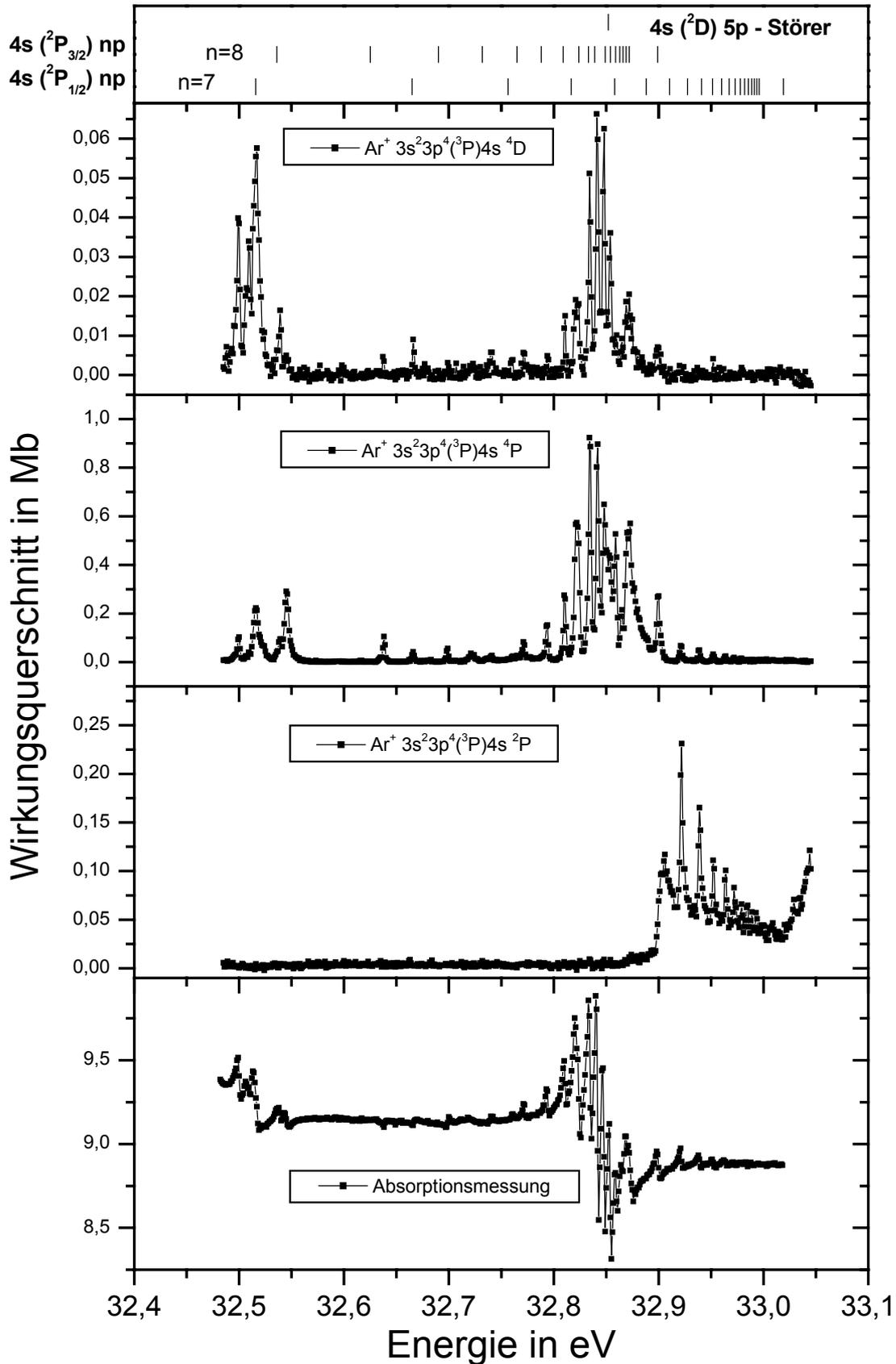


Abb. 5.9: Zusammenfassung der Wirkungsquerschnitte der $Ar^+ 3d ^4D$, $4s ^4P$ und $4s ^2P$ – Satelliten, sowie des totalen Photoionisationswirkungsquerschnitts im Primärenergiebereich von 32,49 bis 33,05 eV. ($4s (^2P_{3/2}) np$ Rydbergserie aus [Bai92], $4s (^2P_{1/2}) np$ Serie eigene Berechnung.)

5.2.2 Der Primärenergiebereich um 32.5 eV

In Abb. 5.2 sieht man sowohl in den PES, als auch in den PIFS Daten ein isoliertes Maximum bei etwa 32,5 eV. Man hat versucht dieses Maximum der Autoionisationsresonanz des Zustands $3d^2P_{3/2} 5p$ [Mad69] zuzuordnen. Die hier präsentierten Daten zeigen eine deutliche Aufspaltung in drei Maxima (vgl. Abb. 5.9). Schaut man nun etwas genauer auf diesen Bereich, so fällt eine noch weitere Aufspaltung dieser drei Maxima auf. Die Entstehung dieser Struktur kann hier nicht geklärt werden. Sicherlich sind Zustände der in [Bai92] ausgezeichneten $4s^2P_{3/2} np$ – Rydbergserie beteiligt. Entweder sind noch weitere Zustände von anderen Rydbergserien (z.B. $4s^2P_{1/2} np$) oder auch die Feinstrukturaufspaltung in $np_{1/2,3/2}$ für diese Aufweitung verantwortlich.

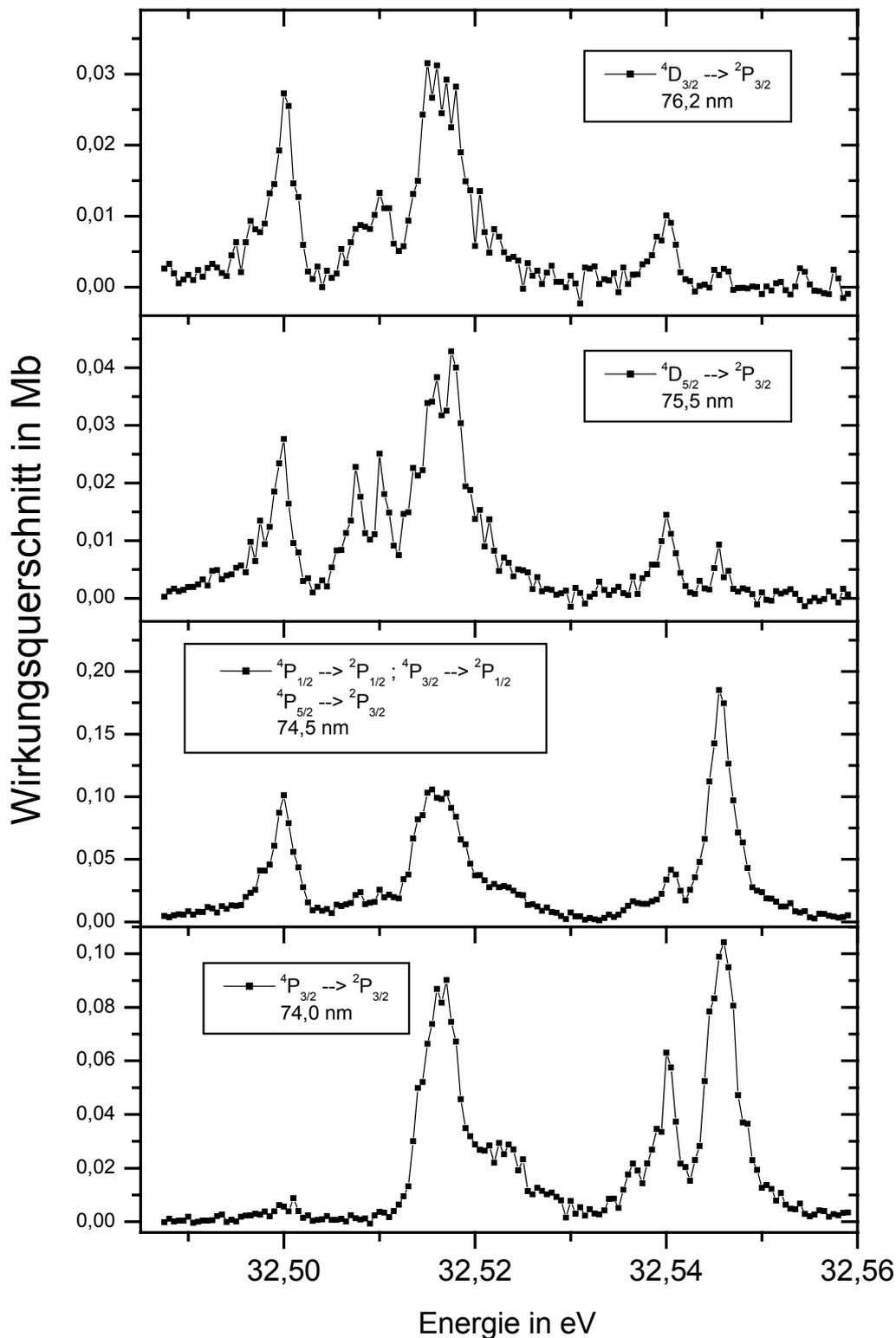
Die einzelnen Übergänge aus den 4P – und den 4D – Zuständen, sowie die Summen der Intensitäten dieser Übergänge sind in den Abb. 5.10 und 5.11 gezeigt. In den Energieabhängigkeiten der Fluoreszenzsignale sind sieben Peaks zu erkennen. Man sieht deutlich, dass die 4P und 4D Zustände sehr unterschiedlich besetzt werden. Während in den Messungen der 4P – Zustände der Peak Nr.7 (bei 32,546 eV; siehe Tab. 5.2) am stärksten beiträgt, dominieren im 4D Fluoreszenzsignal die Peaks 1 und 4. Es zeigt sich außerdem eine deutliche Präsenz der Peaks 2 und 3. Der Peak Nr.5 ist im wesentlichen nur in den 4P – Daten zu sehen, während sich durch die Breite des Peaks 4 hier in beiden Fällen eine Interpretation als Doppelstruktur anbietet.

In der in Abb. 5.11 unten aufgetragenen Messung des totalen Photoionisationswirkungsquerschnitts sind die oben genannten Peaks ebenfalls zu erkennen, man sieht hier allerdings deutlich die Problematik der Fanprofile auftreten. Die Peaks 3 und 5 sind im Vergleich zu den Fluoreszenzdaten nur schwer zu sehen. Die Absorptionmessungen sind nicht mit der gleichen Schrittweite wie die spektroskopischen Daten durchgeführt. Es handelt sich lediglich um einen Auszug aus Abb. 5.4, da durch Elektronikprobleme die gleichzeitigen Absorptionmessungen in diesem Bereich unbrauchbar sind.

| Nr. | Energieposition in eV | Nr. | Energieposition in eV |
|-----|-----------------------|-----|-----------------------|
| 1 | 32,5 | 5 | 32,524 |
| 2 | 32,5075 | 6 | 32,54 |
| 3 | 32,51 | 7 | 32,546 |
| 4 D | 32,517 | D | Doppelpeak |

Tab. 5.2: Experimentell bestimmte Energiepositionen der Autoionisationsresonanzen

Auf eine Markierung der in Frage kommenden Rydbergserien im Kopf der Abbildungen wird in diesem Kapitel vollständig verzichtet, da in diesem Energiebereich lediglich zwei bekannte doppelt angeregte Zustände liegen. Eine Interpretation dieses Energiebereichs ist, wie oben bereits erläutert, mit den hier zur Verfügung stehenden bekannten Zuständen nicht möglich.



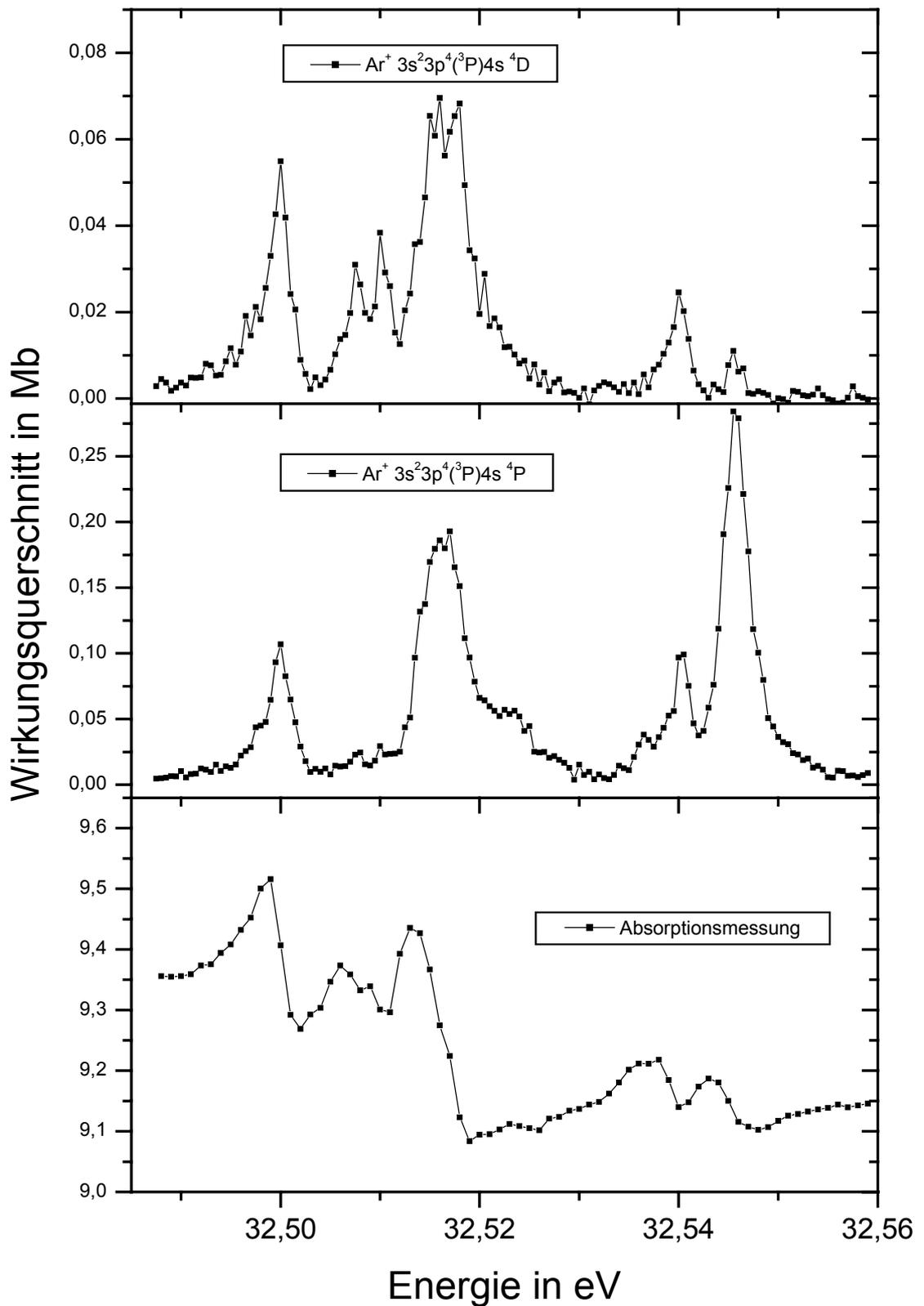


Abb. 5.11: Zusammenfassung der Wirkungsquerschnitte der $\text{Ar}^+ 3d\ ^4D$ und $4s\ ^4P$ – Satelliten, sowie des totalen Photoionisationswirkungsquerschnitts im Primärenergiebereich von 32,49 bis 32,56 eV.

Abb. 5.10: (Seite 88) Wirkungsquerschnitt der beobachteten Ar^+ – Übergänge im Primärenergieintervall von 32,49 bis 32,56 eV.

5.2.3 Der Primärenergiebereich von 32,6 bis 32,8 eV

Dieser Bereich ist gekennzeichnet von eher schwachen Autoionisationsresonanzen. Diese sind in den meisten Fällen klar voneinander getrennt, können jedoch wie z.B. in Abb. 5.14 gezeigt nicht allein durch die in [Bai92] vorgeschlagene $4s\ ^2P_{3/2}\ np$ – Serie erklärt werden. Die dort angegebenen Energiepositionen stimmen in diesem Primärenergiebereich nicht exakt mit den experimentellen Werten überein. Berechnet man hingegen die Rydbergserien mit der Rydbergformel und setzt als effektive Quantenzahlen in der $4s\ ^2P_{3/2}\ np$ – Serie 6,2, 7,2, 8,2 und 9,2 an, so kann man die Peaks 7, 8, 11 und 13 gut wiedergeben (siehe Tab. 5.3). Bezieht man dann noch die $4s\ ^2P_{1/2}\ np$ – Serie mit den effektiven Quantenzahlen von 5,2, 6,2 und 7,2 mit ein, so erhält man die Energielagen der Peaks 4 und 9, während die Energielage von Peak 15 vom Experiment etwas abweicht. Die Kombination der beiden Serien erlaubt in diesem Primärenergiebereich eine deutlich bessere Beschreibung des energetischen Verlaufs als mit den in [Bai92] angegebenen Energiepositionen. Um den $4s\ (^2D)\ 5p$ – Störer werden die Daten allerdings von der in [Bai92] angegebenen Rechnung besser wiedergegeben (vgl. Kap. 5.2.4), deshalb sind im Kopf aller Abbildungen die Energiepositionen der $4s\ ^2P_{3/2}\ np$ – Serie aus der Literatur und nur im Falle der $4s\ ^2P_{1/2}\ np$ – Serie die eigenen Berechnungen markiert. Festzuhalten bleibt allerdings, dass es mit den beiden Serien nicht möglich ist diesen Primärenergiebereich mit den relativ einfachen Strukturen in den Emissionswirkungsquerschnitten zu erklären.

| Nr. | Experiment | Rydbergformel | n* = | | 4s $^2P_{3/2}$ np [Bai92] |
|------|-----------------------|-----------------------|--------------------|--------------------|---------------------------|
| | Energieposition in eV | Energieposition in eV | 4s $^2P_{3/2}$ n*p | 4s $^2P_{1/2}$ n*p | Energieposition in eV |
| 4 D | 32,517 | 32,5158 | | 5,2 | |
| 5 | 32,524 | | | | |
| 6 | 32,54 | | | | 32,536 |
| 7 | 32,546 | 32,5450 | 6,2 | | |
| 8 | 32,638 | 32,6365 | 7,2 | | 32,625 |
| 9 | 32,666 | 32,6650 | | 6,2 | |
| 10 | 32,683 | | | | 32,690 |
| 11 | 32,699 | 32,6967 | 8,2 | | |
| 12 D | 32,723 | | | | |
| 13 | 32,737 | 32,7382 | 9,2 | | 32,732 |
| 14 | 32,741 | | | | |
| 15 | 32,762 | 32,7565 | | 7,2 | 32,765 |
| 16 | 32,772 | | | | |
| 17 | 32,794 | | | | 32,788 |
| 18 | 32,811 | 32,8167 | | 8,2 | 32,809 |
| D | Doppelpeak | | | | |

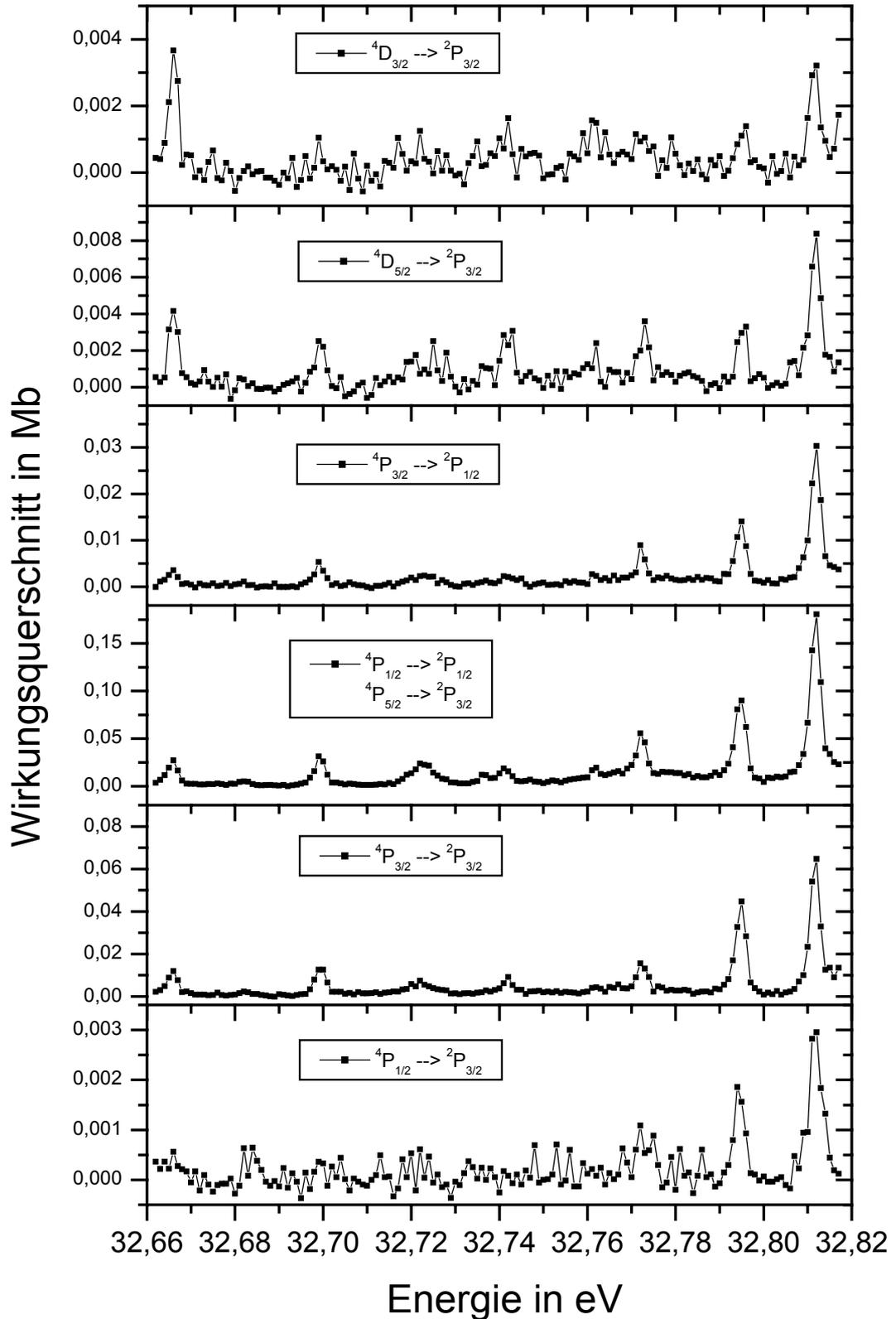


Abb. 5.12: Wirkungsquerschnitt der beobachteten Ar^+ – Übergänge im Primärenergiebereich von 32,66 bis 33,82 eV.

Tabelle 5.3: (Seite 90) Experimentell bestimmte Energiepositionen der Autoionisationsresonanzen im Vergleich mit Berechnungen mittels Rydbergformel (2.11) und der Berechnung von Baig et. al. [Bai92].

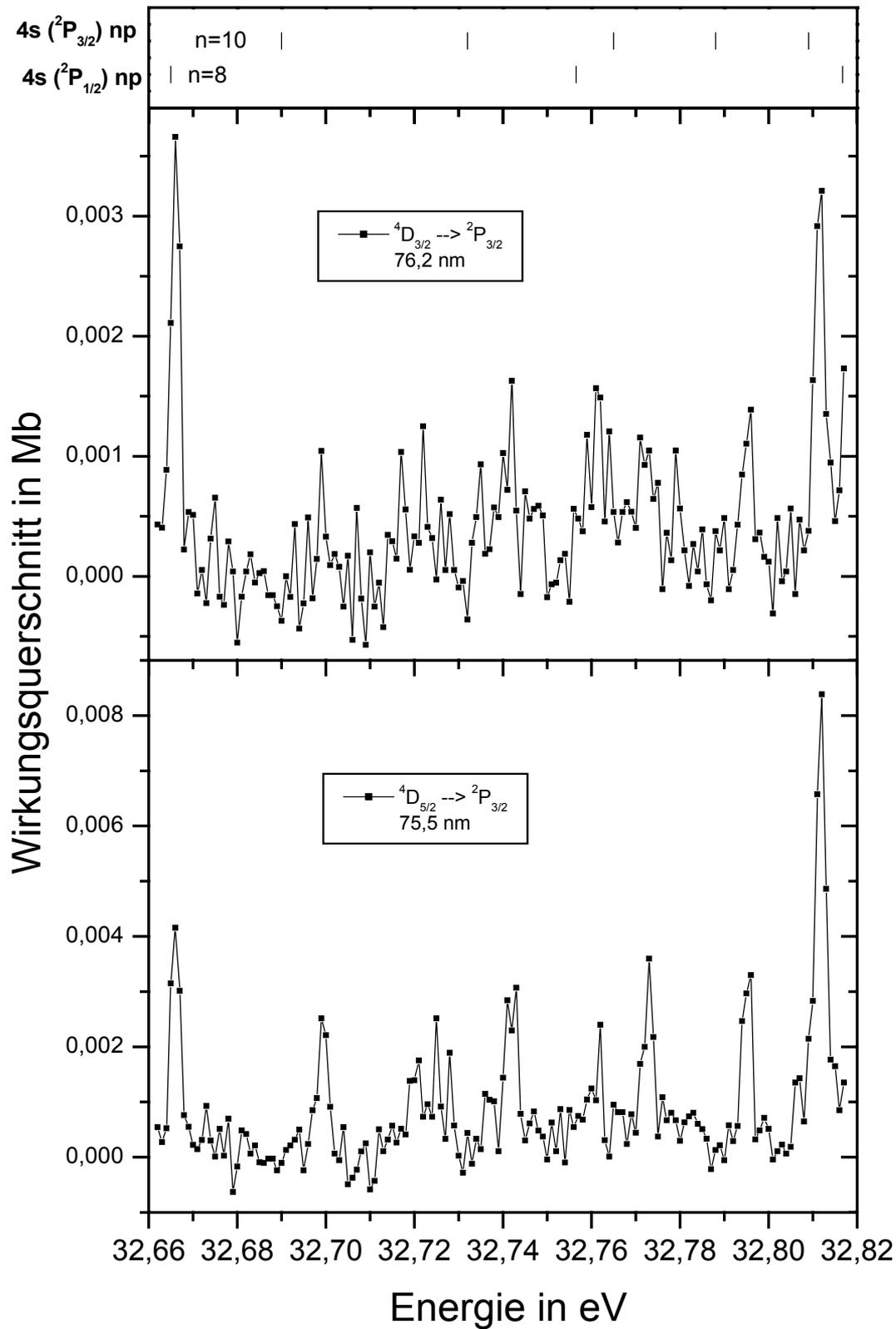


Abb. 5.13: Wirkungsquerschnitt der $\text{Ar}^+ 3d \ ^4D$ – Satelliten im Primärenergiebereich von 32,66 bis 33,82 eV. $4s \ (^2P_{3/2}) \ np$ Rydbergserie aus [Bai92], $4s \ (^2P_{1/2}) \ np$ Serie eigene Berechnung.

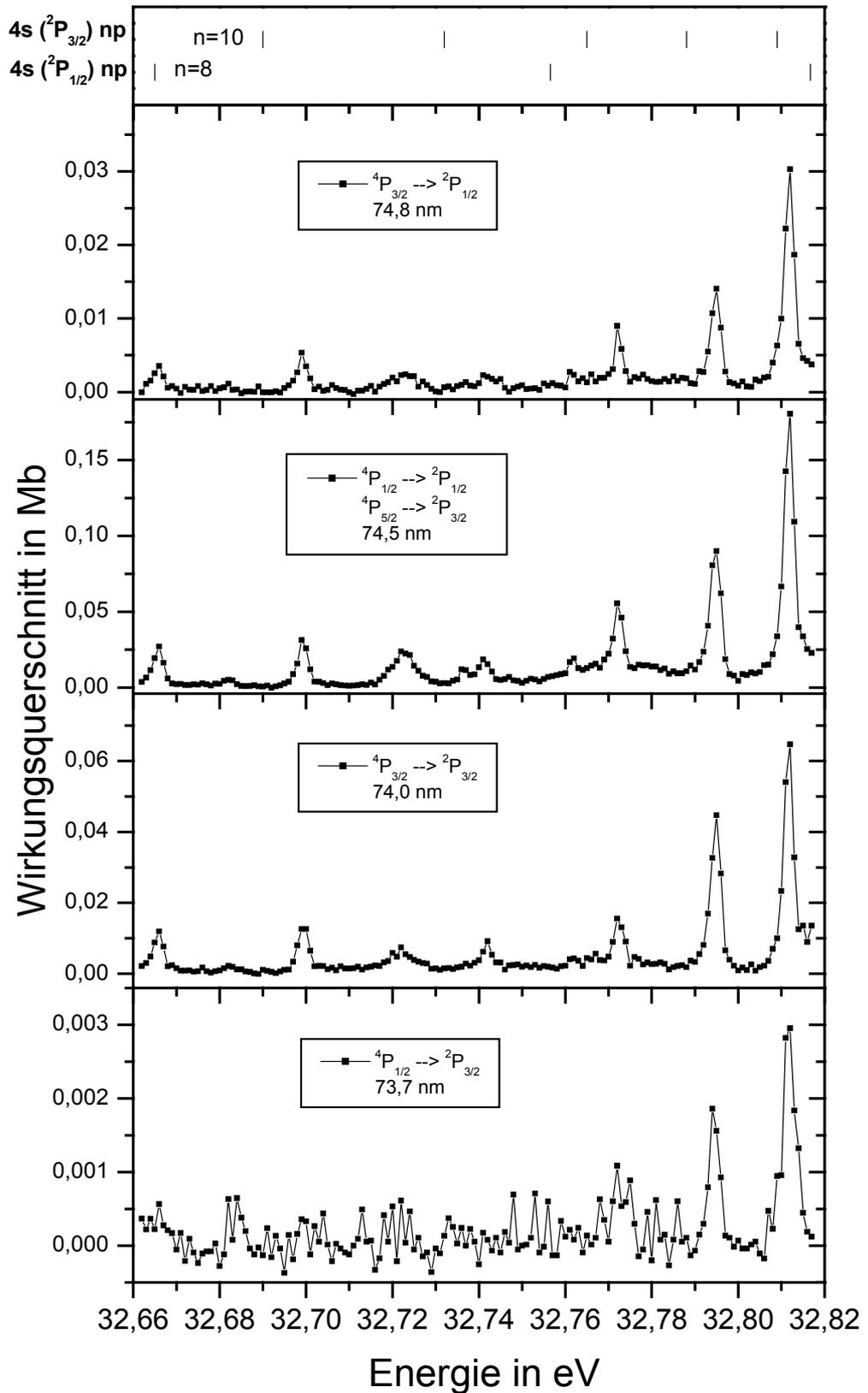


Abb. 5.14: Wirkungsquerschnitt der Ar^+ $4s$ 4P – Satelliten im Primärenergiebereich von 32,66 bis 33,82 eV. $4s$ ($^2P_{3/2}$) np Rydbergserie aus [Bai92], $4s$ ($^2P_{1/2}$) np Serie eigene Berechnung.

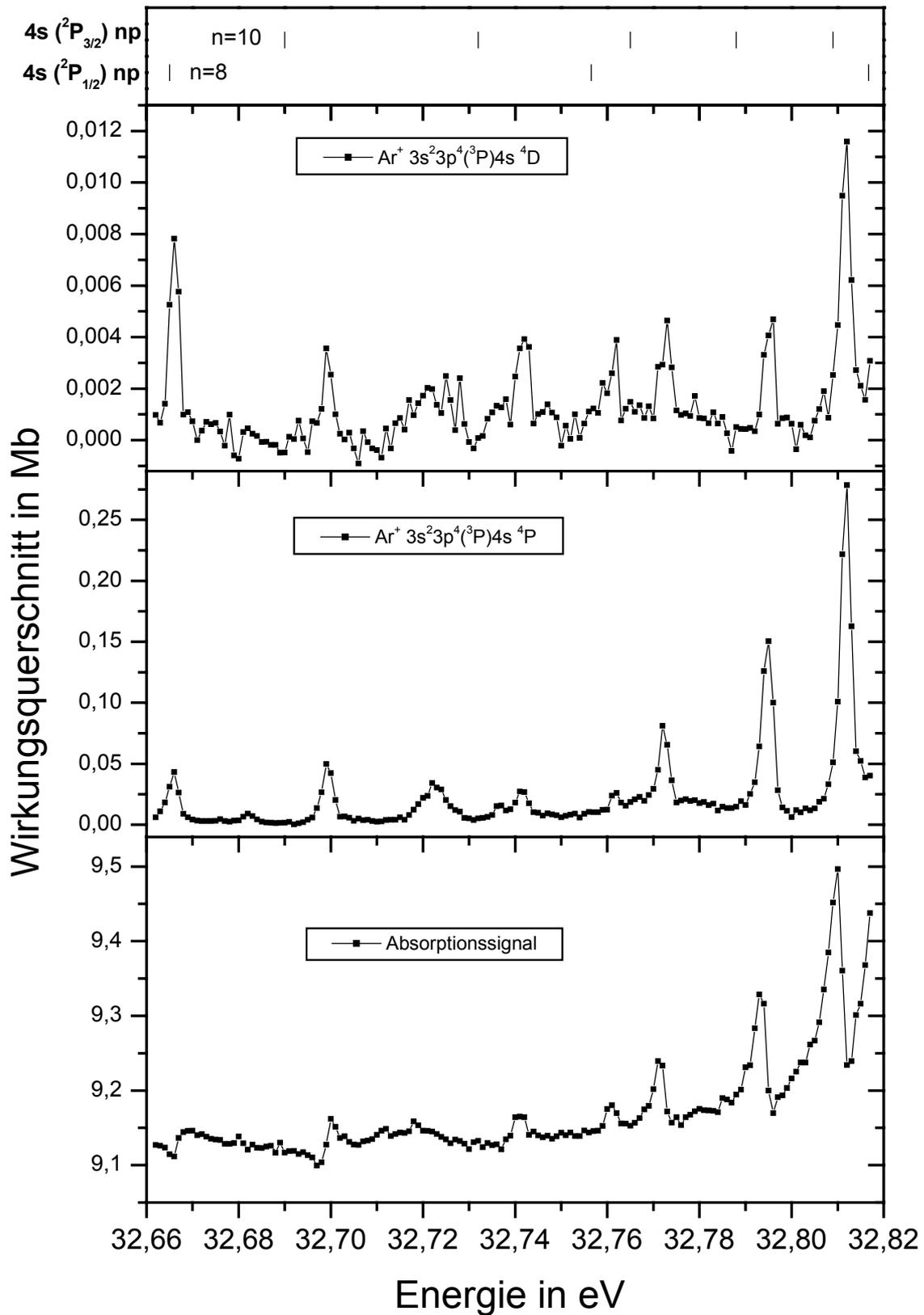


Abb. 5.15: Zusammenfassung der Wirkungsquerschnitte der $Ar^+ 3d ^4D$ und $4s ^4P$ – Satelliten, sowie des totalen Photoionisationswirkungsquerschnitts im Primärenergiebereich von 32,49 bis 33,05 eV. $4s (^2P_{3/2}) np$ Rydbergserie aus [Bai92], $4s (^2P_{1/2}) np$ Serie eigene Berechnung.

5.2.4 Untersuchungen im Bereich des $4s\ (^2D)\ 5p$ – Störers und der 2P – Schwelle

Dieser Bereich ist sehr interessant, aber auch am schwierigsten zu erklären. Wie bereits im vorangegangenen Kapitel beschrieben, versagt hier eine relativ einfache Berechnung der Energiepositionen der Autoionisationsresonanzen. Es ist in der Rydbergformel nicht mehr möglich mit konstanten Quantendefekten zu arbeiten. Dies wird durch den starken Einfluss des $4s\ (^2D)\ 5p$ – Störers hervorgerufen.

Führt man trotzdem die Berechnung der $4s\ ^2P_{1/2}\ np$ – Serie mit konstanten Quantendefekten durch, so sieht man beim experimentellen Vergleich drei Zustände im direkten Einflussgebiet des Störers. Inwiefern dieser Sachverhalt auch die Energielagen der $4s\ ^2P_{3/2}\ np$ – Serie in diesem Bereich beeinflusst kann an dieser Stelle nicht geklärt werden. Dazu sind weiterführende theoretische Überlegungen notwendig.

Der Einfluss des Störers macht sich aber auch in einer für die Messungen äußerst hilfreichen Eigenschaft bemerkbar. Der Emissionswirkungsquerschnitt ist in diesem Bereich um etwa eine Größenordnung höher als in den anderen untersuchten Bereichen.

Die Energielage des Störers wird in der Literatur [Mad69], [Har98] mit 32,852 eV angegeben. In den Abb. 5.17 bzw. 5.18 fällt bei etwa 32,822 eV ein etwas verbreiteter Peak (Nr. 19) auf, der sich auch mit besserer Primärenergieauflösung (vgl. Kap. 5.3) zeigt und somit ein Doppelpeak sein muss. An diesem Beispiel sieht man deutlich den Einfluss der $4s\ ^2P_{1/2}\ np$ – Serie, da eine solche Struktur nicht durch eine einzige Rydbergserie erklärt werden kann. (Die Feinstrukturaufspaltung zur Erklärung kommt nicht in Frage, da sie sonst auch auf den restlichen Peaks zu sehen sein sollte. Berechnungen für den hier betrachteten Fall haben gezeigt, dass die Aufspaltung im μeV – Bereich liegt [Suk03].) Trotz der Nähe zum Störer ist die Energielage des $4s\ ^2P_{1/2}\ 10p$ – Zustands berechnet mit (2.11) und den in Kap. 5.2.3 eingeführten Quantendefekten sehr nahe an den experimentellen Daten von Peak 19 (vgl. auch Abb. 5.17 und Tab. 5.3).

Die dann folgenden Peaks sind im dominierenden Kanal $4s\ ^4P_{5/2} \rightarrow 3p^5\ ^2P_{3/2}$ mit einem Wirkungsquerschnitt von mehr als 0,6 bzw. 0,5 Mb die beiden stärksten Resonanzen. Es zeigen sich deutliche Unterschiede zwischen dem $^4P_{5/2}$ und dem $^4P_{3/2}$ – Kanal. Während die Peaks Nr. 20 und 21 (siehe Abb. 5.18 (b)) die dominierenden Resonanzen im $^4P_{5/2}$ – Fluoreszenzsignal sind, ist der Peak Nr.19 im $^4P_{3/2}$ – Kanal (Abb. 5.18(c)) die dominierende Struktur. Die folgenden Nummern 20 bis 22 liegen auf etwa gleichem, etwas niedrigerem Niveau. Nr. 24 tritt hingegen wieder etwas stärker hervor. Der Emissionswirkungsquerschnitt dieser Autoionisationsresonanz ist im $^4P_{5/2}$ – Kanal viel kleiner, als die energetisch tieferliegenden (siehe Abb. 5.18). Zu beachten ist, dass der in Abb. 5.18 (a) gezeigte Übergang spektroskopisch nicht ganz sauber vom direkt benachbarten Übergang (Abb. 5.18 (b)) getrennt werden kann und deswegen nicht gesondert diskutiert wurde.

Ebenso sind zwar in Abb. 5.19 die beiden Fluoreszenzlinien bei 72,3 und 72,5 nm einzeln aufgeführt obwohl sie nicht sauber getrennt werden konnten. Dies ist der Grund des Intensitätsanstiegs an der $^2P_{3/2}$ – Schwelle im $^2P_{1/2}$ – Kanal. Man sieht deutlich, dass dieses Signal nur aus dem direkt benachbarten $4s\ ^2P_{3/2} \rightarrow 3p^5\ ^2P_{3/2}$ Übergang stammen kann, da der zweite Zerfallskanal des $^2P_{1/2}$ – Zustands keinerlei Intensitätsanstieg zeigt. Dieser Übergang liegt isoliert bei 71,8 nm.

Der totale Photoionisationswirkungsquerschnitt in Abb. 5.20 zeigt deutlich die starke Struktur, die durch den $4s\ (^2D)\ 5p$ – Störer hervorgerufen wird. Die stärksten Oszillationen sind in der Größenordnung von einem Mb. Dies lässt sich sehr gut mit den Fluoreszenzdaten in Einklang bringen.

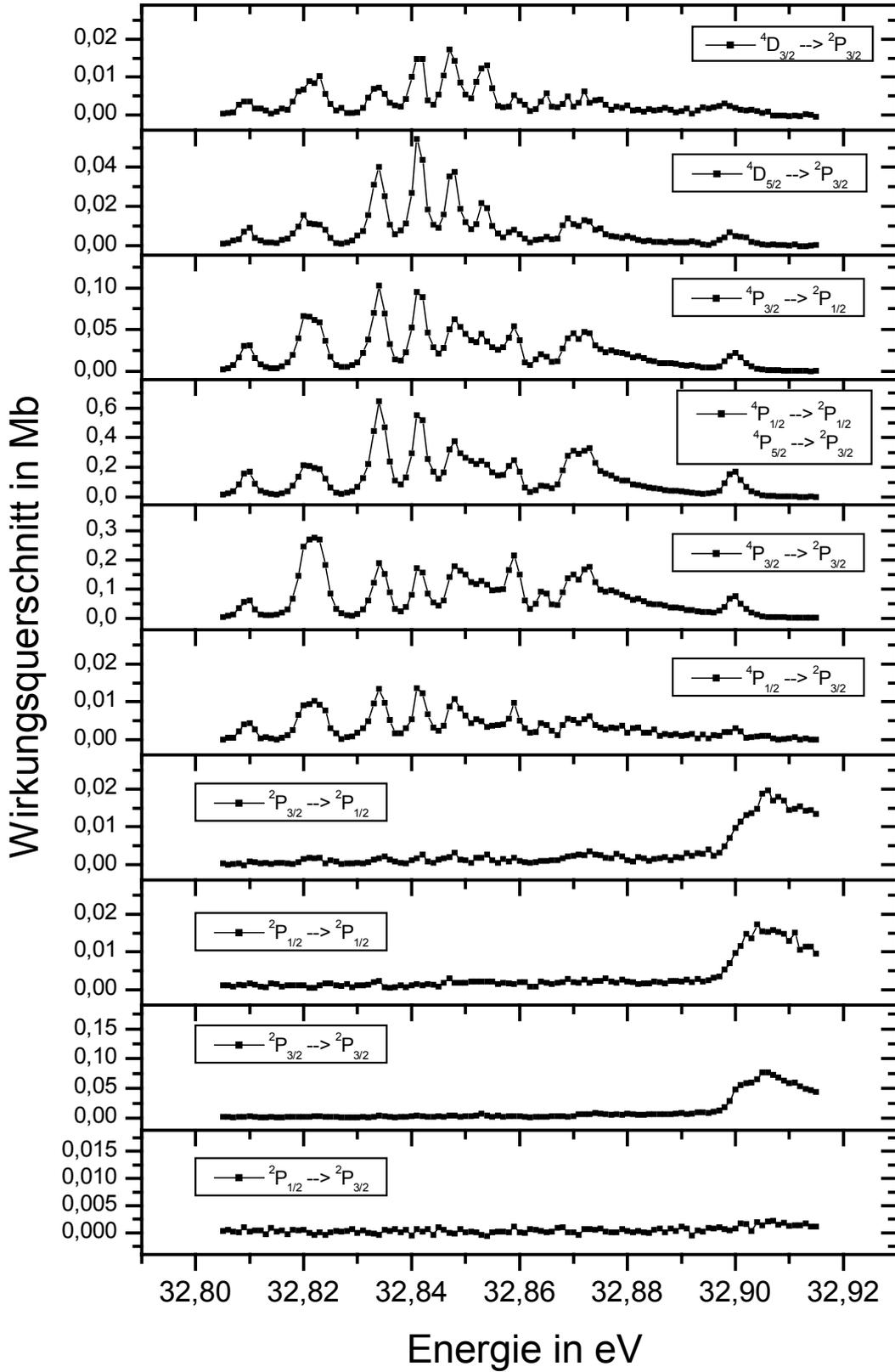


Abb. 5.16: Wirkungsquerschnitt der beobachteten Ar⁺ – Satelliten im Primärenergiebereich von 32,8 bis 33,92 eV.

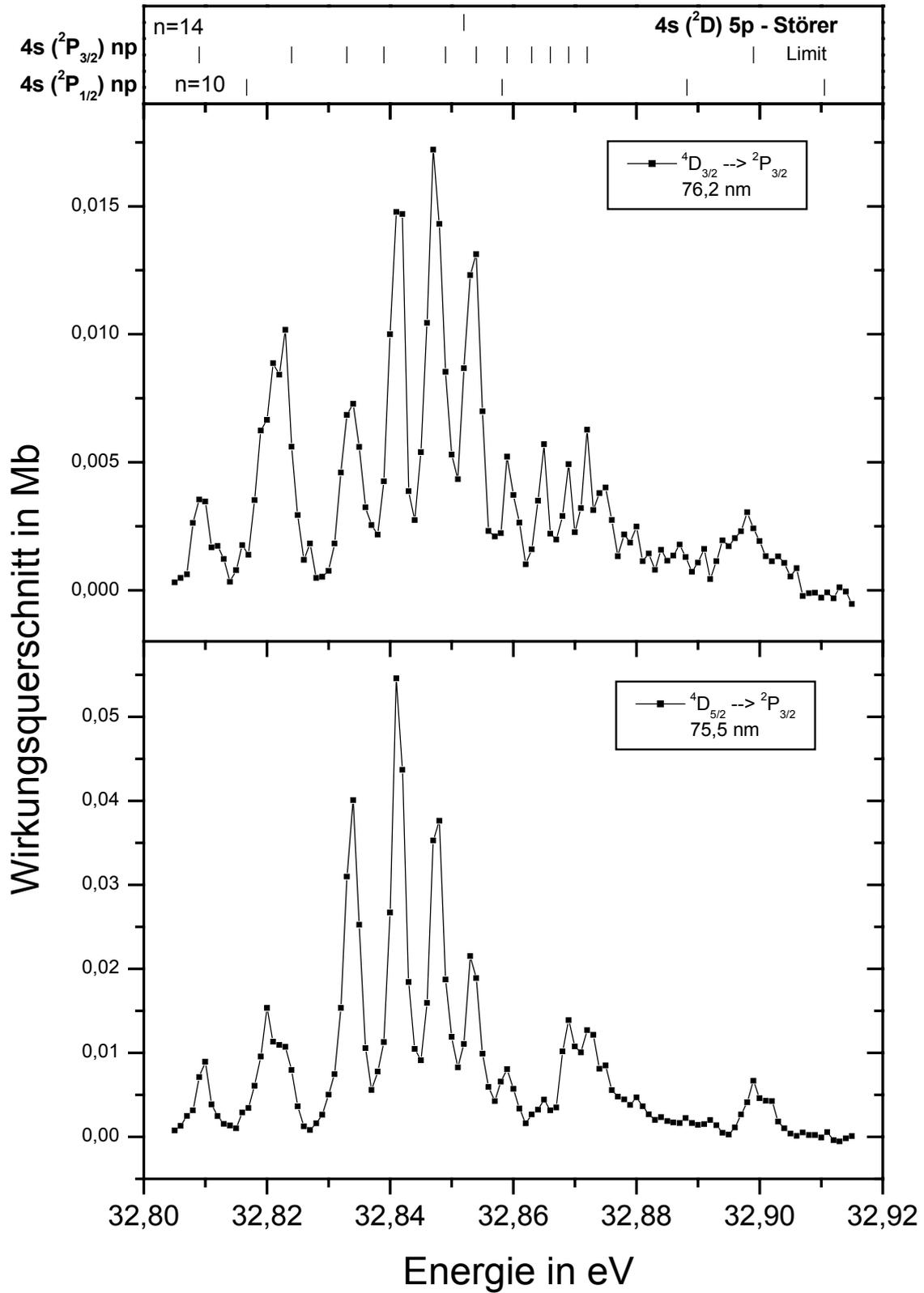


Abb. 5.17: Wirkungsquerschnitt der $\text{Ar}^+ 3d 4D$ – Satelliten im Primärenergiebereich von 32,8 bis 33,92 eV. $4s(2P_{3/2}) np$ Rydbergserie und $4s(2D) 5p$ Störer aus [Bai92], $4s(2P_{1/2}) np$ Serie eigene Berechnung.

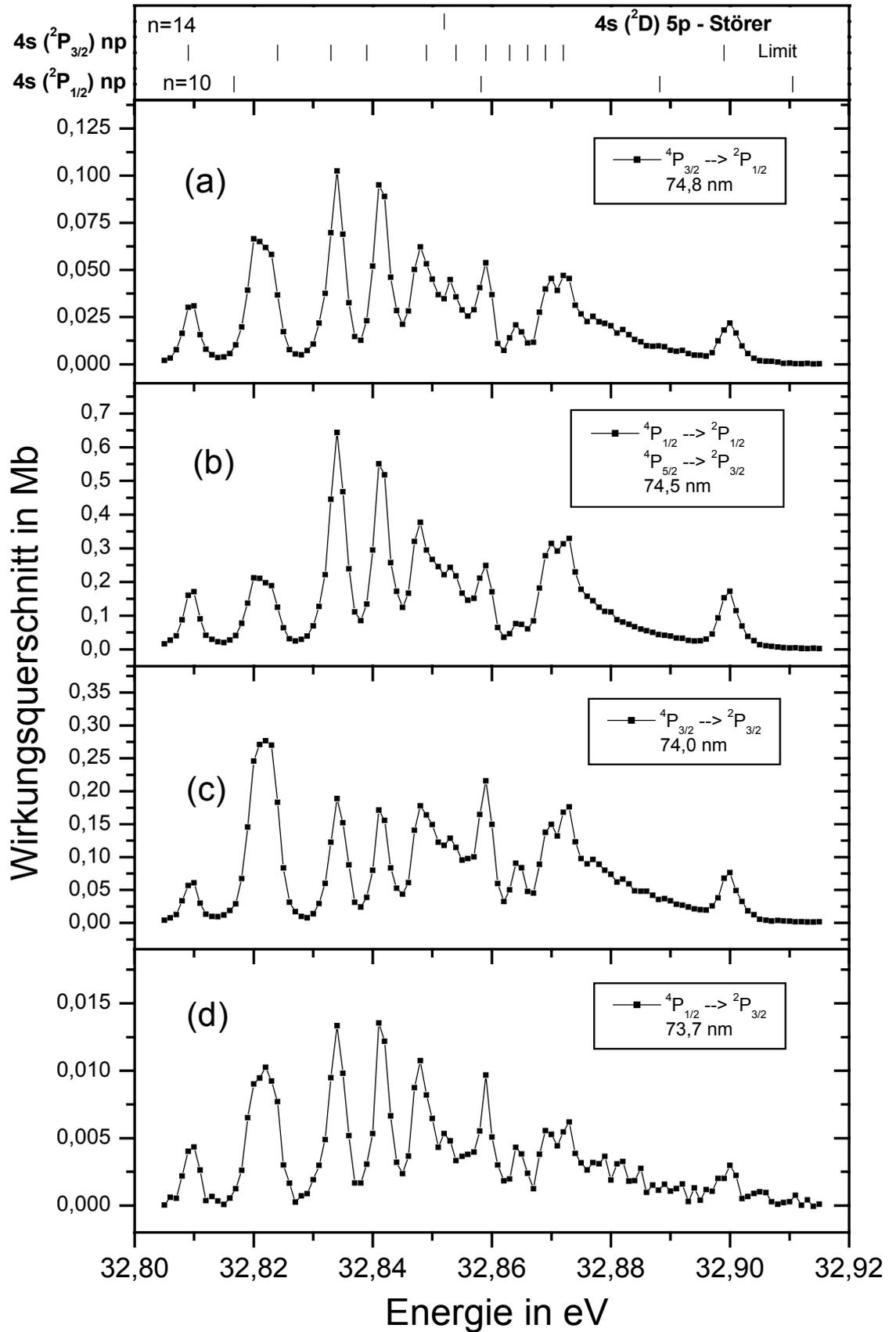


Abb. 5.18: Wirkungsquerschnitt der Ar^+ $4s\ 4P$ – Satelliten im Primärenergiebereich von 32,8 bis 33,92 eV. $4s\ ({}^2P_{3/2})\ np$ Rydbergserie und $4s\ ({}^2D)\ 5p$ Störer aus [Bai92], $4s\ ({}^2P_{1/2})\ np$ Serie eigene Berechnung.

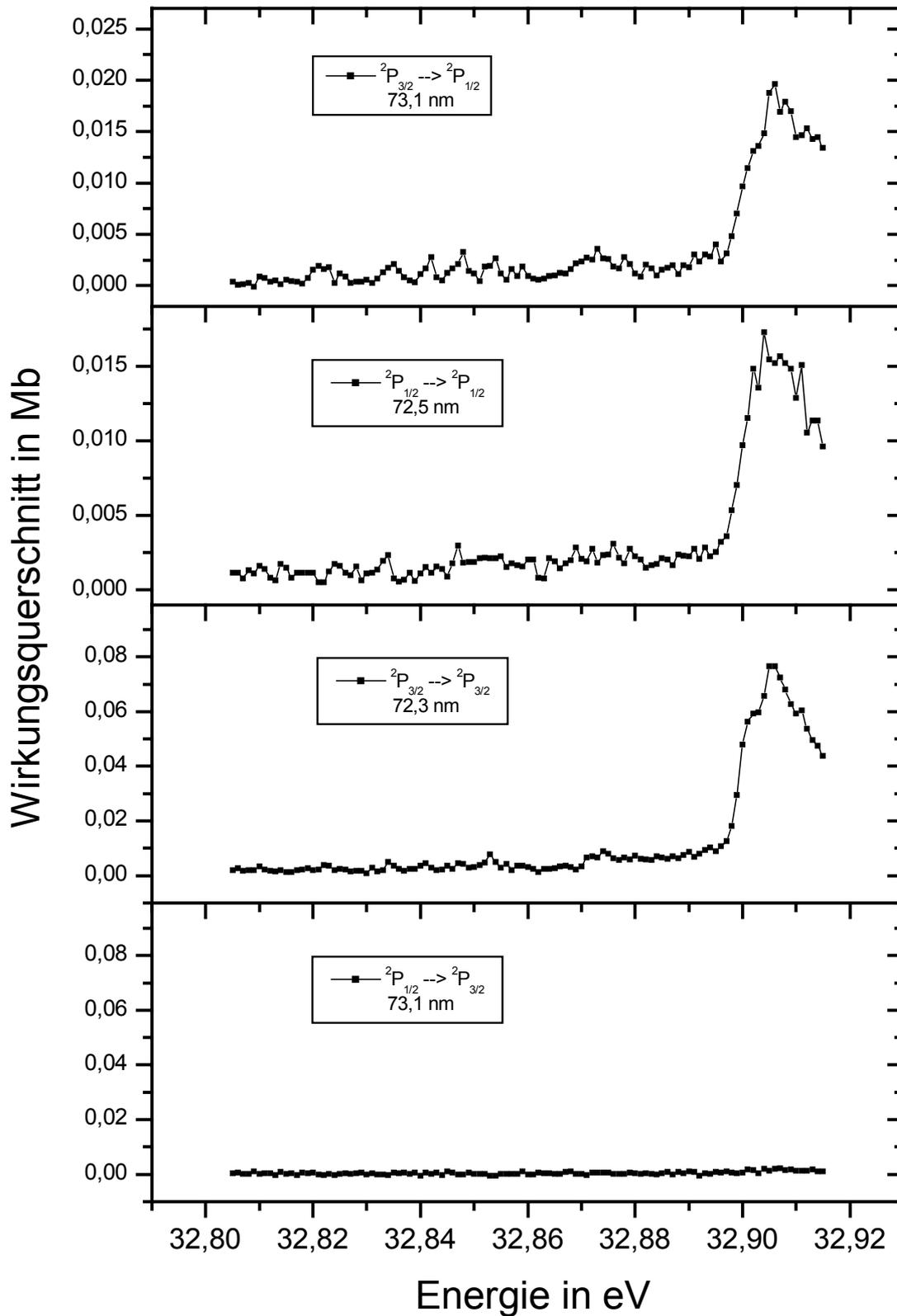


Abb. 5.19: Wirkungsquerschnitt der $\text{Ar}^+ 4s \ ^2P$ – Satelliten im Primärenergiebereich von 32,8 bis 33,92 eV. $4s \ (^2P_{3/2})$ np Rydbergserie und $4s \ (^2D) 5p$ Störer aus [Bai92], $4s \ (^2P_{1/2})$ np Serie eigene Berechnung.

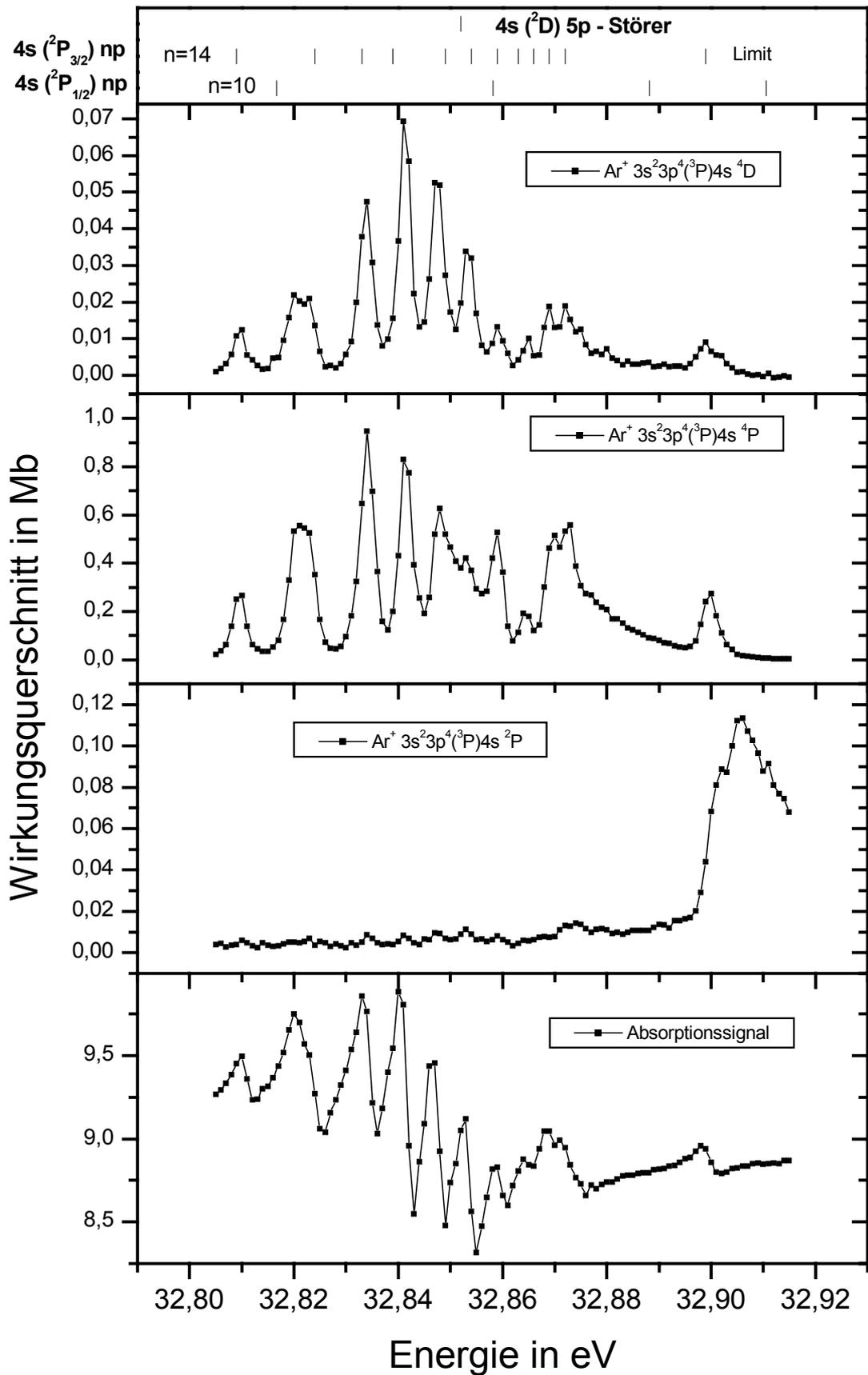


Abb. 5.20: Zusammenfassung der Wirkungsquerschnitte der $\text{Ar}^+ 3d {}^4\text{D}$, $4s {}^4\text{P}$ und $4s {}^2\text{P}$ – Satelliten, sowie des totalen Photoionisationswirkungsquerschnitts im Primärenergiebereich von 32,8 bis 33,92 eV. $4s ({}^2\text{P}_{3/2}) np$ Rydbergserie und $4s ({}^2\text{D}) 5p$ Störer aus [Bai92], $4s ({}^2\text{P}_{1/2}) np$ Serie nach (2.11).

| Nr. | Energieposition in eV | Nr. | Energieposition in eV |
|------|-----------------------|------|-----------------------|
| 1 | 32,5 | 18 | 32,811 |
| 2 | 32,5075 | 19 D | 32,822 |
| 3 | 32,51 | 20 | 32,834 |
| 4 D | 32,517 | 21 | 32,8415 |
| 5 | 32,524 | 22 | 32,848 |
| 6 | 32,54 | 23 | 32,853 |
| 7 | 32,546 | 24 | 32,859 |
| 8 | 32,638 | 25 | 32,864 |
| 9 | 32,666 | 26 | 32,87 |
| 10 | 32,683 | 27 | 32,873 |
| 11 | 32,699 | 28 * | 32,9 |
| 12 D | 32,723 | 29 | 32,922 |
| 13 | 32,737 | 30 | 32,939 |
| 14 | 32,741 | 31 | 32,952 |
| 15 | 32,762 | 32 | 32,964 |
| 16 | 32,772 | 33 | 32,973 |
| 17 | 32,794 | 34 | 32,979 |
| D | Doppelpeak | * | Seriengrenze |

Tabelle 5.4: Experimentell bestimmte Energiepositionen der Autoionisationsresonanzen im Primärenergiebereich von 32,5 bis 33 eV

5.2.5 Intensitätsverlauf der ^4P und ^2P – Satelliten im Primärenergiebereich von 32,82 bis 32,96 eV – Beobachtung der Intensität I_{90°

Obwohl, wie in Abb. 5.21 zu sehen, die spektrale Auflösung nicht ausreicht um die einzelnen Übergänge spektroskopisch zu zerlegen, sind in den in Abb. 5.22 gezeigten Verläufen der Wirkungsquerschnitte der Ar^+ $4s$ ^4P und ^2P – Zustände sehr gut die Strukturen z.B. aus Abb. 5.9 zu sehen. Zum Vergleich ist in dieser Abb. im unteren Teil auch das Signal der Absorptionsmessung aufgetragen. Das in Abb. 5.22 gezeigte Fluoreszenzsignal ist simultan zu dem in Abb. 4.7 dargestellten Verlauf der Ar^+ $3s$ – Wirkungsquerschnitte gemessen. Eine Kalibrierung auf diesen Wirkungsquerschnitt ist leider nicht möglich, da die experimentellen Unterschiede der Detektionssysteme zu groß sind. Darüber hinaus geht noch die Winkelverteilung der Fluoreszenzstrahlung ein, die eine solche Kalibrierung auf die Intensität I_{0° unmöglich macht. Dazu wäre ein sauber getrennter Zustand mit Gesamtdrehimpuls $J_i = 1/2$ notwendig.

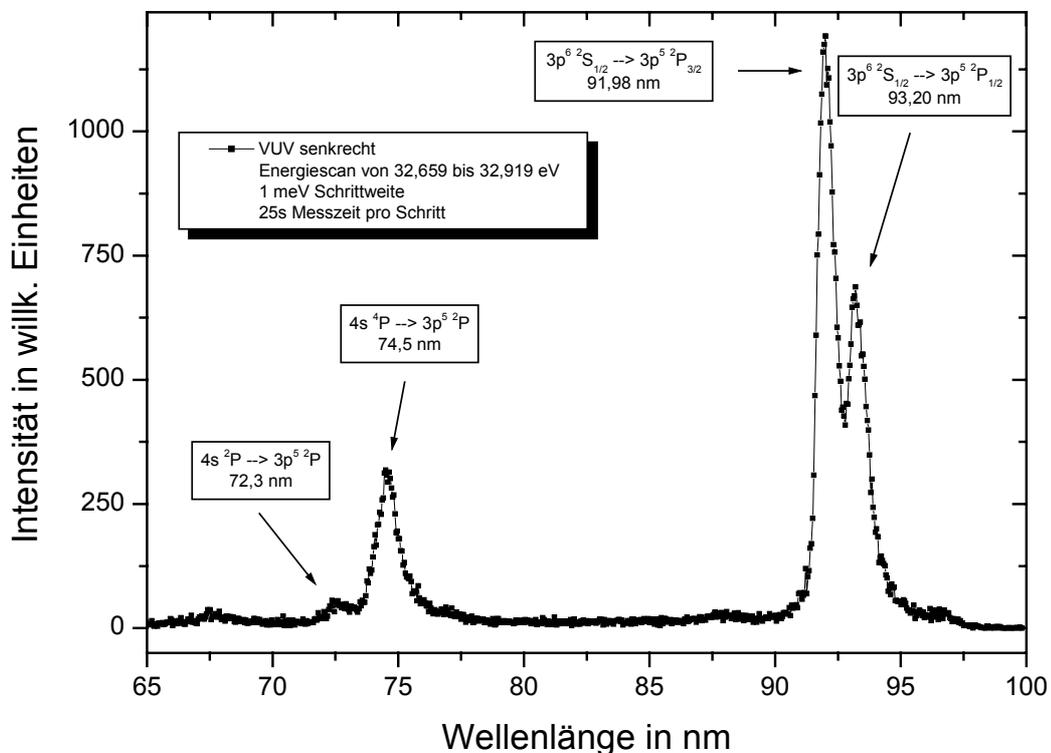


Abb. 5.21: Fluoreszenzspektrum von Argon nach Anregung mit linear horizontal polarisierter Synchrotronstrahlung.
(Aufgenommen mit Monochromator Nr.1)

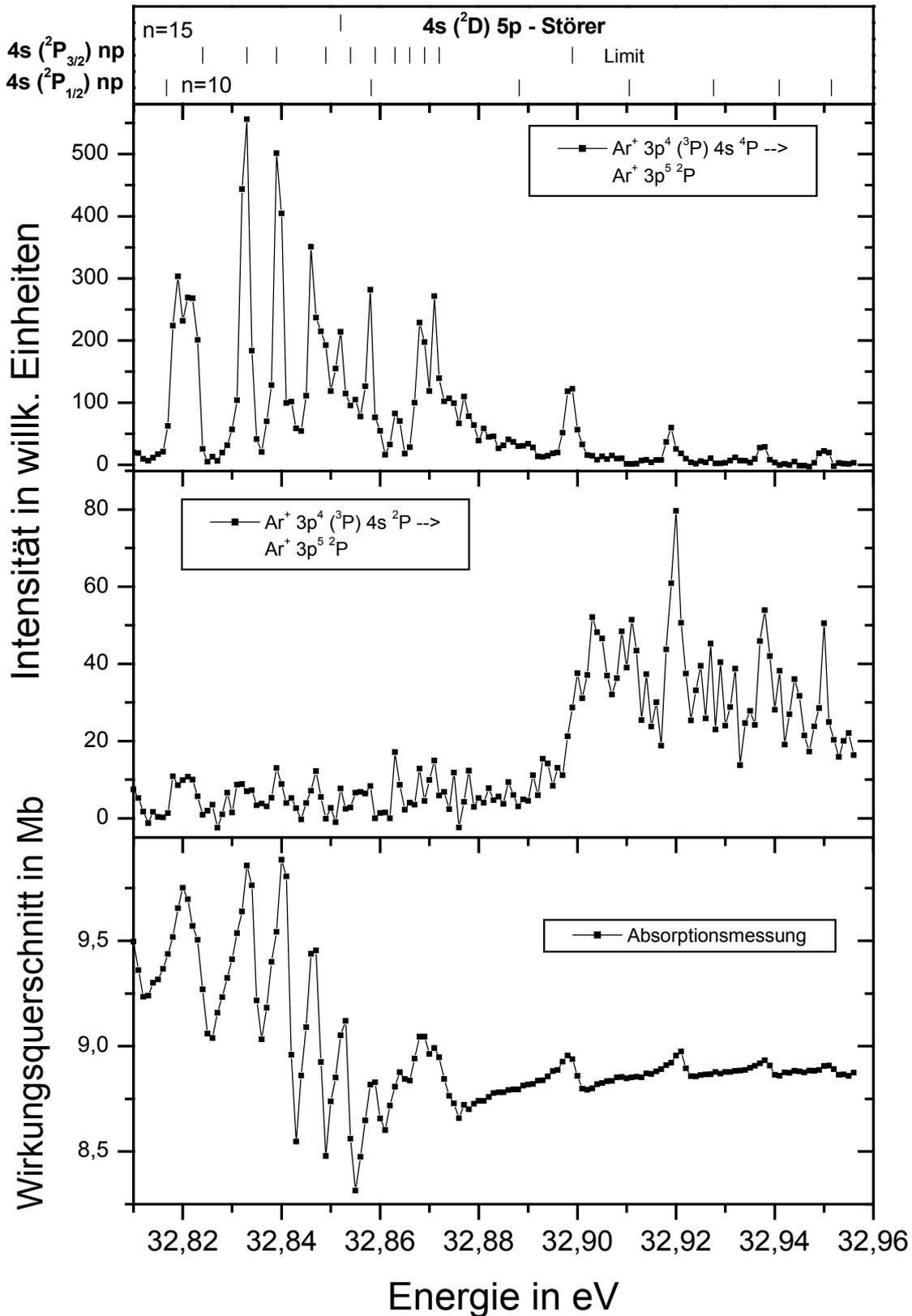


Abb. 5.22: Energetischer Verlauf der $\text{Ar}^+ 4s {}^{4,2}P$ – Satelliten und des totalen Photoionisationswirkungsquerschnitts. Beobachtung der Fluoreszenzkomponente senkrecht zur Polarisationsrichtung der anregenden Photonen. $4s ({}^2P_{3/2}) np$ Rydbergserie und $4s ({}^2D) 5p$ Störer aus [Bai92], $4s ({}^2P_{1/2}) np$ Serie eigene Berechnung.

5.3 Absorptionsmessungen mit höchster Primärauflösung.

Zur Unterstützung der in Kapitel 5.2 gemachten fluoreszenzspektroskopischen Untersuchungen sind mit einer Primärauflösung von etwa 1,7 meV Absorptionsmessungen in Abhängigkeit der anregenden Photonenenergie durchgeführt worden. Die lineare Polarisationsrichtung der anregenden Photonen ist wie in den Experimenten in Kap. 5.2 horizontal. Durch die unterschiedliche Primärauflösung und die veränderte Ausleuchtung der Wechselwirkungszone ist eine Kalibrierung auf den Wirkungsquerschnitt (siehe Kap. 4.5.2) nicht möglich. Die Photonenflüsse der U125/1 PGM – Beamline sind bei diesen Einstellungen so gering, dass eine gleichzeitige Aufnahme von Fluoreszenzdaten nicht möglich war. Messungen in dieser Konfiguration wurden aus zeitlichen Gründen nur für die beiden interessanten Bereiche aus Kap. 5.2.2 und Kap. 5.2.4 gemacht. In den erhaltenen primärenergieabhängigen Signalen zeigen sich deutlich die Fanoprofile der Autoionisationsresonanzen. In Abb. 5.23 sind klar die sieben Peaks der Fluoreszenzmessungen aus Kap. 5.2.2 zu erkennen. Die Doppelstruktur von Peak 4 kann in diesen Daten bestätigt werden. Außerdem deuten sich auch im ersten und im sechsten Peak Unterstrukturen an. Abb. 5.24 bestätigt den Verlauf des Wirkungsquerschnitts in Kap. 5.2.4. Die Doppelstruktur bei 32,822 eV ist hier aufgelöst.

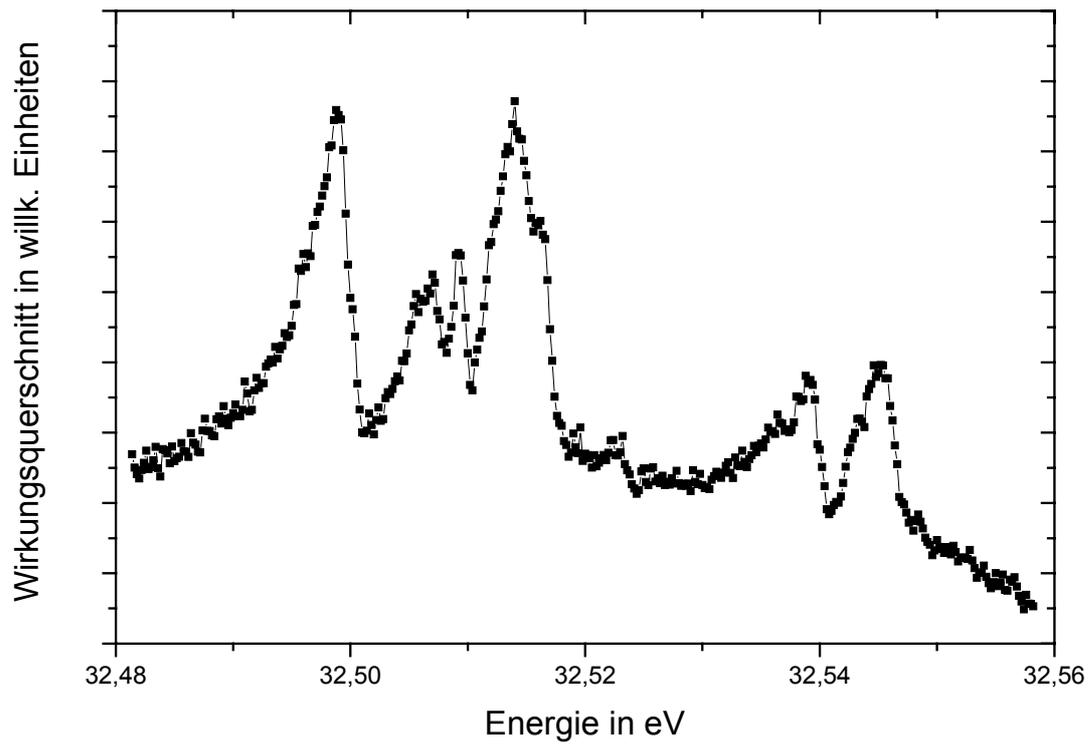


Abb. 5.23: Absorptionsmessung mit höchster Primärauflösung im Energiebereich von 32,48 bis 32,58 eV.

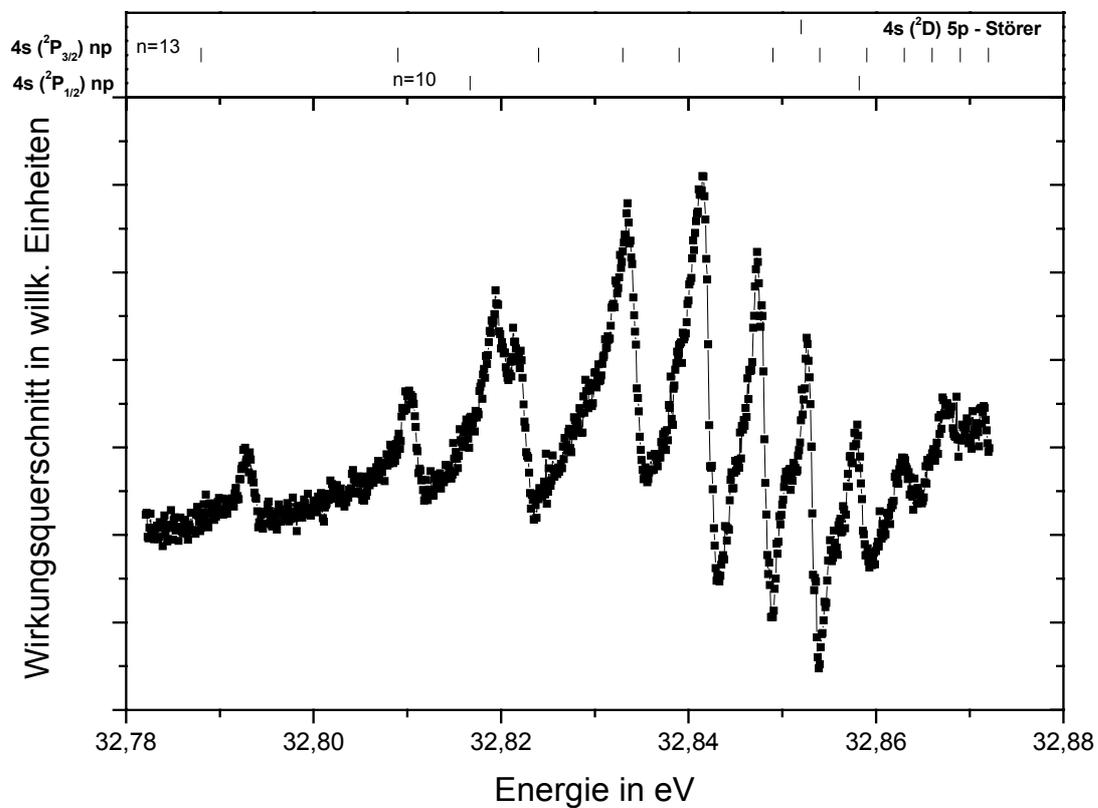


Abb. 5.24: Absorptionsmessung mit höchster Primärauflösung im Energiebereich von 32,78 bis 32,87 eV. $4s (^2P_{3/2}) np$ Rydbergserie und $4s (^2D) 5p$ Störer aus [Bai92], $4s (^2P_{1/2}) np$ Serie eigene Berechnung.

5.4 Zusammenfassende Diskussion der Ergebnisse der Ar^+ 4s–Satellitenmessungen

Die gezeigten Messungen sind dominiert durch den Einfluss des 4s (^2D) 5p – Störers. Seine Präsenz zeigt sich auf zwei Weisen. Es wird eine starke Zunahme der Intensitäten in allen beobachteten Zerfallskanälen registriert. Außerdem sind die in diesem Bereich auftretenden Rydbergserien stark gestört.

Durch die hier gezeigten Daten, die erstmals mittels fluoreszenzspektroskopischen Methoden eine Auflösung der Resonanzstruktur um den 4s (^2D) 5p – Störer zeigen, sind neue Zugänge zur Interpretation der doppelt angeregten Zustände möglich.

Es zeigt sich deutlich, dass es nicht ausreicht die von [Bai92] vorgeschlagene 4s $^2\text{P}_{3/2}$ np – Serie zur Interpretation heranzuziehen. Es sind zweifelsfrei auch Zustände der 4s $^2\text{P}_{1/2}$ np – Serie im energetischen Verlauf der Emissionswirkungsquerschnitte zu sehen. Eine Zuordnung von Zuständen dieser Serie zu den Maxima der experimentellen Daten ist bei der Verwendung von entsprechenden Quantendefekten vor der Energieposition des Störers möglich. Eine Zuordnung im weiteren Energieverlauf ist auf diese einfache Weise nicht möglich. In diesem Fall ist die Unterstützung der Theorie notwendig, die gerade durch die hier gezeigte zustandsselektive Besetzung auf Autoionisationsresonanzen ein leistungsfähiges Mittel zur Hand hat, eine solche Zuordnung zu erreichen.

Auch ist es gelungen, ausgehend von einem isolierten Maximum im energetischen Verlauf des Emissionswirkungsquerschnitts bei der Anregungsenergie von 32,5 eV eine eindeutige Identifikation von sieben Maxima in diesem Bereich zu dokumentieren. Sämtliche Energiepositionen der hier detektierten Autoionisationsresonanzen stehen nun im Primärenergiebereich von 32,490 eV bis 33,050 eV durch eine von Absorptionsuntersuchungen unabhängige Messmethode zur Verfügung.

Ebenso ist im Rahmen dieser Untersuchungen klar zu erkennen, dass die Besetzungen der $^4\text{P}_J$ – Satelliten, in Übereinstimmung der Beschreibung in LS – Kopplung, fast keine direkte Anregung zeigen. Hingegen werden die $^2\text{P}_J$ – Satelliten sowohl direkt (siehe energetische Schwelle z.B. in Abb. 5.8), als auch über Autoionisation besetzt.

Die Beschreibungen der doppelt angeregten Zustände, welche die beobachteten Quartett- und Dublettzustände besetzen, müssen Mischungen von Singulett- und Triplettzuständen enthalten. Beobachtet man Quartett – Zerfallskanäle, so werden die Triplettanteile des Ausgangszustands sichtbar gemacht. Eine Besetzung des Quartettzustands aus einem Singulettausgangszustand wäre nur über einen Spinflip eines gebundenen Elektrons möglich. Die Beobachtung der Dublettzustände wiederum ist ein Indikator für den Singulettanteil des Ausgangszustands, da dieser Anteil die Dublettzustände besetzt.

5.5 Bestimmung des Winkelasymmetrieparameters der Ar^+ (4p – 4s) Fluoreszenzstrahlung

Die hier untersuchten Zerfälle liegen im sichtbaren Spektralbereich bei etwa 470 nm. Ein Fluoreszenzspektrum der beiden Polarisationskomponenten der untersuchten Übergänge ist in Abb. 5.26 gezeigt. Die Normierung der Daten ist auf den Fluss der anregenden Photonen und auf die beiden Übergänge mit $J_i = 1/2$ erfolgt.

Die Daten sind unter Verwendung eines Wollastonprismas in Sekundärmonochromator Nr.1 ermittelt worden. Dies erlaubt die gleichzeitige Aufzeichnung der Intensitätskomponenten I_{\perp} und I_{\parallel} . Aufgeführt sind in den Abbildungen jeweils diese beiden Komponenten und der daraus mittels (5.1) (siehe auch Kap. 2.2 und 4.2.1) errechnete β_{fl} – Parameter.

$$\beta_{\text{fl}} = \frac{I_{\perp} - I_{\parallel}}{2I_{\perp} + I_{\parallel}} \quad (5.1)$$

Die Messungen sollten vor allem die starken Änderungen im β_{fl} – Parameter bei einer Primärenergie von etwa 36,6 eV in den Ergebnissen von Mentzel (Abb. 5.25 [Men98]) klären. Diese Daten sind in zwei Durchläufen (mit vertikalem und horizontalem Undulator) aufgezeichnet. Deshalb sind starke Variationen im Winkelasymmetrieparameter auf den Flanken der Autoionisationsresonanzen bei kleinen Primärenergieverschiebungen in den beiden Durchläufen möglich. Es sollte

mit der nun verfügbaren wesentlich besseren Primärauflösung und dem veränderten Messverfahren die Überprüfung dieser Struktur vorgenommen werden. Die Primärauflösung beträgt in allen gezeigten Messungen etwa 4 meV bei einer Schrittweite von 1 meV.

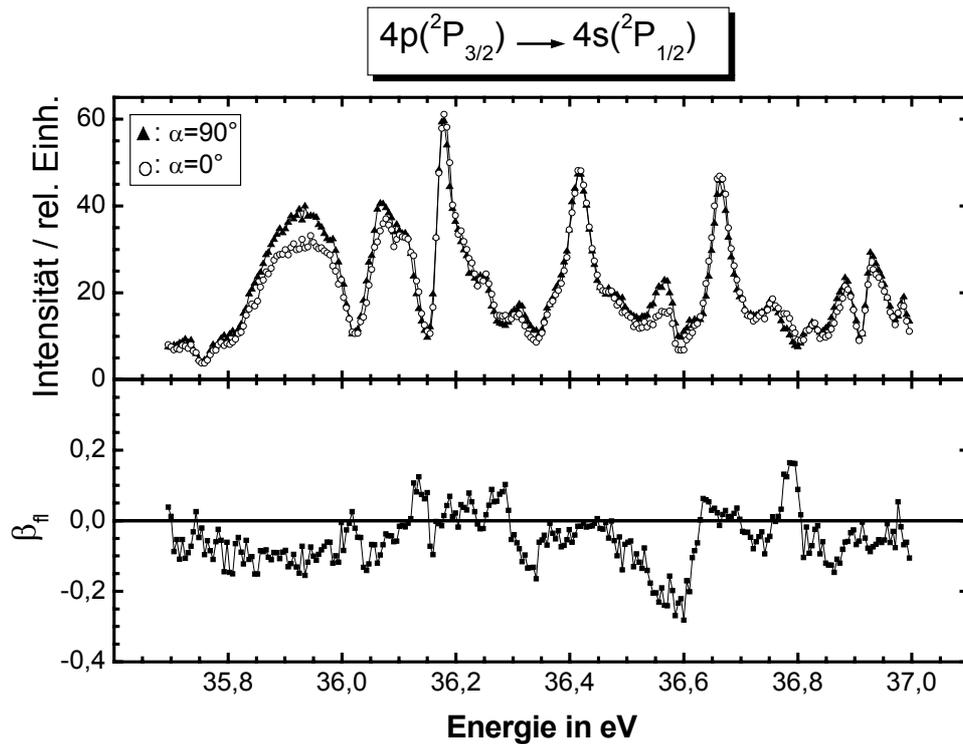


Abb. 5.25: Relative Intensitäten und β_{\parallel} – Parameter des Ar^+ Übergangs $4p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 4s\ ^2P_{1/2}$. Dreiecke: Messung mit vertikalem Undulator; Kreise: Messung mit horizontalem Undulator [Men98].

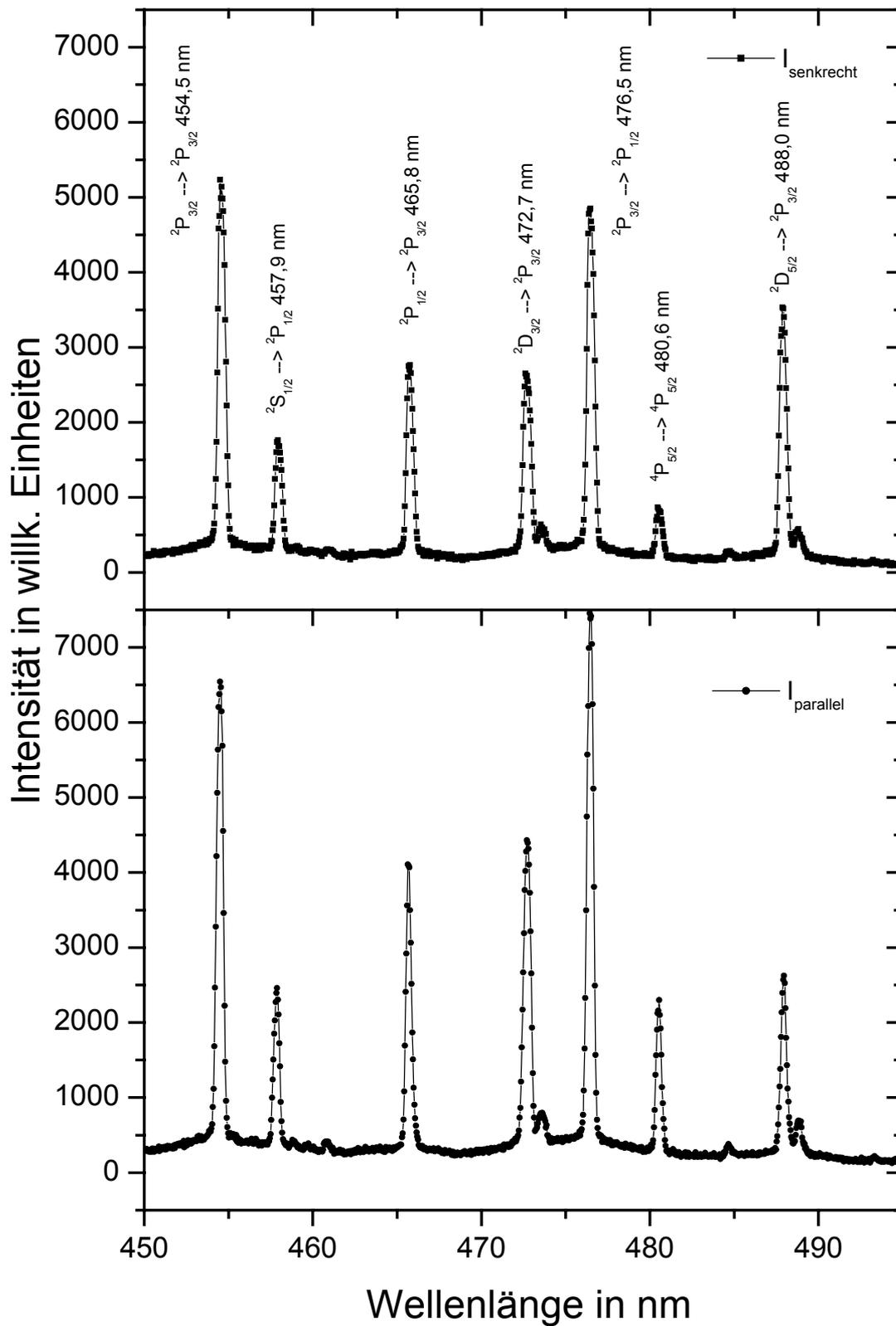
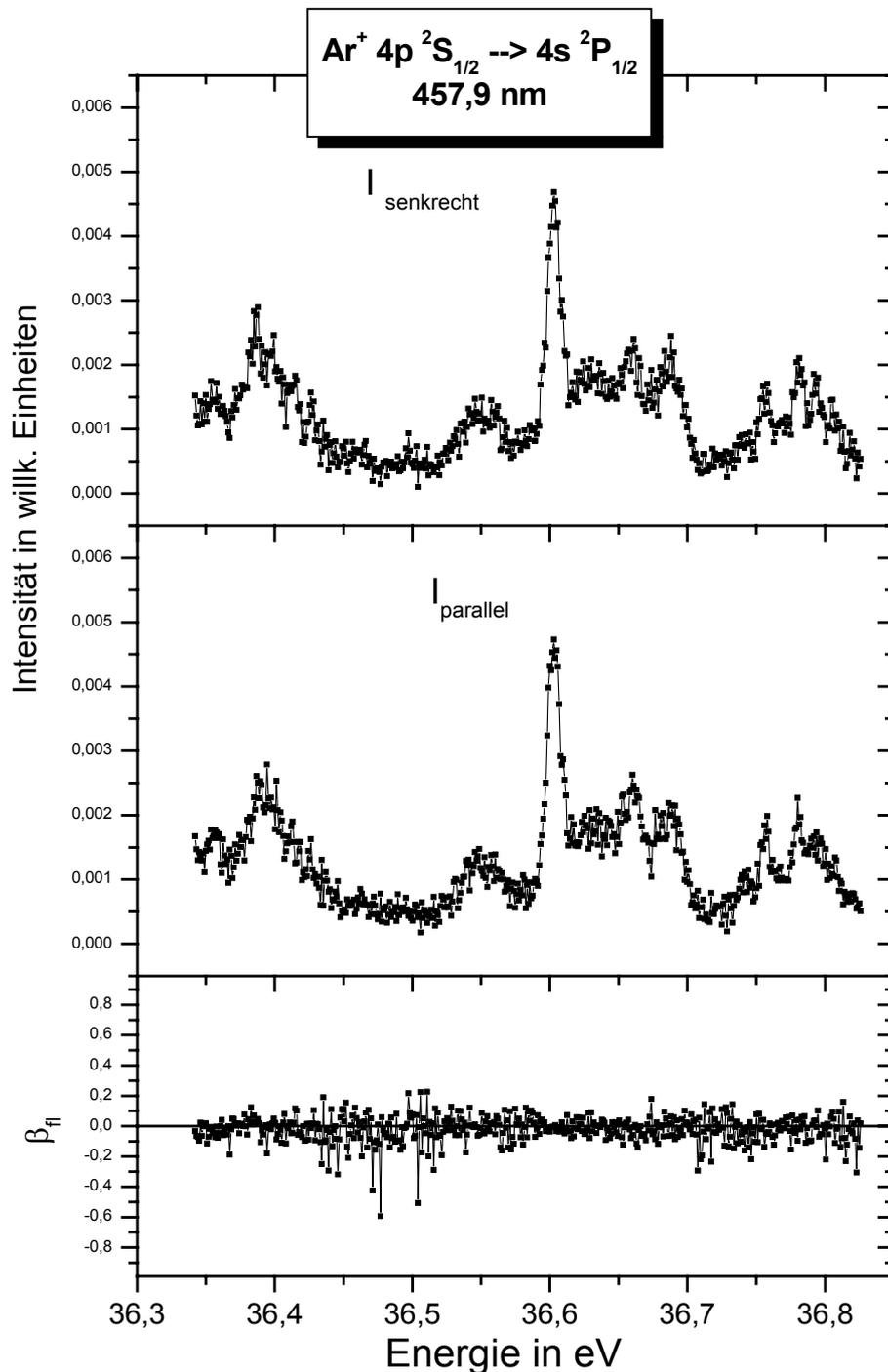


Abb. 5.26: Fluoreszenzspektrum mit den aufgelösten Polarisationskomponenten der untersuchten Übergänge.

Abb. 5.27: (Seite 111) Intensitäten und β_{fl} – Parameter des Ar^+ Übergangs $4p\ {}^2S_{1/2} \rightarrow 4s\ {}^2P_{1/2}$.

5.5.1 Übergänge aus Zuständen mit Gesamtdrehimpuls $J_i = 1/2$

Die beiden hier gezeigten Übergänge sind aufgrund der Kugelsymmetrie ihrer Ausgangszustände zur Kalibrierung der Apparatur verwendet worden. Die beiden Fluoreszenzkomponenten der Zustände sind so normiert, dass sich innerhalb der Statistik ein Winkelasymmetrieparameter von Null ergibt. Alle anderen Übergänge sind dann mit diesen Normierungsfaktoren korrigiert worden.



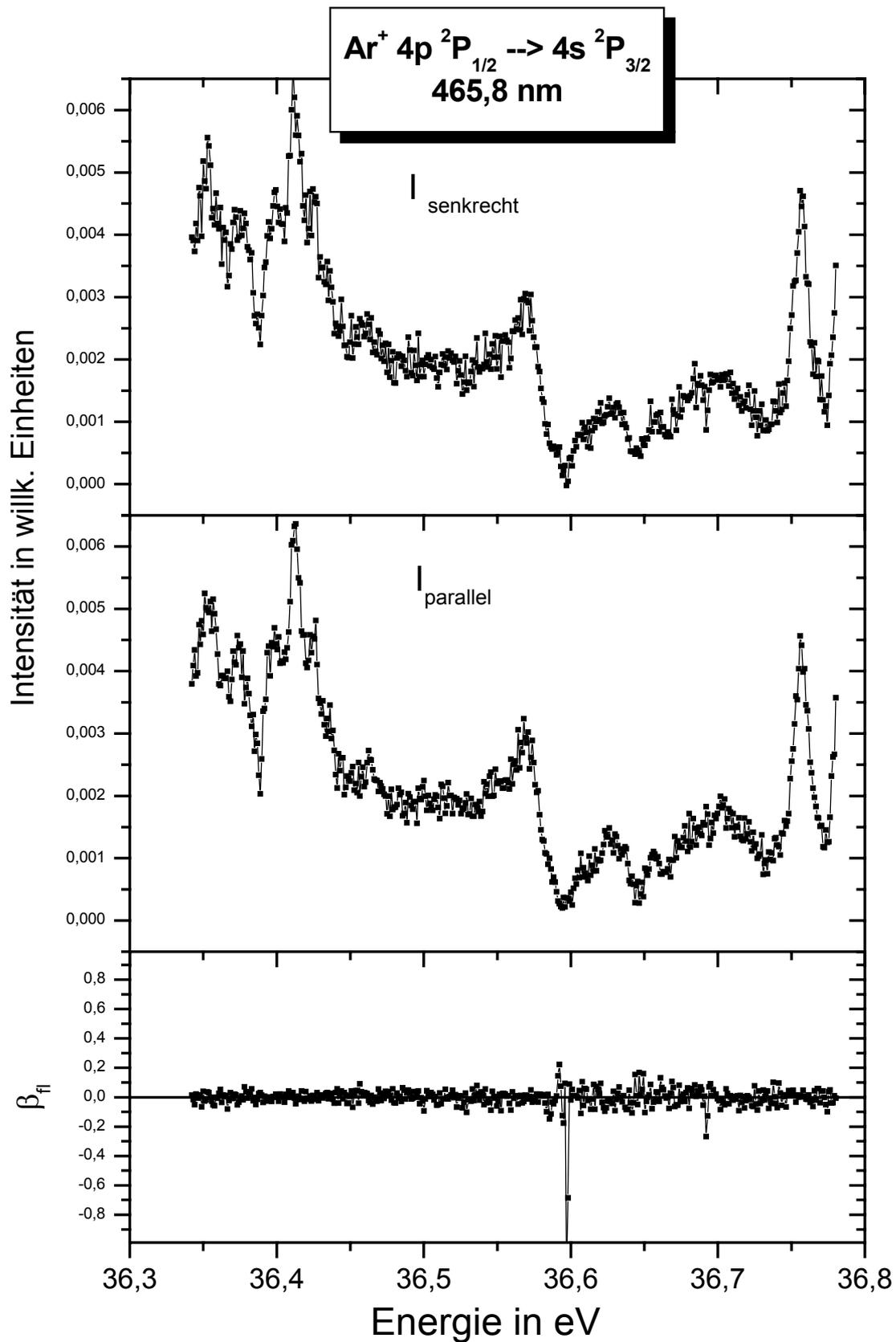


Abb. 5.28: Intensitäten und β_{\parallel} – Parameter des Ar^+ Übergangs $4p \ ^2P_{1/2} \rightarrow 4s \ ^2P_{1/2}$.

5.5.2 Übergänge aus Zuständen mit Gesamtdrehimpuls $J_i = 3/2$

Der starke Sprung im β_{fl} – Parameter im Übergang $Ar^+ 4p \ ^2P_{3/2} \rightarrow 4s \ ^2P_{1/2}$ [Men98], welcher als Motivation zu den jetzigen Messungen zu sehen ist wird von diesen Daten, wie in Abb. 5.29 gezeigt, bestätigt. In allen Abbildungen sind als horizontale, gepunktete Linien die partiellen Werte des β_{fl} – Parameters bei nur einer beteiligten Elektronenpartialwelle (vgl. Tab. 2.1) eingezeichnet. Man sieht in Abb. 5.29 den flachen Verlauf des β_{fl} – Parameters um Null bis zur Anregungsenergie von etwa 36,5 eV. Hier ist keine Aussage zur Beteiligung einer speziellen Elektronenpartialwelle möglich. Ab 36,5 eV setzt ein Trend zu negativen β – Werten ein, was auf die Bevorzugung einer $s_{1/2}$ – Elektronenpartialwelle hinweist. Innerhalb weniger meV folgt ein Sprung zu eindeutig positiven Werten, was auf ein $d_{3/2}$ – Elektron hindeutet. Diese β – Wert Veränderung resultiert aus den gezeigten Intensitätsverläufen von $I_{||}$ und I_{\perp} . In der parallelen Komponente ist ein kleinerer Doppelpeak bei etwa 36,63 eV und ein anschließender Einbruch vor dem darauf folgenden starken Peak zu sehen. In der senkrechten Komponente verschmiert dies alles zu der breiten niederenergetischen Flanke des starken Peaks. Kleinere Ausschläge sind noch im Energiebereich ab 36,74 eV zu erkennen. Der Übergang auf den $^2P_{3/2}$ – Endzustand (Abb. 5.30) zeigt wie erwartet den gespiegelten Verlauf des $^2P_{3/2} \rightarrow ^2P_{1/2}$ Übergangs. Die Sprünge im β_{fl} – Parameter sind allerdings durch die dichter beisammen liegenden theoretischen β_{fl} – Werte nicht so deutlich zu sehen. Im Übergang $Ar^+ 4p \ ^2D_{3/2} \rightarrow 4s \ ^2P_{3/2}$ (Abb. 5.31) zeigt sich eine eindeutige Bevorzugung der d – Kanäle. Das $s_{1/2}$ – Elektron scheint eine geringere Rolle zu spielen.

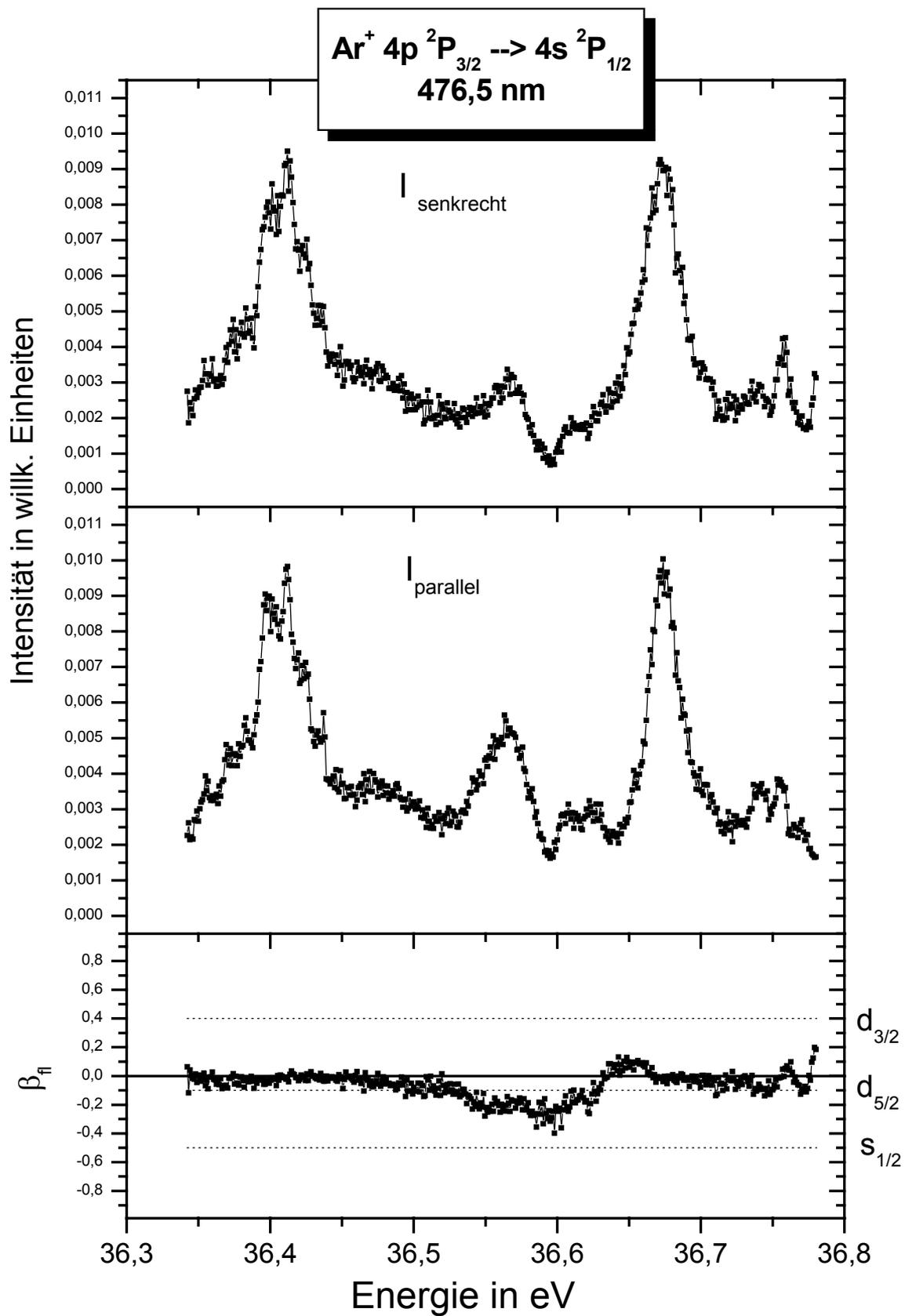


Abb. 5.29: Intensitäten und $\beta_{||}$ – Parameter des Ar⁺ Übergangs $4p^2P_{3/2} \rightarrow 4s^2P_{1/2}$.

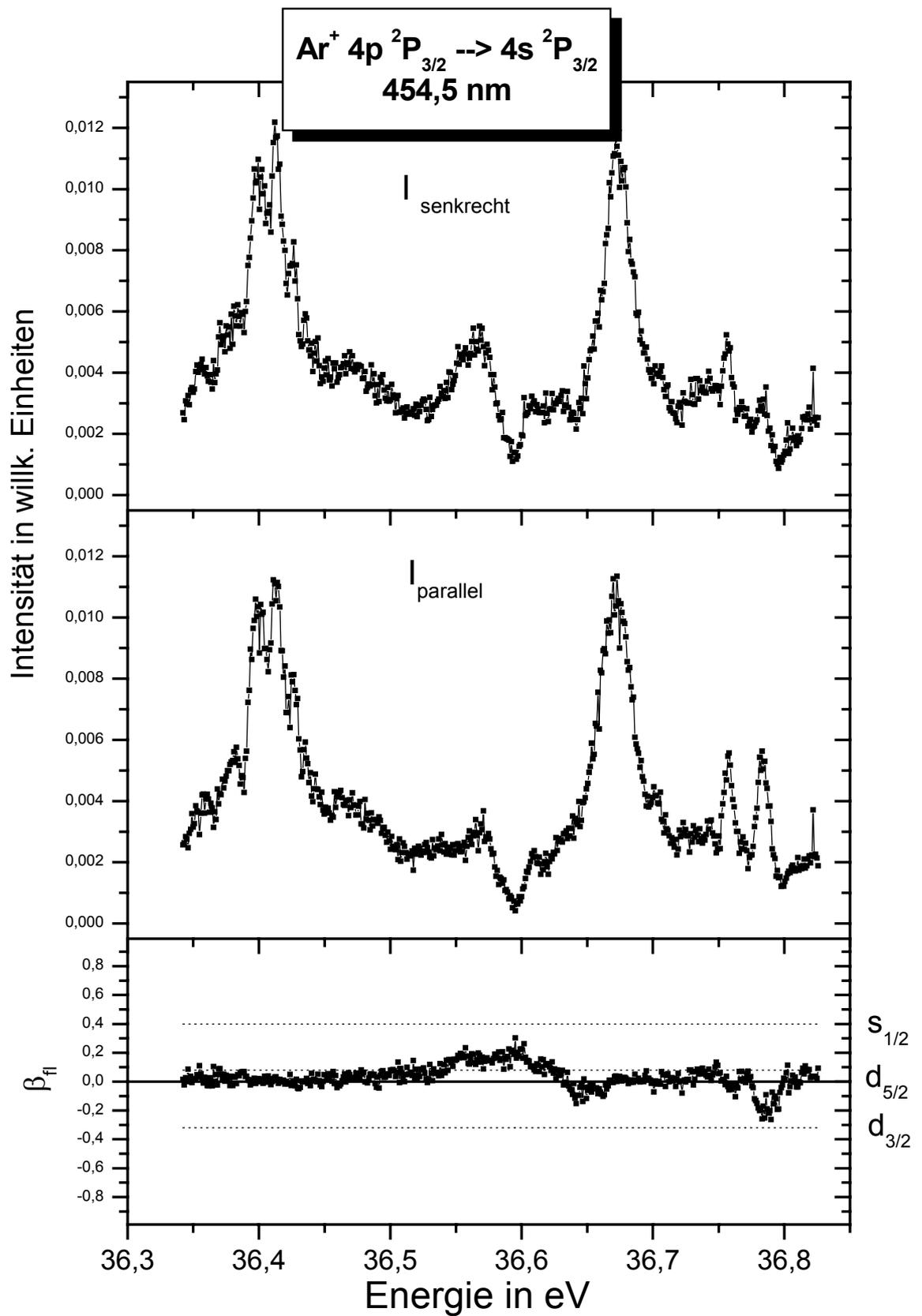


Abb. 5.30: Intensitäten und β_{\parallel} – Parameter des Ar^+ Übergangs $4p \ ^2P_{3/2} \rightarrow 4s \ ^2P_{3/2}$.

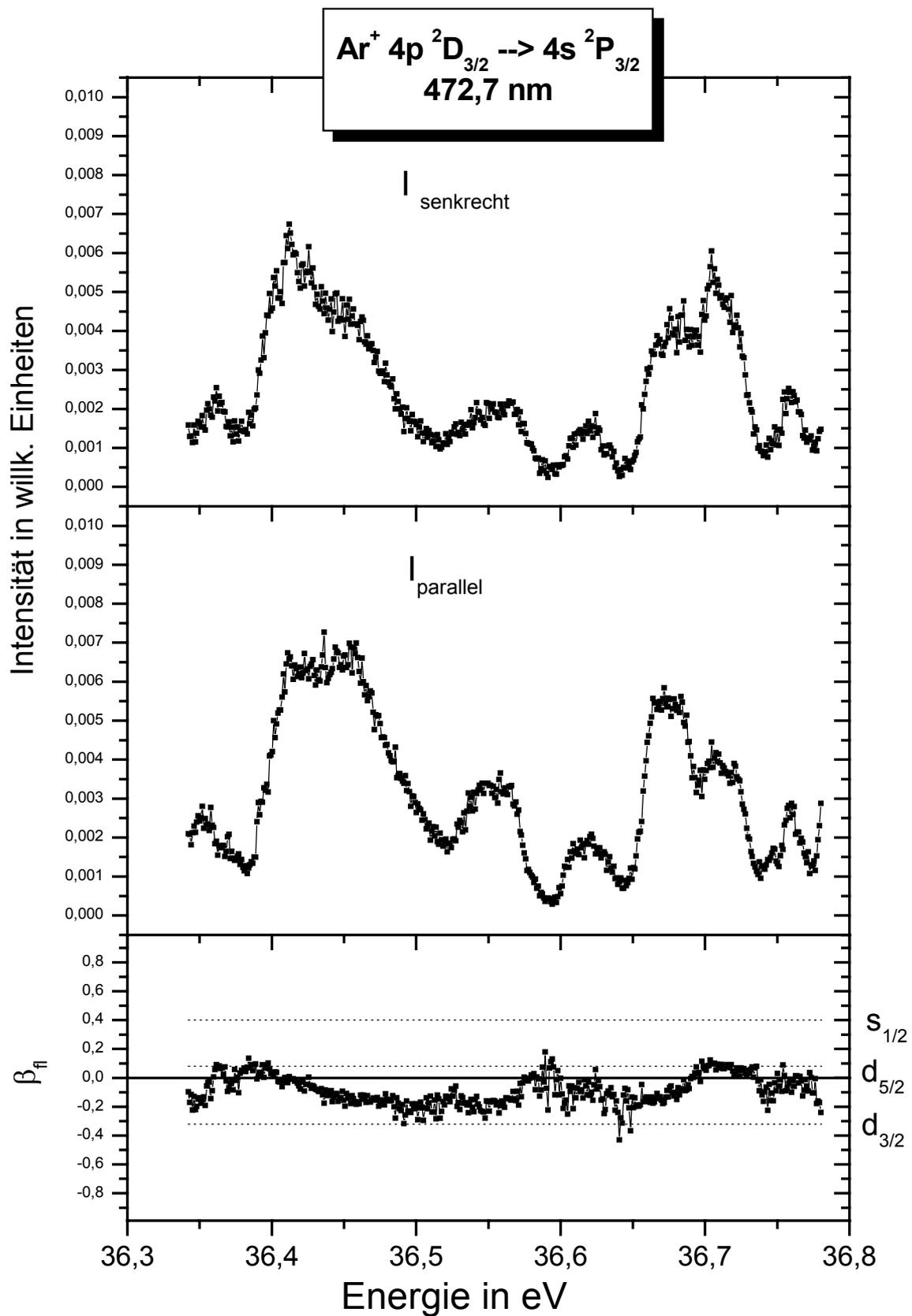


Abb. 5.31: Intensitäten und β_{\parallel} – Parameter des Ar^+ Übergangs $4p \ ^2D_{3/2} \rightarrow 4s \ ^2P_{3/2}$.

5.5.3 Übergänge aus Zuständen mit Gesamtdrehimpuls $J_i = 5/2$

Der in Abb. 5.32 dargestellte energetische Verlauf des β_{fl} – Parameters des Übergangs $Ar^+ 4p \ ^2D_{5/2} \rightarrow 4s \ ^2P_{3/2}$ hat einen relativ glatten Verlauf. Der Absolutwert liegt auf der im Diagramm eingezeichneten Linie des partiellen β_{fl} – Werts eines $d_{5/2}$ – Elektrons. Es sind jedoch in dem interessanten Bereich ab 36,6 eV Einbrüche, welche auf andere Elektronenpartialwellen hinweisen, zu sehen. Der Übergang $Ar^+ 4p \ ^4P_{5/2} \rightarrow 4s \ ^4P_{5/2}$ (Abb. 5.33) zeigt über den gesamten sinnvoll auszuwertenden Bereich einen negativen β_{fl} – Wert. Dieser Wert liegt ebenfalls nahe bei dem theoretischen Wert für ein $d_{5/2}$ – Elektron. Damit wird die bereits durch die Daten von Mentzel et al. gestützte Vermutung, dass bei der Besetzung von Ionenzuständen mit $J \geq 5/2$ ein eindeutiger Trend zur Emission nur einer Elektronenpartialwelle besteht, weiter untermauert.

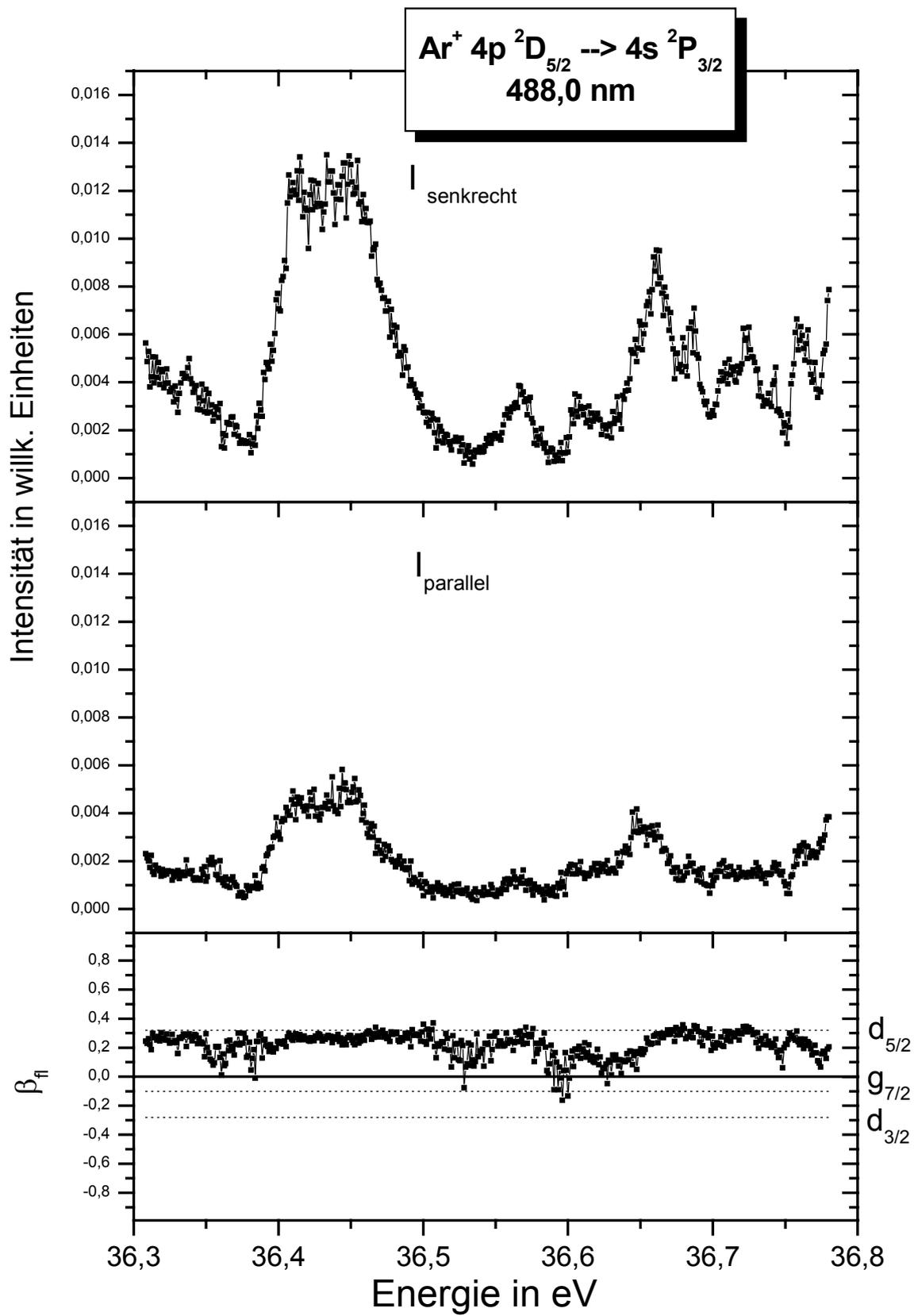


Abb. 5.32: Intensitäten und β_{fl} – Parameter des Ar^+ Übergangs $4p \ ^2D_{5/2} \rightarrow 4s \ ^2P_{3/2}$.

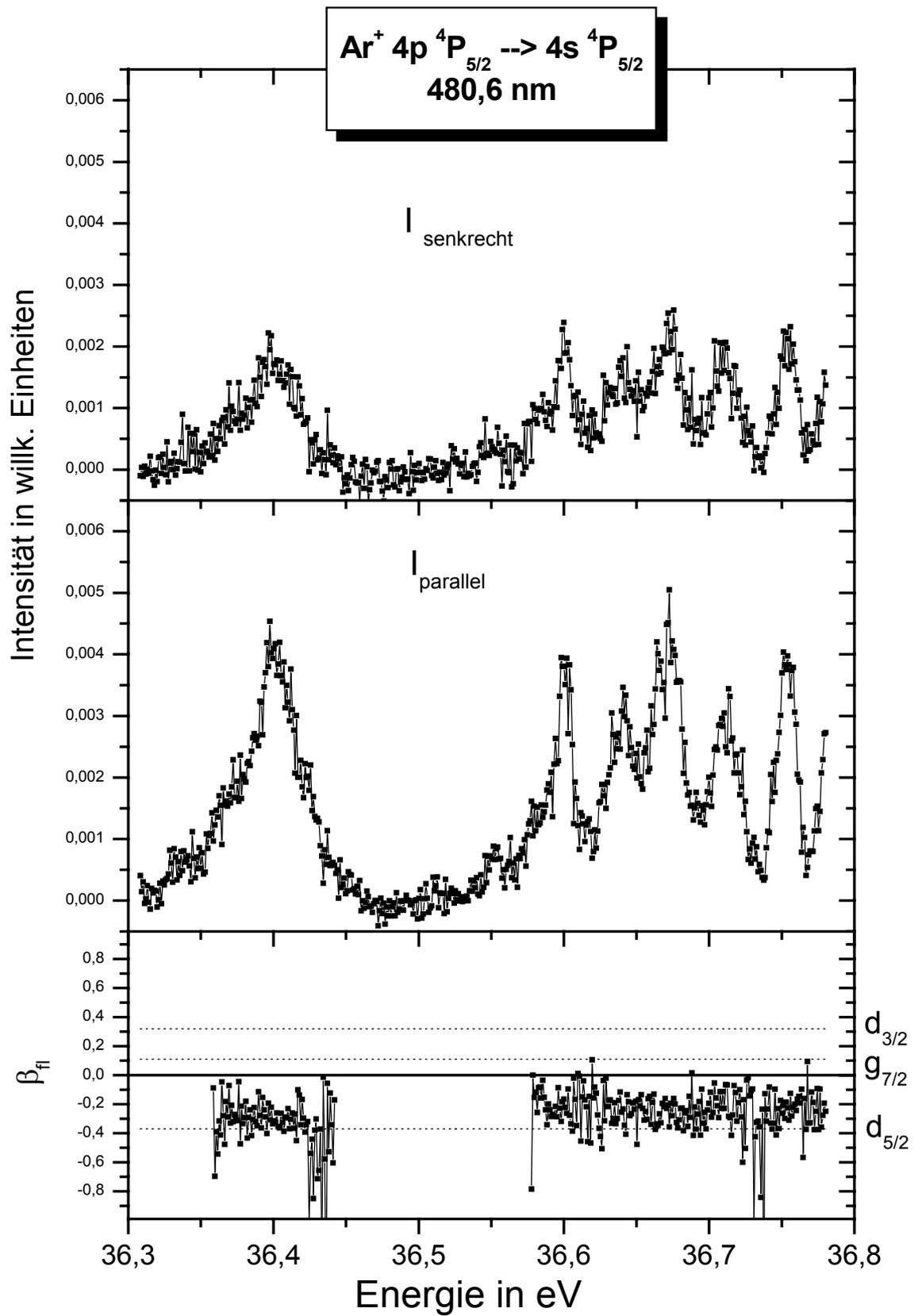


Abb. 5.33: Intensitäten und β_{\parallel} – Parameter des Ar⁺ Übergangs $4p\ ^4P_{5/2} \rightarrow 4s\ ^4P_{5/2}$.

6 Zusammenfassung

Die Ermittlung experimenteller Daten zur Wechselwirkung von Photonen mit Atomen, die im Vergleich mit theoretischen Beschreibungsmethoden erlauben, die Bedeutung der Elektronenkorrelationen und Vielteilchendynamik aufzuzeigen, ist das Ziel aktueller Untersuchungen an Synchrotronstrahlungsquellen der dritten Generation. In diesem Zusammenhang stehen die durchgeführten Messungen von absoluten Wirkungsquerschnitten zur Photoionisation eines Ar $3p$ – Elektrons bei gleichzeitiger Anregung eines zweiten solchen Elektrons in das $4s$ – Orbital. Die $3p^4(^3P)$ – Core Konfiguration bildet mit dem angeregten $4s$ – Elektron 4P und 2P – Feinstrukturzustände als niedrigste angeregte Ionenzustände, abgesehen vom $3s3p^6$ – Zustand. Die Auswahl dieser Zustände und des Primärenergiebereichs orientiert sich an der obigen Forderung, möglichst interpretierbare und interessante Bereiche und Fragestellungen der komplexen Mechanismen der photoneninduzierten Satellitenbesetzung zu isolieren. In dieser Arbeit werden sowohl Quartett- als auch Dublettzustände beobachtet und die Emissionswirkungsquerschnitte für Photonenenergien zwischen 32,475 eV und 33,050 eV gemessen.

In Literaturdaten, ermittelt mit etwa 80 meV Bandbreite der anregenden Strahlung, zeigte die Energieabhängigkeit der Besetzung der 4P – Zustände zwei isolierte Resonanzen bei etwa 32,5 und 32,8 eV. Die eigenen Experimente lösen in diesen Energiebereichen erstmals Resonanzen in regelmäßiger Abfolge auf. Sie zeigen, dass die Quartettzustände überwiegend durch die Autoionisation zweier identifizierter Rydbergserien besetzt werden. Diese sind als $(^3P) 4s \ ^2P_{3/2,1/2} np$ – Serien ausgezeichnet. Ein direkter Prozess wird hingegen nicht beobachtet. Damit wird experimentell der dominierende Quartettcharakter der $(^3P) 4s \ ^4P$ – Zustände bewiesen. Es folgt daraus, dass autoionisierende Rydbergzustände durch eine Mischung aus Singulett und Triplett Zuständen zu beschreiben sind, ansonsten wäre eine Besetzung der 4P – Zustände nur über komplexe dynamische Spin – Bahn Wechselwirkungen möglich.

Im Anregungsenergiebereich zwischen 32,899 eV und 33,019 eV, also zwischen der energetischen Schwelle des $Ar^+ 3p^4 (^3P) 4s \ ^2P_{3/2}$ und des $Ar^+ 3p^4 (^3P) 4s \ ^2P_{1/2}$

Zustands, wird für den $^2P_{3/2}$ Zustand eine Überlagerung von direkter und resonanter Besetzung beobachtet.

Die Rydbergserien werden simultan in Absorption beobachtet. Diese Daten lassen sich mit Literaturwerten bei durchaus verbesserter eigener Primärenergieauflösung vergleichen. In den Literaturdaten wurde die zum $Ar^+ 3p^4 (^3P) 4s ^2P_{1/2}$ Zustand konvergierende Rydbergserie nicht diskutiert.

Die n – Abhängigkeit der Intensitäten der Resonanzbesetzung der Satellitenzustände wird durch zwei in der Literatur dokumentierte störende Resonanzen stark beeinflusst. Eine ist bei 32,852 eV durch Vergleich mit Zustandsberechnungen eindeutig mit $4s (^2D) 5p$ identifiziert. Für die andere werden in der Literatur zwei Energiewerte, bei 32,517 und 32,536 eV, mit $3d ^2P_{3/2} 5p$ ausgezeichnet. Durch den starken Einfluss der beiden Störer ergibt der eigene Versuch der Beschreibung von Rydbergserien mit Hilfe von konstanten Quantendefekten nur in Teilen des untersuchten Primärenergiebereichs ein befriedigendes Ergebnis.

Unterstrichen wird, dass die für die totale Absorption und die offenen Zerfallskanäle gemessenen absoluten Wirkungsquerschnitte eine vollständige experimentelle Datenbasis für einen Test von Berechnungen eines überschaubaren Anregungs- und Zerfallsszenarios bieten. Wie betont, gelingt dies durch die Beschränkung auf die niedrigsten angeregten Satellitenzustände.

Die Messungen der absoluten Emissionswirkungsquerschnitte der $Ar^+ 3s^23p^4 (^3P) 4s$ – Satelliten sind mit Hilfe der photoneninduzierten Fluoreszenzspektroskopie (PIFS) im Spektralbereich des Vakuumultravioletten durchgeführt worden. Als Synchrotronstrahlungsquelle wurde der Elektronenspeicherring BESSY II in Berlin verwendet. Dort steht mit der Undulatorbeamline U125/1 PGM eine intensive und brillante Lichtquelle für den energetischen Bereich der Schwellen der Ar^+ Satelliten zur Verfügung. Im Undulator dieses Experimentierplatzes wird horizontal linear polarisierte Synchrotronstrahlung erzeugt.

Eine der Stärken der PIFS besteht in der Möglichkeit der Bestimmung der relativen Verteilung der drei erlaubten Elektronenpartialwellen. Diese Verteilung ist aus der Messung der Größen A_{20} (Alignmentparameter) und O_{10} (Orientierungsparameter) der besetzten Ionenzustände ableitbar. Für den Test von Berechnungen stellen diese

beiden Parameter sehr empfindliche Größen dar. Die Möglichkeit der Bestimmung von O_{10} kann im Fall der $Ar^+ 3s^23p^4 (^3P) 4s$ – Satelliten bis jetzt aus zwei Gründen nicht durchgeführt werden. Es steht zur Zeit bei BESSY II keine Beamline im Primärenergiebereich um 33 eV zur Verfügung welche, die für die Messungen des Orientierungsparameters O_{10} notwendige intensive und zirkularpolarisierte Strahlung liefert. Als weitere Schwierigkeit tritt das experimentelle Problem der Polarisationsanalyse der Fluoreszenzstrahlung im Spektralbereich des VUV auf. Die Messung von A_{20} alleine erlaubt eine tendenzielle Diskussion der Partialwellenbesetzung und Aussagen über deren Änderung als Funktion der anregenden Photonenenergie. Für die Messung des Alignmentparameters stehen zwei Möglichkeiten zur Verfügung. Erstens können zwei aufeinanderfolgende Messungen mit um 90° gedrehter Polarisationssebene der anregenden Strahlung durchgeführt werden. Zweitens kann man ein Wollastonprisma als Polarisationsstrahlteiler der emittierten Fluoreszenzstrahlung verwenden. Diese zweite Methode bleibt allerdings auf den sichtbaren Spektralbereich beschränkt.

Unter Verwendung eines Wollastonprismas wurde eine resonanzartige Variation von A_{20} der $Ar^+ 3s^23p^4 (^3P) 4p ^2P_{3/2}, ^2D_{3/2}$ – Zustände im Primärenergiebereich um 36,6 eV aus einer Vorläuferarbeit bei BESSY I mit der gesteigerten Primärauflösung von BESSY II untersucht. Das frühere Ergebnis konnte bestätigt werden. Trotz einer um den Faktor drei gesteigerten Primärauflösung von jetzt etwa 4 meV konnten die Strukturen von doppelt angeregten Zuständen nach wie vor nicht zugeordnet werden. Der Energiebereich um 36,6 eV sollte jedoch an Aufmerksamkeit behalten, schließlich bedeuten Vorzeichenwechsel von A_{20} eine Drehung der bevorzugten MJ – Einstellung um 90° .

Für die oben diskutierten $Ar^+ 3s^23p^4 (^3P) 4s$ –, sowie für höher angeregte Satelliten existieren im Primärenergiebereich zwischen 32,8 und 36 eV bisher nicht publizierte relative Wirkungsquerschnitts- und auch Alignmentmessungen, welche im Rahmen früherer Forschungsprojekte bei BESSY I ermittelt wurden. Diese sind im Anhang der Arbeit zusammengefasst, um einen Leitfaden für nachfolgende Untersuchungen mit gesteigerter Primärauflösung bereit zu halten. Nach den Ergebnissen dieser Arbeit wäre bei Untersuchungen des höherenergetischen Bereichs, in dem zahlreiche Rydbergserien überlappen, eine Bandbreite der anregenden Strahlung von weniger als 1 meV anzustreben.

7 Anhang

7.1 Energieabhängigkeit von Ar^+ 4s, 3d – Satelliten und Winkelverteilung der emittierten Fluoreszenzstrahlung untersucht mit mittlerer Primärauflösung

Ausgehend von Abb. 5.2 ist der Anregungsenergiebereich von 32,8 bis 35,8 eV in den hier gezeigten Messungen genauer untersucht worden. In Abb. 5.2 ist in diesem Energiebereich eine kaum aufgelöste breite Struktur im energetischen Verlauf des Emissionswirkungsquerschnitts zu sehen. Man erkennt mit der hier verwendeten Primärauflösung zum Beispiel in Abb. 7.6 eine deutlich komplexere Aufspaltung dieser Struktur. Der Fortschritt der Messtechnik ist auch in der hier von [Mag95] angewandten Methode der gekreuzten Undulatoren an BESSY I zu sehen. Dieses Messverfahren erlaubt den Datensatz bezüglich des Winkelasymmetrieparameters β_n auszuwerten. Die für diese Messungen zur Verfügung stehende Primärauflösung erlaubt aufgrund der komplexen Strukturen der Emissionswirkungsquerschnitte in diesem Anregungsenergiebereich leider keine detaillierten Aussagen bezüglich der Zuordnung von Rydbergserien und der Beteiligung der drei möglichen Photoelektronenpartialwellen auf den Einzelresonanzen. Dieser Datensatz zeigt klar auf, dass man sich aufgrund der zahlreichen autoionisierenden Rydbergserien von doppeltangeregten Zuständen auf die niedrigsten Satelliten – Zustände konzentrieren muss. Darum sind im Rahmen dieser Arbeit Messungen an den Ar^+ 4s ^4P – Satellitenschwellen durchgeführt worden.

Die hier gezeigten Ergebnisse sind trotz aller Mess- und Interpretationsschwierigkeiten sehr interessant, da ein weiter Wellenlängenbereich des Fluoreszenzwellenlängenspektrums überdeckt wird. Dieser reicht von 66 bis 75 nm und beinhaltet damit die Übergänge Nr.4 bis Nr.21 in Abb. 7.1. Somit sind die Daten hervorragend als Orientierungshilfe bei der Suche nach besonders interessanten Stellen im energetischen Verlauf der Ar^+ 4s, 3d – Satelliten geeignet, die mit der nun zur Verfügung stehenden verbesserten Primärauflösung untersucht werden sollten. In den folgenden Kapiteln sieht man deutlich die Schwellen der verschiedenen Ar^+ – Satelliten in den energetischen Verläufen der Fluoreszenzsignale (siehe z.B. Abb. 7.5, 7.2, usw.). Die Anregungsenergieschwellen der Zustände, sowie die daraus resultierenden Zerfallskanäle mit den zugehörigen Wellenlängen sind in Tabelle 7.1 aufgelistet.

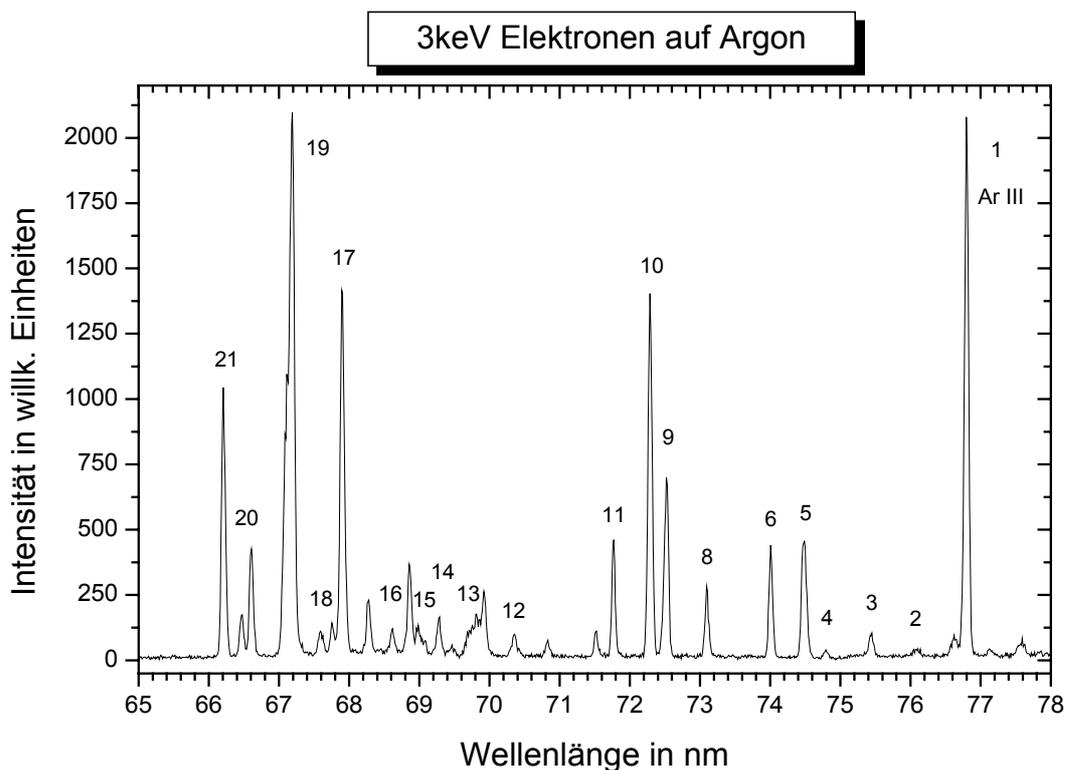


Abb. 7.1: Fluoreszenzspektrum von Argon nach Elektronenstoßanregung.

Bezeichnung der Übergänge siehe Tabelle 7.1.

| Zustand | Übergang | Wellenlänge | Schwelle | Linien Nr. |
|--------------------------------------|-------------------------------------|-------------|-----------|------------|
| $(^3\text{P}) 4s \ ^4\text{P}_{5/2}$ | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{3/2}$ | 74,4925 nm | 32,399 eV | 5 |
| $(^3\text{P}) 4s \ ^4\text{P}_{3/2}$ | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{1/2}$ | 74,8198 nm | 32,509 eV | 4 |
| | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{3/2}$ | 74,0270 nm | | 6 |
| $(^3\text{P}) 4s \ ^4\text{P}_{1/2}$ | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{1/2}$ | 74,5323 nm | 32,569 eV | 5 |
| | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{3/2}$ | 73,7457 nm | | 7 |
| $(^3\text{P}) 4s \ ^2\text{P}_{3/2}$ | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{1/2}$ | 73,0929 nm | 32,899 eV | 8 |
| | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{3/2}$ | 72,3361 nm | | 10 |
| $(^3\text{P}) 4s \ ^2\text{P}_{1/2}$ | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{1/2}$ | 72,5550 nm | 33,019 eV | 9 |
| | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{3/2}$ | 71,8091 nm | | 11 |
| $(^3\text{P}) 3d \ ^4\text{F}_{5/2}$ | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{3/2}$ | 69,8771 nm | 33,499 eV | 13 |
| $(^3\text{P}) 3d \ ^4\text{F}_{3/2}$ | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{1/2}$ | 70,4523 nm | 33,529 eV | 12 |
| | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{3/2}$ | 69,7489 nm | | 13 |
| $(^3\text{P}) 3d \ ^2\text{P}_{1/2}$ | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{1/2}$ | 69,7940 nm | 33,699 eV | 13 |
| | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{3/2}$ | 69,1038 nm | | 15 |
| $(^3\text{P}) 3d \ ^2\text{P}_{3/2}$ | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{1/2}$ | 69,3301 nm | 33,819 eV | 14 |
| | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{3/2}$ | 68,6489 nm | | 16 |
| $(^3\text{P}) 3d \ ^4\text{P}_{1/2}$ | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{3/2}$ | 67,9221 nm | 34,009 eV | 17 |
| $(^3\text{P}) 3d \ ^4\text{P}_{3/2}$ | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{3/2}$ | 67,7951 nm | 34,049 eV | 17 |
| $(^3\text{P}) 3d \ ^4\text{P}_{5/2}$ | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{3/2}$ | 67,6241 nm | 34,089 eV | 18 |
| $(^1\text{D}) 4s \ ^2\text{D}_{3/2}$ | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{1/2}$ | 67,9400 nm | 34,189 eV | 17 |
| | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{3/2}$ | 67,2856 nm | | 19 |
| $(^1\text{D}) 4s \ ^2\text{D}_{5/2}$ | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{3/2}$ | 67,1852 nm | 34,209 eV | 19 |
| $(^3\text{P}) 3d \ ^2\text{F}_{5/2}$ | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{3/2}$ | 66,6010 nm | 34,379 eV | 20a |
| $(^3\text{P}) 3d \ ^2\text{D}_{3/2}$ | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{1/2}$ | 67,0948 nm | 34,419 eV | 19 |
| | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{3/2}$ | 66,4563 nm | | 20b |
| $(^3\text{P}) 3d \ ^2\text{D}_{5/2}$ | $\rightarrow 3p \ ^5\text{P}_{3/2}$ | 66,1869 nm | 34,489 eV | 21 |

Tabelle 7.1: Ausgewählte Zustände von Ar^+ und ihre Zerfallskanäle. Nummerierung analog Abb. 7.1.

In jedem der Diagramme dieses Kapitels ist in Abhängigkeit der Energie der anregenden Photonen im oberen Teil der Intensitätsverlauf I_{0° der abgestrahlten Fluoreszenzstrahlung nach Anregung mit linear polarisierter Synchrotronstrahlung, welche parallel zur Emissionsrichtung der Fluoreszenzstrahlung ausgerichtet ist, aufgetragen. In der Mitte ist das Fluoreszenzsignal I_{90° , d.h. Ausrichtung der Polarisation der anregenden Synchrotronstrahlung senkrecht zur Detektionsrichtung der Fluoreszenz, aufgetragen. Die Intensitäten sind in willkürlichen Einheiten angegeben, da die Rohdaten auf den Primärfluss normiert sind. Eine Normierung auf einen Zustand mit Gesamtdrehimpuls $J_i = 1/2$ ist ebenfalls notwendig um instrumentelle Effekte zu kompensieren (vgl. Kap. 4.3).

Im unteren Teil der Abbildungen ist der daraus mit Formel (7.1) berechnete Winkelasymmetrieparameter β_{fl} der abgestrahlten Fluoreszenz aufgetragen (vgl. Kap. 4.2.1).

$$\beta_{fl} = \frac{I_{0^\circ} - I_{90^\circ}}{\frac{I_{0^\circ}}{2} + I_{90^\circ}} \quad (7.1)$$

Der β_{fl} – Parameter ist sowohl direkt als auch nach einer 5 – Punkt Glättung aufgetragen, um einen besseren Überblick über den energetischen Verlauf und dessen Details zu erhalten. Außerdem sind in diesem Diagrammteil die zu erwartenden partiellen β_{fl} – Werte für die Emission einer speziellen Elektronenpartialwelle (vgl. Kap. 2.2) als horizontale gepunktete Linien eingezeichnet.

Die Anordnung der Daten ist nach dem Gesamtdrehimpuls J_i ihres Ausgangszustands erfolgt. In den folgenden Unterkapiteln sind zuerst die Zustände mit $J_i = 1/2$, dann die Zustände mit $J_i = 3/2$ aufgeführt. Diese sind nochmals in Gruppen unterteilt mit Übergängen in einen Endzustand mit Gesamtdrehimpuls $J_f = 3/2$ und $J_f = 1/2$. Es schließen sich noch die Übergänge mit $J_i \rightarrow J_f = 5/2 \rightarrow 3/2$ an, sowie die restlichen beobachteten Spektrallinien bei denen eine eindeutige Zuordnung zu einem bestimmten Übergang aufgrund der sehr dicht liegenden Wellenlängenpositionen nicht möglich ist.

7.1.1 Übergänge aus Zuständen mit Gesamtdrehimpuls $J_i = 1/2$

Diese Übergänge sollen aufgrund der Kugelsymmetrie ihres Ausgangszustands einen β_{fl} – Wert von Null haben. Man erkennt nach der Normierung in allen Fällen eine gute Übereinstimmung mit dieser Vorhersage. Abweichungen treten insbesondere bei sehr geringen Intensitäten auf. Dort ist es aufgrund der vorgegebenen Zahlenwerte schwierig einen in der Energieabhängigkeit eindeutigen (konstanten) Winkelasymmetrieparameter zu berechnen, da schon sehr geringe Variationen in der Zählrate zu einer sehr großen Variation in den Werten für β_{fl} führen (Vergleiche auch Kap. 5.5.1).

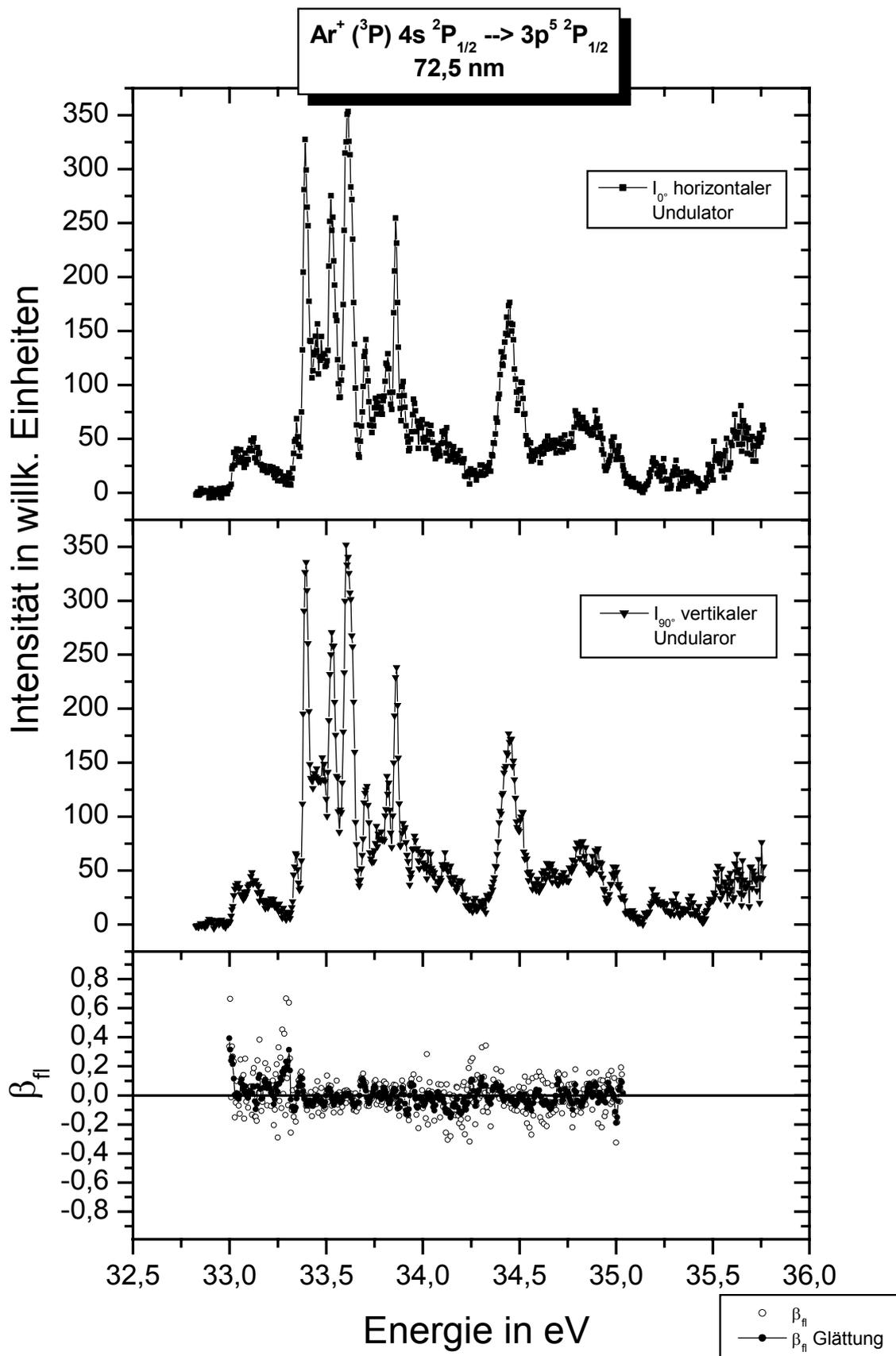


Abb. 7.2: Intensitäten und β_{fl} – Parameter des Ar^+ Übergangs $4s {}^2\text{P}_{1/2} \rightarrow 3p^5 {}^2\text{P}_{1/2}$.

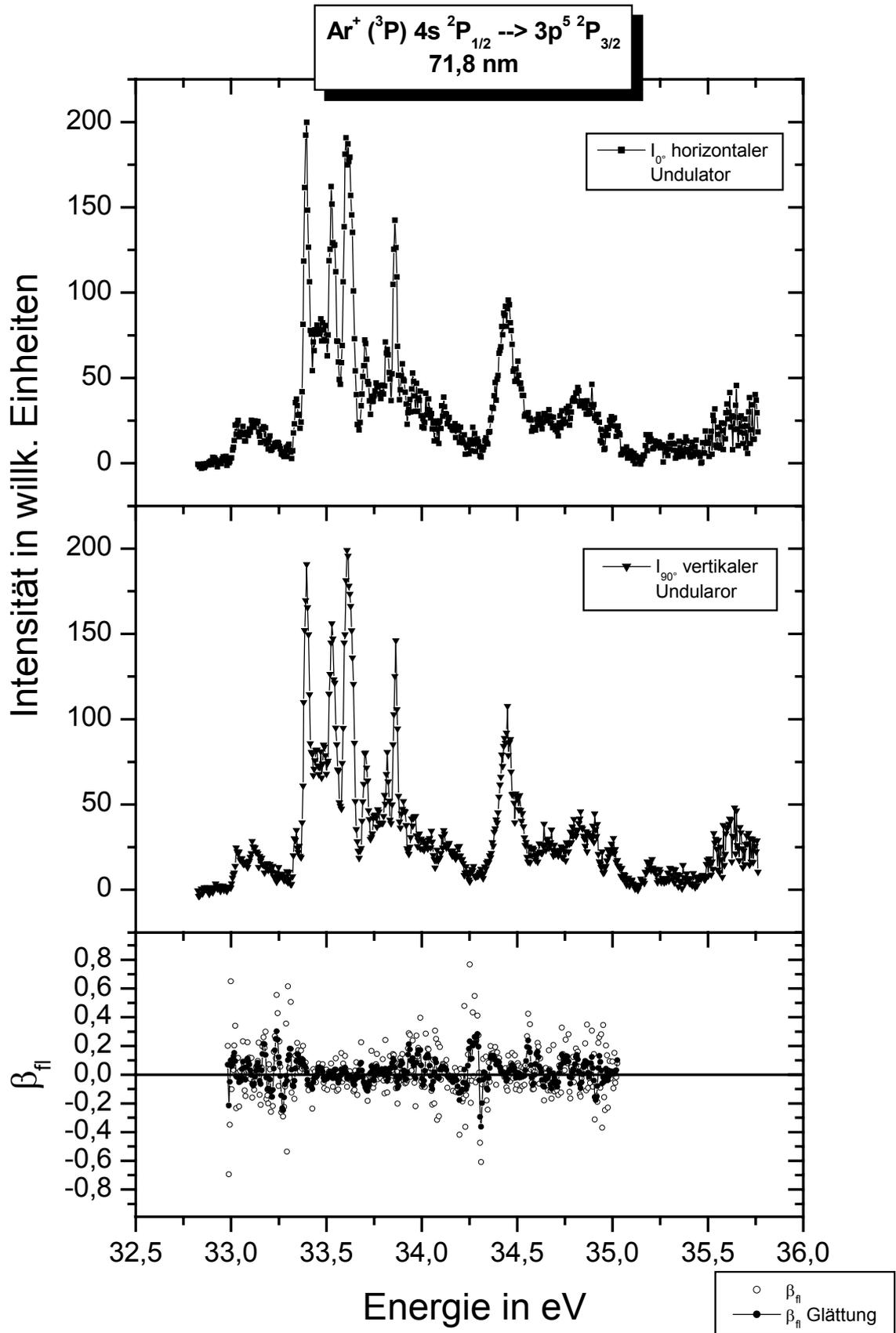


Abb. 7.3: Intensitäten und β_n – Parameter des Ar^+ Übergangs $4s {}^2\text{P}_{1/2} \rightarrow 3p {}^5 {}^2\text{P}_{3/2}$.

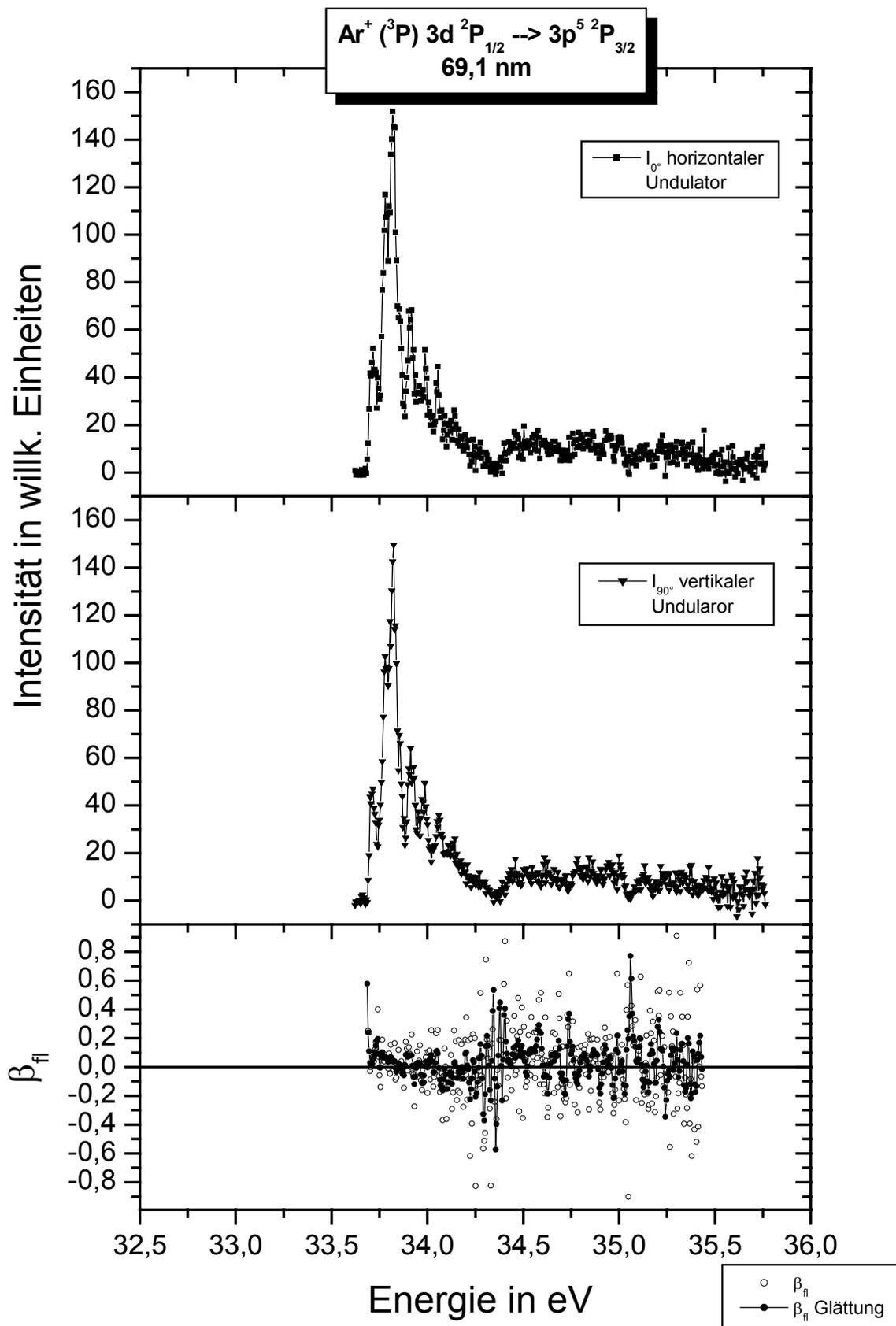


Abb. 7.4: Intensitäten und β_{\parallel} – Parameter des Ar⁺ Übergangs 3d ²P_{1/2} → 3p⁵ ²P_{3/2}.

7.1.2 Übergänge aus Zuständen mit Gesamtdrehimpuls

$J_i = 3/2$ in Zustände mit $J_f = 3/2$

Abweichend zu den in Kap. 7.1.1 gezeigten Übergängen haben diese Übergänge einen von Null verschiedenen β_{fl} – Wert. Bei der Emission von nur einer Elektronenpartialwelle würde sich z.B. für eine $s_{1/2}$ Elektronenpartialwelle ein Wert von 0,4 ergeben (partieller β_{fl} – Wert). Die Daten zeigen keine konstanten Verläufe über den untersuchten Primärenergiebereich. Es treten eindeutige Variationen an den Energiepositionen der verschiedenen Autoionisationsresonanzen auf. Man erkennt z.B. in Abb. 7.5 einen Trend zur Emission eines $d_{3/2}$ Elektrons. Es ist jedoch sehr gut zu sehen, dass es bei den Energiepositionen 33,3 eV, 33,6 eV und 33,8 eV eine deutlichere Beteiligung eines $s_{1/2}$ Elektrons zu geben scheint. Eindeutige Zuordnungen lassen sich aus diesen Daten nicht gewinnen, da auch Überlagerungen der drei Partialwellenanteile die gemessenen β_{fl} – Werte erzeugen können. Um eine Eindeutigkeit herbei führen zu können, wäre die Messung des Orientierungsparameters (siehe Kapitel 2) notwendig. Diese Messungen sind jedoch schwierig, da die zu beobachtenden Übergänge im Spektralbereich des Vakuumultravioletten liegen und sich damit Probleme bei der Polarisationsanalyse ergeben (siehe Kap. 3). Die in Tabelle 2.1 aufgeführten partiellen β_{fl} – Werte für die Emission der drei hier möglichen Elektronenpartialwellen sind:

- +0,40 für ein $s_{1/2}$ Elektron
- –0,32 für ein $d_{3/2}$ Elektron
- +0,08 für ein $d_{5/2}$ Elektron

In den drei gezeigten energetischen Verläufen finden sich Hinweise auf die Beteiligung eines $d_{3/2}$ Elektrons, da man immer negative β_{fl} – Werte sehen kann. Aber auch deutliche Abweichungen in den positiven Wertebereich auf einzelnen Autoionisationsresonanzen werden sichtbar. Sicherlich sind die Daten in Abb. 7.5 am Aussagekräftigsten, da dieser Übergang der stärkste in dieser Sequenz ist.

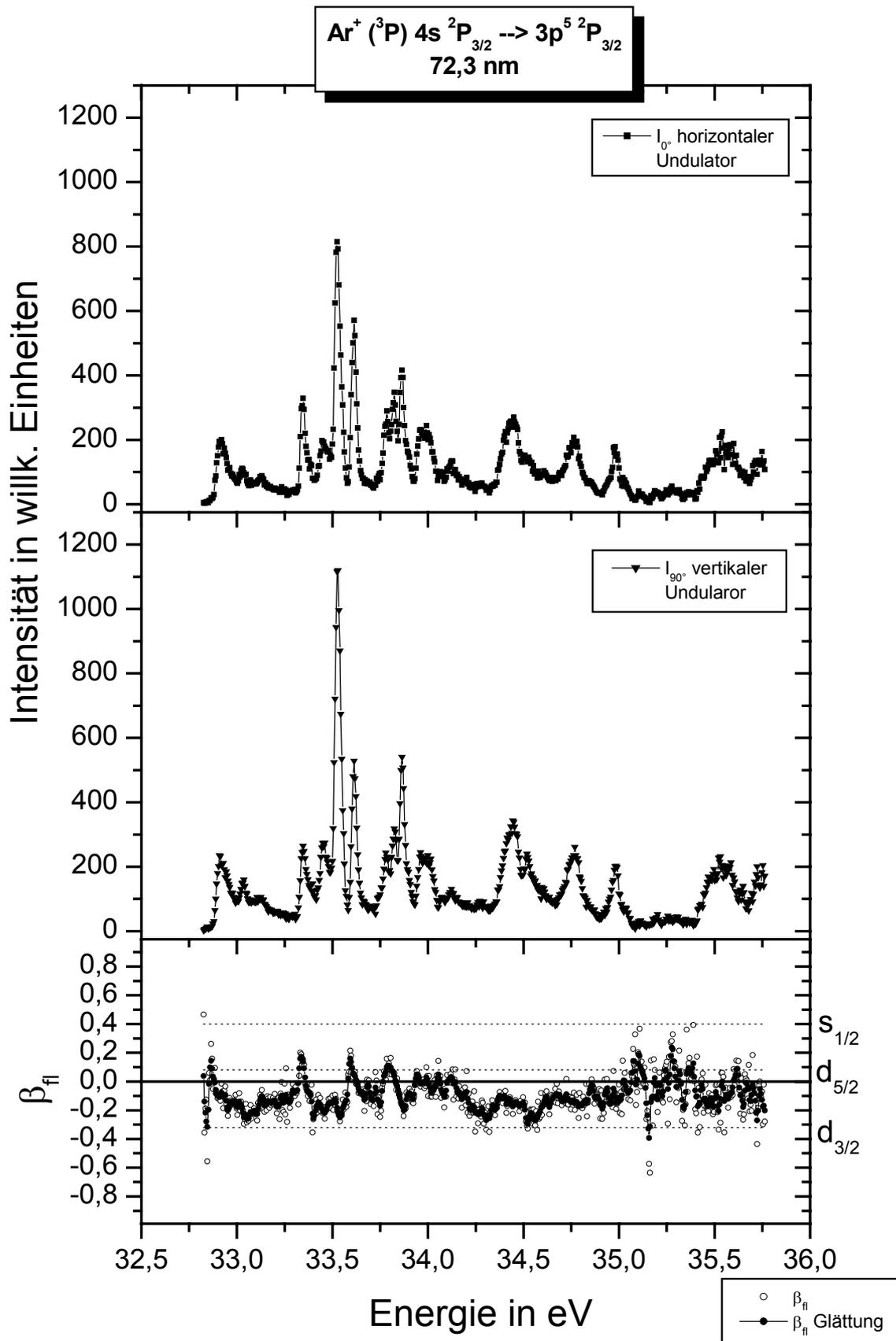


Abb. 7.5: Intensitäten und β_{fl} – Parameter des Ar⁺ Übergangs 4s ²P_{3/2} → 3p⁵ ²P_{3/2}.

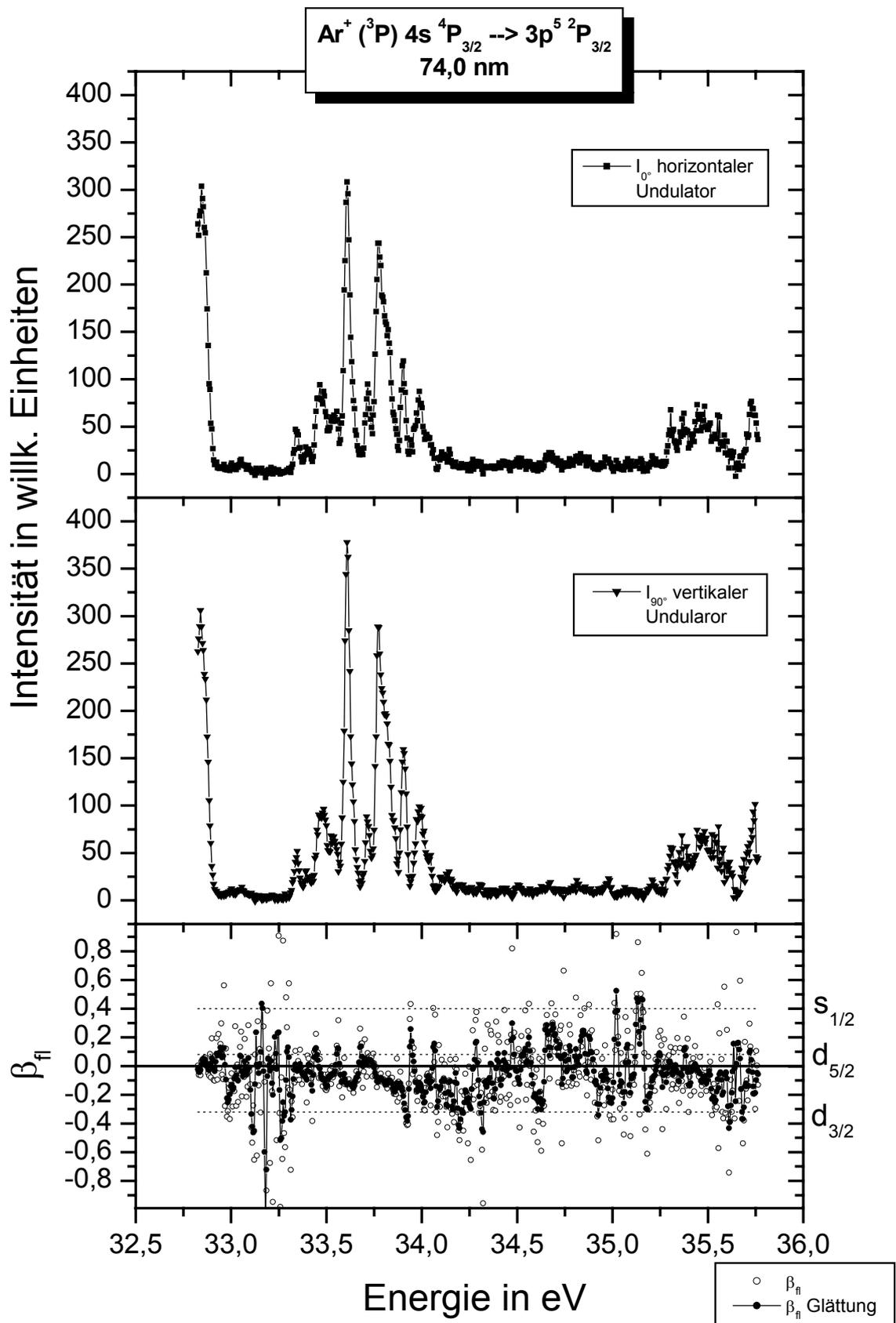


Abb. 7.6: Intensitäten und β_{fit} – Parameter des Ar^+ Übergangs $4s {}^4\text{P}_{3/2} \rightarrow 3p^5 {}^2\text{P}_{3/2}$.

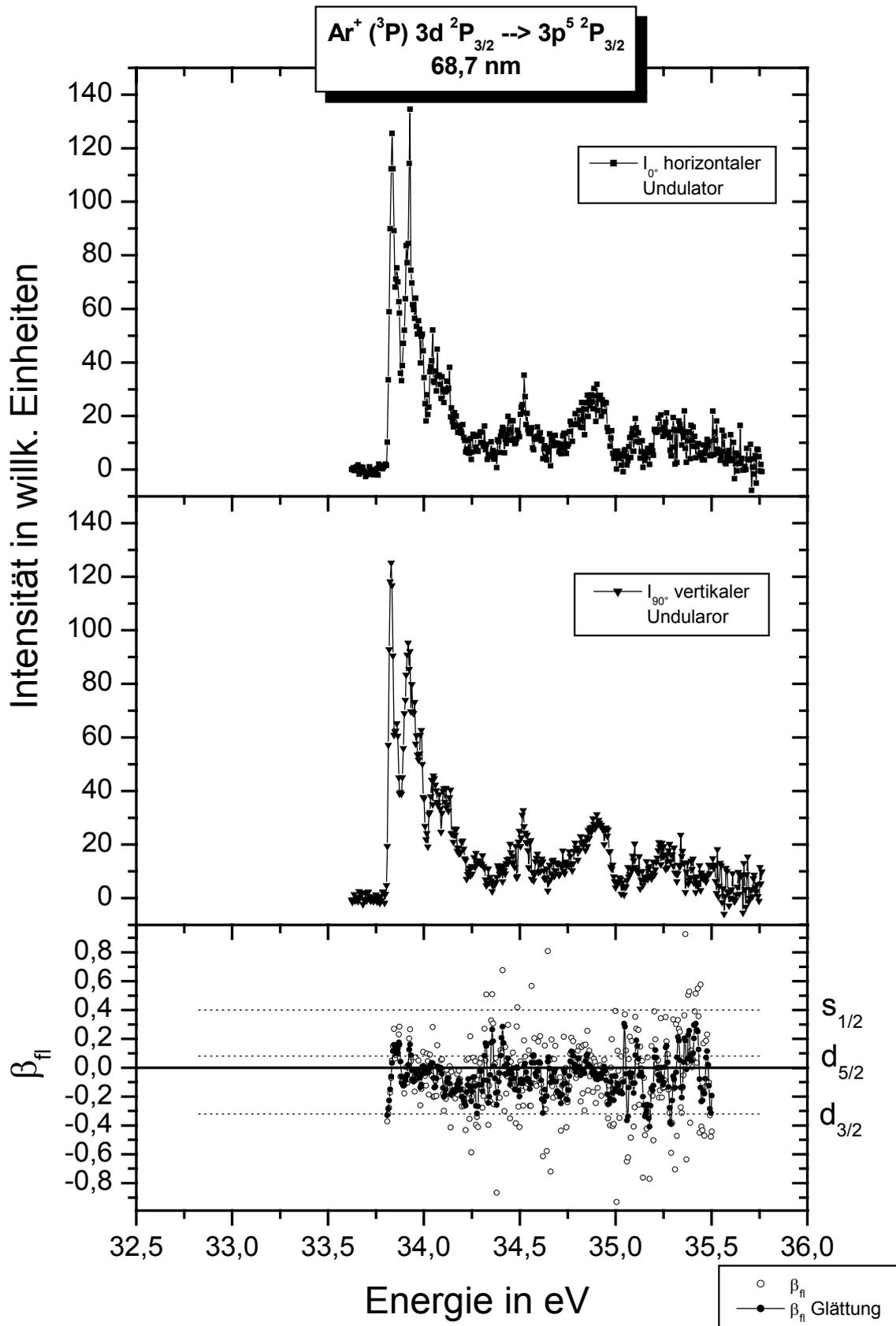


Abb. 7.7: Intensitäten und β_{fi} – Parameter des Ar⁺ Übergangs 3d ²P_{3/2} → 3p⁵ ²P_{3/2}.

7.1.3 Übergänge aus Zuständen mit Gesamtdrehimpuls

$J_i = 3/2$ in Zustände mit $J_f = 1/2$

Auch für diesen Typ von Übergängen ergeben sich von Null verschiedene Werte für die partiellen Winkelasymmetrieparameter. Diese weichen jedoch von denen in Kap. 7.1.2 ab. Vor allem ändern sich die Vorzeichen der β_{fl} – Werte der vergleichbaren Übergänge, so dass sich die gespiegelten Energieverläufe dieser Übergänge ergeben. Der abweichende Gesamtdrehimpuls des Endzustands verursacht dieses Verhalten. Die partiellen β_{fl} – Werte der drei möglichen Elektronenpartialwellen sind hier:

- $-0,50$ für ein $s_{1/2}$ Elektron
- $+0,40$ für ein $d_{3/2}$ Elektron
- $-0,10$ für ein $d_{5/2}$ Elektron

Auch in diesen Messungen ist der Trend zur Beteiligung eines $d_{3/2}$ Elektrons zu sehen. Vor allem in Abb. 7.8 sind bei den Energiepositionen 33,3 eV, 33,6 eV und 33,8 eV wieder Hinweise auf die Beteiligung eines $s_{1/2}$ Elektrons zu erkennen. Die Daten sind jedoch nicht so aussagekräftig wie die in Kap. 7.1.2. Hier wäre sicher eine verbesserte Primärauflösung und eine höhere Zählrate von Vorteil. Die in den Abb. 7.9 und 7.11 gezeigten Übergänge sind aufgrund der geringen Zählrate (Abb. 7.9) und ihres nur leicht positiven β_{fl} – Wertes schwer zu interpretieren. Man kann nur festhalten, dass in beiden Fällen d – Elektronen beteiligt sein werden. In Abb. 7.10 fällt auf, dass der β_{fl} – Wert über fast den gesamten Energiebereich einen negativen Wert zeigt. Dies legt die Vermutung nahe, dass abweichend zu den anderen drei untersuchten Übergängen die $s_{1/2}$ und die $d_{5/2}$ Elektronenpartialwellen stärker beteiligt sind.

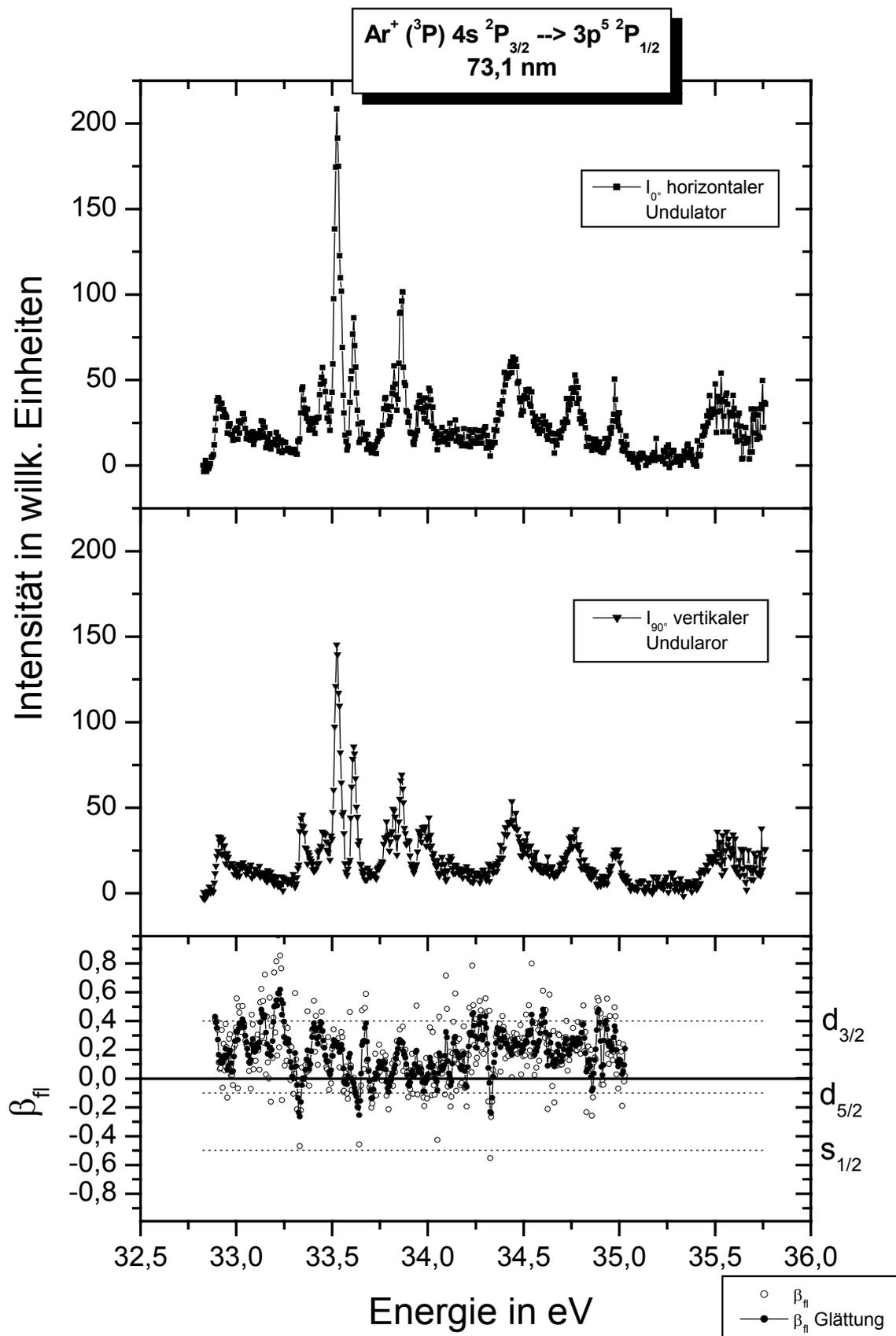


Abb. 7.8: Intensitäten und β_{fl} – Parameter des Ar^+ Übergangs $4s {}^2\text{P}_{3/2} \rightarrow 3p {}^5\text{P}_{1/2}$.

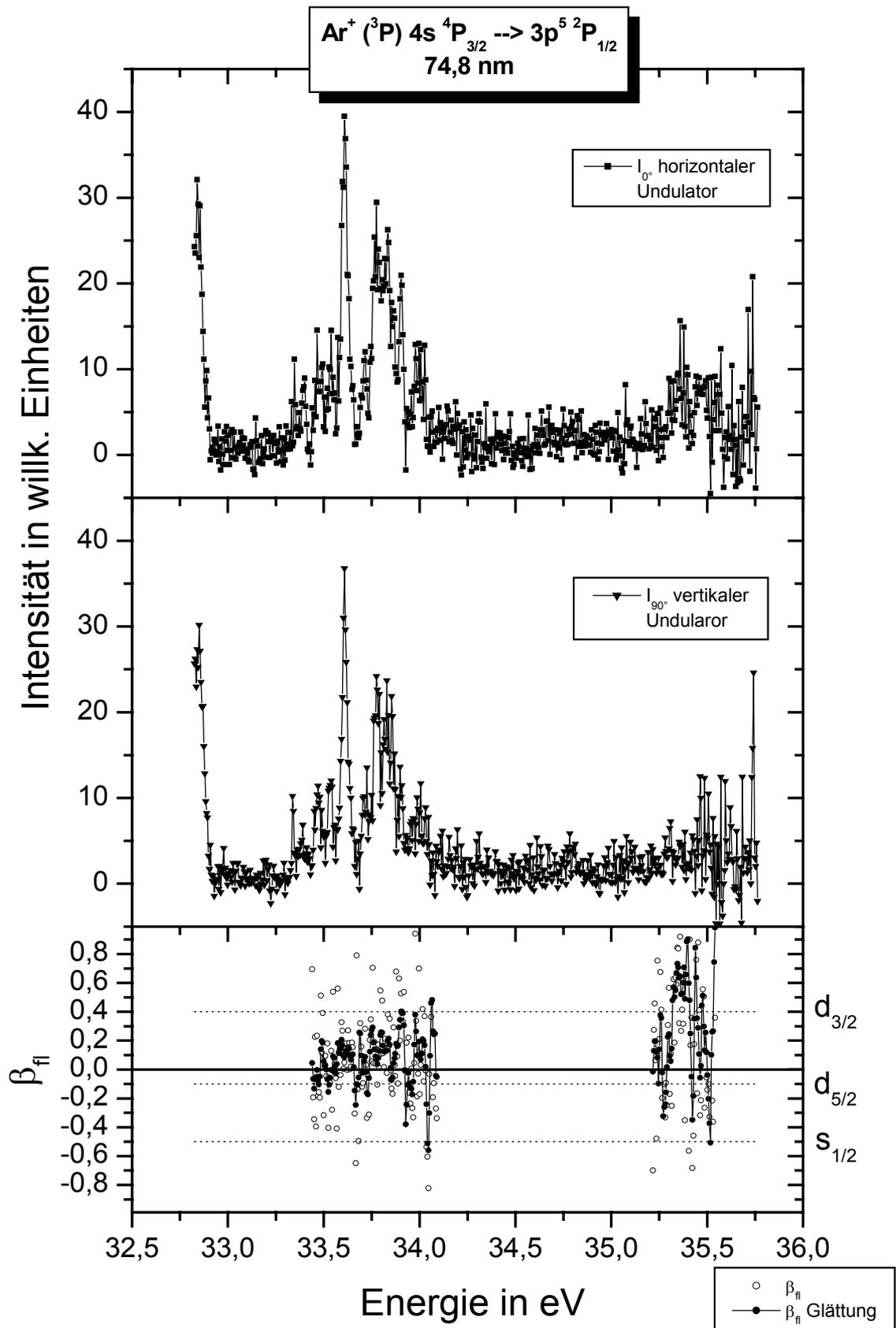


Abb. 7.9: Intensitäten und β_{fl} – Parameter des Ar^+ Übergangs $4s {}^4\text{P}_{3/2} \rightarrow 3p {}^5\text{P}_{1/2}$.

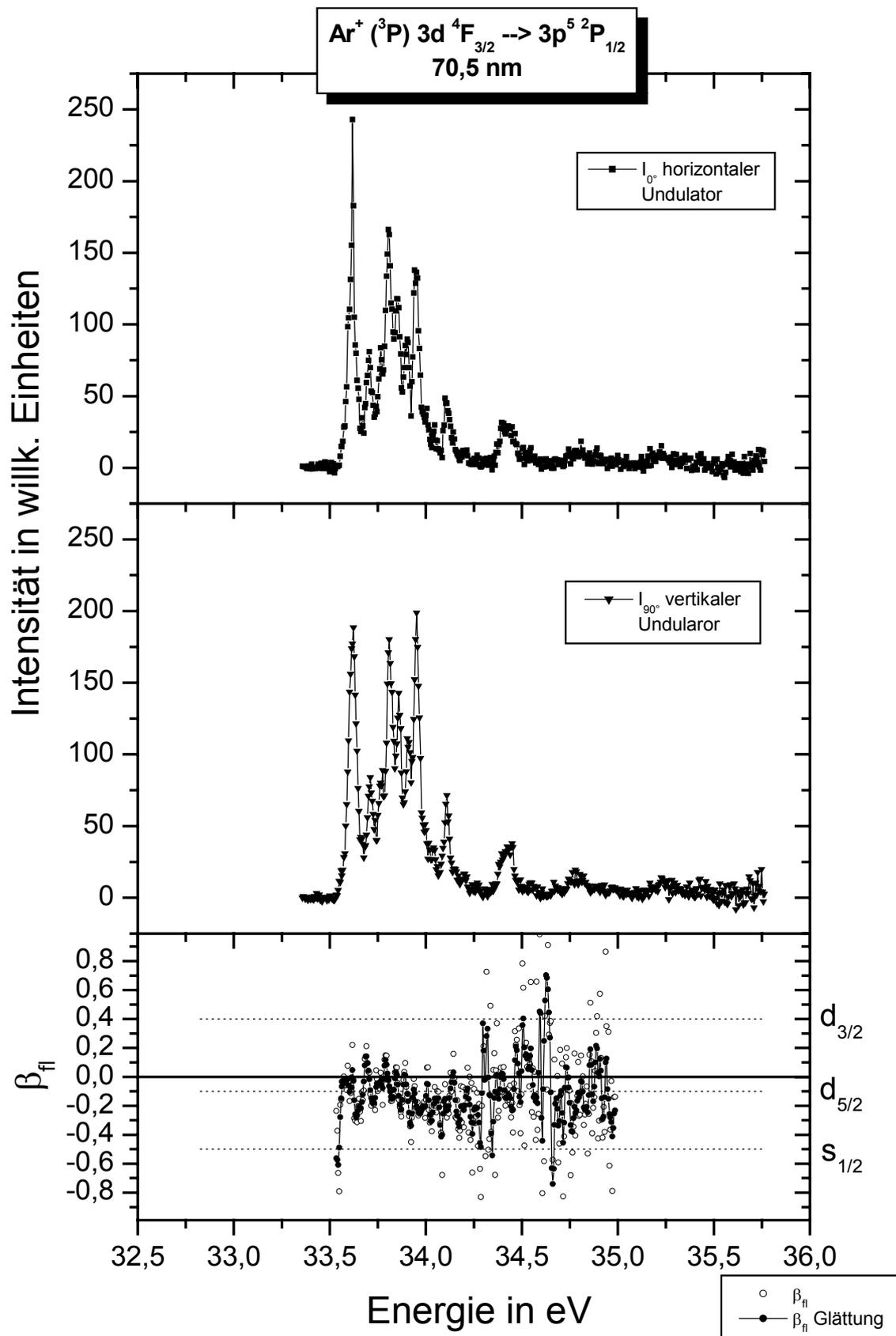


Abb. 7.10: Intensitäten und β_{fl} – Parameter des Ar^+ Übergangs $3d {}^4\text{F}_{3/2} \rightarrow 3p {}^5\text{P}_{1/2}$.

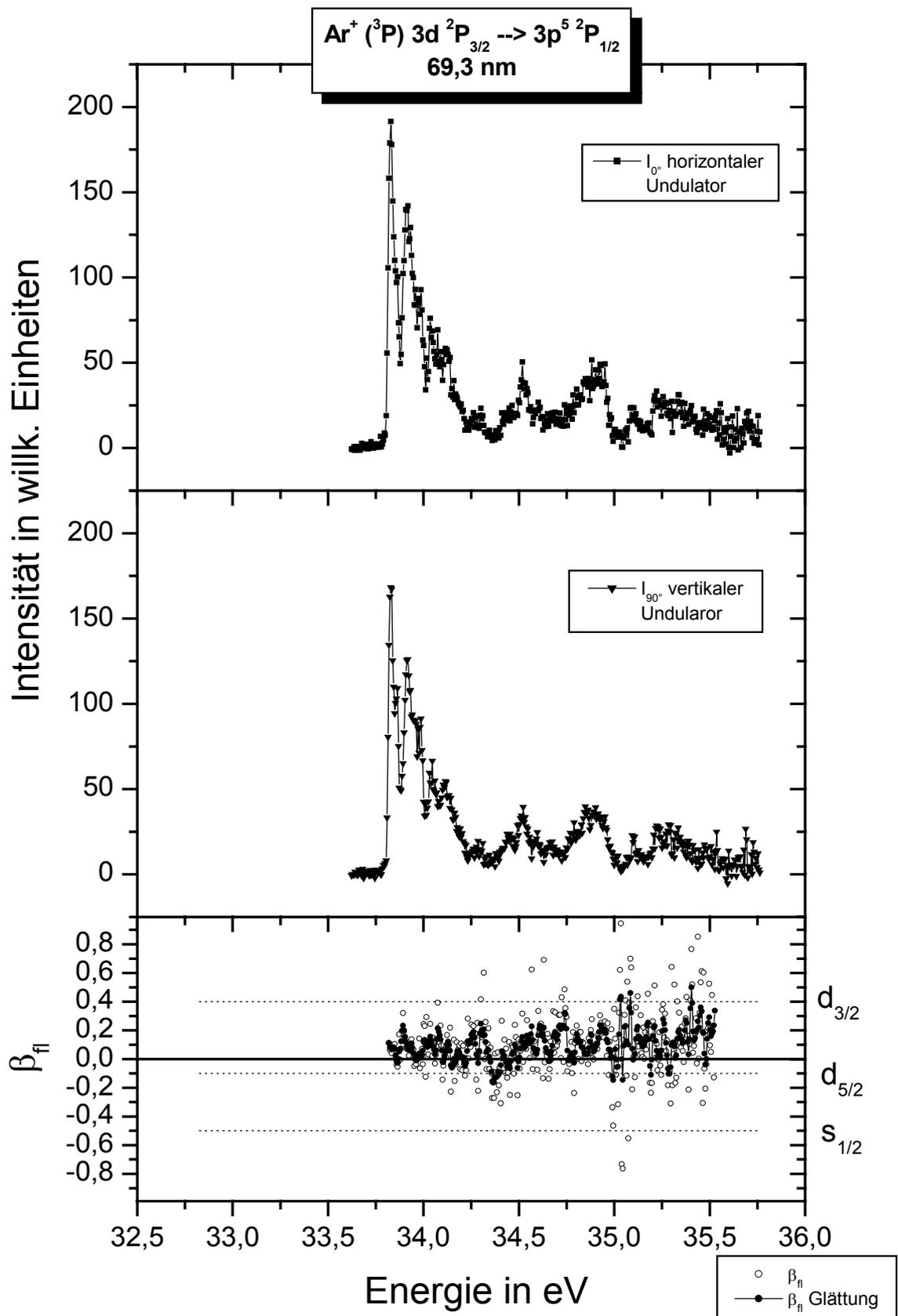


Abb. 7.11: Intensitäten und β_{\parallel} – Parameter des Ar⁺ Übergangs 3d ²P_{3/2} → 3p⁵ ²P_{1/2}.

7.1.4 Übergänge aus Zuständen mit Gesamtdrehimpuls

$J_i = 5/2$ in Zustände mit $J_f = 3/2$

Aussagen über die Beteiligung der Elektronenpartialwellen aus den Messungen dieser Übergänge erweisen sich als schwierig, da die Variation in den möglichen partiellen β_{fl} – Werten kleiner ist als in den beiden vorangegangenen Fällen (vgl. Tab. 2.1). Die möglichen Werte ergeben sich in diesem Fall zu:

- $-0,28$ für ein $d_{3/2}$ Elektron
- $+0,32$ für ein $d_{5/2}$ Elektron
- $-0,10$ für ein $g_{7/2}$ Elektron

Der in Abb. 7.12 gezeigte Übergang ist kein reiner $5/2 \rightarrow 3/2$ Übergang, da der Wellenlängenunterschied von lediglich $0,04$ nm zu dem benachbarten $Ar^+ 4s \ ^4P_{1/2} \rightarrow 3p^5 \ ^2P_{1/2}$ Übergang eine Trennung nicht erlaubt. Er ist jedoch in diese Sequenz aufgenommen worden, da der benachbarte $1/2 \rightarrow 1/2$ Übergang im Ausgangszustand Kugelsymmetrie besitzt und deshalb mit seinem β_{fl} – Wert von Null (siehe Kap. 7.1.1) die Ergebnisse dieses Übergangs nicht beeinflussen kann. Allen drei energetischen Verläufen gemeinsam ist die Variation des β_{fl} – Parameters um die Nulllinie. Es sind sowohl leichte Ausschläge in die positive Richtung zu sehen, als auch gerade in Abb. 7.14 in die negative Richtung. Damit lässt sich aus diesen Daten keine eindeutige Interpretation bezüglich der Elektronenpartialwellen ableiten. Zur weiteren Informationsgewinnung ist deshalb die Beschränkung auf kleine interessante Primärenergiebereiche notwendig, um mit sehr schmalbandiger anregender Strahlung Detailuntersuchungen durchzuführen. Solche Bereiche sind z.B. in Abb. 7.14 um 35 eV, oder auch um $35,3$ eV zu erkennen. In diesen Abschnitten zeichnen sich auf Peaks von Autoionisationsresonanzen eindeutige Trends zu negativen oder positiven Werten im energetischen Verlauf des β_{fl} – Parameters ab.

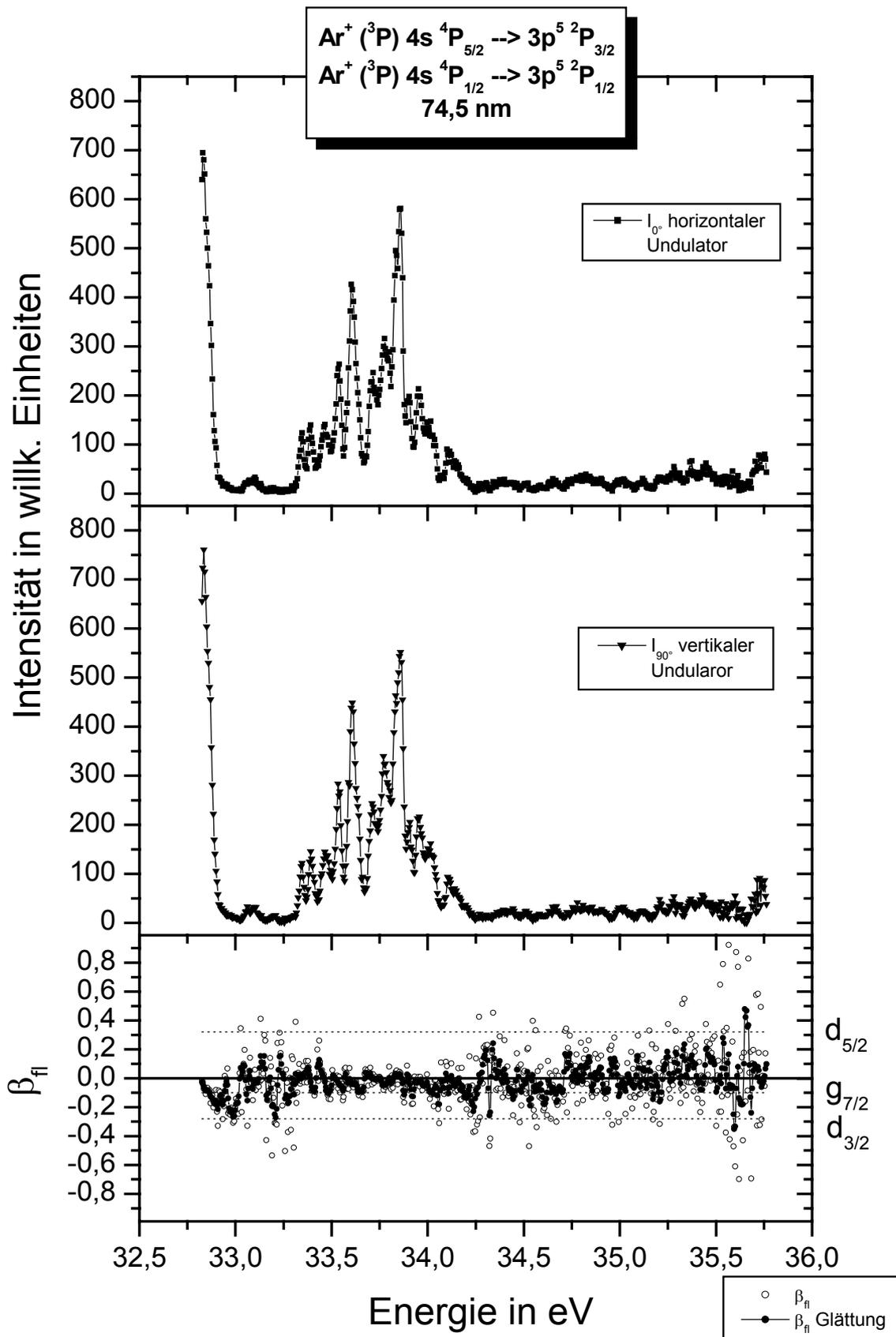


Abb. 7.12: Intensitäten und β_{\parallel} -Parameter der Ar^+ Übergänge $4s {}^4\text{P}_{5/2} \rightarrow 3p {}^5\text{P}_{3/2}$ und $4s {}^4\text{P}_{1/2} \rightarrow 3p {}^5\text{P}_{1/2}$.

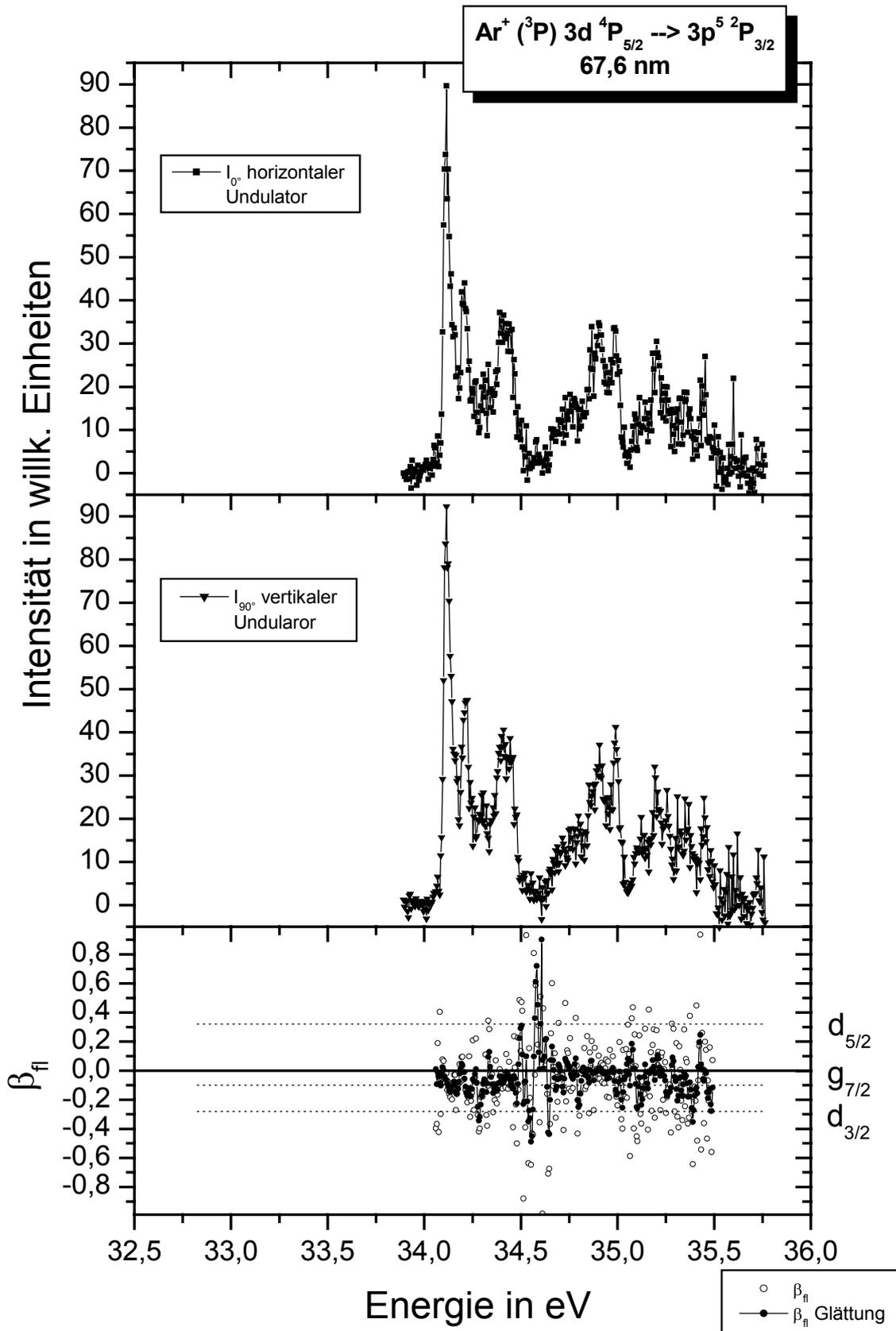


Abb. 7.13: Intensitäten und β_{fl} – Parameter des Ar⁺ Übergangs 3d ⁴P_{5/2} → 3p⁵ ²P_{3/2}.

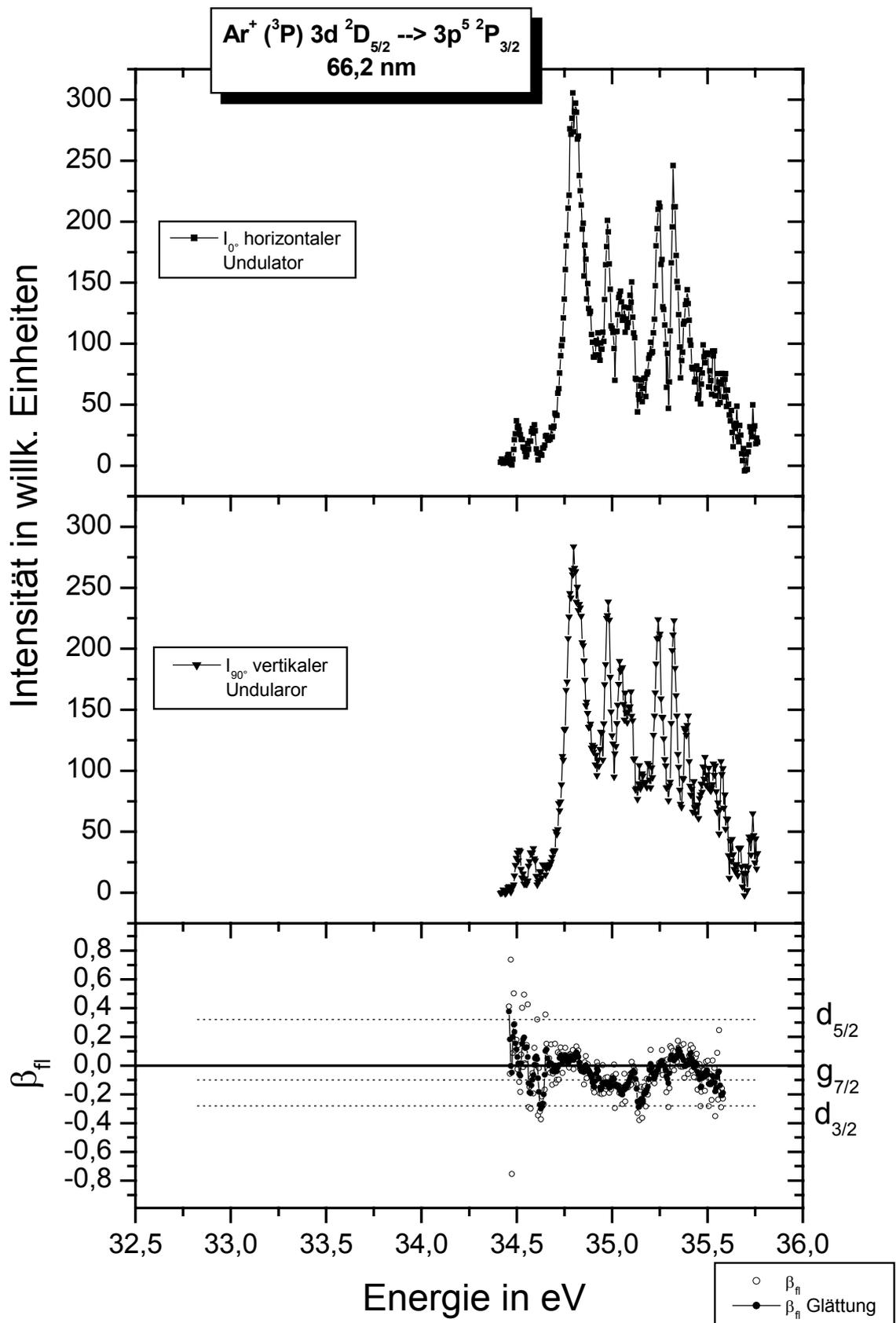


Abb. 7.14: Intensitäten und β_{\parallel} – Parameter des Ar^+ Übergangs $3d {}^2\text{D}_{5/2} \rightarrow 3p {}^5\text{P}_{3/2}$.

7.1.5 Übergänge deren Wellenlängen nicht spektroskopisch getrennt werden können

In diesem Kapitel zusammengefasst sind die verbleibenden vier Wellenlängen, die aus einer Überlagerung von zwei oder mehr Übergängen zusammengesetzt sind. In den Abb. 7.15 bis 7.18 sind folgende Übergänge gezeigt:

- Abb. 7.15 $\text{Ar}^+ 3d^4 F_{5/2,3/2} \rightarrow 3p^5 {}^2P_{3/2}$ und $\text{Ar}^+ 3d^2 P_{1/2} \rightarrow 3p^5 {}^2P_{1/2}$
- Abb. 7.16 $\text{Ar}^+ ({}^1D) 4s^2 D_{3/2} \rightarrow 3p^5 {}^2P_{1/2}$ und $\text{Ar}^+ 3d^4 P_{1/2,3/2} \rightarrow 3p^5 {}^2P_{3/2}$
- Abb. 7.17 $\text{Ar}^+ ({}^1D) 3d^2 D_{5/2,3/2} \rightarrow 3p^5 {}^2P_{3/2}$ und $\text{Ar}^+ 3d^2 D_{3/2} \rightarrow 3p^5 {}^2P_{1/2}$
- Abb. 7.18 $\text{Ar}^+ 3d^2 F_{5/2} \rightarrow 3p^5 {}^2P_{3/2}$ und $\text{Ar}^+ 3d^2 D_{3/2} \rightarrow 3p^5 {}^2P_{3/2}$

Man kann aufgrund der verschiedenen beteiligten Ausgangs- und Endzuständen die Daten nicht bezüglich des β_{fl} – Parameters interpretieren. Es lassen sich wie z.B. in Abb. 7.16 und 7.17 eindeutig negative β_{fl} – Werte ablesen. Welcher der beteiligten Zustände jedoch dominant ist und deshalb zur Interpretation der Partialwellenanalyse herangezogen werden muss, ist nicht klar. Ein ähnlicher Fall ist in Abb. 7.18 gegeben, bei dem ein klarer positiver β_{fl} – Wert und ein sehr deutlicher Einbruch auf Null um 35 eV herum abgelesen werden kann. Trotz dieser Schwierigkeiten sind die Messungen hier aufgeführt, um den energetischen Verlauf der Emissionswirkungsquerschnitte zu dokumentieren.

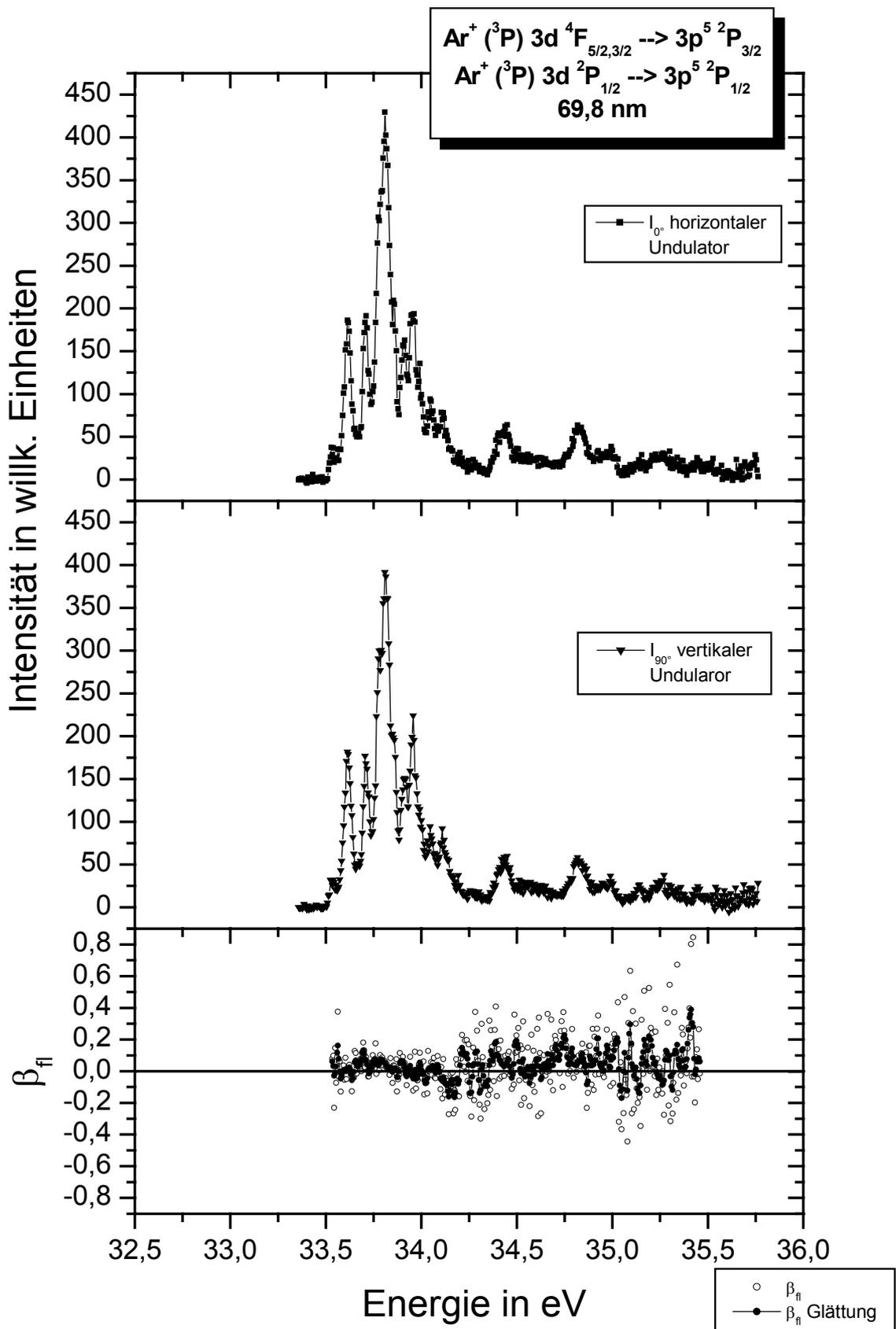


Abb. 7.15: Intensitäten und β_{fit} -Parameter der Ar^+ Übergänge $3d {}^4\text{F}_{5/2,3/2} \rightarrow 3p {}^5\text{P}_{3/2}$ und $3d {}^2\text{P}_{1/2} \rightarrow 3p {}^5\text{P}_{1/2}$.

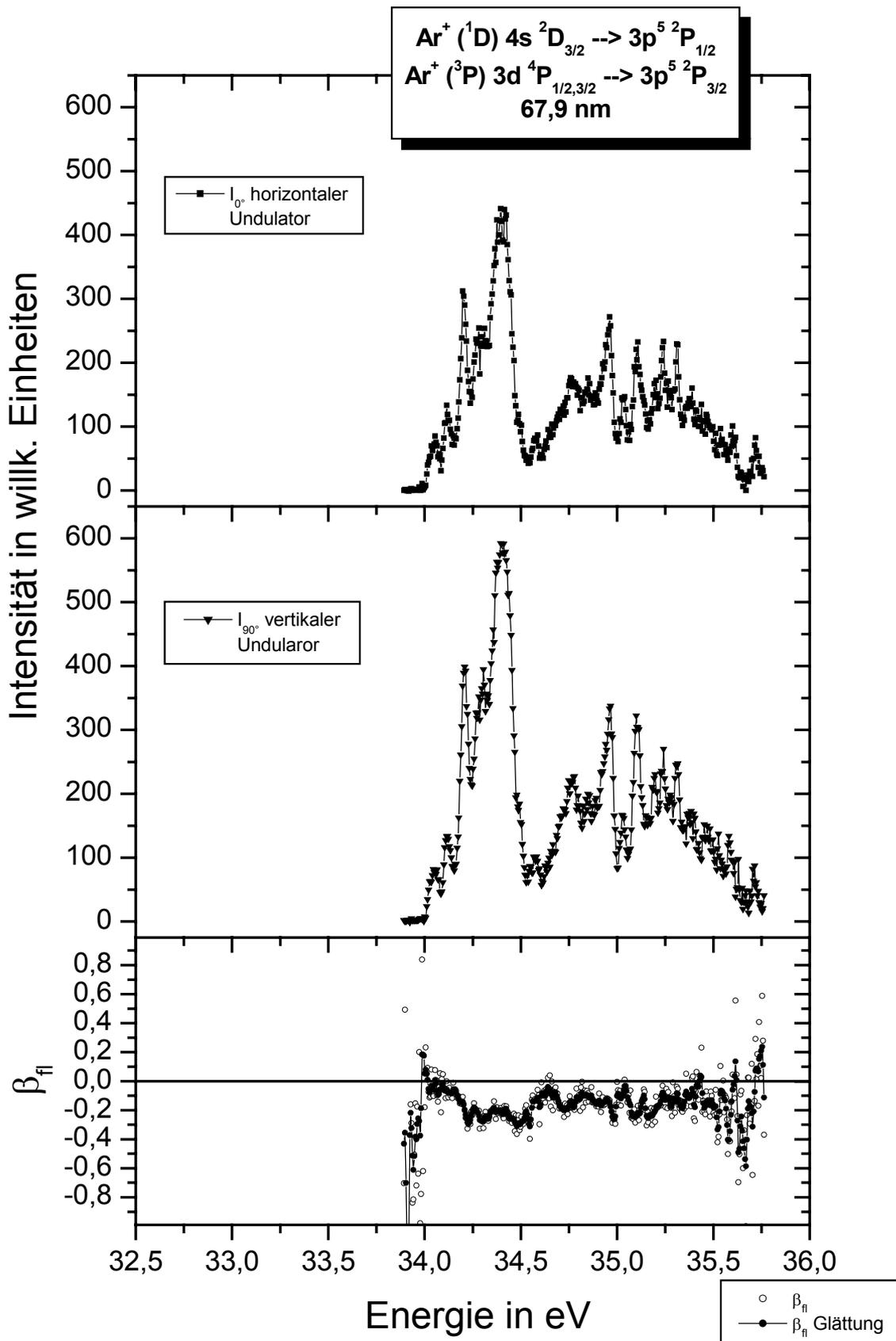


Abb. 7.16: Intensitäten und β_{fl} – Parameter der Ar^+ Übergänge $({}^1\text{D}) 4s {}^2\text{D}_{3/2} \rightarrow 3p {}^5\text{P}_{1/2}$ und $3d {}^4\text{P}_{1/2,3/2} \rightarrow 3p {}^5\text{P}_{3/2}$.

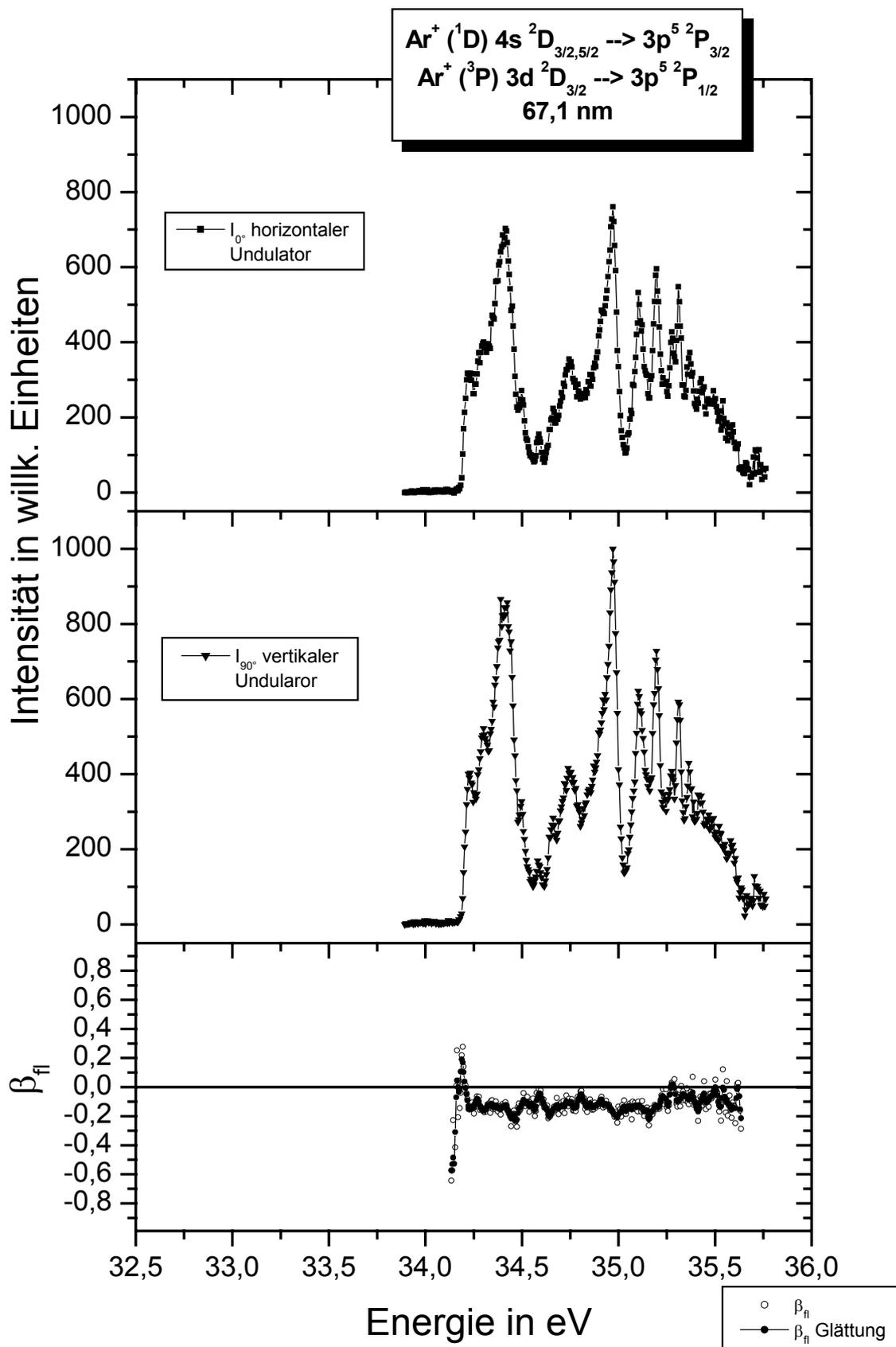


Abb. 7.17: Intensitäten und β_{f1} – Parameter der Ar^+ Übergänge $({}^1\text{D}) 4s {}^2\text{D}_{3/2,5/2} \rightarrow 3p {}^5{}^2\text{P}_{3/2}$ und $3d {}^2\text{D}_{3/2} \rightarrow 3p {}^5{}^2\text{P}_{1/2}$.

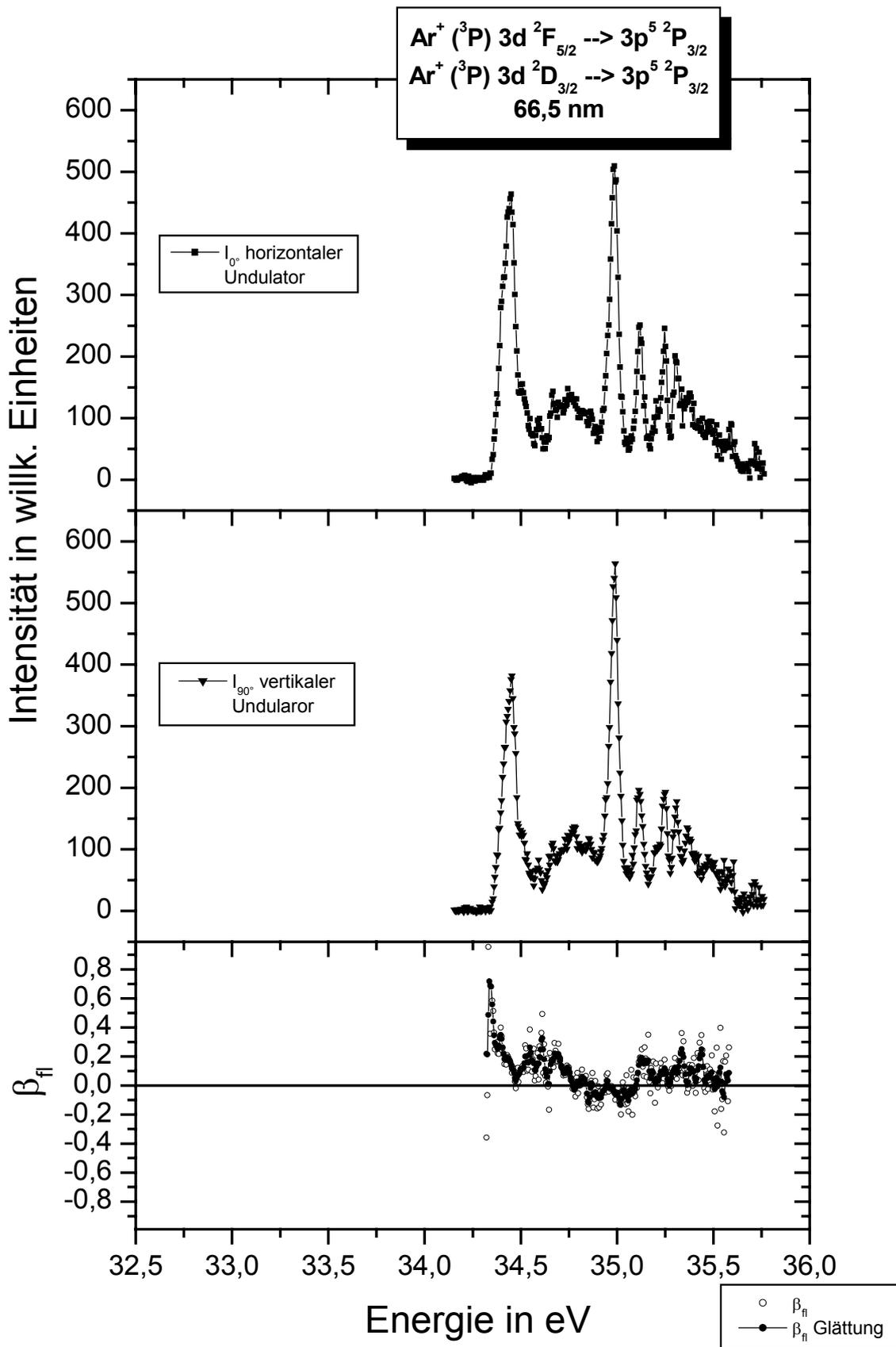
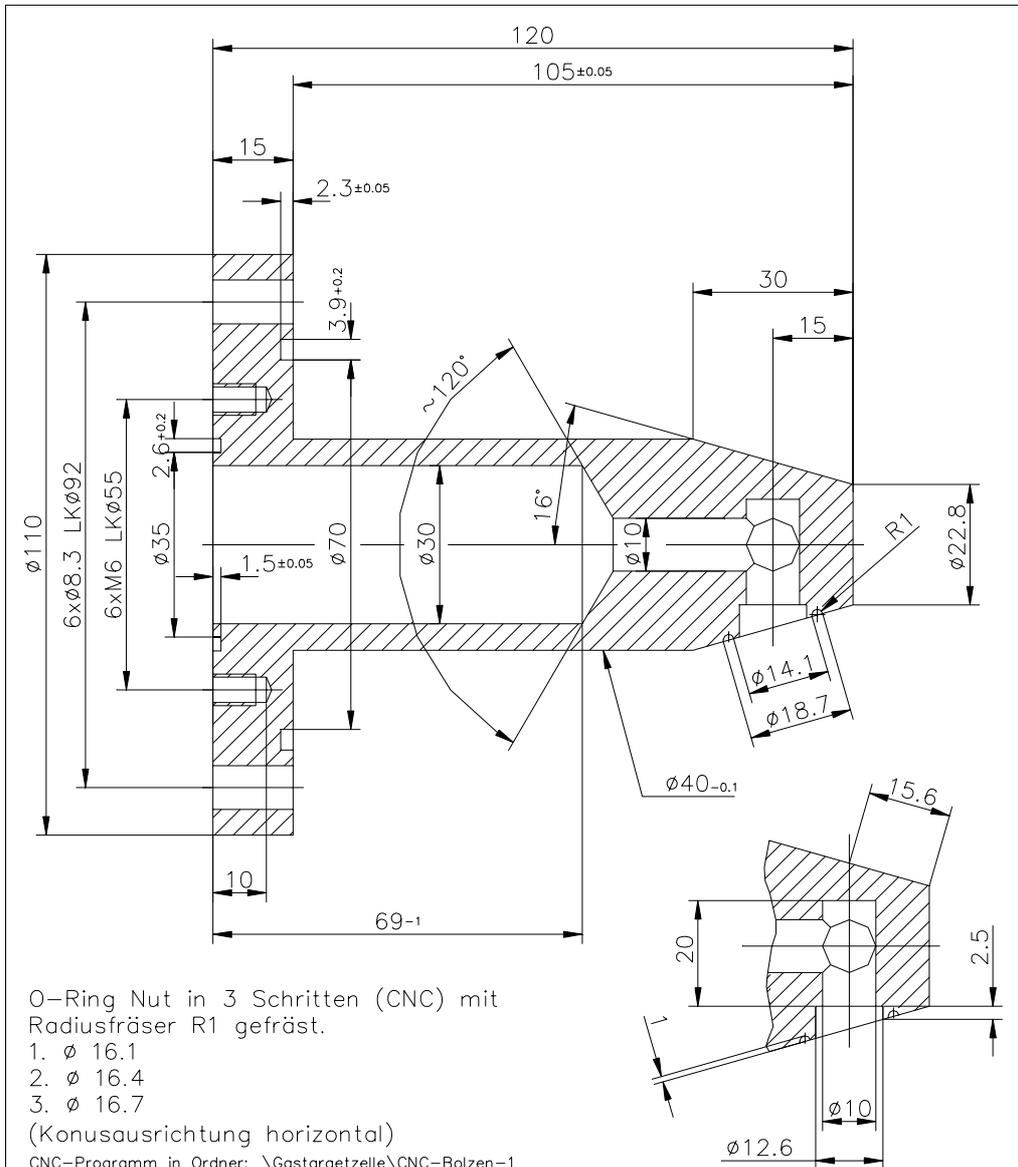


Abb. 7.18: Intensitäten und β_{fl} – Parameter der Ar^+ Übergänge $3d {}^2\text{F}_{5/2} \rightarrow 3p {}^5 {}^2\text{P}_{3/2}$ und $3d {}^2\text{D}_{3/2} \rightarrow 3p {}^5 {}^2\text{P}_{3/2}$.

7.2 Technische Zeichnungen Gastargetzelle

An dieser Stelle sollen die technischen Zeichnungen der Gastargetzelle aufgeführt werden um den Stand der Entwicklung zum jetzigen Zeitpunkt zu dokumentieren. Dazu sind als Ergänzung der beiden Zeichnungen in Kap. 3 die restlichen Ansichten des Standardgastargetzelleneinschubs aus Aluminium, sowie der Modifikation aus Mu-Metall in den Abschnitten 7.2.1 und 7.2.2 gezeigt. Als Komplettierung des Gesamtbauteils sind in Kap. 7.2.3 die Zeichnungen des Gastargetzellenblocks angefügt. Der Originaldatensatz ist in der Feinmechanischen Werkstatt des I. Physikalischen Instituts archiviert ([Sch99-03]).

7.2.1 Aluminiumgastargetzelleneinschub



| | | | | | |
|--------------------|----------|-------------------|------------|---|---------------|
| Verwendungsbereich | | Zul. Abw. | Oberfl | Maßstab 1:1 | Gewicht |
| | | | | Werkstoff, Halbzeugl : Al Rohteil-Nr -- Modell- oder Gesenk-Nr -- | |
| | | Datum | Name | GASTARGETZELLE | |
| | | Bearb. 25.09.2002 | P.SCH. | | |
| | | Gepr. | | | |
| | | Norm | | | |
| | | | Uni-Gießen | GTZ_SEITEN | |
| | | | 1. Physik | | |
| Zust. | Änderung | Datum | Name | Ursprung | Blätter 4 |
| | | | | Ersatz für: | Ersatz durch: |

Abb. 7.19: AL-GTZ Ansicht A-1

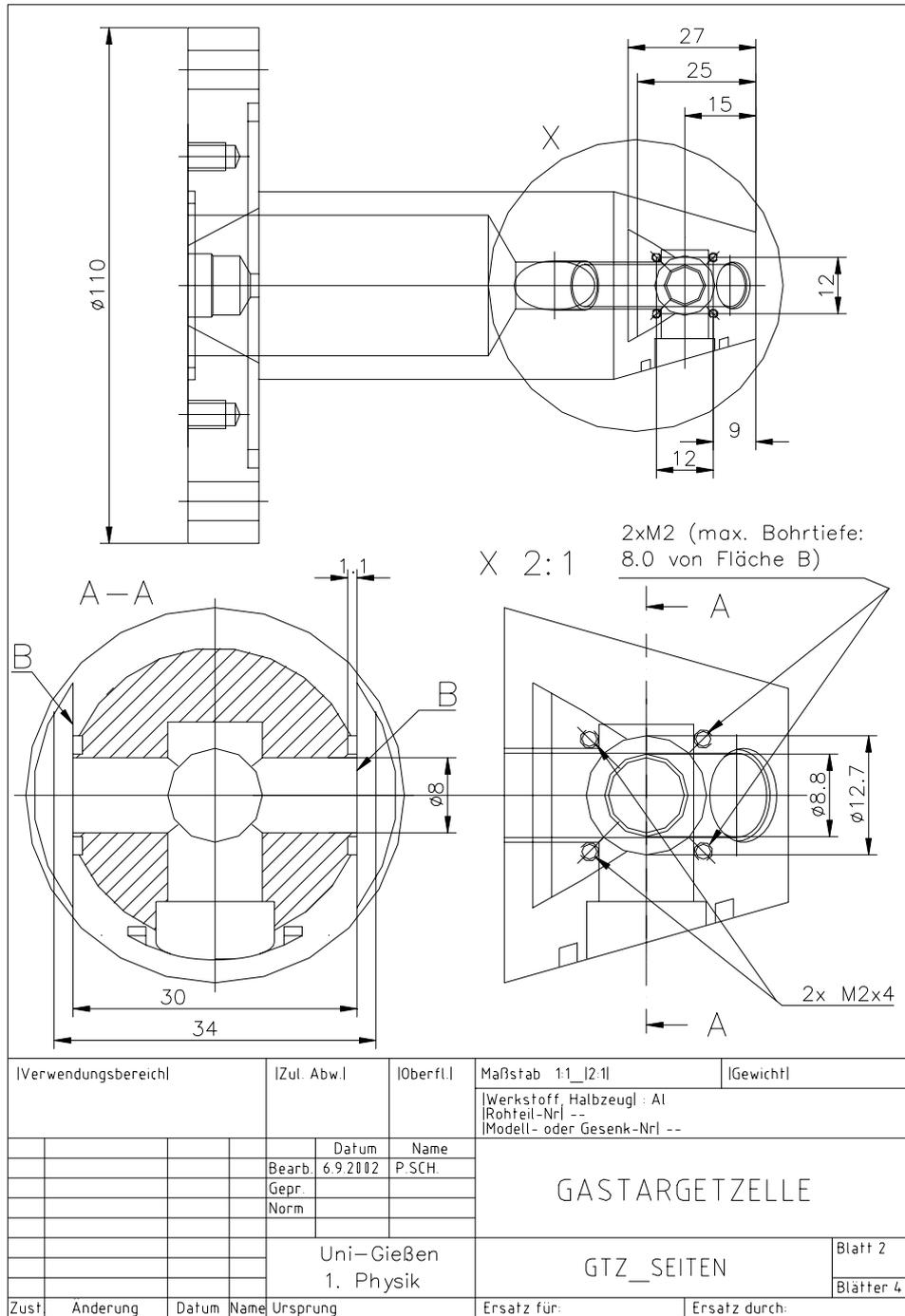


Abb. 7.20: AL-GTZ Ansicht A-2

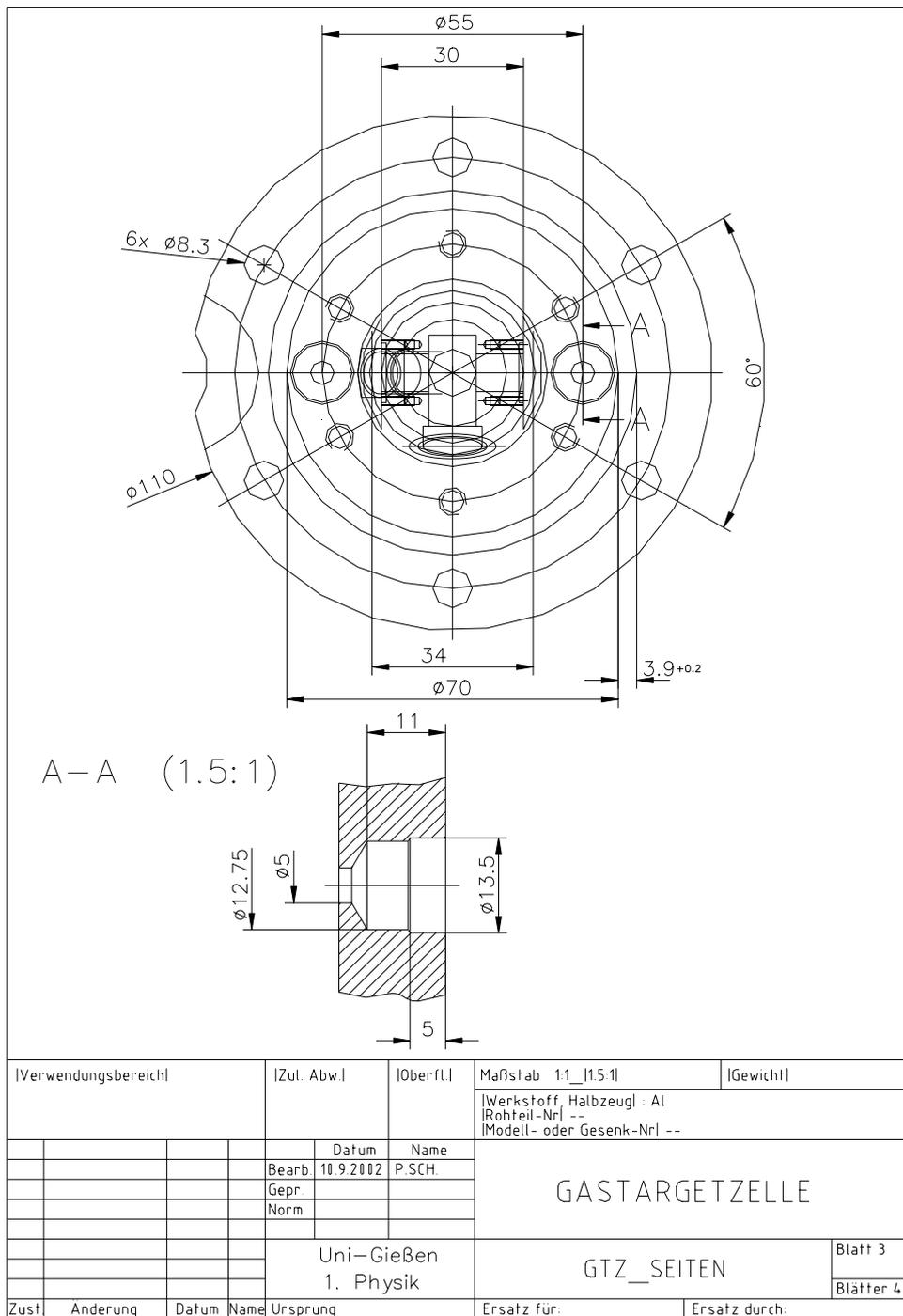


Abb. 7.21: AL-GTZ Ansicht A-3

7.2.2 Mu-Metallgastargetzeleinschub

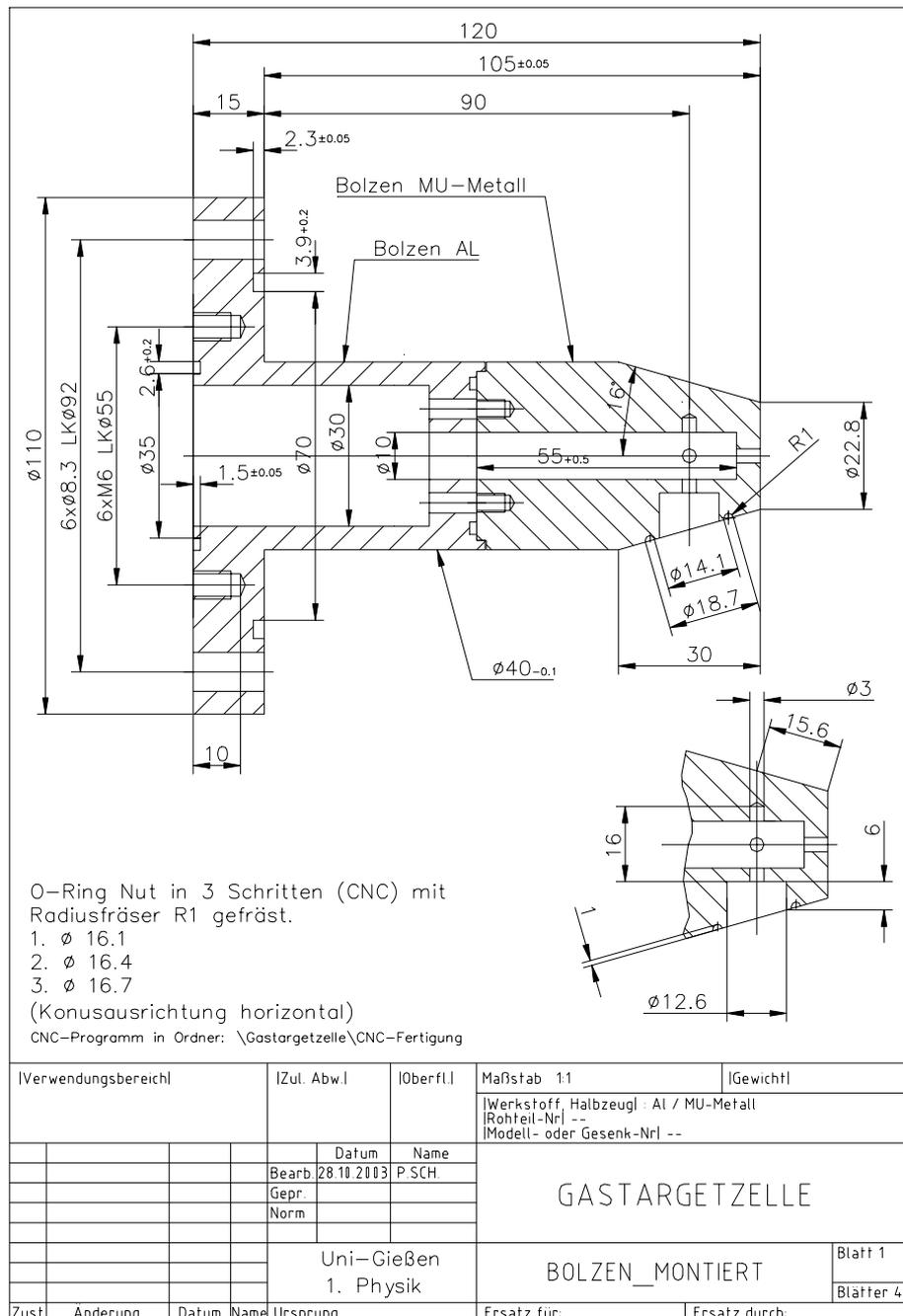


Abb. 7.22: Mu-Metall-GTZ Ansicht A-1

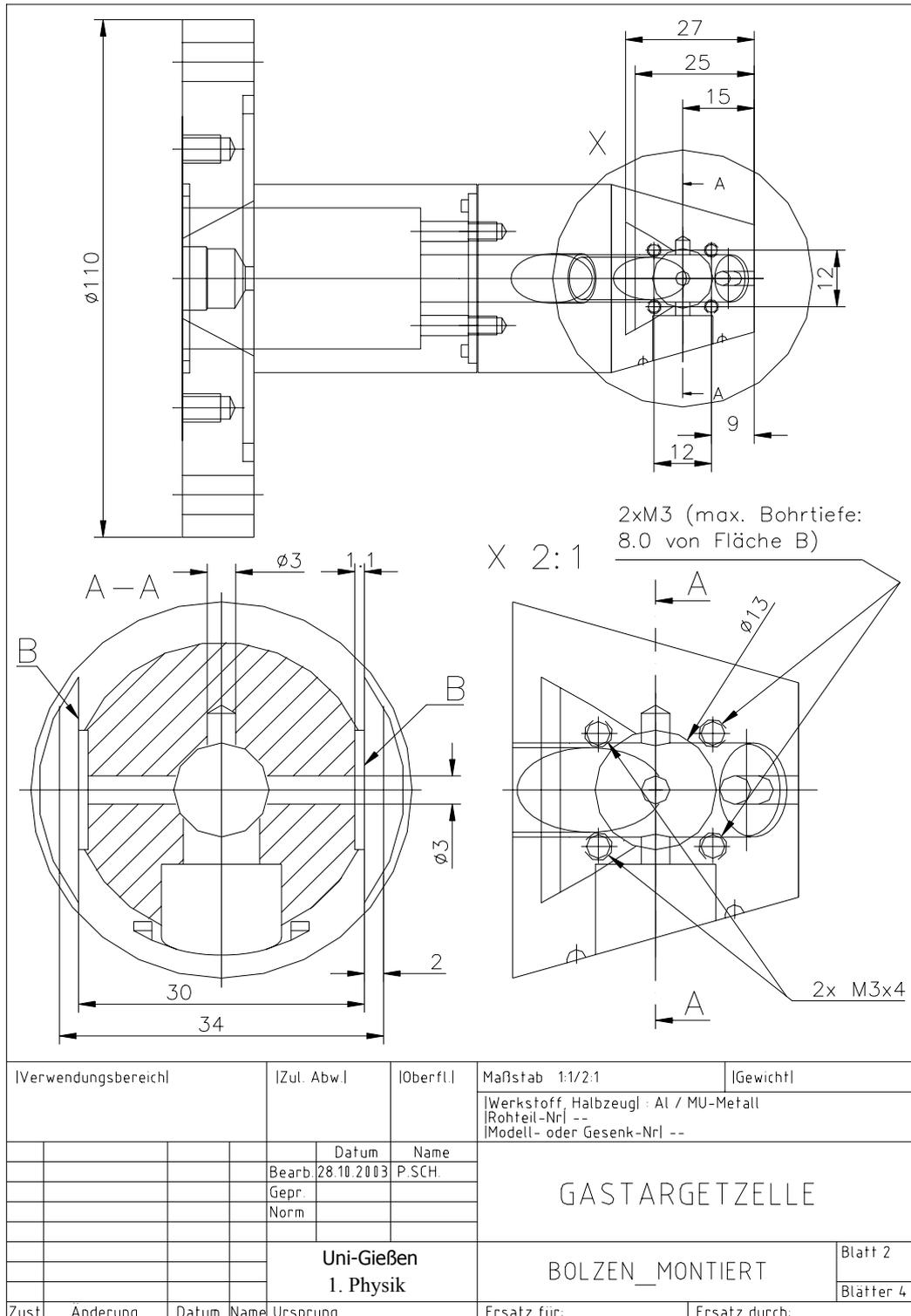
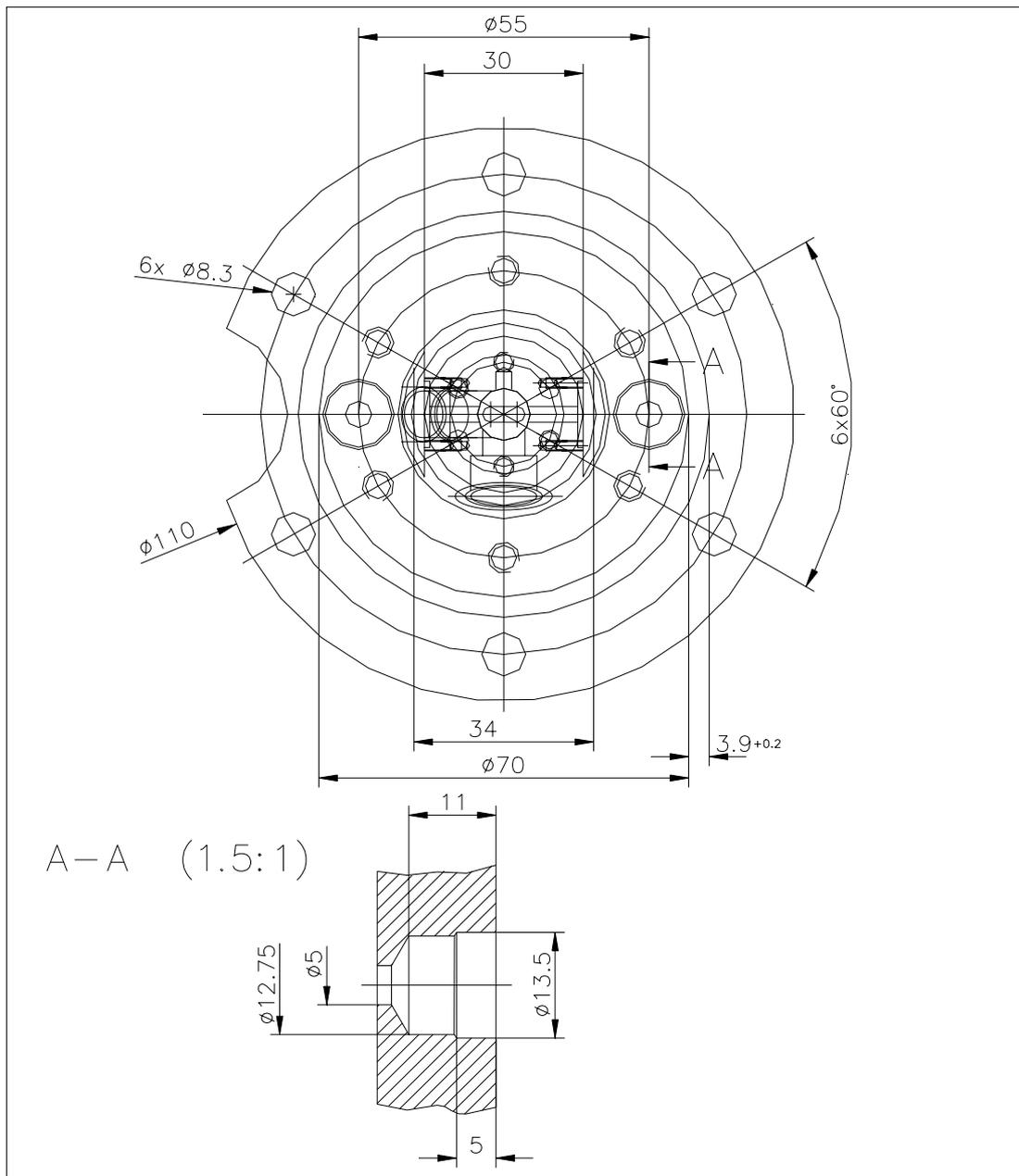


Abb. 7.23: Mu-Metall-GTZ Ansicht A-2



A-A (1.5:1)

| | | | | | | | | | | |
|--------------------|----------|-----------|------|------------|-------------|--------------------------------------|---------------|-----------|--|--------|
| Verwendungsbereich | | Zul. Abw. | | Oberfl. | | Maßstab 1:1 [1.5:1] | | Gewicht | | |
| | | | | | | Werkstoff, Halbzeugl: AL / MU-Metall | | | | |
| | | | | | | Rohteil-Nr: -- | | | | |
| | | | | | | Modell- oder Gesenk-Nr: -- | | | | |
| | | | | Datum | Name | GASTARGETZELLE | | | | |
| | | | | Bearb. | 31.10.2003 | | | | | P.SCH. |
| | | | | Gepr. | | | | | | |
| | | | | Norm | | | | | | |
| | | | | Uni-Gießen | | BOLZEN_MONTIERT | | Blatt 3 | | |
| | | | | 1. Physik | | | | Blätter 4 | | |
| Zust. | Anderung | Datum | Name | Ursprung | Ersatz für: | | Ersatz durch: | | | |

7.24: Mu-Metall-GTZ Ansicht A-3

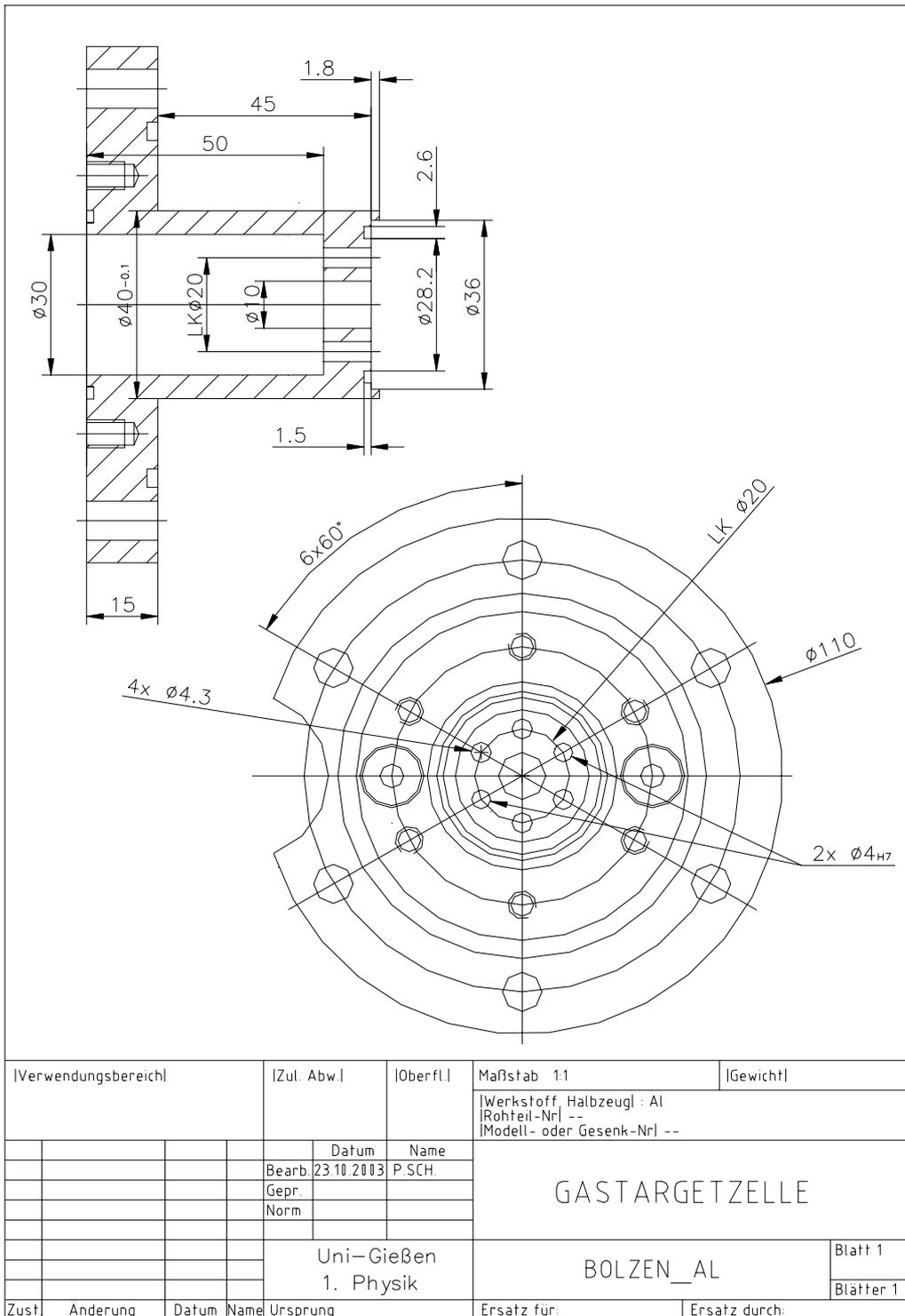


Abb. 7.25: Verbindungsstelle AL – MU-Metall

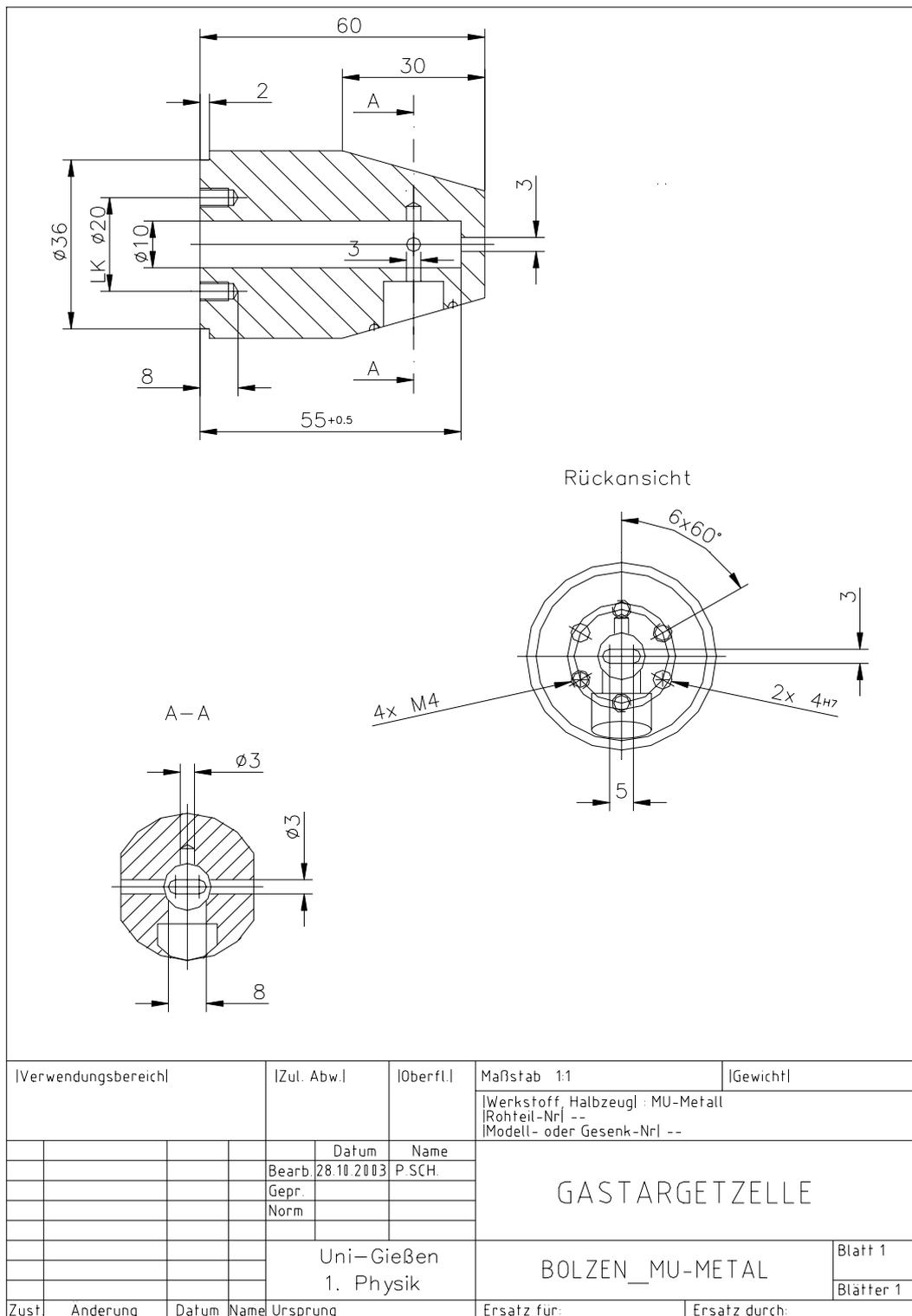


Abb. 7.26: Verbindungsstelle MU-Metall – AL

7.2.3 Gastargetzellenblock

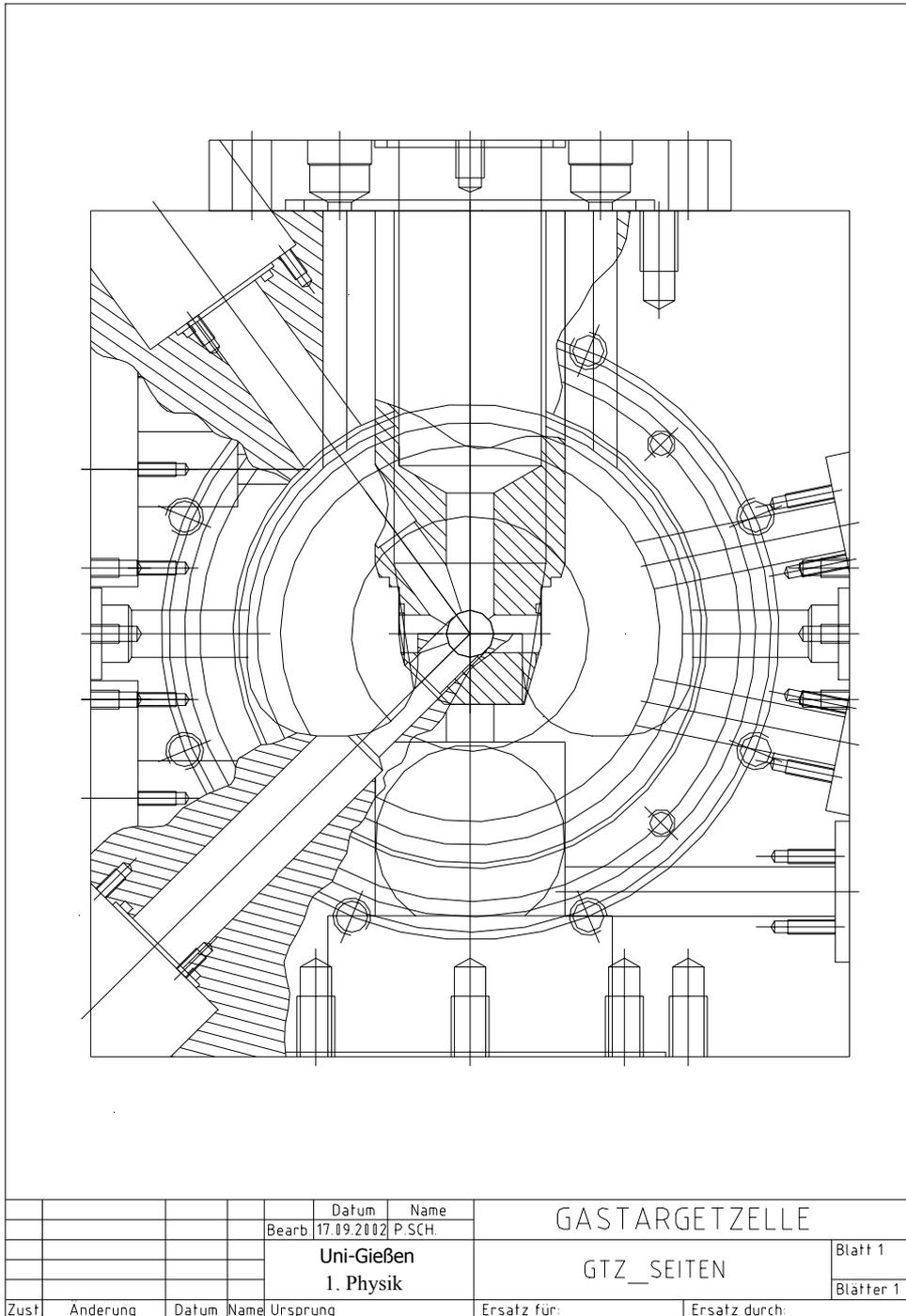


Abb. 7.27: GTZ – Block Bohrungen 45° und 54° mit Einschub. Draufsicht

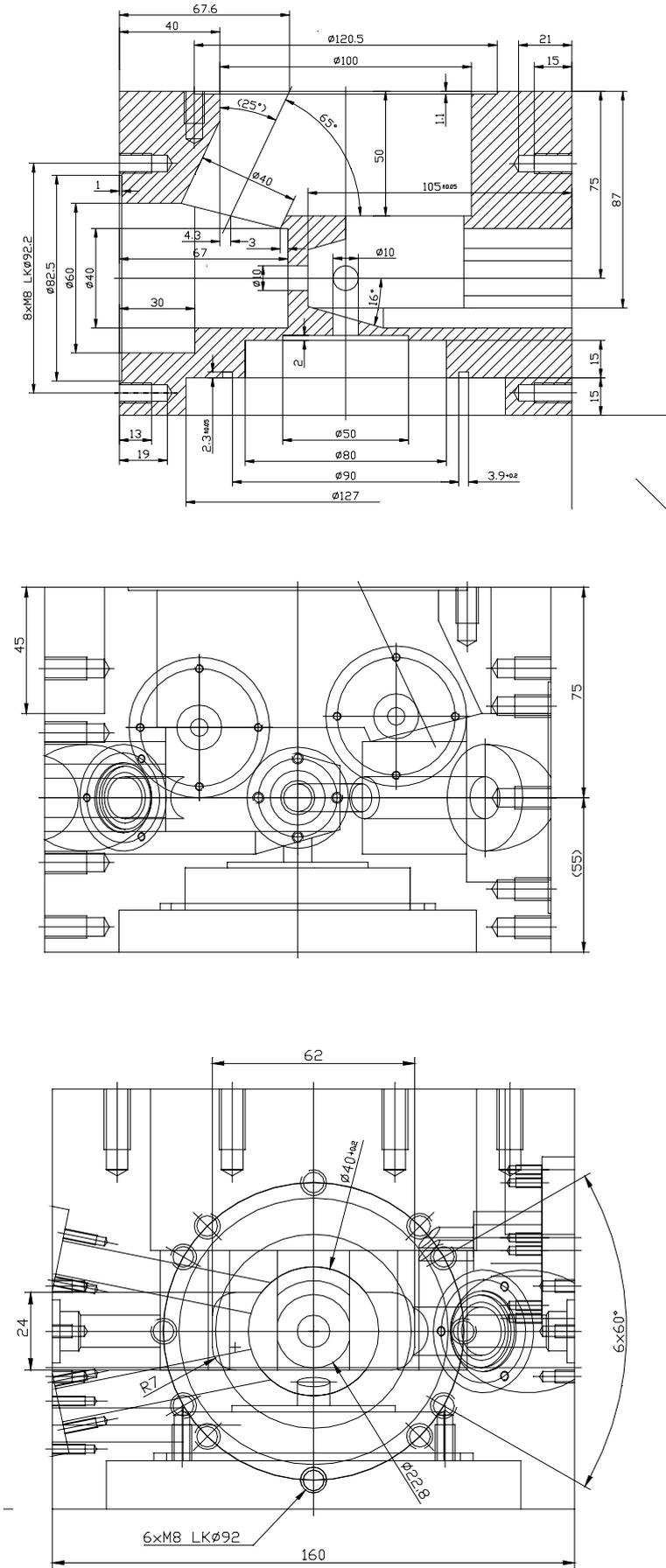


Abb. 7.28:
GTZ – Block,
Seitenansichten
und Schnitt.

Literaturverzeichnis

- [Aks84] H. Aksela, S. Aksela, H. Pulkkinen. *Phys. Rev. A*, **30/5**; 2456, (1984)
- [Bai92] M.A. Baig, S. Ahmad, J.P. Connerade, W. Dussa, J. Hormes.
Phys. Rev. A, **45/11**; 7963, (1992)
- [Bec88] U. Becker, B. Langer, H.G. Kerckhoff, M. Kupsch, D. Szostak,
R. Wehlitz, P.A. Heimann, S.H. Liu, D.W. Lindle, T.A. Ferett,
D.A. Shirley. *Phys. Rev. Lett.*, **60/15**; 1490, (1988)
- [Bec91] AG-Becker. *Private Mitteilung*, (1991)
- [Bes04] Homepage der BESSY mbH; Berlin, (2004)
<http://www.bessy.de>
- [Fol04] Rolf Follath. *Private Mitteilung*, BESSY mbH; Berlin, (2004)
- [Fri90] Friedrich. *Theoretische Atomphysik. Lehrbuch*, Springer-Verlag,
Berlin Heidelberg, (1990)
- [Gor98] T.W. Gorczyca, Z. Felfli, H.L. Zhou, S.T. Manson. *Phys. Rev. A*, **58/5**;
3661, (1998)
- [Hal89] R.I. Hall, L. Avaldi, G. Dawber, P.M. Rutter, M.A. MacDonald,
C.G. King. *J. Phys. B: At. Mol Opt. Phys.*, **22**; 3205, (1989)
- [Har98] H.W. van der Hart, C.H. Greene. *Phys. Rev. A*, **58/3**; 2097, (1998)
- [Har99] H.W. van der Hart, C.H. Greene. *J. Phys. B: At. Mol Opt. Phys.*, **32**;
4029, (1999)

- [Har02] H.W. van der Hart, C.H. Greene. *Phys. Rev. A*, **65**; 062509-1, (2002)
- [KiSch96] G.C. King, K.-H. Schartner. *Resonances and Near-Threshold Processes*. VUV and Soft X-Ray Photoionisation, U.Becker and D.A.Shirley, eds. Plenum Press, New York, London, (1996)
- [Kra91] B. Kraus. *Entwicklung eines zweidimensional positionsempfindlichen Detektors und sein Einsatz in der Spektroskopie von Wenigelektronensystemen*. **Dissertation**, I. Physikalisches Institut der JLU Giessen und Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI), Darmstadt, (1991)
- [Lag94] B.M. Lagutin, V.L. Sukhorukov, I.D. Petrov, H. Schmoranzer, A. Ehresmann, K.H. Schartner. *J. Phys. B: At. Mol Opt. Phys.*, **27**; 5221, (1994)
- [Lag99] B.M. Lagutin, Ph.V. Demekhin, I.D. Petrov, V.L. Sukhorukov, S. Lauer, H. Liebel, F. Vollweiler, H. Schmoranzer, O. Wilhelmi, G. Mentzel, K.H. Schartner. *J. Phys. B: At. Mol Opt. Phys.*, **32**; 1795, (1999)
- [Lan92] B. Langer. *Anregungsenergieabhängigkeit von Photoelektronensatelliten unter spezieller Berücksichtigung des Schwellbereichs*. **Dissertation**, Fachbereich Physik der Technischen Universität Berlin, (1992)
- [Lie01] H. Liebel. *Spektroskopische Untersuchungen der Neutraldissoziation des Sauerstoffs nach Anregung mit monochromatisierter Synchrotronstrahlung: Absolute und relative Wirkungsquerschnitte in Fluoreszenzbereich von 90 bis 130 nm*. **Dissertation**, Universität Kaiserslautern, Fachbereich Physik, (2001)

- [Mad69] R.P. Madden, D.L. Ederer, K. Codling. *Phys. Rev.*, **177/1**; 136, (1969)
- [Mag95] B. Magel. *Private Mitteilung*. Daten aus Messzeit (1995)
- [Mar94] N. Marks. *Conventional magnets*. Cern – Report, **94-01**; 867, (1994)
- [McL02] K.W. McLaughlin, O. Yenen, D.H. Jaecks, T.J. Gay, M.M. Sant`Anna, D. Calabrese, D. Thaden-Jordan. *Phys. Rev. Lett.*, **88/12**; 123003-1, (2002)
- [Meh72] W. Mehlhorn, W. Schmitz, D. Stalherm. *Z. Physik*, **252**; 399, (1972)
- [Mei04] S. Meiß. *Ortsaufgelöste Multiplex-Spektroskopie an Plasmaentladungen unter Verwendung von Lichtwellenleitern und CCD – Detektoren. Diplomarbeit*, I. Physikalisches Institut der JLU Giessen, (2004)
- [Men98] G. Mentzel. *Resonanzverstärkung und Alignment bei der Photoproduktion von $Ar^+ 3s^2 3p^4 4p$ – Satelliten. Dissertation*, I. Physikalisches Institut der JLU Giessen, (1998)
- [Mic02] S. Mickat. *Multiplex – Fluoreszenz – Spektroskopie an doppelt angeregten Edelgaszuständen. Diplomarbeit*, I. Physikalisches Institut der JLU Giessen, (2002)
- [Möb93] B. Möbus, B. Magel, K.-H. Schartner, B. Langer, U. Becker, M. Wildberger, H. Schmoranzner. *Phys. Rev. A*, **47/5**; 3888, (1993)
- [Ros94] J. Rossbach, P. Schmüser. *Basic course on accelerator optics*. Cern – Report, **94-01**; 17, (1994)
- [Sch88] K.H. Schartner, B. Möbus, P. Lenz, H. Schmoranzner, M. Wildberger. *Phys. Rev. Lett.*, **61/24**; 2744, (1988)

- [Sch92] V. Schmidt. *Rep. Prog. Phys.*, **55**; 1483, (1992)
- [Sch93] H. Schmoranzer, A. Ehresmann, F. Vollweiler, V.L. Sukhorukov, B.M. Lagutin, I.D. Petrov, K.H. Schartner. *J. Phys. B: At. Mol Opt. Phys.*, **26**; 2795, (1993)
- [Sch96] K. Schulz, R. Püttner, A. Gutierrez, G. Kaindl, G. Miecznik, C.H. Greene. *Phys. Rev. A*, **54**; 3095, (1996)
- [Sch97] H. Schmoranzer, S. Lauer, F. Vollweiler, A. Ehresmann, V.L. Sukhorukov, B.M. Lagutin, I.D. Petrov, Ph.V. Demekhin, K.H. Schartner, B. Magel, G. Mentzel. *J. Phys. B: At. Mol Opt. Phys.*, **30**; 4463, (1997)
- [Sch99-03] P. Schneider. *Technische Zeichnungen Gastargetzellenblock und Gastargetzelleneinschub*. Feinmechanische Werkstatt des I. Physikalischen Instituts der JLU Giessen, (1999 bis 2003)
- [Sch01] K.-H. Schartner, B. Zimmermann, S. Kammer, S. Mickat, H. Schmoranzer, A. Ehresmann, H. Liebel, R. Follath, G. Reichardt. *Phys. Rev. A*, **64**; 040501-1, (2001)
- [Sch03] R.H. Schill, D. Hasselkamp, S. Kammer, S. Mickat, B. Zimmermann, K.-H. Schartner, A. Ehresmann, H. Schmoranzer, M. Schlüter, Yu.A. Schutov, B.M. Lagutin, V.L. Sukhorukov. *J. Phys. B: At. Mol Opt. Phys.*, **36/2**; L57, (2003)
- [Sta94] U. Staude. *Entwicklung und Anwendung eines modularen Programms zur zweidimensionalen Spektrenaufnahme und Spektrenanalyse*. **Diplomarbeit**, I. Physikalisches Institut der JLU Giessen, (1994)

- [Sta98] U. Staude. *Grazing – Inzidence – Präzisionsspektrometrie am Strahl schneller hochgeladener Ionen*. **Dissertation**, I. Physikalisches Institut der JLU Giessen, (1998)
- [Suk94] V.L. Sukhorukov, B.M. Lagutin, I.D. Petrov, H. Schmoranzer, A. Ehresmann, K.H. Schartner. *J. Phys. B: At. Mol Opt. Phys.*, **27**; 241, (1994)
- [Suk03] V.L. Sukhorukov. *Private Mitteilung*, (2003)
- [Wer72] L.O. Werme, T. Bergmark, K. Siegbahn. *Physica Scripta*, **6**; 141, (1972)
- [Wer93] A. Werner. *Spektroskopische Untersuchungen am Effusionsstrahl einer Stickstoff- und Sauerstoffgasentladung*. **Diplomarbeit**, I. Physikalisches Institut der JLU Giessen, (1993)
- [Wil89] A.A. Wills, A.A. Cafolla, F.J. Curell, J. Comer, A. Svensson, M.A. MacDonald. *J. Phys. B: At. Mol Opt. Phys.*, **22**; 3317, (1989)
- [Wil92] K. Wille. *Physik der Teilchenbeschleuniger und Synchrotronstrahlungsquellen*. **Lehrbuch**. Teubner Studienbücher, Stuttgart, (1992)
- [Wil94] M. Wildberger, A. Ehresmann, H. Schmoranzer, B. Möbus, B. Magel, K.-H. Schartner. *Phys. Lett. A*, **193**; 274, (1994)
- [Wil99] O. Wilhelmi. *Fluoreszenzspektroskopische Untersuchungen der Ionisation und Anregung von atomarem und molekularem Sauerstoff*. **Dissertation**, I. Physikalisches Institut der JLU Giessen, (1999)

- [Yen97] O. Yenen, K.W. McLaughlin, D.H. Jaecks.
Phys. Rev. Lett., **79/26**; 5222, (1997)
- [Yen01] O. Yenen, K.W. McLaughlin, D.H. Jaecks, M.M. Sant`Anna,
E.A. Seddon. *Phys. Rev. Lett.*, **86/6**; 979, (2001)
- [Zim98] B. Zimmermann. *Fluoreszenzspektroskopische Messungen der
photoneninduzierten $Ne^+ 2s^2 2p^4 3p(^2P)$ -Satellitenproduktion im
Bereich der Anregungsschwellen. Diplomarbeit,*
I. Physikalisches Institut der JLU Giessen, (1998)
- [Zim03] B. Zimmermann. *Dynamische Prozesse bei der photoneninduzierten
 Ne^+ -Satellitenproduktion: Direkte Besetzung und Autoionisation
doppelt angeregter Zustände. Dissertation,* I. Physikalisches Institut
der JLU Giessen, (2003)

Danksagung

Die vorliegende Arbeit wurde in der Arbeitsgruppe Plasma- und Atomstoßphysik des I. Physikalischen Instituts der Justus Liebig Universität Giessen und bei der Berliner Elektronenspeicherring – Gesellschaft für Synchrotronstrahlung mbH (BESSY) angefertigt.

An erster Stelle möchte ich Herrn Prof. Dr. K.-H. Schartner danken. Er hat mich in seine Arbeitsgruppe aufgenommen und mich zu dieser Arbeit ermutigt. Sein stetiges Interesse an den behandelten Themen und die hilfreiche Unterstützung in allen Belangen des Projektes machten es mir möglich diese Arbeit anzufertigen und die Ergebnisse international zu präsentieren.

Ohne die restlichen Mitglieder der Arbeitsgruppe wäre diese Arbeit auch nie zustande gekommen. Deshalb möchte ich allen Danken, die in unserer Arbeitsgruppe ein so gutes Arbeitsklima verbreitet haben. Im speziellen geht mein Dank zuerst an Herrn Dipl. Phys. Sascha Mickat, der mit seinem unermüdlichen Einsatz geholfen hat wirklich jede Messzeit bei BESSY zum Erfolg zu bringen. Natürlich haben in gleichem Maße Herr Dipl. Phys. Rüdiger Schill und Herr Dr. Bernd Zimmermann zu dem Erfolg beigetragen. Erwähnen möchte ich auch noch Herrn Dr. Oliver Wilhelmi und Herrn Dipl. Phys. Uwe Bursik, die mich in der Anfangsphase sehr unterstützt haben und mein Interesse für dieses Projekt verstärkt haben.

Ich möchte ganz herzlich auch allen Mitgliedern der Arbeitsgruppe Prof. Dr. H. Schmoranz (Universität Kaiserslautern) für die freundliche Unterstützung während der Messzeiten danken. Besonders erwähnen möchte ich in diesem Zusammenhang Herrn Priv. Doz. Arno Ehresmann, der mich mit Rat und Tat bei der Weiterentwicklung des Projekts unterstützt hat.

Unserem Techniker Günther Trylat möchte ich für seine Unterstützung in Konstruktionsfragen und der wirklich umfassenden Betreuung während der Aufbauphasen bei BESSY danken.

Den Leitern der Werkstätten Herrn H. Hausner und T. Nimmerfroh und Ihren Mitarbeitern sei für die jederzeit zuverlässige Abwicklung der technischen Aufträge gedankt. Ganz besonders möchte ich Herrn Peter Schneider erwähnen, ohne den die kniffligen Targetzellenkonstruktionen unmöglich gewesen wären.

Mein Dank gilt der gesamten BESSY – Belegschaft, die zuverlässige und angenehme Experimentierbedingungen über die gesamten Messphasen geschaffen haben.

Bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft möchte ich mich für die finanzielle Unterstützung, sowie bei der Firma Vakuumschmelze Hanau für das zur Verfügung gestellte Material bedanken.

Zum Schluss geht natürlich ein besonderer Dank an meine Eltern, meinen Bruder und vor allem an meine Freundin Nadja, die mich immer unterstützt haben und mir den Rückhalt gegeben haben, den man für eine solche Arbeit braucht.

