

# Fluoreszenzspektroskopie an K-Schalen-Übergängen hochgeladener Eisenionen

## Inaugural-Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades  
der Naturwissenschaftlichen Fakultät  
der Justus-Liebig-Universität Gießen

vorgelegt beim

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

von

Dipl.-Phys. Jan Rudolph  
aus Göttingen

Institut für Atom- und Molekülphysik  
Universität Gießen  
2013



## Kurzzusammenfassung:

Röntgenemissionslinien von K-Schalen-Übergängen in Eisenionen sind weit verbreitet in beobachteten Spektren astrophysikalischer Objekte. Sie haben ihren Ursprung in Stoßanregung in thermischen Plasmen sowie Absorption oder Streuung von Röntgenstrahlung durch Materie der Umgebung. Hohe Übergangsraten und die große relative Häufigkeit von Eisen ergeben starke Emissionslinien. Diese  $K_\alpha$ -Signaturen liefern verschiedene Informationen über die Dynamik der beobachteten Objekte. Auch die geringe intergalaktische Absorption für elektromagnetische Strahlung in dem hier interessanten Energiebereich von 6 keV bis 7 keV begünstigt die Signalqualität.

Erstmals konnten in der vorliegenden Arbeit unter Laborbedingungen K-Schalen-Übergänge in Eisenionen mit Röntgenphotonen angeregt und deren Fluoreszenzspektrum aufgenommen werden. Unter Verwendung einer Elektronenstrahlionenfalle wurden die untersuchten fluorartigen bis heliumartigen Eisenionen erzeugt. Mit monochromatisierten Röntgenstrahlen der brillanten Synchrotronstrahlungsquelle *PETRA III* gelang es,  $1s$ -Elektronen aus dem Grundzustand direkt in ein  $np$ -Niveau mit  $2 \leq n \leq 7$  anzuregen. Die Übergangsenergien konnten mit einer relativen Genauigkeit von rund 10 ppm bestimmt werden. Kalibriert wurde die Energieskala durch Vermessung mehrerer Absorptionskanten. Es ist ebenfalls gelungen, die natürliche Linienbreite der verschiedenen Übergänge aus den aufgenommenen Linienprofilen zu bestimmen.

## Abstract:

X-ray emission lines of K-shell transitions in iron ions prevail in observed spectra of astrophysical objects. They originate from impact excitation in thermal plasmas as well as from absorption and reflection of X-rays by the surrounding matter. Their high transition rates and the relatively high abundance of iron yield strong emission lines. Iron  $K_\alpha$  signatures are thus very good to obtain information about the dynamics of the observed objects. Low intergalactic absorption of electromagnetic radiation in the energy region of interest from 6 keV to 7 keV enhance the signal quality.

In this work for the first time K-shell transitions in iron ions were excited by X-ray photons and the corresponding fluorescence spectrum was recorded. Fluorinelike to heliumlike iron ions were produced using an electron beam ion trap. With monochromatized X-rays produced by the brilliant synchrotron light source *PETRA III* a ground state  $1s$ -electron could be successfully excited to a  $np$ -state for  $2 \leq n \leq 7$ . Transition energies were determined with a relative accuracy of approximately 10 ppm. The energy scale was calibrated by absorption edge measurements. In addition the natural line widths of different transitions were successfully derived from measured line profiles.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>7</b>
<b>2</b>	<b>Physikalische Grundlagen</b>	<b>11</b>
2.1	Atome und Ionen . . . . .	11
2.1.1	Ein-Elektron-Systeme . . . . .	11
2.1.2	Mehr-Elektronen-Systeme . . . . .	12
2.1.3	Konfigurationswechselwirkung . . . . .	13
2.1.4	Störungstheorie . . . . .	14
2.2	Wechselwirkung elektromagnetischer Strahlung mit atomaren Systemen . . . . .	14
2.2.1	Absorption . . . . .	15
2.2.2	Emission . . . . .	15
2.2.3	Auswahlregeln . . . . .	15
2.2.4	Linienbreite . . . . .	17
2.2.5	Augerzerfall . . . . .	19
2.2.6	Lebensdauer angeregter Zustände . . . . .	19
2.3	Winkelverteilung linear polarisierter Fluoreszenz . . . . .	20
2.4	Röntgenstrahlung . . . . .	21
2.4.1	Bremsstrahlung . . . . .	22
2.4.2	Charakteristische Strahlung . . . . .	23
2.4.3	Röntgenbeugung am Silizium-Einkristall . . . . .	24
2.4.4	Absorption und Streuung . . . . .	27
2.5	Synchrotronstrahlung . . . . .	27
2.5.1	Emittierte Strahlung einer beschleunigten Ladung . . . . .	28
2.5.2	Undulatorstrahlung . . . . .	29
2.6	Elektronenstrahlionenfallen . . . . .	32
2.6.1	Funktionsweise einer EBIT . . . . .	32
2.6.2	Wechselwirkung des Elektronenstrahls mit der Ionenwolke . . . . .	34
2.6.3	Ladungszustandsverteilung . . . . .	36

<b>3</b>	<b>Experiment</b>	<b>37</b>
3.1	FLASH-EBIT . . . . .	37
3.1.1	Elektronenstrahl . . . . .	37
3.1.2	Fallenkonstruktion und Magnetfeld . . . . .	39
3.1.3	Überlapp von Ionenwolke und Photonenstrahl . . . . .	40
3.1.4	Photonendetektoren . . . . .	41
3.1.5	Ionenextraktion . . . . .	43
3.1.6	Bau eines magnetisch geschirmten Ablenkens . . . . .	43
3.2	Die Synchrotronstrahlungsquelle <i>PETRA III</i> . . . . .	48
3.2.1	Betriebsparameter . . . . .	48
3.2.2	Strahlrohr P01 . . . . .	49
3.3	Messschema . . . . .	55
3.4	Datenaufnahme . . . . .	56
3.4.1	Detektorsignale . . . . .	57
3.4.2	Weitere Parameter . . . . .	57
3.4.3	<i>PETRA III</i> Datenaufnahme . . . . .	59
3.5	Datenanalyse . . . . .	59
3.5.1	Zuordnung der <i>MPA</i> - und <i>PETRA III</i> Logdaten . . . . .	59
3.5.2	Vereinfachung der <i>MPA</i> -Ereignislisten . . . . .	59
3.5.3	Vorabanalyse . . . . .	60
3.5.4	Nichtberücksichtigung von Daten während eines Dumps . . . . .	61
3.5.5	Trennung der Einzeldurchläufe . . . . .	63
3.5.6	Normierung des Fluoreszenzsignals . . . . .	63
3.5.7	Unterschiede der Analyse in 2011 . . . . .	64
3.5.8	Absolute Energiekalibrierung . . . . .	65
3.5.9	Fehlerrechnung . . . . .	69
<b>4</b>	<b>Ergebnisse</b>	<b>73</b>
4.1	$K_\alpha$ (1s-2p) Übergänge . . . . .	73
4.1.1	Messung 2011 . . . . .	73
4.1.2	Messung 2012 . . . . .	80
4.2	$K_\beta$ (1s-3p) Übergänge . . . . .	91
4.3	1s-np Übergänge in $\text{Fe}^{24+}$ ( $4 \leq n \leq 7$ ) . . . . .	97
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>103</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>106</b>

# 1 Einleitung

Das Universum, unendliche Weiten mit einer mittleren Dichte unterhalb von  $10^{-30}$  kg/m<sup>3</sup>, enthält eine unvorstellbar große Menge baryonischer Materie, die sich in astronomischen Objekten, wie Sternen oder aktiven galaktischen Kernen, als sichtbare Materie wiederfindet. Bei den dort vorherrschenden Temperaturen von mehreren Millionen Kelvin liegt die Materie dabei vornehmlich in einem ionisierten Zustand vor. Ionen mit wenigen gebundenen Elektronen oder gar „nackte“ Kerne sind keine Seltenheit und von großer Bedeutung für die Beschreibung und das Verständnis astrophysikalischer Plasmen.

Die aufschlussreichste Möglichkeit, Informationen über weit entfernte astronomische Objekte zu sammeln, ist die Beobachtung und Aufnahme von Emissions- und Absorptionsspektren. Mit erdgebundenen Teleskopen können spektroskopische Beobachtungen nur für den optischen und Radiowellenbereich erfolgen. Die absorbierende Wirkung der Erdatmosphäre auf einen Großteil des elektromagnetischen Spektrums verhindert terrestrische Beobachtungen in anderen Wellenlängenbereichen. Erst Raketenmissionen erlaubten es, Röntgenspektren astronomischer Objekte aufzunehmen. Heutzutage werden Röntgen-Weltraumteleskope, wie ROSAT, XMM-Newton und Chandra auf Erdumlaufbahnen positioniert, die mit immer besserer Auflösung Röntgenspektren astrophysikalischer Quellen liefern [7] und damit zum besseren Verständnis unseres Universums beitragen.

Abstände der Energieniveaus in Ionen verschiedener Elemente skalieren etwa mit  $Z^2$ , der zweiten Potenz der Kernladungszahl, folglich bestimmen Emissionslinien der schweren Elemente das kurzwellige elektromagnetische Spektrum. Innerhalb unseres Sonnensystems ist Eisen das am häufigsten vorkommende der schweren Elemente [1]. Emissionslinien aus K-Schalen-Übergängen der Eisenionen zählen daher zu den wichtigsten Merkmalen astronomischer Röntgenspektren. Sie konnten erstmals im Jahr 1972 mit einer raketengestützten Beobachtung des Supernovaüberrests *Cassiopeia-A* entdeckt werden [6, 88].

Der Energietransport im Inneren von Sternen wie unserer Sonne wird zum Großteil durch Photonenstreuung geregelt. Prozesse wie Konvektion und Wärmeleitung spielen nur eine untergeordnete Rolle [25]. Bei hohen Temperaturen, wie sie in Sternen erreicht

werden, sind viele der leichten Elemente vollständig ionisiert und können ohne Hüllenelektronen nicht zur Photonenstreuung beitragen. Ionen schwerer Elemente bilden daher, trotz ihrer relativ geringen Anzahl, für den Energietransport in Sternen einen essenziellen Bestandteil. Kurze Lebensdauern der Übergänge hoher Energien, im Bereich von einigen fs sorgen für einen effektiven Energietransport durch Streuung der elektromagnetischen Strahlung an schweren Ionen. Trotz ihres geringen Anteils in der Sonne von etwa 0,1 % tragen Eisenionen so zu einem Großteil der Opazität der Sonne bei. Das heißt, die wenigen Eisenionen schirmen die Röntgenstrahlung aus dem Sonneninneren durch Streuung effektiv ab. Als Folge daraus vermindert sich erheblich der Wasserstoffverbrauch der Sonne, der notwendig ist um die Fusionsreaktion aufrechtzuerhalten. Dies verlängert die Lebensdauer unseres Zentralgestirns und schafft damit die Lebensbedingungen des gesamten Sonnensystems. Ohne Eisen wäre unser Leben folglich gar nicht möglich.

Nicht nur die thermisch angeregte Emission von Sternen trägt zum astronomischen Röntgenspektrum bei, auch durch den kontinuierlichen Hintergrund der Röntgenbremsstrahlung photonisch angeregte hochgeladene Ionen sind ein wichtiger Teil davon. Insbesondere gilt dies für *aktive galaktische Kerne* (englisch: *active galactic nuclei*, AGN), in deren Zentren sich massereiche schwarze Löcher befinden. Aus der beobachteten Röntgenabsorption lässt sich auf die Zusammensetzung von Gaswolken in der Umgebung solcher AGN schließen [47]. Wie *Wang et al.* [99] anhand von Emissionsspektren des zentralen Schwarzen Loches unserer Galaxie, *Sagittarius A* zeigten, lassen sich wichtige Einschränkungen der dynamischen Modelle solcher Objekte aus den Beobachtungen ableiten.

An Bord der für das Jahr 2015 geplanten ASTRO-H Mission [97] wird ein kalorimetrisches Röntgenspektrometer mit einer Auflösung von unter 7 eV im Bereich von 0,3 keV bis 12 keV detaillierte Spektren aufzeichnen [67]. Die einzelnen K-Schalen-Übergänge heliumartiger Ionen werden getrennt voneinander beobachtbar sein. Die nochmals verbesserte Auflösung bereitet den Weg zu weitergehendem Verständnis der astrophysikalischen Plasmen durch den Vergleich mit sehr genauen Referenzwerten. Atomare Daten, die experimentell gewonnen wurden oder auf Rechnungen zurück zu führen sind, bilden die Vergleichsgrundlage. Die Qualität der Rechnungen soll an ausgewählten Beispielen mit experimentellen Daten geprüft werden.

Um solche Ionen im Labor zu untersuchen wurden in den letzten Jahrzehnten verschiedene Verfahren entwickelt. Die Erzeugung erdgebundener Plasmen findet beispielsweise in Tokamaks und Elektronenstrahlionenfallen kurz EBIT (englisch: *electron beam ion trap*) statt. Mit der Analyse des elektromagnetischen Emissionsspektrums werden atomare Daten gewonnen. Insbesondere die Untersuchung der Eisen K-Linien hat Wissenschaftler zur Durchführung einer Vielzahl von Experimenten bewegt [9, 13, 15, 22, 23, 94]. Bisherige Messungen waren auf die Anregung der Übergänge durch Elektronenstoß im Fall eines

---

EBIT- oder Tokamak-Plasmas angewiesen.

Ziel dieser Arbeit ist es, analog zu den Prozessen in vielen beobachteten kosmischen Objekten, zum ersten Mal K-Schalen-Übergänge in Eisenionen mit Röntgenphotonen anzuregen und deren Fluoreszenz zu detektieren und analysieren. Eine Synchrotronstrahlungsquelle zur Erzeugung energiereicher Röntgenstrahlung im Bereich einiger keV ist mit der Fertigstellung von *PETRA III* vor wenigen Jahren geschaffen worden. Mit Hilfe dieser wissenschaftlichen Einrichtung wurde das Ziel dieser Arbeit erreicht. Erstmals konnten K-Schalen-Übergänge hochgeladener Eisenionen durch Röntgenphotonen von 6,4 keV bis 8,7 keV angeregt werden. Eine Elektronenstrahlionenfalle erzeugte das dafür notwendige Plasma hochgeladenen Eisens mittels Elektronenstoßionisation. Die Energie des Elektronenstrahls war so gewählt, dass sie unterhalb der Schwelle zur direkten Anregung der K-Schalen-Elektronen lag.

Die Energieskala des Fluoreszenzspektrums konnte mit Messungen sehr genau bekannter Absorptionskanten kalibriert werden. Absolute Linienenergien wurden für die stärksten  $K_{\alpha}$ -Übergänge fluorartiger bis heliumartiger Eisenionen mit bisher unerreichter Genauigkeit bestimmt. Mit dem Auflösungsvermögen von rund 30 000 des monochromatischen Photonenstrahls liegt die Unsicherheit der gemessenen Linienenergien bei rund 10 ppm [80]. Damit ist eine experimentelle Überprüfung der umfangreichen in der Literatur vorhandenen Vorhersagen möglich.

Die folgende Arbeit gibt zunächst einen kurzen Überblick über atomare Systeme und ihre Wechselwirkung mit Photonen und Elektronen. Ebenfalls werden weitere für das Experiment wichtige Grundlagen erläutert, bevor daran anschließend das Experiment selbst beschrieben wird. Dazu zählen eine Beschreibung der Experimentieranlagen, des Messschemas und der Datenaufnahme. Auf die Schilderung des Ablaufs der Datenanalyse werden in einem separaten Kapitel die Ergebnisse der Messungen präsentiert und mit anderen experimentellen Ergebnissen und theoretischen Vorhersagen verglichen. Abschließend wird nochmals eine kurze Zusammenfassung der Arbeit mit einem Ausblick gegeben.



## 2 Physikalische Grundlagen

### 2.1 Atome und Ionen

#### 2.1.1 Ein-Elektron-Systeme

In der Modellvorstellung *Niels Bohrs* laufen die Elektronen des Atoms auf Kreisbahnen um den gemeinsamen Schwerpunkt mit dem Kern [14]. Die daraus abgeleiteten quantisierten Energiezustände der Elektronen gelten insbesondere für das Wasserstoffatom und wasserstoffähnliche Ionen mit ebenfalls nur einem Elektron, aber größeren Kernladungen  $Z$ . Die Bindungsenergie des Elektrons auf einer Bahn mit der Quantenzahl  $n$  ist

$$E_n = -Ry \cdot \frac{Z^2}{n^2} \quad (2.1)$$

mit der Rydbergkonstanten  $Ry = 13,605\,692\,53\,(30)\text{ eV}$  [69]

Die Schrödinger-Gleichung ist die Grundgleichung der nicht-relativistischen Quantentheorie [84, 85, 86, 87]. Sie beruht auf dem statistischen Modell *Erwin Schrödingers*, das die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen mittels Wellenfunktionen  $\psi(\mathbf{r}, t)$  beschreibt.

$$H|\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle \quad (2.2)$$

Aus den Eigenwerten des Hamilton-Operators  $H$  wird die Energie  $E$  der Zustände  $|\psi\rangle$  berechnet. Der Hamilton-Operator  $H$  eines Teilchens der Masse  $m$  in einem zeitlich konstanten Potential  $V(\mathbf{r})$  lautet

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \quad (2.3)$$

mit dem Laplace-Operator  $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

und dem Planck'schen Wirkungsquantum  $\hbar = 6,582\,119\,28\,(15) \times 10^{-16}\text{ eV s}$  [69]

Ohne die Berücksichtigung des Elektronenspins sind die Energieniveaus  $n^2$ -fach entartet. Es treten Abweichungen experimenteller Befunde zu den Energietermen nach der Schrödinger-Gleichung auf. Diese können beispielsweise auf die relativistische Massenzu-

nahme des Elektrons im Coulombfeld des Kerns und der Wechselwirkung des Elektronenspins mit dem Bahndrehimpuls zurückgeführt werden. *Paul A. M. Dirac* erhielt aus der relativistischen Erweiterung der Schrödinger-Gleichung Korrekturterme der Energieniveaus. Diese sind nicht mehr in  $n$  entartet, bleiben es jedoch für den Bahndrehimpuls  $l$ . Lediglich der Gesamtdrehimpuls  $j$  des Elektrons und die Hauptquantenzahl  $n$  haben Einfluss auf den berechneten Energiewert [28].

$$E_{n,j} = E_n \cdot \left[ 1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{n} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right] \quad (2.4)$$

mit der Sommerfeld'schen Feinstrukturkonstanten  $\alpha = 7,297\,352\,569\,8(24) \times 10^{-3}$  [69].

Zur korrekten Beschreibung eines Atoms muss, wie es in der Quantenelektrodynamik (QED) geschieht, zusätzlich die Wechselwirkung des Atoms mit dem elektromagnetischen Strahlungsfeld berücksichtigt werden [68]. Absorption und Emission von Strahlung, auch sogenannter virtueller Photonen, bewirken eine kleine Verschiebung der Energierterme. Diese ist abhängig von der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons im Kern und somit von den Quantenzahlen  $n$  und  $l$ . Experimentell belegt ist diese Verschiebung durch Messungen von *Willis E. Lamb* und *Robert C. Retherford* [60] und wird heutzutage auch als Lamb-Verschiebung bezeichnet.

## 2.1.2 Mehr-Elektronen-Systeme

Die Behandlung atomarer Systeme mit zwei oder mehr Elektronen ist analytisch nicht mehr exakt lösbar. Die Wechselwirkung der Elektronen untereinander ist nicht kugelsymmetrisch, daher erfordert die Lösung des Problems ein Näherungsverfahren. Mögliche Ansätze sind hier eine sehr aufwendige numerische Lösung der exakten Schrödinger-Gleichung oder die Annahme eines vereinfachten Atommodells.

### 2.1.2.1 Hartree-Fock Methode

Der im Wasserstoffatom betrachtete Fall des Zentralpotentials des Atomkerns wird um einen Wechselwirkungsterm der Elektronen untereinander ergänzt. In diesem effektiven Zentralpotential bewegt sich das Elektron  $e_i$

$$V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (2.5)$$

Die Gesamtwellenfunktion  $\Psi$  des Systems mit  $N$  Elektronen wird aus Produkten von Einzelteilchen-Wellenfunktionen  $\psi$  gebildet. Um dem Pauli-Prinzip gerecht zu werden, muss es

sich um eine gegenüber Teilchenaustausch antisymmetrische Mehrteilchenwellenfunktion handeln. Der Einfachheit halber wird diese meist in der Form einer Slater-Determinante geschrieben.

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\mathbf{r}_1) & \cdots & \psi_1(\mathbf{r}_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_N(\mathbf{r}_1) & \cdots & \psi_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix} \quad (2.6)$$

In einem numerischen Iterationsverfahren wird die Schrödinger-Gleichung gelöst und versucht die Energie des Systems zu minimieren und so den optimalen Satz von Ein-Teilchen-Wellenfunktionen zu finden. In jedem Iterationsschritt wird das mittlere Potential in dem sich die Elektronen bewegen neu berechnet und als Anpassung des nächsten Schritts verwendet. Die Hartree-Fock Methode erlaubt die Abschätzung der oberen Grenze der Grundzustandsenergie des Systems aus einem selbstkonsistenten Variationsverfahren heraus. Berücksichtigt werden sowohl die effektive Anziehung der Elektronen mit parallelem Spin, als auch die Coulombabstoßung aller Elektronen.

Für schwere Atome und Ionen spielen relativistische Effekte eine zunehmend größere Rolle. Entsprechend dem Ein-Elektron-System, muss hier ebenfalls der Schritt über die Lösung Dirac-Gleichung gegangen werden. Man spricht vom Dirac-Fock-Verfahren. Eine ausführliche Beschreibung beider Methoden ist beispielsweise in [12, 37, 40] nachzulesen.

### 2.1.3 Konfigurationswechselwirkung

Um Korrelationen zwischen den Elektronen der Atome und Ionen zu erfassen muss ein abgewandelter Ansatz gewählt werden. Die Gesamtwellenfunktion wird fortan als Summe von  $N_S$  Slater-Determinanten  $\Psi_\nu$  dargestellt, die verschiedene  $N$ -Elektronen-Konfigurationen umfassen kann [37].

$$\Psi = \sum_{\nu=1}^{N_S} c_\nu \Psi_\nu \quad (2.7)$$

Mit der *Configuration Interaction* Methode (CI) werden nun die Mischungskoeffizienten  $c_\nu$  variiert bis der Erwartungswert der Energie minimal ist.

Erweitert man das Hartree-Fock und Dirac-Fock Verfahren um die Konfigurationswechselwirkung, führt dies zum sogenannten *Multi-Configuration-Hartree-Fock* (MCHF) beziehungsweise *Multi-Configuration-Dirac-Fock* (MCDF) Verfahren. Variationsparameter sind bei diesen beiden Verfahren sowohl die Mischungskoeffizienten  $c_\nu$  als auch die Ein-Teilchen-Wellenfunktionen. Bei Berücksichtigung ausreichend vieler Terme der Summe (2.7), kann mit diesen Verfahren prinzipiell eine beliebig gute Näherung des exakten Werts erreicht werden [37].

### 2.1.4 Störungstheorie

Einen anderen Ansatz verfolgen störungstheoretische Verfahren. Der Mehr-Teilchen Hamilton-Dirac-Operator wird als Summe der Ein-Teilchen Wechselwirkungen  $H_0$  mit einem zusätzlichen kleinen Störungsterm  $\lambda V$  dargestellt.

$$H = H_0 + \lambda V \quad (2.8)$$

Dabei ist das Spektrum der bekannten Ein-Teilchen Wechselwirkungen  $H_0$  und deren Eigenzustände  $|\psi_n^{(0)}\rangle$  bekannt. Mit einer Reihenentwicklung in Potenzen des Parameters  $\lambda$  werden die Eigenzustände  $|\psi_n\rangle$  von  $H$  genähert. Gleiches gilt für die Eigenwerte  $E_n$  [37]. Die Reihe beginnt jeweils mit den ungestörten Termen  $|\psi_n^{(0)}\rangle$  beziehungsweise  $E_n^{(0)}$ . Wird mit diesem Ansatz die stationäre Schrödinger-Gleichung gelöst, so erhält man folgende Änderungen der Wellenfunktion in erster Ordnung

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^{(0)} | \lambda V | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (2.9)$$

Iterativ werden die Eigenzustände und Energieeigenwerte des durch  $H$  beschriebenen Systems bestimmt, sofern es zur Konvergenz der Reihenentwicklung kommt.

Mit dem störungstheoretischen Ansatz werden Viel-Teilchen Systeme beispielsweise mit der Methode der relativistischen Viel-Teilchen Störungstheorie (engl.: *relativistic many body perturbation theory*, *RMBPT*) oder Quantenelektrodynamik gebundener Zustände (engl.: *bound state quantum electrodynamics*, *BSQED*) bestimmt. Eine ausführliche Diskussion dieser Verfahren und der Beschreibung der verschiedenen Störterme ist von [68, 82] geführt worden.

## 2.2 Wechselwirkung elektromagnetischer Strahlung mit atomaren Systemen

Nicht die Atome als Ganzes haben eine Wechselwirkung mit dem Strahlungsfeld, sondern die Hüllenelektronen mit einzelnen Photonen. Die Wechselwirkung des Atoms mit dem elektromagnetischen Feld bewirkt zeitabhängige Übergänge zwischen verschiedenen Eigenzuständen des stationären Hamiltonoperators. Mittels zeitabhängiger Störungstheorie können diese Übergänge beschrieben werden, wenn die elektromagnetische Wechselwirkung  $W$  als kleine Störung angenommen werden kann [37]. Die Übergangswahrscheinlichkeit vom Anfangszustand  $\psi_i$  in einen Endzustand  $\psi_k$  ist nach erster Ordnung zeitabhängiger Störungstheorie durch folgenden Ausdruck gegeben, der auch als *Fermi's Goldene*

Regel bekannt ist.

$$W_{i \rightarrow k} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_i | V | \psi_k \rangle|^2 \rho_k \quad (2.10)$$

Dabei ist  $\rho_k$  die Dichte der Endzustände.

Die folgende Behandlung der Wechselwirkungsprozesse gilt gleichermaßen für Atome und Ionen. Strukturierung und inhaltliche Gestaltung dieses Abschnitts orientieren sich an den Werken zur Atomphysik von *Wolfgang Demtröder* [24] und *Hermann Haken, Hans Christian Wolf* [43].

### 2.2.1 Absorption

Die Absorption eines Photons durch ein Atom überführt dieses aus dem Zustand  $i$  in einen angeregten Zustand  $k$  höherer Energie. Dabei wird ein Elektron einer besetzten Schale in eine nicht vollständig besetzte oder unbesetzte Schale angeregt. Das absorbierte Photon muss genau die Energie  $E_\gamma = h \cdot \nu_{ik}$  tragen, die der Differenz der beteiligten Energieniveaus  $E_i$  und  $E_k$  entspricht.

$$E_\gamma = \Delta E = E_k - E_i \quad (2.11)$$

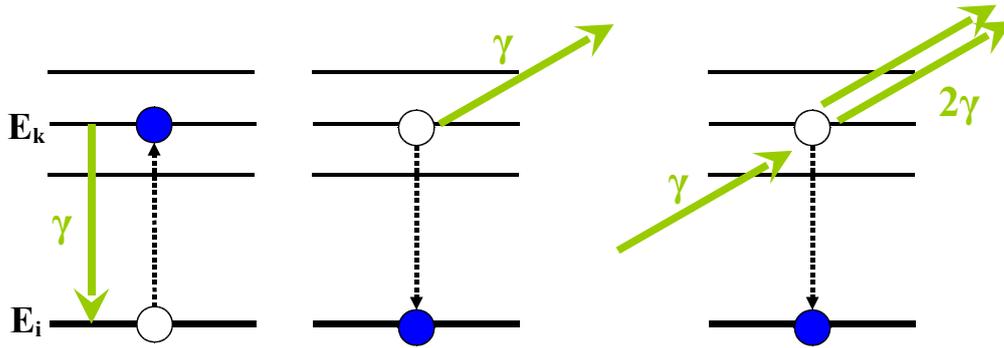
### 2.2.2 Emission

Der angeregte Zustand eines Atoms ist in der Regel nicht stabil. Durch spontane Emission eines Photons der Energie  $E_\gamma = E_k - E_i$  kann das Atom in einen Zustand niedrigerer Energie  $E_i$  übergehen, dies wird als Fluoreszenz bezeichnet. Die Abregung kann direkt oder über Zwischenniveaus in den Grundzustand führen.  $R_{\text{em}}$  ist die Rate der spontanen Emission des Zustands  $k$ . Sie gibt an, wie viele Zerfälle des Zustands im statistischen Mittel pro Sekunde unter Abstrahlung eines Photons stattfinden.

Der Vollständigkeit halber sei erwähnt, dass neben der spontanen Emission auch eine induzierte Emission möglich ist. Ein Photon mit der Energie  $E_\gamma = E_k - E_i$  stimuliert ein angeregtes Atom im Zustand  $E_k$ , durch Emission eines Photons in den niedrigeren Zustand  $E_i$  überzugehen. Die Emissionsrichtung wird dabei durch die Richtung des stimulierenden Photons vorgegeben.

### 2.2.3 Auswahlregeln

Bei der Emission und Absorption von elektromagnetischer Dipolstrahlung ist nicht allein die Erhaltung der Energie, Gleichung (2.11) von Bedeutung, sondern auch der Drehimpuls ist eine Erhaltungsgröße. Daraus ergeben sich Auswahlregeln (2.12), die für einen dipol-erlaubten Übergang erfüllt sein müssen. Elektrische und magnetische Multipolstrahlung



**Abb. 2.1:** Absorption, spontane und induzierte Emission eines Photons  $\gamma$  in einem atomaren System mit Energiezuständen  $E_i$  und  $E_k$ .

höherer Ordnungen ist gegenüber der elektrischen Dipolstrahlung um mehrere Größenordnungen unterdrückt, und kommt daher nur dort zum Tragen, wo elektrische Dipolübergänge verboten sind.

Ist das Dipolstrahlungsfeld mit Ausbreitungsrichtung entlang der  $z$ -Achse zirkular polarisiert, so ist der Drehimpuls des Photons  $+\hbar$  ( $\sigma^+$ -Strahlung) oder  $-\hbar$  ( $\sigma^-$ -Strahlung). Wird ein solches Photon absorbiert, ändert sich die Drehimpulskomponente des Atoms in  $z$ -Richtung um  $\Delta M = \pm\hbar$ . Eine Überlagerung links und rechts zirkular polarisierter Strahlung führt zu einer linearen Polarisation ( $\pi$ -Strahlung). Dementsprechend erwartet man, dass die Drehimpulskomponente in  $z$ -Richtung des Photons verschwindet. Bei Absorption eines  $\pi$ -Photons ändert sich die Projektion des Drehimpulses auf die  $z$ -Achse nicht,  $\Delta M = 0$ .

$$\Delta M_L = \begin{cases} 0, & \text{linear polarisiertes Licht} \\ \pm 1, & \sigma^\pm \text{ zirkular polarisiertes Licht} \end{cases} \quad (2.12a)$$

Generell trägt das Photon den Drehimpuls  $\pm\hbar$ . Die Drehimpulsquantenzahl  $L$  des Atoms ändert sich um  $\Delta L = \pm 1$ , wenn es ein Photon absorbiert oder emittiert, damit der Drehimpuls des Systems erhalten bleibt.

$$\Delta L = \pm 1 \quad (2.12b)$$

Eine weitere Auswahlregel besagt, dass Übergänge zwischen Zuständen unterschiedlichen Gesamtspins nicht erlaubt sind

$$\Delta S = 0 \quad (2.12c)$$

Man spricht vom „Interkombinationsverbot“ zwischen Zuständen verschiedener Multi-

plettsysteme. Der Spin des Elektrons kann beim Übergang nicht umklappen. Das Interkombinationsverbot gilt bei schwacher Spin-Bahn-Kopplung. Mit steigender Masse der Atome nimmt die Spin-Bahn-Kopplung zu und der Gesamtspin  $S$  ist keine gute Quantenzahl mehr. Es können in dem Fall Übergänge geringer Intensität zwischen verschiedenen Multiplettsystemen auftreten. Ebenso gilt Auswahlregel (2.12b) nicht streng. Übergänge mit  $\Delta L = 0$  sind möglich, sie sind jedoch üblicherweise stark unterdrückt.

Nach Auswahlregel (2.12c) bleibt der Betrag des Gesamtspins erhalten, seine Orientierung relativ zum Bahndrehimpuls kann sich jedoch ändern. Es gibt  $2S + 1$  Einstellmöglichkeiten des Spins. Für den Gesamtdrehimpuls  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$  beziehungsweise eine Änderung der Gesamtdrehimpulsquantenzahl folgt daraus die Auswahlregel

$$\Delta J = 0, \pm 1 \quad (J = 0 \nrightarrow J = 0) \quad (2.12d)$$

mit der Einschränkung, dass kein Übergang zwischen zwei Zuständen mit Gesamtdrehimpulsquantenzahl  $J = 0$  möglich ist. Die Drehimpulsänderung  $\Delta L = \pm 1$  kann durch eine entgegengesetzte Änderung der magnetischen Quantenzahl des Spins  $\Delta m_s = \mp 1$  aufgehoben werden. Aus den erlaubten Werten für  $J$

$$|L - S| \leq J \leq L + S \quad (2.13)$$

folgt, dass für  $J = 0$  gilt  $L = S$ . Dies kann nicht in Anfangs- und Endzustand, unter Einhaltung der Auswahlregeln (2.12b, 2.12c) erfüllt sein.

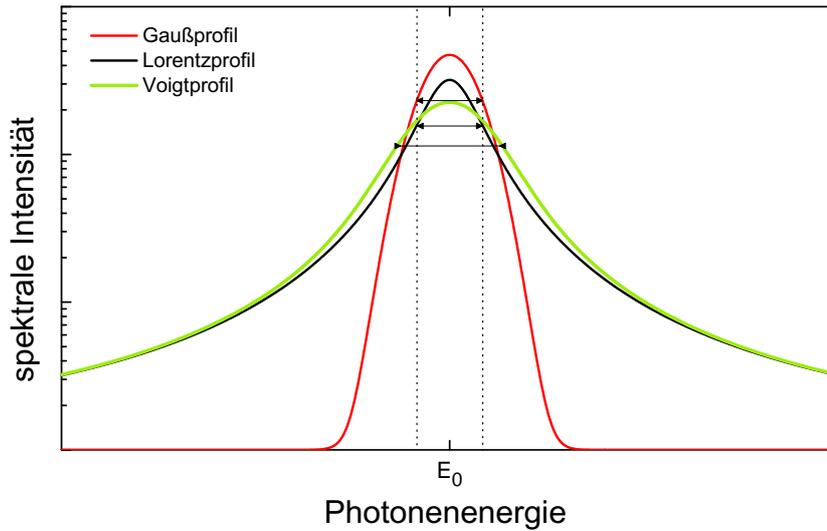
## 2.2.4 Linienbreite

Die betrachteten Übergänge, bei denen elektromagnetische Strahlung emittiert oder absorbiert wird, sind nicht exakt auf die angenommene Übergangsenergie  $E_\gamma = E_k - E_i = h \cdot \nu_{ik}$  beschränkt. Vielmehr bildet sich eine Intensitätsverteilung  $I(\nu)$  um die Mittenfrequenz  $\nu_0 = \nu_{ik}$ . Die Halbwertsbreite der Verteilung beschreibt den Frequenzbereich innerhalb dessen die Intensität der Strahlung auf die Hälfte des Maximums  $I_0$  abgefallen ist.

### 2.2.4.1 Natürliche Linienbreite

Die am Übergang beteiligten Niveaus haben nach der Heisenberg'schen Unschärferelation eine endliche Breite, die an die Lebensdauer der angeregten Zustände gekoppelt ist,  $\delta E = \hbar/\tau$  [45]. Daraus folgt für einen Übergang zwischen zwei Zuständen  $E_i$  und  $E_k$  eine Breite der Spektrallinie von

$$\delta E_n = \hbar \left( \frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_k} \right) \quad (2.14)$$



**Abb. 2.2:** Lorentzprofil und Gaußprofil gleicher Halbwertsbreite auf konstantem Untergrund im Vergleich. Die logarithmische Darstellung verdeutlicht die Unterschiede beider Verteilungen. Die Linienflügel des Lorentzprofils laufen weit aus, während das Gaußprofil bereits bei einem Abstand der doppelten Halbwertsbreite von der Mittenenergie um mehr als eine Größenordnung stärker abgefallen ist. Das Voigtprofil zeigt die Faltung beider Verteilungen.

Man spricht von der natürlichen Linienbreite  $\delta E_n$ . Das Linienprofil wird in diesem Fall mit einer Lorentzfunktion beschrieben, siehe Abbildung 2.2.

$$I = \frac{I_0}{2\pi} \cdot \frac{\delta E_n}{(E - E_0)^2 + (\frac{1}{2} \cdot \delta E_n)^2} \quad (2.15)$$

#### 2.2.4.2 Dopplerbreite

Durch thermische Bewegungen der Atome wird die Spektrallinie zusätzlich verbreitert. Der Dopplereffekt bewirkt, dass die beobachtete emittierte Strahlung frequenzverschoben ist. Im thermischen Gleichgewicht sind diese Verschiebungen normal verteilt und man erhält zur Beschreibung der dopplerverbreiterten Linie ein Gaußprofil, siehe Abbildung 2.2.

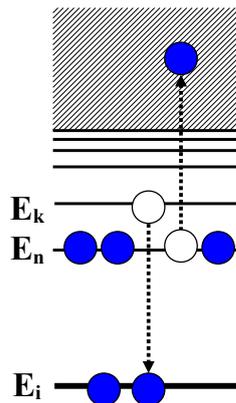
$$I = I_0 \cdot \exp \left[ -4 \ln 2 \cdot \frac{(E - E_0)^2}{\delta E_D^2} \right] \quad (2.16)$$

Die Dopplerbreite  $\delta E_D$  für Atome der Masse  $m$  ist allein von der Temperatur  $T$  des Ensembles abhängig.

$$\delta E_D = \frac{E_0}{c} \cdot \sqrt{\frac{8k_B T \cdot \ln 2}{m}} \quad (2.17)$$

### 2.2.5 Augerzerfall

Ein angeregter Zustand kann nicht nur durch spontane oder induzierte Emission eines Photons zerfallen. Wird ein Loch in einer der inneren Schalen durch ein Elektron gefüllt, so kann es seine Energie ebenfalls direkt an ein benachbartes Hüllenelektron übertragen, welches in einen Kontinuumszustand angeregt wird. Bedingung hierfür ist ein ausreichend großer Energieübertrag, um die Ionisationsschwelle zu überwinden. Abbildung 2.3 zeigt ein Schema dieses Autoionisationsprozesses.



**Abb. 2.3:** Schema des Augerzerfalls. Im angeregten atomaren System wird das Loch im Zustand  $E_i$  durch ein Elektron aus dem Zustand  $E_k$  gefüllt. Die Energie des Elektrons überträgt sich auf ein benachbartes Elektron in Zustand  $E_n$  welches daraufhin ionisiert wird.

### 2.2.6 Lebensdauer angeregter Zustände

Ein angeregter Zustand  $E_k$  hat keine unendliche Lebensdauer, da er durch spontane Emission von Photonen (Abschnitt 2.2.2) in den Grundzustand zerfallen kann. Sind Innerschalenelektronen des atomaren Systems angeregt, kann zusätzlich durch den zuvor beschriebenen Augereffekt (Abschnitt 2.2.5), ein energetisch günstigerer Zustand erreicht werden. Beides sind konkurrierende Prozesse. Die Übergangsrate für spontane Emission  $R_{\text{em}}$  und den Augerzerfall  $R_{\text{Auger}}$  addieren sich zur Gesamtzerfallsrate  $R_k$  des Zustands.

$$R_k = R_{\text{em}} + R_{\text{Auger}} \quad (2.18)$$

Befinden sich mehrere Systeme eines Ensembles in dem angeregten Zustand  $E_k$ , so wird die zeitliche Änderung der Besetzungsdichte  $n_k(t)$ , mit dem Anfangswert  $n_0 = n_k(0)$ ,

durch einen exponentiellen Abfall beschrieben.

$$n_k(t) = n_k(0) \cdot e^{-R_k \cdot t} \quad (2.19)$$

Die Zeit, nach der die Besetzungsdichte auf den Wert  $n_0/e$  abgefallen ist, wird als mittlere Lebensdauer  $\tau_k$  des Zustands  $E_k$  bezeichnet. Wie sich leicht aus Gleichung (2.19) ableiten lässt, entspricht die mittlere Lebensdauer dem Inversen der Zerfallskonstante  $R_k$ .

$$\tau_k = R_k^{-1} = \frac{1}{R_{\text{em}} + R_{\text{Auger}}} \quad (2.20)$$

### 2.3 Winkelverteilung linear polarisierter Fluoreszenz

Mit unpolarisierter Strahlung angeregte atomare Systeme emittieren Fluoreszenzphotonen gleichberechtigt in alle Richtungen. Bei linear polarisierter einfallender Strahlung kann sich die Winkelverteilung der Fluoreszenz von einer isotropen Verteilung unterscheiden. Die Richtungsabhängigkeit der Abstrahlcharakteristik wird für einen Übergang durch den Gesamtdrehimpuls  $J$  der beteiligten Niveaus bestimmt. Wir betrachten einen Übergang zwischen dem Grundzustand  $\alpha_g$  mit dem Gesamtdrehimpuls  $J_g$  und einem angeregten Zustand  $\alpha_a$  mit  $J_a$  angeregt durch linear polarisierte Strahlung und der darauf folgenden Abregung in den Grundzustand.

$$|\alpha_g J_g\rangle + \gamma \rightarrow |\alpha_a J_a\rangle^* \rightarrow |\alpha_g J_g\rangle + \gamma \quad (2.21)$$

Die Winkelverteilung der emittierten Strahlung dieses Prozesses wird allgemein durch nachstehenden Ausdruck beschrieben. Dabei definiert die Bewegungsrichtung des einfallenden Photons die Quantisierungsachse (z-Achse). Mit der Polarisationsrichtung wird dann die x-z-Ebene festgelegt, relativ zu der, mit dem Winkel  $\phi$ , die Bewegungsrichtung des emittierten Photons beschrieben wird.

$$W(\theta, \phi) = \frac{\sigma_{g \rightarrow a \rightarrow g}}{4\pi} \left( 1 + \sum_{k=1}^{2J_a} \sum_{q=-k}^k \sqrt{\frac{4\pi}{2k+1}} Y_{kq}(\theta, \phi) A_{kq}(\alpha_a J_a) f_k(\alpha_a J_a, \alpha_g J_g) \right) \quad (2.22)$$

Der sogenannte Ausrichtungsparameter  $A_{kq}$  berücksichtigt die unterschiedliche Besetzung magnetischer Unterniveaus des angeregten Zustands, während der Parameter  $f_k$  die elektronische Struktur des Ions und die Wechselwirkung mit dem Strahlungsfeld berücksichtigt. Die Bestimmung der Parameter erfordert anspruchsvolle Berechnungen der Mehr-Teilchen-Systeme. Im Fall der Photoanregung durch linear polarisierte Strahlung wird die Bevölkerung der Niveaus durch die Parameter mit dem Grad  $k = 2$  und den

Projektionen  $q = 0, \pm 2$  bestimmt. Ist die einfallende elektromagnetische Welle zirkular polarisiert so sind nur die Parameter mit Grad  $k = 1$  und der Projektion  $q = 0$  verschieden von null. In beiden Fällen verschwinden alle Projektionen  $q = \pm 1$  [5].

Übergänge mit Gesamtdrehimpuls  $J_a = 1 \rightarrow J_g = 0$  und  $J_a = \frac{3}{2} \rightarrow J_g = \frac{1}{2}$  werden bei K-Schalen-Übergängen in heliumartigen und lithiumartigen Ionen beobachtet. In Tabelle 2.1 sind die Werte der Ausrichtungsparameter  $A_{kq}$  und Strukturparameter  $f_k$  für diese Fälle bei Anregung mit linear polarisierten Photonen aufgeführt [96].

	$A_{20}$	$A_{2\pm 2}$	$f_2$
$J = 1 \rightarrow 0$	$1/\sqrt{2}$	$-\sqrt{3}/2$	$1/\sqrt{2}$
$J = \frac{3}{2} \rightarrow \frac{1}{2}$	$1/2$	$-\sqrt{6}/4$	$1/2$

**Tabelle 2.1:** Ausrichtungs- und Strukturparameter für die Fälle  $J_a = 1 \rightarrow J_g = 0$  und  $J_a = \frac{3}{2} \rightarrow J_g = \frac{1}{2}$  [96].

Mit diesen Parametern erhält man aus Gleichung (2.22) folgende Winkelverteilungen der Fluoreszenzphotonen:

$$W(\theta, \phi) = \frac{\sigma_{g \rightarrow a \rightarrow g}}{4\pi} \cdot \left[ \frac{9}{8} + \frac{3}{8} \cos(2\theta) - \frac{3}{4} \cos(2\phi) \sin^2 \theta \right], \quad J = 1 \rightarrow 0 \quad (2.23)$$

$$W(\theta, \phi) = \frac{\sigma_{g \rightarrow a \rightarrow g}}{4\pi} \cdot \left[ \frac{7}{8} + \frac{3}{8} \cos^2 \theta - \frac{3}{8} \cos(2\phi) \sin^2 \theta \right], \quad J = \frac{3}{2} \rightarrow \frac{1}{2} \quad (2.24)$$

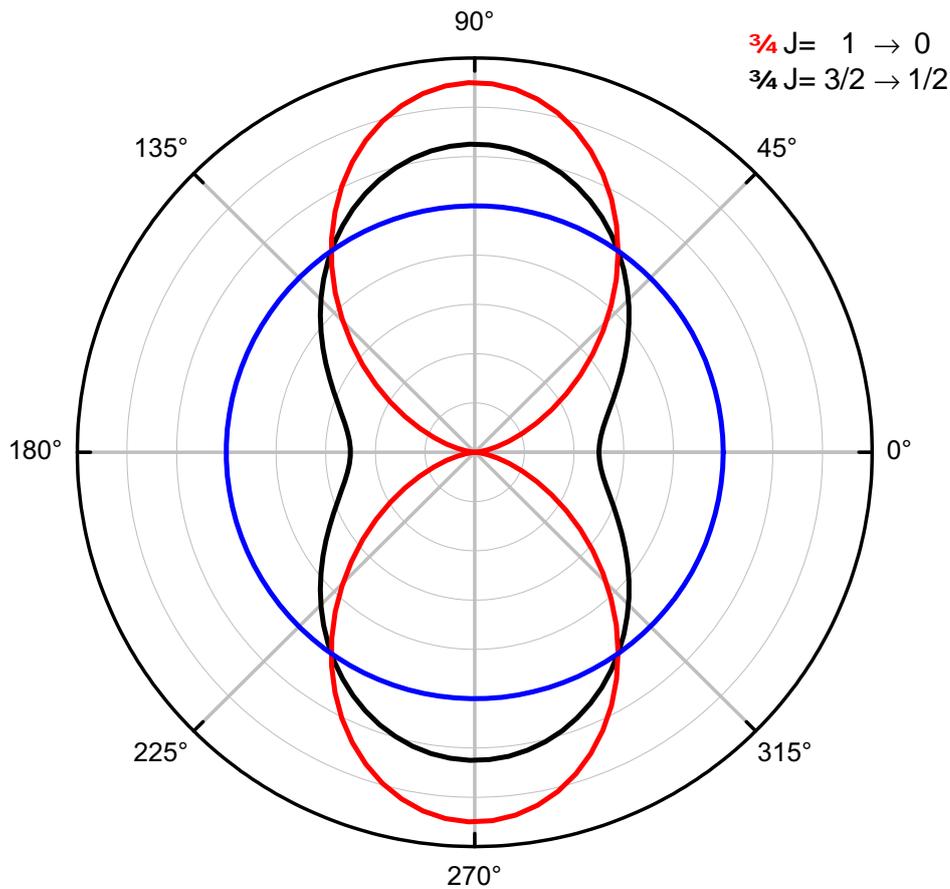
Beide Abstrahlcharakteristiken, sind in Abbildung 2.4 in der senkrecht zur Einfallsrichtung (z-Achse) verlaufenden x-y-Ebene ( $\theta = \frac{\pi}{2}$ ) gezeigt. Gleich starke Übergänge werden demnach je nach Beobachtungswinkel sehr unterschiedlich wahrgenommen. Einige Vergleichswerte hierzu sind in Tabelle 2.2 aufgeführt.

	$45^\circ$	$90^\circ$	$180^\circ$
$J = 1 \rightarrow 0$	$\frac{3}{4}$	$\frac{3}{2}$	0
$J = \frac{3}{2} \rightarrow \frac{1}{2}$	$\frac{7}{8}$	$\frac{5}{4}$	$\frac{1}{2}$

**Tabelle 2.2:** Abstrahlungsintensität relativ zur isotropen Abstrahlcharakteristik für verschiedene Winkel  $\phi$  bei  $\theta = \frac{\pi}{2}$ .

## 2.4 Röntgenstrahlung

Der Begriff Röntgenstrahlung beschreibt elektromagnetische Strahlung im Energiebereich von 0,1 keV bis 100 keV. Hierbei handelt es sich nicht um feste Grenzen. Der Übergang von



**Abb. 2.4:** Winkelverteilung der Fluoreszenz, in der x-y-Ebene, senkrecht zur Einfallsrichtung der linear polarisierten Photonen ( $\theta = \frac{\pi}{2}$ ). Die unterschiedlichen Verteilungen, isotrop (blau),  $J = 1 \rightarrow 0$  Übergang (rot) und  $J = \frac{3}{2} \rightarrow \frac{1}{2}$  Übergang (schwarz) sind jeweils für den gleichen Wirkungsquerschnitt  $\sigma_{g \rightarrow a \rightarrow g}$  abgebildet.

ultravioletter Strahlung in den Bereich „weicher“ Röntgenstrahlung ist fließend und wird in der Literatur oftmals sehr unterschiedlich gehandhabt. Man unterscheidet verschiedene Arten der Entstehung von Röntgenstrahlung.

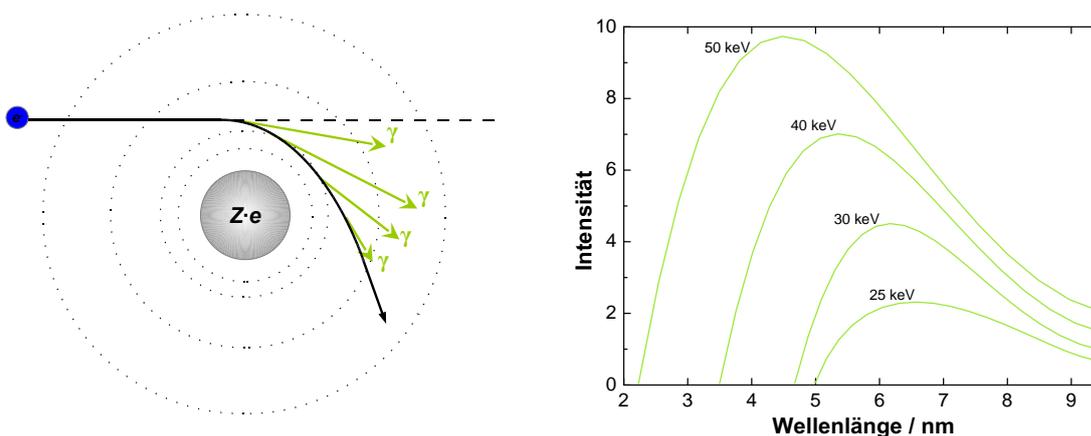
### 2.4.1 Bremsstrahlung

Werden energiereiche Elektronen in Materie abgebremst, entsteht die sogenannte Bremsstrahlung. Das Coulombfeld der Atomkerne lenkt die Elektronen von ihrer Flugbahn ab, dabei emittieren sie bei jedem Abbremsvorgang ein Photon. Wird das Elektron in einem Schritt vollständig abgebremst, so ist der Grenzfall erreicht, bei dem die Energie des Elektrons in Form eines einzelnen Photons  $h\nu_G$  abgestrahlt wird, siehe hierzu

Abbildung 2.5.

$$E_\gamma \leq h\nu_G = E_e \quad (2.25)$$

Das Bremsstrahlungsspektrum weist eine kontinuierliche Intensitätsverteilung auf, mit einer Grenze zu hohen Energien, die durch die Energie des abgebremsten Elektrons bestimmt ist.

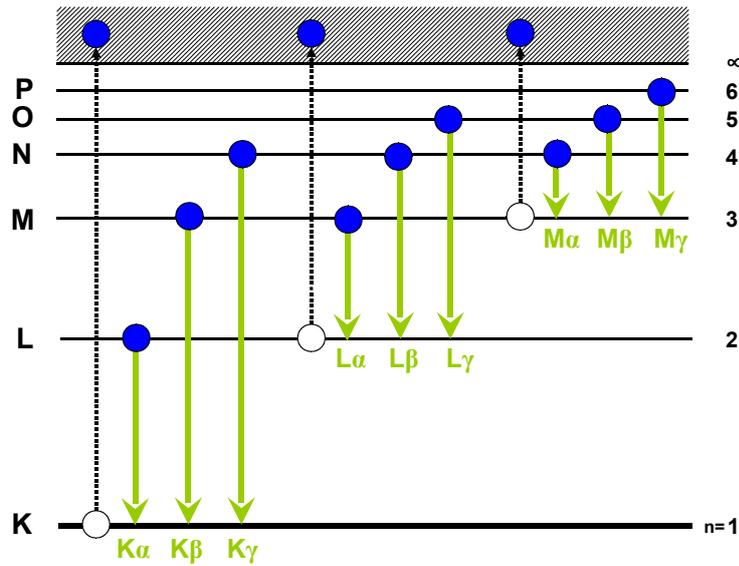


**Abb. 2.5:** Ablenkung eines freien Elektrons im Coulombfeld eines Atomkerns. Dabei wird das Elektron abgebremst, es gibt Energie in Form von Bremsstrahlung ab (links). Die Intensitätsverteilung der Bremsstrahlung für Elektronen verschiedener Energien, die in Wolfram abgebremst werden (rechts). Abbildungen nach [24].

### 2.4.2 Charakteristische Strahlung

Neben der Ablenkung im Coulombfeld der Atomkerne können energiereiche Elektronen, die auf Materie treffen, außerdem durch Stöße mit den Elektronen der Atome Energie abgeben. Bei solchen Stößen werden Elektronen aus den inneren Schalen in unbesetzte Niveaus angeregt oder sogar ionisiert, wenn die kinetische Energie des stoßenden Elektrons ausreichend hoch ist. Das entstandene Loch wird durch weiter außen liegende Elektronen gefüllt. Die dabei emittierten Fluoreszenzphotonen werden als charakteristische Röntgenstrahlung bezeichnet, da sie spezifisch für die Schalenstruktur des atomaren Systems sind.

Um die Bezeichnung einzelner Linien zu vereinfachen, hat man sie zu Klassen zusammengefasst, die nach der Schale, in der die Übergänge enden, benannt sind. Ein Index zeigt an, wie groß die Differenz der Hauptquantenzahlen der am Übergang beteiligten Zustände ist. Die Nummerierung folgt dem griechischen Alphabet, beginnend mit  $\alpha$  für einen Übergang aus der nächst höheren Schale. Das bedeutet, die  $K_\alpha$ -Linie stammt von einem Übergang von der L-Schale in die K-Schale, vergleiche Abbildung 2.6. Oft wird ein



**Abb. 2.6:** Schematische Darstellung verschiedener atomarer Übergänge und ihrer Bezeichnung.

zweiter Index verwendet, um verschiedene durch die Feinstruktur innerhalb der Schalen entstandene Übergänge zu unterscheiden.

*Henry Gwyn Jeffreys Moseley* fand 1913 eine empirische Gesetzmäßigkeit, mit der die Energie des  $K_\alpha$  Übergangs in einem Atom der Kernladungszahl  $Z$  berechnet werden kann [70].

$$E_{K\alpha} = \frac{3}{4} \cdot \frac{Ry}{1 + \frac{m_e}{M}} (Z - 1)^2 \quad (2.26)$$

Dabei ist  $Ry$  die Rydbergkonstante,  $m_e$  die Elektronenmasse und  $M$  die Kernmasse. In der allgemeinen Form gilt für jeden Übergang in einem Atom von der Schale  $n_k$  nach  $n_i$

$$E_{ik} = \left( \frac{1}{n_i} - \frac{1}{n_k} \right) \cdot \frac{Ry}{1 + \frac{m_e}{M}} (Z - S)^2 \quad (2.27)$$

Die Abschirmung der Kernladung durch die verbliebenen Elektronen des Atoms wird mit dem Abschirmparameter  $S$  berücksichtigt.

### 2.4.3 Röntgenbeugung am Silizium-Einkristall

Einzelne Aspekte der Festkörperphysik, die für weitere Punkte dieser Arbeit von Bedeutung sind, werden in diesem Abschnitt knapp erläutert. Für ein umfassenderes Studium sei auf gängige Fachliteratur verwiesen [3, 41, 49, 50, 55].

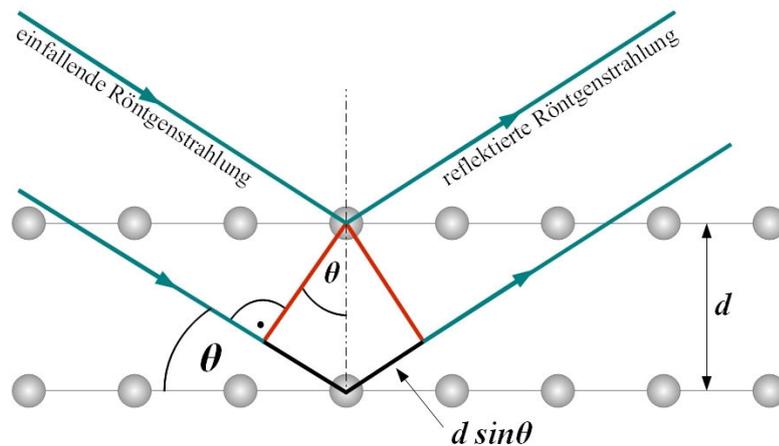
Beugung von Röntgenstrahlung an einem Einkristall wird bei Reflexion der einfall-

lenden Strahlung an den Netzebenen  $(h,k,l)$  des Kristalls beobachtet. Hierfür ist eine konstruktive Interferenz der gestreuten Wellen erforderlich, dies ist unter der sogenannten Bragg-Bedingung gegeben.

$$n \cdot \lambda = 2d_{hkl} \cdot \sin \theta \quad (2.28)$$

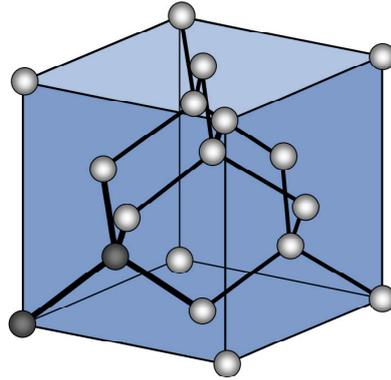
mit  $\lambda$  : Wellenlänge der einfallenden Röntgenstrahlung  
 $d_{hkl}$  : Abstand der Netzebenen  
 $\theta$  : Reflexionswinkel  
 $n$  : positive ganze Zahl

Der Gangunterschied  $(2d \cdot \sin \theta)$  der interferierenden Wellen muss ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge  $\lambda$  sein. Der Begriff Braggwinkel wird für den Reflexionswinkel verwendet, unter dem die Bragg-Bedingung (2.28) mit  $n = 1$  erfüllt ist. Eine schematische Darstellung der Braggreflexion an einem Kristallgitter findet sich in Abbildung 2.7.



**Abb. 2.7:** Die Röntgenstrahlen mit dem Einfallswinkel  $\theta$  werden, an der Netzebenenschar mit Abstand  $d$ , reflektiert. Bedingung hierfür ist, dass der Gangunterschied an benachbarten Netzebenen reflektierter Wellenfronten,  $(2d \cdot \sin \theta)$  ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge  $\lambda$  ist, siehe Gleichung (2.28).

Die Kristallstruktur von Silizium besteht aus zwei kubisch-flächenzentrierten Raumgittern, die in der sogenannten Diamantstruktur angeordnet sind, vergleiche Abbildung 2.8. An den Punkten  $(0,0,0)$  und  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$  befinden sich die Atome der zweiatomigen Basis des Kristalls. Im Vakuum, bei einer Temperatur von 295,65 K (22,5 °C) hat ein Silizium-Einkristall eine Gitterkonstante von  $a = 5,431\,020\,504\,(89)\text{ \AA}$  [69]. Der Abstand der Net-



**Abb. 2.8:** Die Diamantstruktur wird aus zwei, ineinander gesetzten, kubisch-flächenzentrierten Raumgittern gebildet. Die Basisatome beider Gitter sind dunkel hervorgehoben, sie liegen an den Punkten  $(0, 0, 0)$  und  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ . Die Kantenlänge des Translationsgitters entspricht der Gitterkonstanten  $a$  des Kristalls. Die Abbildung ist aus *Hunklinger-Festkörperphysik* [49] übernommen.

ebenen  $d_{hkl}$  kann für den Siliziumkristall, da es sich um ein kubisches Gitter handelt, wie folgt berechnet werden

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (2.29)$$

Ändert sich die Temperatur des Kristalls, so ändern sich ebenfalls die Atomabstände und somit die Gitterkonstante  $a$ . Die Temperatur hat demzufolge einen Einfluss auf den Winkel  $\theta$ , unter dem Röntgenstrahlung mit der Wellenlänge  $\lambda$  am Kristall reflektiert wird. *Lyon et al.* [64] haben die temperaturabhängige relative Längenänderung in Siliziumkristallen untersucht. Nimmt man an, der Siliziumkristall sei mit flüssigem Stickstoff gekühlt und habe eine Temperatur von  $T_{\text{Kristall}} = (80 \pm 3) \text{ K}$ , so erfährt der Kristall durch die Abkühlung gegenüber der Raumtemperatur eine Längenänderung von  $\Delta L/L_{22,5(80 \text{ K})} = (-238,0 \pm 6,5) \text{ ppm}$ . Die tatsächliche Gitterkonstante wäre somit  $a_{80 \text{ K}} = 5,429\,728(6) \text{ \AA}$ .

### 2.4.4 Absorption und Streuung

Beim Durchgang durch Materie wird die Intensität  $I$  eines Photonenstrahls abgeschwächt. Dies wird durch das Absorptionsgesetz beschrieben.

$$I = I_0 \cdot e^{-\mu x} \quad (2.30)$$

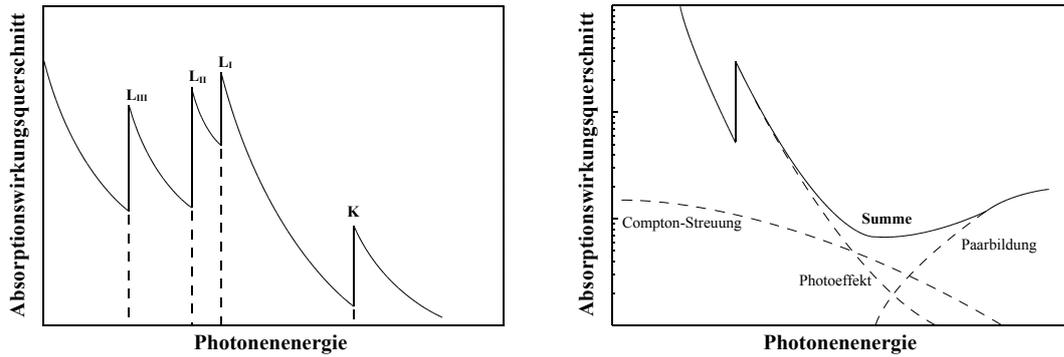
mit  $I_0$  : Photonenstrahlintensität vor Eintritt ins Medium  
 $\mu$  : Absorptionskoeffizient  
 $x$  : Dicke des durchquerten Mediums

Der Absorptionskoeffizient  $\mu$  ist vom Material und der Photonenenergie abhängig. Im Medium werden einzelne Photonen absorbiert oder gestreut. Die hauptsächlich daran beteiligten Prozesse sind der Photoeffekt, die Compton-Streuung und die Paarerzeugung. Für hochenergetische Photonen mit Energien in der Größenordnung von Megaelektronenvolt dominiert die Paarerzeugung.

Da die in dieser Arbeit beschriebenen Experimente mit Photonenenergien von einigen keV durchgeführt wurden, wird im Folgenden nur noch der niederenergetische Bereich betrachtet. Der Photoeffekt ist hier maßgeblich für die Absorption. Ein Atom absorbiert ein Röntgenphoton und im Gegenzug wird ein Elektron einer inneren Schale ionisiert. Der Wirkungsquerschnitt des Photoeffekts fällt mit steigender Photonenenergie  $E_\gamma$  stark ab. Es treten jedoch bei bestimmten Energien Sprünge im Absorptionsquerschnitt auf, man bezeichnet diese als Absorptionskanten, siehe Abbildung 2.9. Photonen niedriger Energien können nur Elektronen hoher Schalen, mit geringen Bindungsenergien ionisieren. Überschreitet die Photonenenergie die Ionisierungsenergie  $E_i^{\text{ion}}$  der  $i$ -ten Schale, tragen mehr Elektronen eines Atoms zur Absorption bei, folglich vergrößert sich der Absorptionsquerschnitt bei Erreichen der Energien  $E_i^{\text{ion}}$  schlagartig. Absorptionskanten sind charakteristisch für verschiedene Absorptionsmaterialien, da sie direkt an die Ionisierungsenergien der absorbierenden Atome gekoppelt sind.

## 2.5 Synchrotronstrahlung

Beschleunigte Ladungen emittieren elektromagnetische Strahlung, wie bereits in Abschnitt 2.4.1 zur Bremsstrahlung gesehen. Die ersten Ideen zur Entwicklung einer Synchrotronstrahlungsquelle wurden im Jahr 1945 veröffentlicht [66, 98]. Im darauffolgenden Jahr gab es bereits eine experimentelle Umsetzung [39]. Die technische Erzeugung der



**Abb. 2.9:** Schematischer Verlauf eines Absorptionswirkungsquerschnitts in Abhängigkeit von der Photonenergie. Abbildung links zeigt die charakteristischen Kanten eines Absorptionswirkungsquerschnitts, die entstehen, indem bei Erreichen der Ionisierungsenergie einer inneren Schale weitere Elektronen photoionisiert werden können. Die verschiedenen Beiträge zum Wirkungsquerschnitt, des Photoeffekts, der Compton-Streuung und der Paarbildung sind in der rechten Abbildung skizziert.

Synchrotronstrahlung ist seitdem weit fortgeschritten. Das Grundprinzip änderte sich jedoch nicht. Zur Erzeugung von Synchrotronstrahlung werden relativistische Elektronen oder Positronen in ihrer Bewegungsrichtung verändert, jedoch nicht im elektrischen Feld von Atomkernen, sondern in einem externen Magnetfeld. Die Nutzung von Synchrotronstrahlungsquellen erstreckt sich über Photonen im Ultraviolett- und Röntgenbereich.

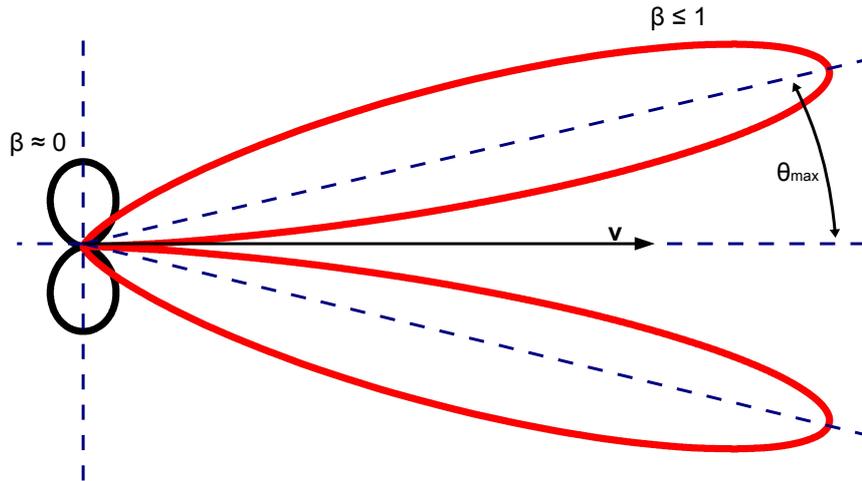
### 2.5.1 Emittierte Strahlung einer beschleunigten Ladung

Eine mit der Geschwindigkeit  $\vec{\beta}$  gleichförmig bewegte Ladung  $q$  emittiert keine Strahlung. Der Geschwindigkeitsvektor  $\vec{\beta}$  entspricht der auf die Vakuumlichtgeschwindigkeit  $c$  normierten Teilchengeschwindigkeit  $\vec{v}$ .

$$\vec{\beta} = \frac{\vec{v}}{c} \quad (2.31)$$

Durch eine Veränderung der Bewegungsrichtung des geladenen Teilchens, was gleichbedeutend mit einer Beschleunigung  $\dot{\vec{\beta}}$  ist, erzeugt dieses ein elektromagnetisches Feld. Die Strahlungsleistung aus Sicht des Beobachters, in Richtung  $\vec{e}_r$ , wird allgemein durch folgenden Ausdruck beschrieben [52, 73]

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{q^2}{16\pi^2\epsilon_0 c} \cdot \frac{\left| \vec{e}_r \times \left[ \left( \vec{e}_r - \vec{\beta} \right) \times \dot{\vec{\beta}} \right] \right|^2}{\left( 1 - \vec{e}_r \cdot \vec{\beta} \right)^5} \quad (2.32)$$



**Abb. 2.10:** Strahlungscharakteristik eines, in Bewegungsrichtung beschleunigten, geladenen Teilchens, mit der Geschwindigkeit  $\beta = 0,9$  (rot). Der nicht relativistische Fall  $\beta \approx 0$  (schwarz) wurde um den Faktor 200 gestreckt.

Erfolgt die Beschleunigung in der Bewegungsrichtung des Teilchens  $\vec{\beta} \parallel \dot{\vec{\beta}}$ , vereinfacht sich Gleichung (2.32) zu

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{q^2}{16\pi^2\epsilon_0 c} \cdot \frac{\dot{\beta}^2 \sin^2(\theta)}{(1 - \beta \cos \theta)^5} \quad (2.33)$$

Abhängig von der Teilchengeschwindigkeit  $\beta$  ändert sich die Raumrichtung, in der die Emission maximal ist. Im Grenzfall sehr langsamer Teilchen  $\beta \ll 1$  erfolgt die Emission senkrecht zur Bewegungsrichtung  $\theta_{\max} \approx 90^\circ$ . Für ultrarelativistische Teilchen  $\beta \rightarrow 1$  ist die Abstrahlung in Vorwärtsrichtung maximal, siehe Abbildung 2.10. Der Emissionswinkel relativ zur Bewegungsrichtung des Teilchens kann im relativistischen Grenzfall wie folgt genähert werden

$$\theta_{\max} \rightarrow \frac{1}{2\gamma} \quad (2.34)$$

mit dem Lorentzfaktor  $\gamma = 1/\sqrt{1 - \beta^2}$

### 2.5.2 Undulatorstrahlung

Ausgehend von der parasitären Strahlungsnutzung der Ablenkmagnete in Speicherringen, wurde die Synchrotrontechnik in den vergangenen Jahrzehnten kontinuierlich weiterentwickelt. Auf den Einsatz von so genannten *Wiggeln* folgte die Entwicklung von *Undulatoren*. Das Prinzip des *Undulators* wurde bereits im Jahr 1951 von *H. Motz* [71] beschrieben. Beide, *Wiggler* und *Undulatoren*, verwenden periodische Strukturen von Dipolmagneten, wie in Abbildung 2.11 dargestellt. Die alternierende Struktur der Dipol-

magnete in Ausbreitungsrichtung des geladenen Teilchens  $z$ , mit der Periodenlänge  $\lambda_u$ , bewirkt ein Magnetfeld  $B_y(z)$  in vertikaler Richtung, welches als sinusförmig angenommen wird [4, 102].

$$B_y(z) = B_0 \cdot \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_u} z\right) \quad (2.35)$$

$B_0$  beschreibt hierbei das Maximum des Magnetfeldes. Die Ablenkung des Teilchens wird durch die Lorentzkraft  $\vec{F}_L$  hervorgerufen.

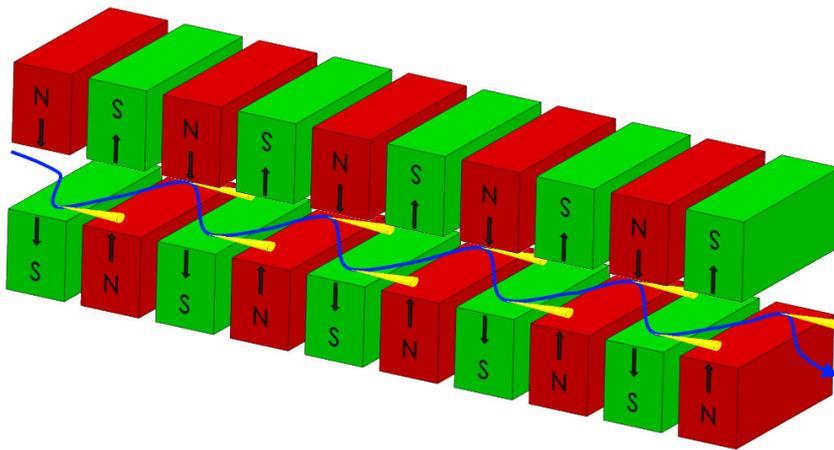
$$\vec{F}_L = m\gamma\vec{a} = -e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (2.36)$$

Die Wirkung des durch die Beschleunigung erzeugten Strahlungsfeldes auf das Teilchen selbst kann vernachlässigt werden, daher gilt  $\vec{E} = 0$ . Für das bewegte Teilchen mit  $\vec{v} = v_z \cdot \vec{e}_z$  erfolgt die Ablenkung in  $x$ -Richtung.

$$m\gamma \frac{dv_x}{dt} = -ev_z B_y \quad (2.37)$$

Durch eine zeitliche Integration und Einsetzen des Magnetfeldes nach Gleichung (2.35) erhält man für die Geschwindigkeit in Ablenkungsrichtung

$$v_x = -\frac{eB_0\lambda_u}{2\pi m_e\gamma} \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_u} z\right) = -\frac{cK}{\gamma} \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_u} z\right) \quad (2.38)$$



**Abb. 2.11:** Die Schemazeichnung eines Undulators zeigt die alternierende Anordnung der Dipolmagnete und die periodische Flugbahn eines geladenen Teilchens, welches axial die Magnetstruktur durchquert (blau). Jeweils an den Umkehrpunkten der Teilchenbahn ist der Strahlungskegel, der in Vorwärtsrichtung emittierten Photonen, dargestellt.

Der dimensionslose Magnetfeldparameter  $K$  beschreibt die Stärke des *Undulators*.

$$K = \frac{eB_0\lambda_u}{2\pi m_e c} = 0,9337 \text{ T}^{-1} \text{ cm}^{-1} \cdot B_0\lambda_u \quad (2.39)$$

Unter der Annahme, die Auslenkung des Teilchens von der Vorwärtsrichtung sei klein, kann der Ablenkwinkel des Teilchens  $\vartheta$  wie folgt abgeschätzt werden.

$$\theta \approx \tan \theta = \frac{v_x}{v_z} = -\frac{K}{\gamma} \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_u} z\right) \quad (2.40)$$

Man unterscheidet zwei Fälle für den Magnetfeldparameter  $K$ , beziehungsweise der Stärke der Ablenkung durch das Magnetfeld.

$K > 1$       *Wiggler*: Die Teilchen werden auf relativ großen Bahnen abgelenkt, man erhält ein kontinuierliches Energiespektrum. Die Intensität  $I$  ist proportional zur Zahl der Undulatorperioden  $N_u$ .

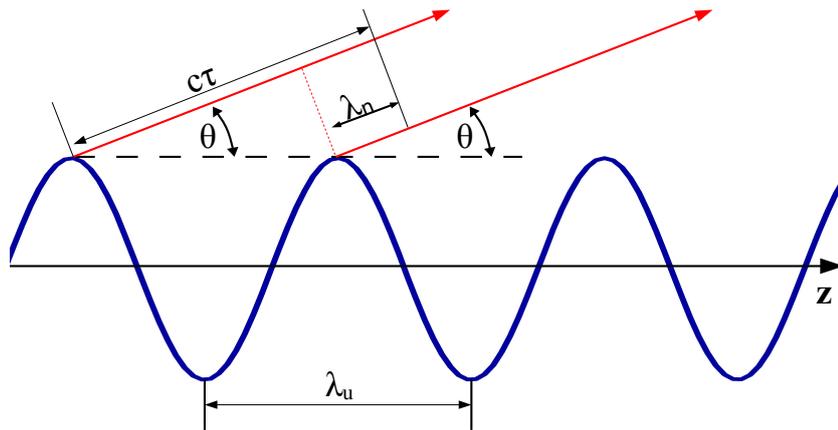
$K \leq 1$       *Undulator*: Der Öffnungswinkel des Strahlungskegels  $1/\gamma$  ist größer als der maximale Ablenkwinkel des Teilchens  $K/\gamma$ . Es kommt zu Interferenz der emittierten Strahlung, wodurch sich ein schmalbandiges Spektrum ausbildet, dessen Intensität proportional zur quadratischen Periodenzahl  $N_u^2$  ist.

Die Zeit, die das geladene Teilchen mit der mittleren Geschwindigkeit  $\bar{v}_z$  benötigt, um eine Undulatorperiode  $\lambda_u$  zu durchlaufen, wird mit  $\tau = \lambda_u/\bar{v}_z$  bezeichnet. Die Wellenfront legt in der Zeit zwischen zwei Emissionspunkten entsprechend die Strecke  $c \cdot \tau$  zurück. Ist der Gangunterschied zweier Wellenfronten ein Vielfaches der Wellenlänge der emittierten Strahlung  $\lambda_n$ , kommt es zu konstruktiver Interferenz. Das Emissionsspektrum wird von den Wellenlängen dominiert für die die Resonanzbedingung erfüllt ist, vergleiche Abbildung 2.12.

$$n \cdot \lambda_n = c\tau - \lambda_u \cos \theta \quad (2.41)$$

Drückt man diese Gleichung durch eine Winkelnäherung und in Abhängigkeit des Magnetfeldparameters  $K$  aus, erhält man die *Undulatorgleichung*

$$\lambda_n = \frac{\lambda_u}{2n\gamma^2} \left[ 1 + \frac{K^2}{2} + \gamma^2 \theta^2 \right] \quad (2.42)$$



**Abb. 2.12:** Skizze der Interferenzbedingung aller Perioden für die Undulatorstrahlung eines geladenen Teilchens.

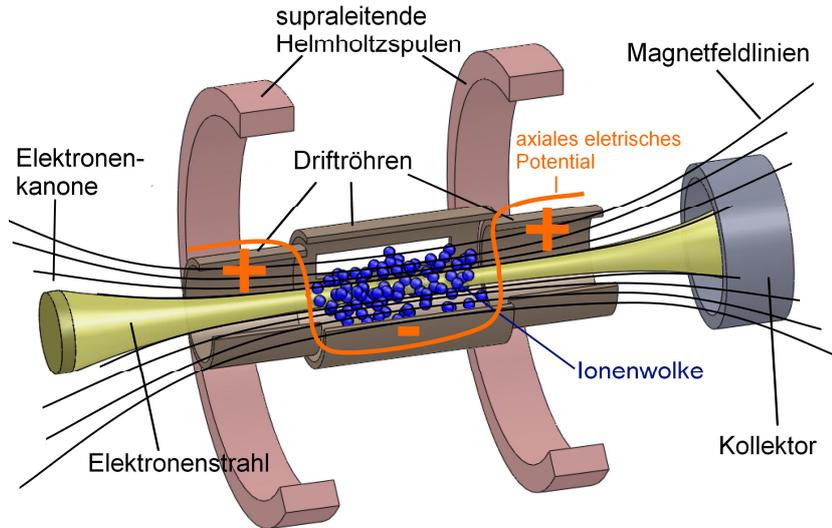
## 2.6 Elektronenstrahlionenfallen

Mit einer Elektronenstrahlionenfalle (*englisch* Electron-Beam-Ion-Trap, EBIT) können Ionen (atomare Systeme) in sehr hohem Ladungszustand erzeugt, gespeichert und untersucht werden. Prinzipiell ist die Erzeugung „nackter“ Ionen, auch bei sehr schweren Elementen mit hohen Bindungsenergien möglich, also die vollständige Entfernung der Elektronenhülle um den Atomkern. Seit rund 25 Jahren wird die EBIT als machtvolles Werkzeug der Atomphysik eingesetzt. 1988 wurde am „*Lawrence Livermore National Laboratory*“ (LLNL) die erste EBIT als neues Instrument atomphysikalischer Messungen gebaut [62, 65].

### 2.6.1 Funktionsweise einer EBIT

Das Element, welches ionisiert und experimentell untersucht werden soll, gelangt mittels eines gerichteten neutralen Atom- oder Molekülstrahls in das Fallenzentrum. Durch Elektronenstoß werden die Moleküle dissoziiert und die Atome und Molekülfragmente anschließend bis zu dem gewünschten Ladungszustand schrittweise ionisiert.

Die benötigten Elektronen werden in einer Elektronenkanone mit Kathode erzeugt, die sich auf negativem Potential  $U_{\text{Kathode}}$  befindet. Thermisch emittierte Elektronen formen den Elektronenstrahl, der dem Potentialgefälle folgend, zur Falle hin beschleunigt wird. Diese ist von zwei Magnetspulen in Helmholtz-Konfiguration umgeben. Das koaxial zum Elektronenstrahl verlaufende Magnetfeld bewirkt eine starke Komprimierung des Strahls. Da die Elektronen den Magnetfeldlinien folgen, lassen sich im Fallenzentrum extrem hohe Elektronenstromdichten erzeugen. Das Magnetfeld weitet sich hinter der Fallenregion erneut auf, was gleichermaßen in einer Verbreiterung des Elektronenstrahls



**Abb. 2.13:** Schematischer Aufbau einer EBIT mit den Hauptbestandteilen, der Elektronenkanone, den Driftröhren und dem Kollektor. Die Driftröhren bilden einen elektrostatischen Potentialtopf, in dem die Ionenwolke axial eingeschlossen ist. Der Elektronenstrahl wird von der Elektronenkanone zur Fallenmitte beschleunigt und auf seinem Weg zum Kollektor wieder abgebremst. Ein starkes koaxial verlaufendes Magnetfeld komprimiert den Elektronenstrahl, es wird durch ein die Falle umgebendes Magnetspulen-Paar erzeugt. Die Ionenwolke wird ebenfalls durch das Magnetfeld in radialer Richtung gefangen, zusätzlich verhindert die Raumladung des Elektronenstrahls eine radiale Ausbreitung der Ionenwolke.

resultiert. Dieser kann so im Kollektor abgebremst und vollständig aufgefangen werden. Abbildung 2.13 zeigt den schematischen Aufbau einer EBIT mit ihren drei Hauptbestandteilen Elektronenkanone beziehungsweise Kathode, den Fallenelektroden und dem Kollektor.

Ähnlich, wie es für den Elektronenstrahl gilt, hält das Magnetfeld auch die Ionen auf Bahnen nahe der Magnetfeldachse fest. Darüber hinaus verhindert die Raumladung des Elektronenstrahls eine radiale Ausbreitung der Ionenwolke. Die Falle besteht konzeptionell aus 3 Zylinderelektroden auch Driftröhren (*englisch* Drifttube, DT) genannt, die koaxial zum Elektronenstrahl angeordnet sind und sich auf positivem Potential befinden. Durch die Erzeugung eines Potentialtopfes werden die Ionen axial in der mittleren Driftröhre eingeschlossen, siehe Abbildung 2.13.

$$U_{\text{DT-links}} \gtrsim U_{\text{DT-Mitte}} \lesssim U_{\text{DT-rechts}} \quad (2.43)$$

Die kinetische Energie der Elektronen  $E_e$  folgt aus der Potentialdifferenz zwischen der Kathode und der mittleren Fallenelektrode. Es muss ebenfalls der Einfluss des Raumla-

dungspotentials der Elektronen  $U_{\text{Raumladung}}$  berücksichtigt werden, um die Elektronenenergie nicht zu überschätzen.

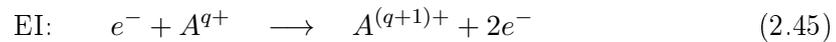
$$E_e = e \cdot (U_{\text{DT-Mitte}} - U_{\text{Raumladung}} - U_{\text{Kathode}}) \quad (2.44)$$

Die Elektronenenergie ist eine Größe elementarer Wichtigkeit, sie entscheidet ob ein Ladungszustand erzeugt werden kann oder nicht. Durch Stoßionisation mit den Elektronen werden die Atome im Fallenzentrum schrittweise ionisiert. Liegt das Ionisationspotential eines Ladungszustands oberhalb der Elektronenenergie, kann der nächst höhere Ladungszustand folglich nicht mehr erreicht werden. Eine ausführlichere Beschreibung der Physik einer EBIT und ihrer Funktionsweise findet sich in [21].

## 2.6.2 Wechselwirkung des Elektronenstrahls mit der Ionenwolke

### Elektronenstoß-Ionisation (EI)

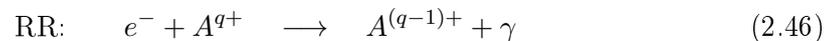
Die direkte Ionisation durch Elektronenstoß ist der entscheidende Prozess in der Funktionsweise einer EBIT bezüglich der Wechselwirkung zwischen dem Elektronenstrahl und der Ionenwolke. Ist die kinetische Energie des stoßenden Elektrons größer als die Ionisierungsenergie  $E_I$  eines Ions, kann folgender Prozess stattfinden.



Ein gebundenes Elektron des Ions erhält beim Stoß ausreichend Energie, um ins Kontinuum oberhalb der Ionisierungsgrenze angeregt zu werden.

### Elektroneneinfang - Radiative Rekombination (RR)

Der Einfang eines Elektrons mit der kinetischen Energie  $E_{\text{kin}}$  aus dem Kontinuum beziehungsweise dem Elektronenstrahl erfolgt in ein unbesetztes Niveau mit der Ionisierungsenergie  $E_I$ . Die frei werdende Energie wird in Form eines Photons emittiert.



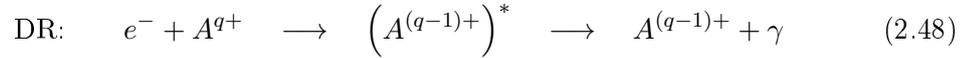
Die Energie des Photons ergibt sich aus der Summe der kinetischen Energie des Elektrons und der Ionisierungsenergie des von ihm besetzten Niveaus.

$$E_\gamma = \hbar\omega = E_{\text{kin}} + E_I \quad (2.47)$$

### Elektroneneinfang - Dielektronische Rekombination (DR)

Bei der dielektronischen Rekombination handelt es sich um einen resonanten Prozess.

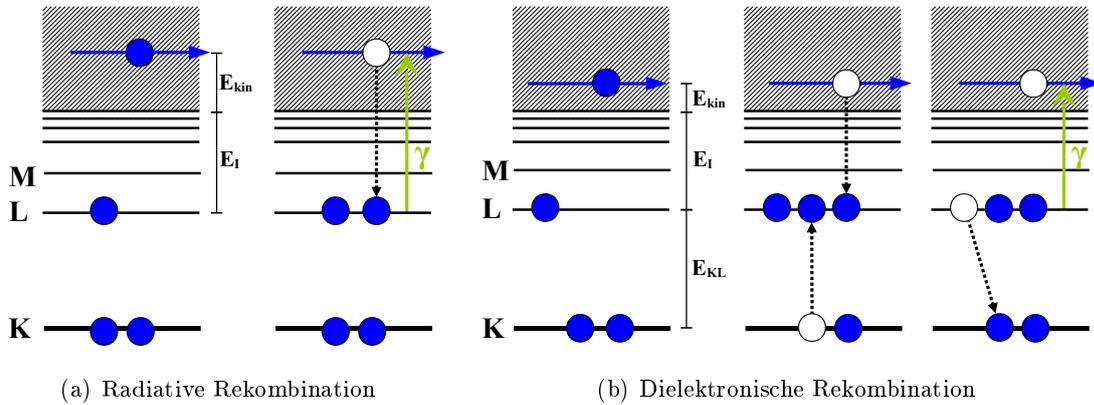
Das eingefangene Elektron überträgt seine Energie auf ein gebundenes Elektron im Zustand  $E_i$  und regt dieses in ein höheres Niveau  $E_k$  an, in Beispielabbildung 2.14(b) erfolgt die Anregung von der K in die L-Schale. Der angeregte Zustand  $(A^{(q-1)+})^*$  geht durch Emission eines oder mehrerer Photonen in den Grundzustand über.



Es gilt folgende Resonanzbedingung:

$$E_{\text{kin}} = E_{ik} - E_I \quad (2.49)$$

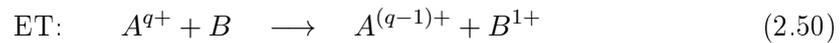
Die kinetische Energie des Elektrons  $E_{\text{kin}}$  muss der Anregungsenergie des zweiten Elektrons  $E_{ik}$  abzüglich der Ionisierungsenergie  $E_I$  des einfangenden Niveaus entsprechen.



**Abb. 2.14:** Schematische Darstellung der verschiedenen Elektroneneinfangprozesse am Beispiel eines Li-artigen Systems.

### Ion-Atom Stöße - Elektronentransfer (ET)

Bei Stößen zwischen Ionen und Atomen kommt es zum Ladungsaustausch durch Elektronentransfer. Ein Elektron wird beim Stoß vom Atom an das Ion übertragen, dessen Ladungszustand sich dementsprechend um 1 verringert.



### Elektronenstoßanregung (EE)

Durch den Stoß mit einem freien Elektron, wird ein gebundenes Elektron im Zustand  $E_i$  in ein höher liegendes Energieniveau  $E_k$  angeregt. Die dafür benötigte Energie  $E_{ik}$  erhält es aus der kinetischen Energie  $E_{\text{kin}}$  des Stoßpartners. Der angeregte Zustand kehrt

schließlich durch Abstrahlung eines Photons, vergleiche Abschnitt 2.2.2 oder den bereits in Abschnitt 2.2.5 erwähnten Augerzerfall wieder in den Grundzustand zurück.

### 2.6.3 Ladungszustandsverteilung

Neben den zuvor beschriebenen Wechselwirkungsmechanismen der Ionen mit dem Elektronenstrahl kann sich die Ladungszustandsverteilung auch durch Verlust einzelner Ionen ändern. Bei ausreichender kinetischer Energie können Ionen die Fallenpotentiale überwinden und die Ionenwolke axial oder radial verlassen. Die zeitliche Änderung der Ionenzahl  $N$  eines Ladungszustands  $q$  kann durch ein System von Ratengleichungen beschrieben werden.

$$\begin{aligned} \frac{dN_q}{dt} = & R_{q-1 \rightarrow q}^{\text{EI}} + R_{q+1 \rightarrow q}^{\text{RR}} + R_{q+1 \rightarrow q}^{\text{DR}} + R_{q+1 \rightarrow q}^{\text{ET}} \\ & - R_{q \rightarrow q+1}^{\text{EI}} - R_{q \rightarrow q-1}^{\text{RR}} - R_{q \rightarrow q-1}^{\text{DR}} - R_{q \rightarrow q-1}^{\text{ET}} - R_q^{\text{Verlust}} \end{aligned} \quad (2.51)$$

Die Entwicklung der Ladungszustandsverteilung in einer EBIT, der beteiligten Prozesse und der Lösung der Ratengleichungen wird in [63, 77] ausführlich beschrieben. Nach Einschalten des Elektronenstrahls erreicht die Ladungszustandsverteilung innerhalb weniger Sekunden ein dynamisches Gleichgewicht  $\left(\frac{dN_q}{dt} = 0\right)$ .

## 3 Experiment

Die bisherigen experimentellen Untersuchungen von K-Schalenanregungen in hochgeladenen Eisenionen, und insbesondere von  $K_\alpha$ -Übergängen, wurden an Emissionslinien thermischer Plasmen durchgeführt [9, 13, 15, 22, 23]. Die in dieser Arbeit beschriebenen Experimente erfolgten auf Grundlage von Photonenanregung, um bei der Übergangsanregung keine Beteiligung von Stoßprozessen der Elektronen mit den Ionen zu haben.

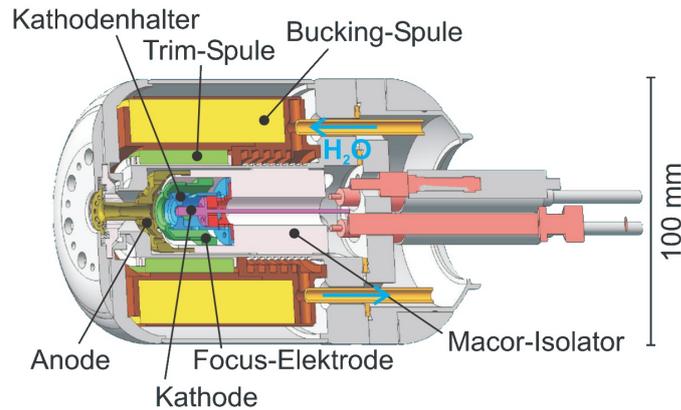
Neben der Erläuterung der eingesetzten Experimentieranlagen zur Erzeugung der Ionen und Photonen, werden das Messschema, das verwendete Datenaufnahmesystem und die Datenanalyse der zwei Kampagnen, im September 2011 und Oktober 2012 beschrieben. Im Zuge dessen werden unterschiedliche Methoden zur absoluten Energiekalibrierung der aufgenommenen Spektren erläutert.

### 3.1 FLASH-EBIT

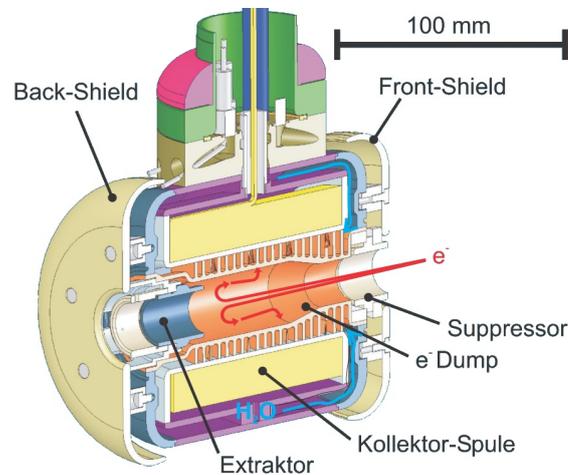
Zur Durchführung der Experimente dieser Arbeit kam die FLASH-EBIT als Ionenquelle zum Einsatz. Sie wurde von *Sascha Epp* am Max-Planck-Institut für Kernphysik entwickelt und gebaut [33]. Die FLASH-EBIT ist als transportables Experiment, speziell für den Einsatz an Synchrotronstrahlungsquellen, konzipiert. Insbesondere wurde gegenüber dem Originaldesign der Livermore-EBIT [62, 61, 65] die Elektronenstrahlachse von der Vertikalen in die Horizontale verlegt. Damit kann ein axialer Überlapp der Ionenwolke mit dem horizontalen Photonenstrahl der Synchrotronstrahlungsquellen realisiert werden. Trotz ihrer Kompaktheit ist die Leistungsfähigkeit der FLASH-EBIT enorm hoch, was bei mehrfachen Einsätzen an Synchrotronstrahlungsquellen oder an Freie-Elektronen-Lasern unter Beweis gestellt wurde [10, 31, 32, 91, 92].

#### 3.1.1 Elektronenstrahl

Eine im Durchmesser 3 mm große thermische Kathode aus Wolfram, die mit Bariumoxid dotiert ist, erzeugt den Elektronenstrahl der FLASH-EBIT. Die an der Kathode angelegte Hochspannung kann bis zu  $-2$  kV betragen. Emittierte Elektronen werden durch



**Abb. 3.1:** Schnittansicht der Elektronenkanone der FLASH-EBIT (aus [33]).



**Abb. 3.2:** Schnittansicht des Elektronenkollektors der FLASH-EBIT (aus [33]).

die Fokuselektrode von der Kathodenoberfläche abgezogen und weiter zu den Driftröhren beschleunigt (siehe Abbildung 3.1). Diese Maschine erreicht, bei ausreichender Beschleunigungsspannung, Elektronenströme von über 500 mA [33]. Durch das Magnetfeld von 6 T im Fallenzentrum wird der Elektronenstrahl auf einen Durchmesser von  $\sim 50 \mu\text{m}$  komprimiert. Für die Experimente dieser Arbeit wurden Elektronenströme zwischen 100 mA und 180 mA, bei einer Kathodenspannung von  $-2 \text{ kV}$  und einem Fallenpotential von  $1,4 \text{ kV}$  verwendet.

Der Elektronenstrahl wird nach dem Durchqueren der Fallenelektrode, der Wechselwirkungszone mit den Ionen, im Elektronenkollektor wieder eingesammelt. Der Kollektor ist als Zylinderrohr konzipiert, auf dessen Innenseite die Elektronen gestoppt werden. Dies ermöglicht das Einkoppeln eines zur FLASH-EBIT koaxial ausgerichteten Lasers oder gar das Laden der Falle mit Ionen aus externen Quellen [33]. Das Feld der in der

Abbildung des Kollektors 3.2 dargestellten Magnetspule weitet den zuvor komprimierten Elektronenstrahl auf. Weitere Elektroden, wie beispielsweise der *Extraktor*, begünstigen den Strahlverlauf der Elektronen und ermöglichen es, diese effektiv im Kollektor zu stoppen.

### 3.1.2 Fallenkonstruktion und Magnetfeld

Die für eine EBIT elementare Magnetstruktur besteht bei der FLASH-EBIT aus einem supraleitenden Helmholtz-Spulenpaar der Firma *Cryogenic*. Dieser supraleitende Magnet, mit einer Sprungtemperatur von 17 K wird mit einem Kältekopf auf 6 K gekühlt, dessen geschlossener Heliumkreislauf von einem Kompressor betrieben wird. Ein in den Magnetspulen zirkulierender Strom von etwa 114 A erzeugt im Fallenzentrum ein Feld von 6 T. Der Spulenabstand ist gegenüber der idealen Helmholtz-Konfiguration etwas vergrößert, um die Sichtlinie zum Fallenzentrum nicht zu beeinträchtigen [33]. Das hat zur Folge, dass die größte Magnetfeldstärke nicht im Fallenzentrum, sondern in den angrenzenden Elektroden erreicht wird (vergleiche hierzu die Darstellung der axialen Magnetfeldstärke in Abbildung 3.3). Die in der zentralen Elektrode durch das Magnetfeld und die Raumladung des Elektronenstrahls gefangene Ionenwolke hat eine radiale Ausdehnung von  $\sim 200 \mu\text{m}$ . Damit wird eine sehr große Flächenladungsdichte von bis zu  $10^{11}$  Ionen  $/\text{cm}^2$  erzielt.

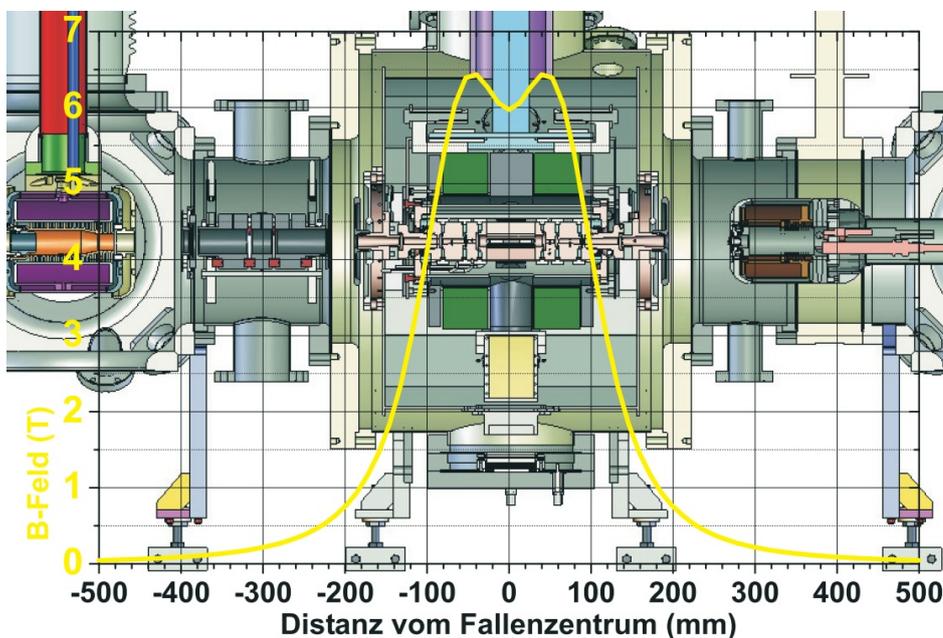
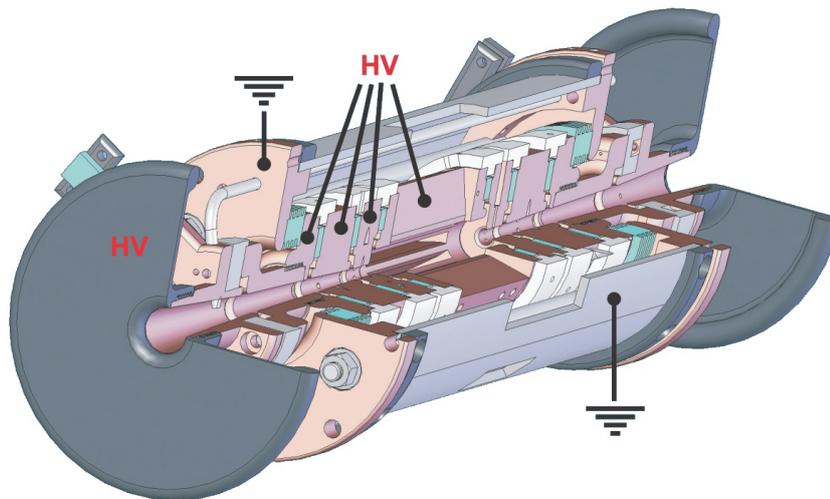
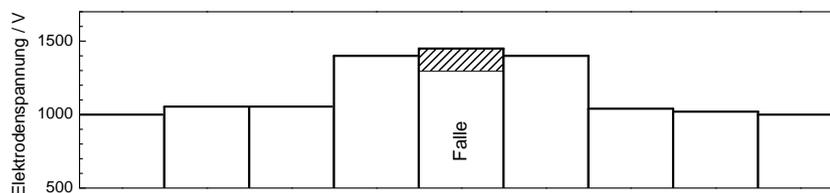


Abb. 3.3: Verlauf des axialen Magnetfeldes der FLASH-EBIT. Abbildung aus [33].



**Abb. 3.4:** Schnittansicht des Driftröhrenensembles der FLASH-EBIT (aus [33]).

Die zentrale Fallenelektrode ist mit radialen Schlitzfenstern versehen und ermöglicht so von außerhalb freien optischen Zugang zur Ionenwolke, siehe Abbildung 3.4. Das Driftröhrenkollektiv ist koaxial zum Magnetfeld aufgehängt und befindet sich auf Hochspannung von maximal 30 kV gegenüber der Erde. Typische Hochspannungswerte der Driftröhren für die Experimente dieser Arbeit sind in Abbildung 3.5 dargestellt. Der schraffierte Bereich gibt qualitativ wieder, um welchen Betrag sich das effektive Potential, durch den Einfluss der Raumladung in der Falle, von der angelegten Spannung unterscheidet.



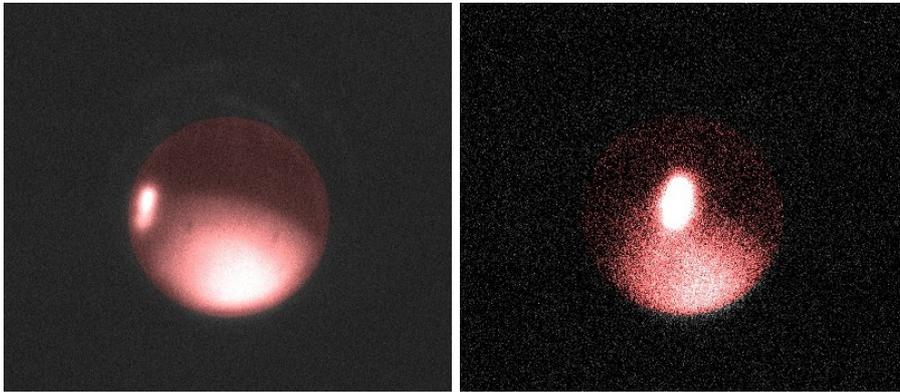
**Abb. 3.5:** Typischer Verlauf der Elektrodenpotentiale des Driftröhrenkollektivs. Das Potential der Fallenelektrode wird durch Raumladungseffekte verringert (schraffiert).

### 3.1.3 Überlapp von Ionenwolke und Photonenstrahl

Der fokussierte koaxial zur FLASH-EBIT verlaufende Photonenstrahl einer Synchrotronstrahlungsquelle soll die Ionenwolke vollständig ausleuchten. Um Intensitätsverluste zu vermeiden, wird daher ein Photonenstrahldurchmesser von 200  $\mu\text{m}$  gewählt, was etwa der radialen Ausdehnung der Ionenwolke entspricht. Der ideale Überlapp kann nur gewährleistet sein, wenn die Positionen des Photonenstrahls und der Ionenwolke gut bekannt sind und diese zur Deckung gebracht werden.

In das Fallenzentrum kann, mittels eines Linearmanipulators, ein dünner Kristall aus mit Chrom dotiertem Yttrium-Aluminium-Granat (Cr:YAG) gefahren werden [93]. Dieser fluoresziert, wo er vom Elektronenstrahl oder Photonenstrahl getroffen wird. Der Elektronenstrahl bildet später das Zentrum der Ionenwolke, seine Position muss daher mit der des Photonenstrahls in Einklang gebracht werden.

Die Ausrichtung der FLASH-EBIT kann mit drei Maschinenfüßen verändert und so der Überlapp mit dem Photonenstrahl erzielt werden [11]. Der YAG-Kristall wird über einen Spiegel, auf einer mit Elektronenvervielfacher ausgestatteten CCD-Kamera (*englisch: Charge-Coupled-Device*) abgebildet, um die Strahlpositionen in Echtzeit verfolgen zu können. Abbildung 3.6 zeigt zwei Einzelbilder der CCD-Kamera für verschiedene Positionen des Photonenstrahls. Mit einem Loch im Spiegel, der im  $45^\circ$  Winkel zur Strahlachse steht, wird verhindert, dass der Weg des Photonenstrahls bei in den Strahlengang gefahrenem Spiegel blockiert ist.



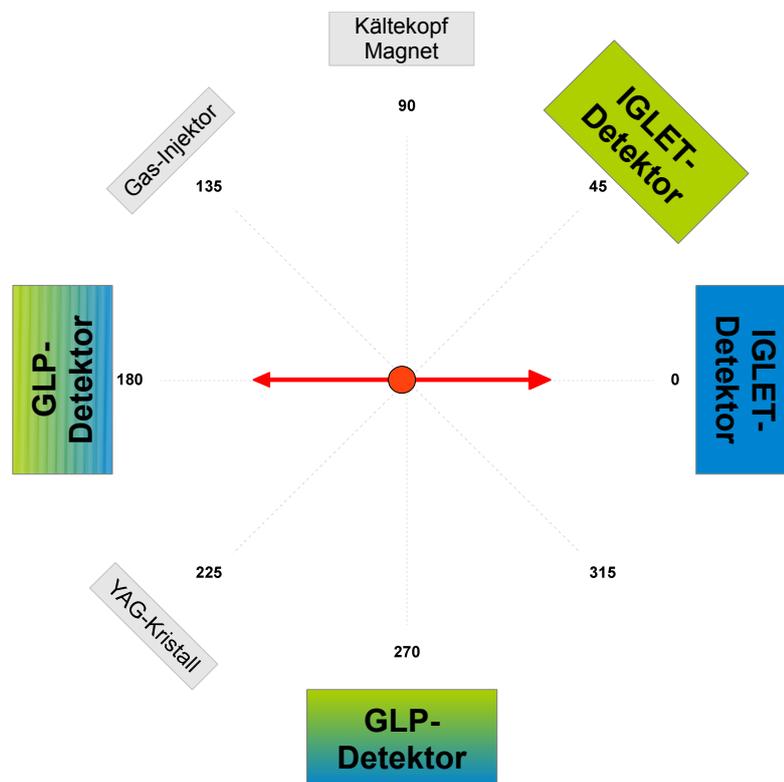
**Abb. 3.6:** Mit der CCD-Kamera aufgenommenes Bild von dem YAG-Kristall im Fallenzentrum. Der Bereich innerhalb der Driftröhren ist rot eingefärbt. Durch den Kristall hindurch ist die glühende Kathode am unteren Rand als großflächige Leuchterscheinung sichtbar. Links: Am linken Rand ist zeitgleich der fokussierte Photonenstrahl vor der endgültigen Ausrichtung der EBIT zu sehen. Den Fallbereich umgeben Lichtreflexe der glühenden Kathode an den Innenseiten der Driftröhren, die als schwache Ringe wahrgenommen werden können. Rechts: Ausgerichteter Photonenstrahl.

#### 3.1.4 Photonendetektoren

Zum Nachweis der Fluoreszenzphotonen wurden Halbleiterdetektoren aus hochreinem Germanium eingesetzt. Dabei kamen unterschiedliche Modelle der Firma *ORTEC*<sup>®</sup> zum Einsatz. Zum einen zwei sogenannte *Pop-Top*-Detektoren aus der *GLP*-Serie mit einer aktiven Fläche von  $1000\text{ mm}^2$  hinter einem  $250\text{ }\mu\text{m}$  dicken Berylliumfenster und zum anderen ein *IGLET*-Detektor, dessen aktive Fläche nur etwa  $28\text{ mm}^2$  beträgt, dafür ein Berylliumfenster geringerer Dicke von  $13\text{ }\mu\text{m}$  hat. Die *GLP*-Detektoren haben eine große

aktive Fläche, was für gute Zählraten sorgt, ihre Energieauflösung ist etwa 400 eV bei 6 keV. In dem Berylliumfenster tritt für Photonen unterhalb einer Energie von 3 keV starke Absorption auf, sodass in diesem Energiebereich kaum Ereignisse zu erwarten sind.

Der IGLET-Detektor hat eine deutlich kleinere aktive Fläche, erzielt allerdings eine bessere Energieauflösung von rund 200 eV bei 6 keV. Weitere Vorteile dieses Detektors liegen darin, dass er direkt an beziehungsweise in eine Vakuumkammer eingebaut und so die Entfernung zur Röntgenquelle reduziert werden kann. Damit vergrößert sich der vom Detektor eingesehene Raumwinkel. Darüber hinaus ist das dünne Berylliumfenster des IGLET-Detektors durchlässiger für Photonen niedriger Energien. Der IGLET-Detektor registriert daher auch Photonen mit Energien bis hinunter zu etwa 500 eV. Die Anordnung der Detektoren um die Ionenwolke in der EBIT ist in Abbildung 3.7 dargestellt.



**Abb. 3.7:** Positionierung der Fluoreszenz-Detektoren relativ zu der Polarisationsachse des Photonenstrahls (rot). Die unterschiedliche Anordnung der Detektoren bei den beiden Messzeiten ist farblich markiert. Blau markierte Detektoren waren 2011 und grün markierte 2012 an den entsprechenden Positionen montiert.

### 3.1.5 Ionenextraktion

Für die Photoionisations-Experimente mit der FLASH-EBIT [92, 91] war die Analyse extrahierter Ionen ein wesentliches Element. Der Aufbau zur Ionenextraktion wurde von *Martin Simon* für seine Dissertation geplant und umgesetzt [93].

Durch Herabsetzen des Potentials der einschließenden Elektrode zur Kollektorseite, wird der Potentialtopf einseitig geöffnet und Ionen verlassen die Falle axial durch den Kollektor. Der Ionenstrahl wird hinter dem Kollektor mit einem elektrostatischen Ablenker horizontal um  $90^\circ$  von der Photonenstrahlachse abgelenkt. Die Ablenkung erfolgt für alle Ionen in gleicher Weise, die durch das gleiche Potential beschleunigt wurden. In einem Wienfilter mit senkrecht zueinander stehendem magnetischen und elektrischen Feld, werden diese Ionen nach ihrem Ladung-zu-Masse-Verhältnis aufgespalten und anschließend auf einem positionsempfindlichen Ionendetektor nachgewiesen. Der Aufbau zur Ionenextraktion, ohne die zur Strahlführung und Fokussierung eingesetzten elektrostatischen Linsen, ist in Abbildung 3.8 schematisch dargestellt. Das Design des Ablenkers war, den beschränkten Platzverhältnissen am Berliner Elektronenspeicherring (*BESSY II*) geschuldet, auf Kompaktheit ausgerichtet. Das kompakte Design mit einem kleinen Ablenkradius und schmalen Öffnungen macht den Ablenker sehr empfindlich und beschränkt die Maximalenergie der extrahierten Ionen.

Verlassen die Ionen die EBIT- beziehungsweise Magnetfeldachse im elektrischen Feld des Ablenkers, so bewirkt das Restmagnetfeld der EBIT eine leichte Aufspaltung der Ionen nach ihrem Ladung-zu-Masse-Verhältnis, was sich negativ auf die Auflösung der Ladungszustände auswirkt. Diese Einflüsse auf den Ionenstrahl mussten bei der damaligen Planung des Ablenkers in Kauf genommen werden.

### 3.1.6 Bau eines magnetisch geschirmten Ablenkers

Mit dem Bau eines neuen elektrostatischen Ablenkers habe ich vor allem die Problematik des Restmagnetfeldes behoben. Die Magnetfeldabschirmung besteht aus einem Gehäuse aus magnetischem Stahl, das das Ablenkplattenpaar umgibt. Das Magnetfeld wird in den Außenwänden des Gehäuses geführt und so vom Ionenstrahl ferngehalten. Zusätzlich leitet die bereits existierende Konstruktion aus  $\mu$ -Metallblechen, die die Kammer umgibt, das aus dem Gehäuse wieder ausgetretene Magnetfeld um den weiteren Aufbau herum.

Der Spiegel, über den der YAG-Kristall abgebildet wird, war im bisherigen Aufbau mit dem Ablenker auf einem Linearmanipulator montiert, sodass sich wahlweise entweder das eine oder das andere Bauelement im Strahlengang befand. Die bewegliche Aufhängung erschwerte das Arbeiten mit dem Ablenker. Da Position und Ausrichtung nicht zu 100 % reproduzierbar waren, mussten optimierte Einstellungen nach dem Bewegen des Ablen-

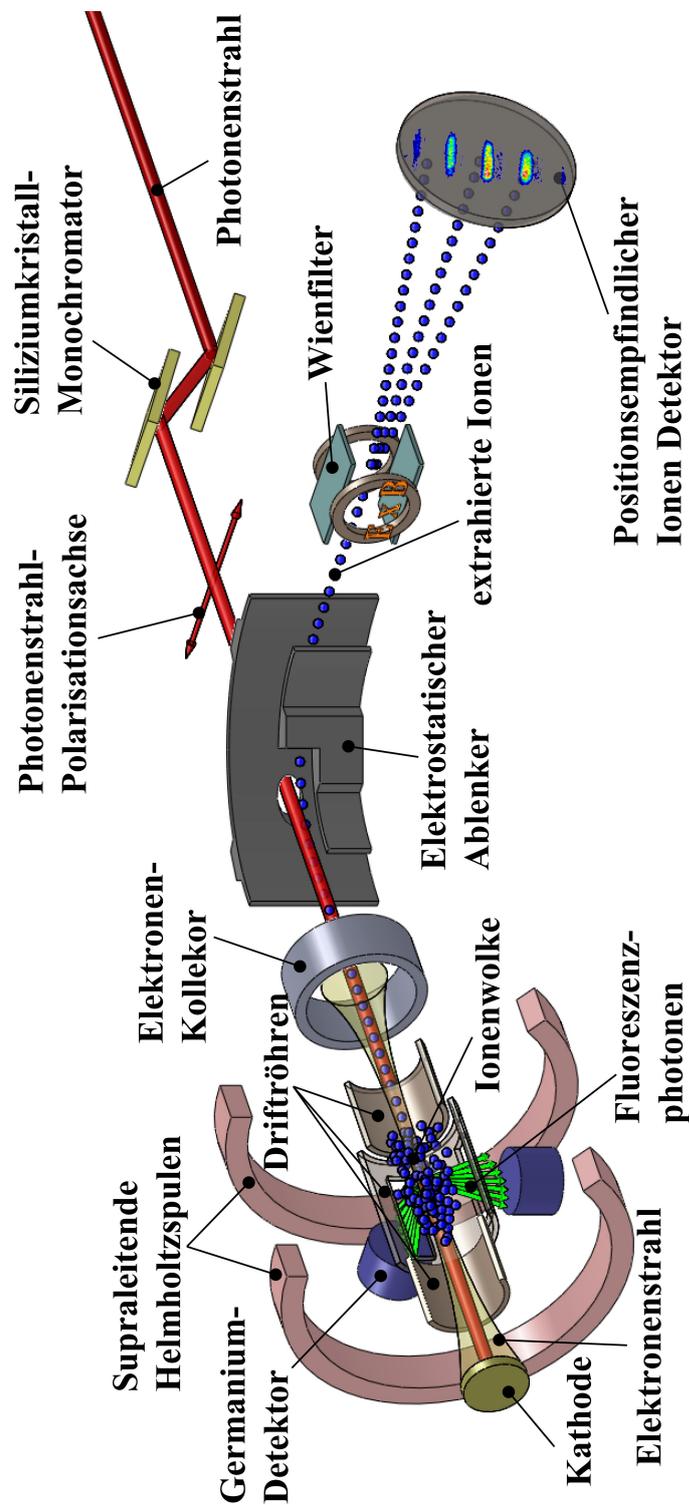
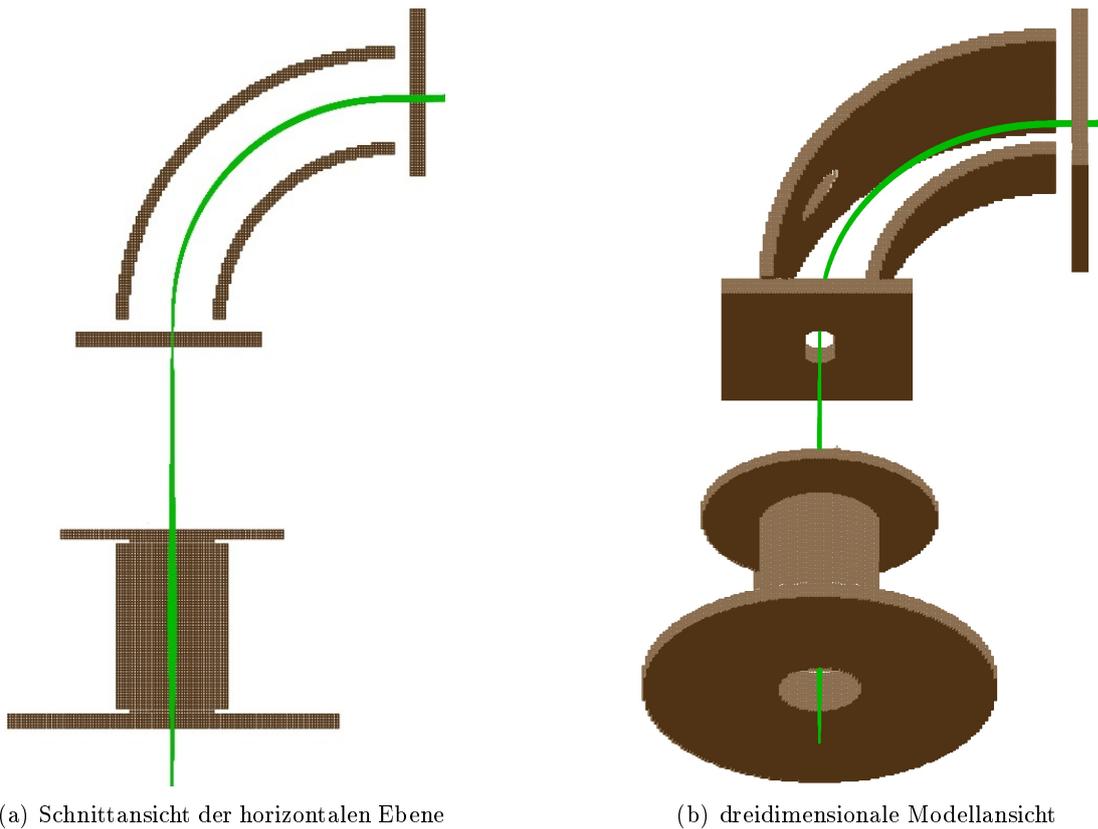


Abb. 3.8: Schematische Darstellung der Ionenextraktion an der FLASH-EBIT.

kers erneut gefunden werden. Im neuen Design, das keine ähnlich strikten räumlichen Beschränkungen beinhaltet sind Ablenker und Spiegel getrennt voneinander aufgehängt. In den Abbildungen 3.10(a) und 3.10(b) ist ein Foto beziehungsweise Modell der neuen Ablenkerkammer zu sehen.

Die Ablenkerelektroden bestehen aus zwei konzentrisch angeordneten zylindrischen Platten unterschiedlicher Höhe. Das nach [57] gewählte Design ist einfach zu handhaben und bietet dennoch ähnliche Fokuseigenschaften wie die Geometrie eines Kugelkondensators. Im Bereich der Strahlachse bewirkt das elektrische Feld der Ablenkerplatten eine Fokussierung sowohl horizontal, als auch vertikal. Dies ist bei Zylinderelektroden gleicher Höhe nicht der Fall. Einflüsse verschiedener Geometrien des Ablenkplattenpaars auf Fokus und Verlauf des Ionenstrahls habe ich mit der Software *SIMION 8.0* simuliert. In Abbildung 3.9 ist ein Ausschnitt der vollständigen Simulation des schlussendlich gewählten Designs dargestellt. Der Übersichtlichkeit halber sind einige Gehäuseelemente nicht gezeigt. Umgesetzt wurde ein Ablenkplattenpaar mit Ablenkradius  $R = 80$  mm.

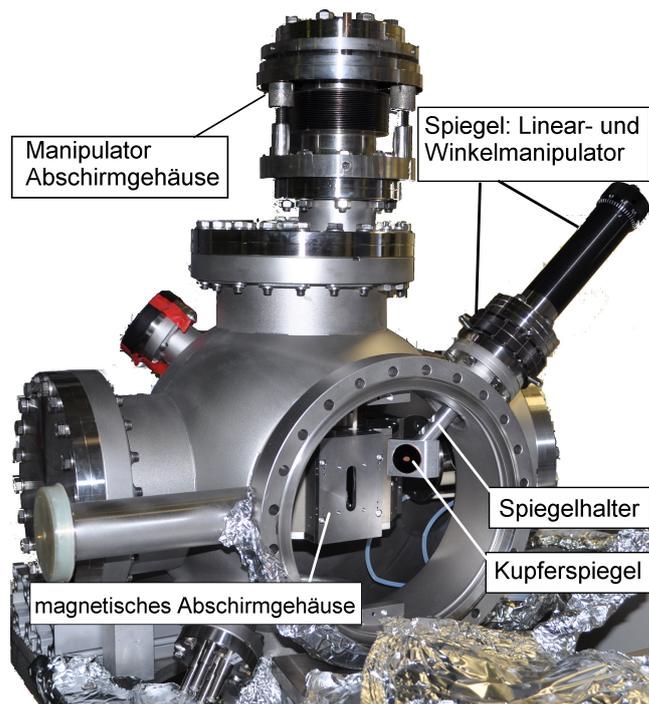


**Abb. 3.9:** Simulation des Strahlverlaufs im neu designeten Ablenker mit *SIMION*. Der Ionenstrahl (grün) ist auf den Eintrittsspalt fokussiert. Am Austrittsspalt treten die Ionen als Parallelstrahl aus.

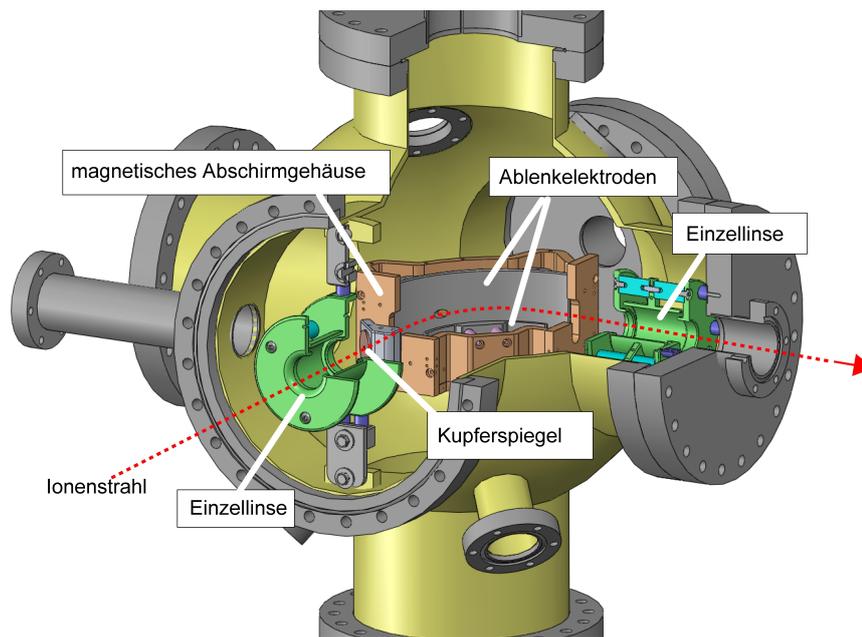
Die Elektroden sind in einem Abstand von 30 mm im magnetisch geschirmten Gehäuse isoliert aufgehängt. Mit einer Höhe von 60 mm ist die äußere Elektrode erheblich größer als die Innere mit einer Höhe von 36 mm. Die *SIMION*-Simulationen ergaben für den Ionenstrahl, bei einer Elektrodenanordnung mit diesen Maßen, eine sehr gute Fokussierung sowohl horizontal als auch vertikal.

Jeweils eine große Einzellinse, bestehend aus 3 Elektroden, befindet sich vor der Eintritts- beziehungsweise hinter der Austrittsöffnung des Ablenkergehäuses, siehe Abbildung 3.10(b). Diese Linsen wurden ebenfalls in den *SIMION*-Simulationen berücksichtigt. Die zentralen Elektroden werden auf positivem Potential betrieben, während die Außenelektroden auf Erdpotential liegen. Die isolierte Aufhängung ermöglicht ebenfalls den Betrieb der Einzellinsen mit negativen oder auch positiven äußeren Elektroden.

Zwischen der ersten Einzellinse und der Eintrittsblende des Ablenkers ist ausreichend Platz eingeplant, sodass der Spiegel dort in den Strahlengang gefahren werden kann. Wie im Vorgängermodell handelt es sich um einen Kupferspiegel mit einer Silberbeschichtung, in dessen Mitte sich unter  $45^\circ$  ein 4 mm großes Durchgangsloch befindet. Der Durchmesser des Spiegels beträgt 25,4 mm. Der Spiegelhalter ist an einem Linearmanipulator angebracht, mit dem er unter einem  $45^\circ$  Winkel in den Strahlengang gefahren werden kann, siehe Abbildung 3.10(a). Um leichte Positionsanpassungen vornehmen zu können ist dieser Aufbau auf einem Winkelmanipulator gelagert, der Winkelkorrekturen von bis zu  $2^\circ$  erlaubt. Im Rahmen dieser Arbeit kam der Neubau der Ablenkerkammer nur aufgrund der Spiegelkonstruktion zum Einsatz. Bei anderen Experimenten mit extrahierten Ionen wurde der Ablenker bereits erfolgreich eingesetzt.



(a) Neue Ablenkerkammer



(b) Schnittansicht der Ablenkerkammer (3D-Modell)

**Abb. 3.10:** Die neue Ablenkerkammer und die darin enthaltenen Komponenten.

## 3.2 Die Synchrotronstrahlungsquelle *PETRA III*

Die Synchrotronstrahlungsquelle der dritten Generation *PETRA III* befindet sich auf dem Gelände des Helmholtz-Forschungszentrums *Deutsches Elektronen-Synchrotron (DESY)* in Hamburg. Die *Positron-Elektron-Tandem-Ring-Anlage PETRA* besteht seit den 1970er Jahren. Der Speicherring mit einem Durchmesser von 2,304 km wurde zu Forschungszwecken der Teilchenphysik erbaut und diente später als Vorbeschleuniger der *HERA-Anlage (Hadron-Elektron-Ring-Anlage)*. Mit dem Umbau zur Röntgenstrahlungsquelle entstand eine rund 300 m lange Experimentierhalle, siehe Abbildung 3.11. Diese wurde im Jahr 2009 in Betrieb genommen und gilt seitdem als weltweit brillianteste Synchrotronstrahlungsquelle [26].



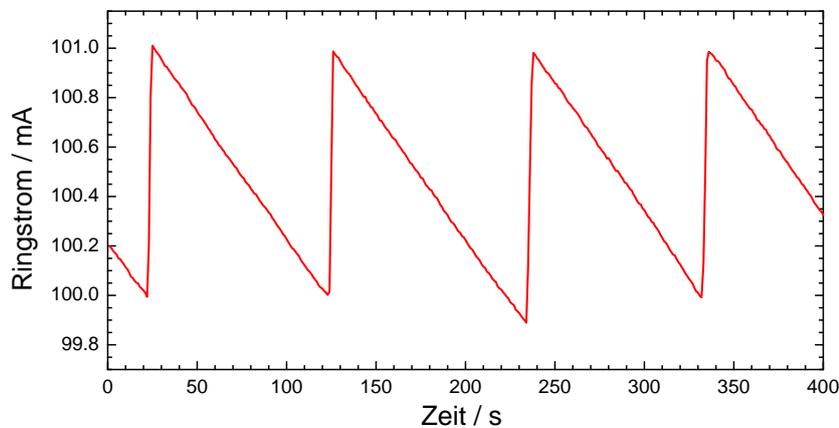
**Abb. 3.11:** Luftaufnahme der *PETRA III* Experimentierhalle „Max von Laue“.  
Bild: DESY [27]

### 3.2.1 Betriebsparameter

An insgesamt 14 Strahlrohren stehen Experimentierplätze für unterschiedlichste Anwendungen bereit. Jedem dieser Strahlrohre sind Undulatoren vorgeschaltet, die einen hoch brillanten Photonenstrahl erzeugen. An einigen Strahlrohren stehen 2 Undulatoren mit

einer Länge von 2 m zur Verfügung. Die anderen Strahlrohre sind mit einem 5 m langen Undulator ausgestattet. Eine Ausnahme bildet hier die Experimentierstation in Sektor 1, die über 2 Undulatoren je 5 m Länge verfügt und noch bis zu einer Gesamtlänge von 20 m aufrüstbar ist.

Der Speicherring wird mit Positronen betrieben, deren Energie bei 6 GeV liegt. Mit dem *Top-Up-Modus* verfügt *PETRA III* über die Möglichkeit, den festgelegten Ringstrom weitgehend konstant zu halten. Während des Betriebs werden deshalb immer wieder Positronen oder Elektronen in den Ring injiziert. Im aktuellen Betrieb beträgt der Ringstrom normalerweise 100 mA und wird mit einer Abweichung von 1 % konstant gehalten, vergleiche Abbildung 3.12.



**Abb. 3.12:** Ringstrom im *Top-Up-Modus* bei PETRA III. Der Abfall des Stroms wird durch Injektionen, die hier etwa alle 100 s stattfanden kompensiert.

### 3.2.2 Strahlrohr P01

Das Strahlrohr P01 hat mit allen optischen Elementen und Experimentierhütten eine Länge von rund 100 m. Es trägt den Beinamen *Dynamics Beamline* und wurde im November 2011 für den offiziellen Nutzerbetrieb freigegeben [100]. Konzipiert ist die Anlage für zwei experimentelle Bereiche, Kernresonanzstreuung (englisch: *Nuclear Resonant Scattering*, NRS) und inelastische Röntgenstreuung (englisch: *Inelastic X-ray Scattering*, IXS). Die Photonenenergie kann an diesem Strahlrohr zwischen 5 keV und 70 keV mit einer Auflösung von 1 eV bis 1 meV gewählt werden.

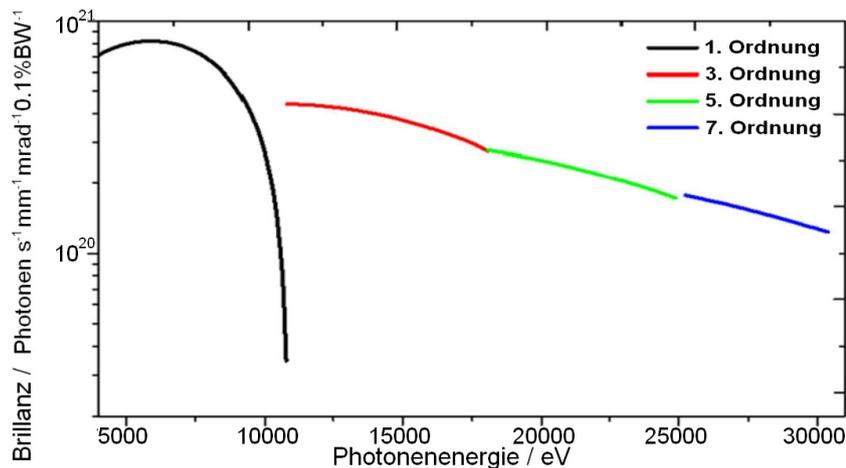
#### 3.2.2.1 Undulator

Der Photonenstrahl wird mit zwei Undulatoren je 5 m Länge erzeugt. Die  $2 \times 157$  Undulatorperioden  $\lambda_u$  sind jeweils 32 mm lang. In der zweiten Ausbauphase des Strahlrohres

kann die Zahl der Undulatoren verdoppelt werden, sodass dann insgesamt 20 m Undulatorstrecke zur Verfügung stehen werden. Die maximale Leistung des Undulators von derzeit 5,5 kW wird dadurch nochmals um einen Faktor 4 erhöht. Da wie in Abschnitt 2.5.2 beschrieben sich die Intensität beziehungsweise Leistung der Strahlung quadratisch mit der Zahl der Undulatorperioden erhöht.

Die spektrale Brillanz  $\mathfrak{B}$  ist ein Maß, um die Qualität von Strahlungsquellen vergleichen zu können und ein entscheidendes Kriterium für viele Experimente. Man versteht hierunter die Zahl der Photonen, die pro Sekunde, pro Raumwinkelelement, pro Frequenzintervall (Bandbreite, BW) und pro emittierender Fläche erzeugt werden. Die höchste Brillanz  $\mathfrak{B}_{\max}$  an P01, wird bei einer Photonenenergie von etwa 6 keV erreicht, wie aus Abbildung 3.13 zu entnehmen ist.

$$\mathfrak{B}_{\max} \approx 8 \times 10^{20} \frac{\text{Photonen}}{\text{s} \cdot \text{mm}^2 \cdot \text{mrad}^2 \cdot 0,1 \% \text{BW}} \quad (3.1)$$



**Abb. 3.13:** Brillanz des PETRA III Strahlrohres P01 in Abhängigkeit der Photonenenergie bei minimalem Abstand der Magnetpole von 12,7 mm. Der Bereich verschiedener Ordnungen der Undulatorstrahlung ist farblich gekennzeichnet. Abbildung nach [103].

### 3.2.2.2 Monochromator

Die hohe Energieauflösung des Strahlrohres wird durch einen Monochromator, bestehend aus zwei Silizium-Einkristallen, gewährleistet. Eine Blende mit typischen Spaltmaßen von 0,6 mm × 1,6 mm (H × B) reduziert die Leistung der Undulatorstrahlung, die auf den Monochromator trifft. Bei einer Photonenenergie von 6,7 keV ist die Hitzelast auf den Monochromator auf rund 240 W vermindert, dennoch müssen die Kristalle mit flüssigem Stickstoff gekühlt werden, um schwerwiegende Beschädigungen der Kristalle zu verhinder-

dern. Bei einer Bandbreite von 100 eV und einer Energieauflösung von 0,2 eV passieren rund  $10^{15}$  Photonen pro Sekunde den Monochromator.

Zwei unterschiedlich geschnittene Siliziumkristalle stehen dem Nutzer zur Verfügung. Der Kristall für den (111)-Reflex liefert bei 6,6 keV eine Auflösung von etwa 1 eV. Mit dem zweiten Kristall, den (311)-Reflex nutzend, wird bei gleicher Energie eine Auflösung von etwa 0,2 eV erreicht. Der Photonenfluss hinter dem Si(311)-Kristall ist entsprechend geringer. Die erwähnte Auflösung von 1 meV kann mit diesen Kristallpaaren nicht erreicht werden. Für Streuexperimente an der  $^{57}\text{Fe}$  Kernresonanz bei 14,4125 keV (Eisen-Mößbauerlinie) wird ein Monochromator mit vier Siliziumkristallen, je zwei den (400)- und den (10 6 4)-Reflex nutzend, eingesetzt. Dieser erreicht die beschriebene 1 meV Auflösung, kann indessen aber nur ein schmales Energiefenster um die Resonanzlinie abdecken.

Die Steuersoftware des Strahlrohres schreibt für jeden durchgeführten Scan der Photonenenergie am Monochromator die Energiewerte der Einzelschritte mit weiteren Parametern in eine eigene Logdatei. Der Steuersoftware wird zur Kalibrierung bei einer Winkelposition ein Energiewert übergeben. Der absolute Winkel zwischen der Kristalloberfläche und der Achse des einfallenden Photonenstrahls und damit der Nullpunkt der Winkelskala, kann so jedoch nicht festgelegt werden. Der für die Energiewertberechnung der Logdateien angenommene Braggwinkel ist um eine konstante Phase  $\Phi_0$  verschoben.

Die erste Hälfte der Messzeit 2011 erfolgte bei einer internen Fehleinstellung der Winkelsteuerung des Monochromators. Einer der Parameter wurde mit einem Faktor 10 zu kleinen Wert bewegt, was letztlich dazu führte, dass der Photonenstrahl nicht mehr auf den Kristall, sondern auf eine der Kühlleitungen aus Kupfer traf. Durch die lokale Hitzelast wurde die Leitung beschädigt und Stickstoff flutete die Monochromatorkammer. Dieses Problem konnte glücklicherweise behoben und die Strahlzeit nach Abschluss der Reparaturen fortgesetzt werden.

### 3.2.2.3 Fokussierung

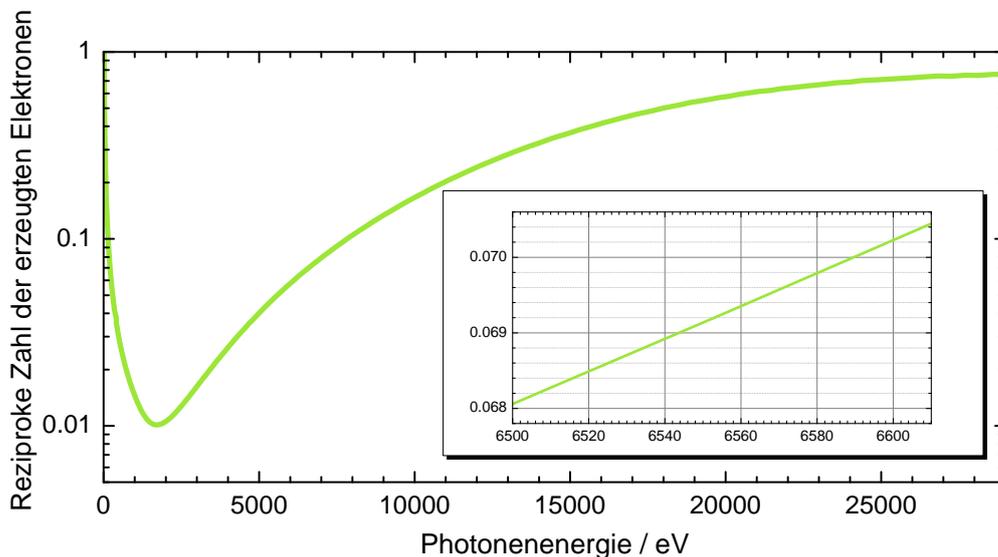
Der unfokussierte Photonenstrahl weitet sich auf und erreicht eine Größe von bis zu mehreren Quadratmillimetern im Querschnitt. Viele Anwendungen erfordern einen hohen Photonenfluss, konzentriert auf einen kleinen Bereich. Eine *Kirkpatrick-Baez*-Optik (KB), bestehend aus zwei, zueinander senkrecht stehenden, axialen Parabolspiegeln, ermöglicht es, den unter streifendem Einfall reflektierten Röntgenstrahl sowohl horizontal als auch vertikal zu fokussieren [54]. Die KB-Optik wurde erst wenige Wochen vor Beginn der zweiten Strahlzeit, im Jahr 2012 in P01 installiert. Der Fokus konnte auf etwa  $200\ \mu\text{m} \times 200\ \mu\text{m}$  gewählt werden, sodass er ähnlich groß war wie die Ionenwolke in der EBIT.

Während der ersten Messreihe 2011 musste ein anderes System verwendet werden. Zur Fokussierung des Strahls kamen Berylliumlinsen zum Einsatz [95]. Diese waren bi-konkav

geformt und hatten eine minimale Stärke von  $100\ \mu\text{m}$ . Der Radius der 4 Linsen für die horizontale Fokussierung des Strahls betrug  $1,5\ \text{mm}$ . Für die vertikale Fokussierung wurden 2 Linsen mit einem Radius von  $0,5\ \text{mm}$  verwendet. Der so gebündelte Strahl erreichte lediglich eine Größe von etwa  $600\ \mu\text{m} \times 900\ \mu\text{m}$  (V×H).

### 3.2.2.4 Intensitätsmessung

Die Intensität des Photonenstrahls wurde mit einer beziehungsweise mehreren mit Stickstoff gefluteten Ionisationskammern der Firma *ADC USA* überwacht. Das Datenaufnahmesystem von P01 erhielt ein zu dem an der Ionisationskammer gemessenen Strom proportionales Frequenzsignal. Eine Umrechnung des energieabhängigen Signals in Photonenfluss war nicht notwendig, um benachbarte Messpunkte vergleichen zu können. Der Umrechnungsfaktor (Ampere in Photonen  $\text{s}^{-1}$ ) ändert sich im Bereich einiger eV, die zur Bestimmung einzelner Übergänge vermessen wurden, weniger als 1%, und dies liegt deutlich unterhalb der Messgenauigkeit des Signals. In Abbildung 3.14, ist die proportional zum Umrechnungsfaktor verlaufende Kurve dargestellt, die die reziproke Zahl der erzeugten Ladungen pro Photon angibt. Die Kurve wurde aus der energieabhängigen Absorption der Photonen nach [46] berechnet. Grundlage der Berechnungen ist ein  $6\ \text{cm}$  langer mit Stickstoff bei Normaldruck gefüllter Absorptionsbereich. Die Zahl der bei vollständiger Absorption erzeugten Elektronen wurde durch Division der Photonenenergie mit dem Ionisationspotential der Stickstoffatome  $I_N = 14,55\ \text{eV}$  [34] bestimmt.

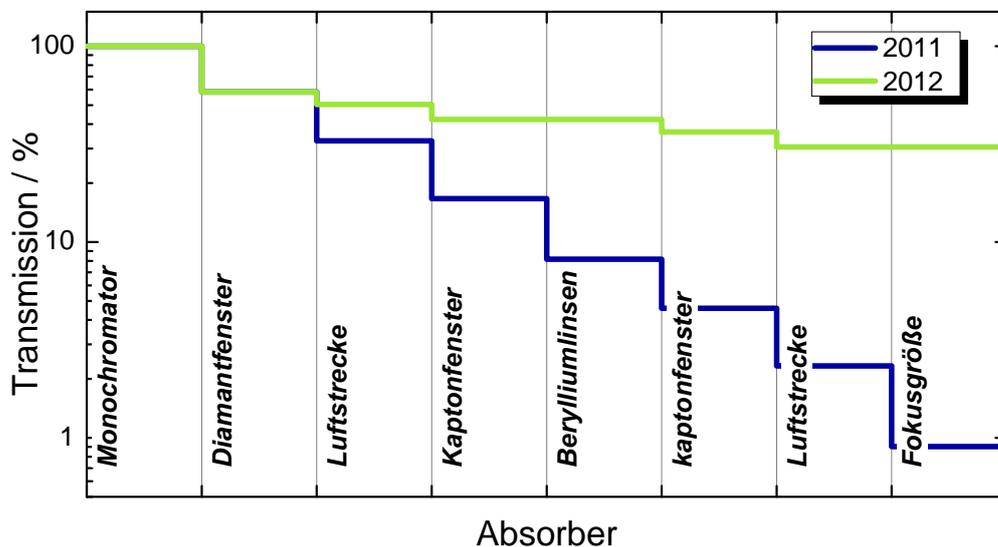


**Abb. 3.14:** Verlauf der reziproken Zahl der Elektronen, die in einer  $6\ \text{cm}$  langen, mit Stickstoff gefluteten Ionisationskammer pro Photon erzeugt werden. Der Energiebereich um  $6550\ \text{eV}$  ist vergrößert dargestellt.

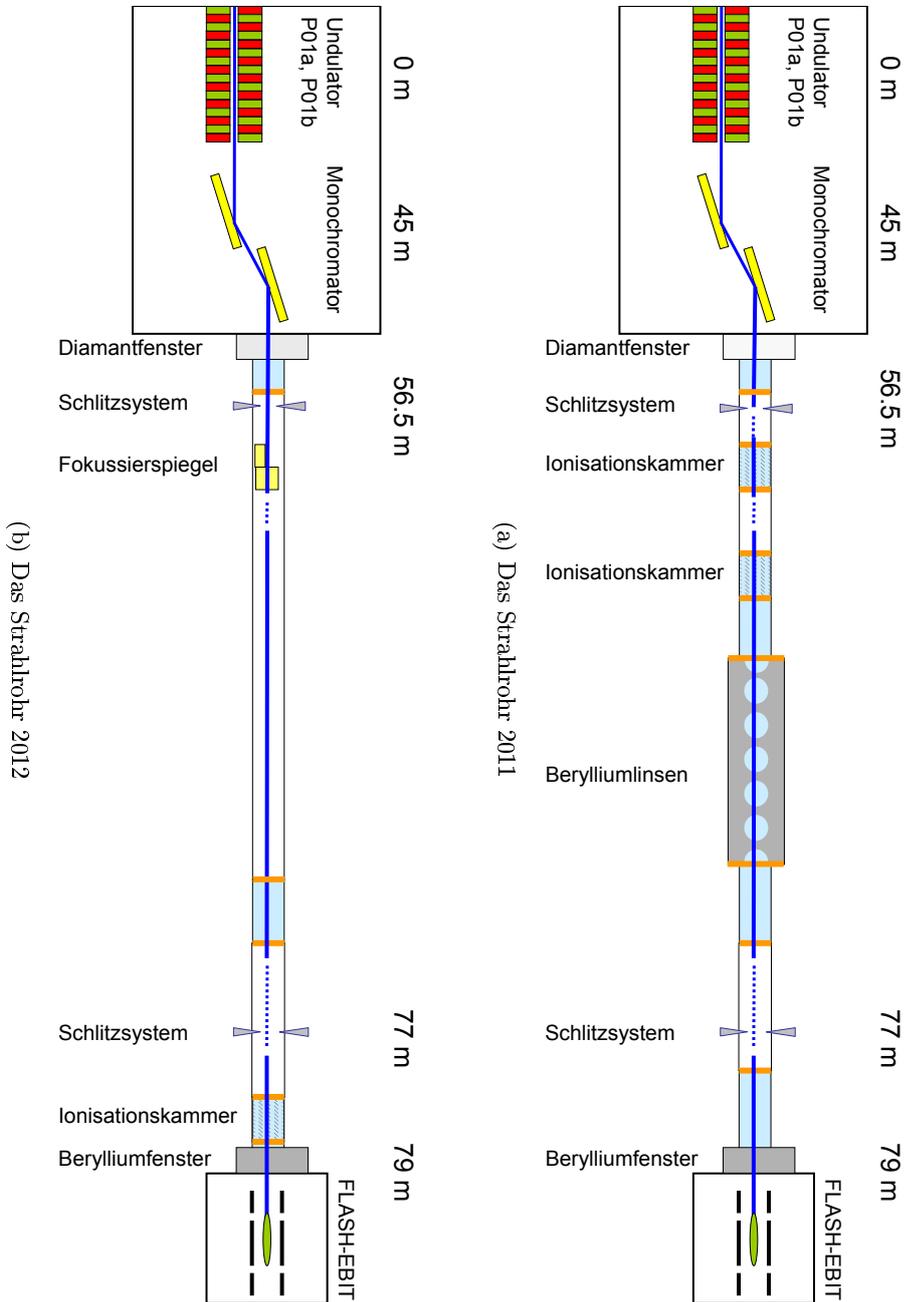
### 3.2.2.5 Absorption

Der Strahlengang vom Monochromator bis zum Experiment befindet sich nicht durchgehend in einem evakuierten Rohr. An vielen Stellen musste das Vakuumrohr unterbrochen werden, um beispielsweise eine Ionisationskammer in den Strahlengang zu bringen oder die Berylliumlinsen zu platzieren. Allein durch diese Elemente im Strahlengang wird ein nicht unerheblicher Teil des Photonenstrahls absorbiert. Darüber hinaus sind die Vakuumrohrstücke mit Kaptonfenstern verschlossen, die ebenfalls Photonen absorbieren. Gerade auch die Luftstrecken wirken sich sehr nachteilig auf die Photonenintensität aus. Insbesondere gilt dies für Photonen mit relativ geringer Energie unter 10 keV, so wird bei Normaldruck ein Photonenstrahl mit der Energie von 5 keV zu 99 % in 1 m Luft absorbiert, für 13 keV sind es nur etwa 20 % [46]. Der Einfluss möglicher Absorber im Strahlengang hat also einen entscheidenden Anteil auf den Photonenfluss der letztlich dem Experiment zur Verfügung steht. In Abbildung 3.16 ist schematisch dargestellt, wie das Strahlrohr für beide Messzeiten aufgebaut war.

Vor dem zweiten Experiment wurde gezielt daran gearbeitet, Luftstrecken und die Zahl der Fenster, die der Photonenstrahl passieren musste, auf das Notwendigste zu minimieren. Dies zeigte deutlichen Erfolg, wie in Abbildung 3.15 qualitativ dargestellt ist. Der Übersichtlichkeit halber sind darin mehrere Absorber zu einem Punkt zusammengefasst. Rund 30 mal mehr Transmission zum Experiment wurde 2012, im Vergleich zu 2011 erreicht.



**Abb. 3.15:** Qualitativer Einfluss der Absorbermaterialien im Strahlengang auf die Photonen-Transmission, bei einer Strahlenergie von 6,7 keV, nach *Henke et al.* [46]. Der Punkt Fokusgröße berücksichtigt, welcher Anteil der Photonen in der Wechselwirkungszone der EBIT verfügbar war.



**Abb. 3.16:** Der Aufbau des Strahlrohrs P01 bei *PETRA III* während der beiden Messzeiten in den Jahren 2011 und 2012. Die Darstellung ist nicht maßstabgetreu. Sie gibt einen Überblick über den Strahlgang und die darin befindlichen Elemente. Der Strahlverlauf ist dunkelblau markiert. Luftstrecken sind hellblau hinterlegt, weiße Rohrstücke befinden sich unter Vakuum und Kaptonfenster sind orange dargestellt.

### 3.3 Messschema

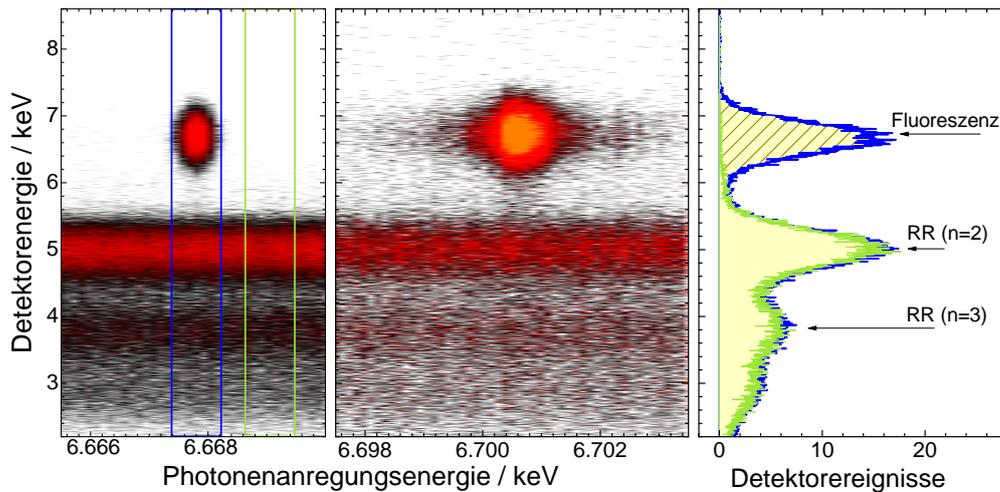
Nachdem zuvor die Experimentieranlagen vorgestellt wurden, soll hier näher auf das verwendete Messschema eingegangen werden. Zunächst muss wie in Abschnitt 3.1.3 beschrieben sicher gestellt sein, dass die Ionenwolke in der FLASH-EBIT mit dem Photonenstrahl des Strahlrohres koaxial perfekt überlappt. Um die Elektronen der K-Schale in heliumartigen Eisenionen anzuregen, werden Energien von etwa 6700 eV benötigt. Zur Untersuchung der atomaren Struktur der Ionen soll die Anregungsenergie durch den Photonenstrahl erbracht werden, nicht jedoch durch den Elektronenstrahl der EBIT. Die Photonenenergie kann mit Hilfe des Monochromators am Strahlrohr P01 schrittweise variiert werden.

Ziel ist es, mit den verwendeten Detektoren ein von der Anregungsenergie abhängiges Fluoreszenzsignal aufzunehmen. Um nicht nur sehr starke resonante Übergänge spektroskopisch untersuchen zu können, muss das Untergrundsignal minimiert werden. Das bedeutet, dass möglichst keine Wechselwirkung der Elektronen mit den Ionen in der EBIT stattfinden soll, die zu einer Abstrahlung elektromagnetischer Wellen im Energiebereich der untersuchten Übergänge führt. Insbesondere soll die Elektronenstrahlenergie unterhalb der Anregungsenergie der zu untersuchenden Übergänge gewählt werden, so dass eine Anregung durch den Elektronenstrahl ausgeschlossen werden kann.

Um ebenfalls Photonenuntergrund aus radiativer Rekombination der Elektronen mit den Ionen zu unterdrücken, darf die Elektronenstrahlenergie 3400 eV nicht übersteigen. Die maximale Photonenenergie bei einer Rekombination in die  $n = 2$  Schale liegt dann bei rund 5600 eV. Trotz der geringen Energieauflösung der Photonendetektoren von 400 eV (vergleiche Abschnitt 3.1.4) kann ein Fluoreszenzsignal bei 6400 eV eindeutig vom Untergrund unterschieden werden. Mit Abbildung 3.17 wird das Emissionsspektrum der Ionenwolke in Abhängigkeit von der Photonenanregungsenergie veranschaulicht.

Es ist zu berücksichtigen, dass die zu untersuchende Ionensorte in ausreichender Zahl durch Elektronenstoßionisation produziert werden muss. Zur Erzeugung von heliumartigen Eisenionen,  $\text{Fe}^{24+}$ , ist mindestens das Ionisationspotential von 2047,5 eV zu überwinden. Um die Erzeugungsrate zu erhöhen, sollte die Elektronenstrahlenergie einige 100 eV oberhalb der Schwelle liegen, was zu einem Konflikt mit der Vermeidung von Untergrundereignissen, wie zuvor beschrieben, führen kann. Für die hier durchgeführten Messungen wurde eine Elektronenstrahlenergie zwischen 2800 eV und 3200 eV gewählt. In diesem Energiebereich war eine ausreichende Produktion der höchsten Ladungszustände, als auch eine deutliche Trennung der Fluoreszenzsignale von Photonen aus RR-Prozessen gewährleistet.

Die Ionenfalle wird in regelmäßigen Abständen durch Erhöhen des Fallenpotentials



**Abb. 3.17:** Links / Mitte: Intensitätsdarstellung der detektierten Photonenergie in Abhängigkeit der Anregungsenergie. Rechts: Zahl der detektierten Photonen in Abhängigkeit ihrer Energie, für zwei Bereiche des linken Spektrums. Die grüne Kurve zeigt das Detektorspektrum ohne, die blaue Kurve mit resonanter Photonenanregung.

geleert, man spricht von einem „Dump“. Wolfram und Barium, die von der Kathode freigesetzt werden, können neben den gewünschten Eisenionen in der Falle gespeichert werden. Diese vergleichsweise schweren Elemente erreichen bei gleicher Ionisierungsenergie einen höheren Ladungszustand als Eisen und werden dementsprechend stärker in der Falle gebunden. Um eine Verdrängung der leichteren Eisenionen durch den allmählich steigenden Wolfram- und Bariumanteil in der Falle zu unterbinden, muss diese regelmäßig geleert werden. Ein solcher Dump-Zyklus dauerte bei den hier durchgeführten Messungen an heliumartigen Eisenionen 15 s bis 60 s.

### 3.4 Datenaufnahme

Zur Datenaufnahme wurde ein System, der Firma *FAST ComTec Communication Technology GmbH*, mit der Bezeichnung *MPA-3* (englisch: „Multiparameter Analyser“), verwendet [36]. Mit diesem System können an bis zu 16 Anschlüssen digitale Parameter aufgenommen werden. Es setzt sich aus einzelnen, miteinander verbundenen Modulen mit 4 ADC-Eingängen (englisch: „analog-to-digital converter“) zusammen. Das Hauptmodul wird über eine PCI-Karte eines Rechners und die Steuerungs- und Aufnahmesoftware „*MPANT*“ betrieben. Die Verarbeitungsgrenze des Systems wird mit  $6 \times 10^6$  Ereignissen pro Sekunde angegeben.

Die ADC-Eingänge nehmen Signale der ebenfalls von *FAST ComTec Communication Technology GmbH* hergestellten Digitalwandler „7072T Dual Timing“ [35] auf. Diese

Module ermöglichen es, das *MPA-3*-System auf sehr vielfältige Problemstellungen auszurichten, da zur Verarbeitung sehr unterschiedlicher Signale 3 verschiedene Betriebsarten gewählt werden können.

**PHA** (englisch: „Pulse Height Analysis“)

Das Maximum eines Pulses wird gemessen und digitalisiert, zusätzlich wird auf dem Monitorausgang ein TTL-Signal erzeugt. Die Pulshöhen müssen zwischen 0,025 V und 10 V liegen, um als Signalpuls erkannt, beziehungsweise vollständig erfasst zu werden.

**SVA** (englisch: „Sampling Voltage Analysis“)

Analoge Spannungssignale zwischen 0 V und 10 V können im SVA-Betrieb digitalisiert werden. Die anliegende Spannung wird nur gemessen, wenn am so genannten „GATE“ eine ansteigende Flanke, beispielsweise eines TTL-Signals, registriert wird.

**TDC** (englisch: „Time-to-Digital Conversion“)

Die Zeit zwischen den abfallenden Flanken zweier NIM-Pulse an den Eingängen „START“ und „STOP“ wird gemessen. Man kann eines von 9 Zeitfenstern, von 50 ns bis 20  $\mu$ s wählen, innerhalb dessen die gemessenen Zeitspannen digitalisiert werden.

Mittels der Software *MPANT* startet und stoppt man einzelne Messreihen. Außerdem liest die Software ein Mal in der Sekunde jeden verwendeten Kanal aus und aktualisiert zugehörige Diagramme. Bereits während der laufenden Messung kann so eine Beurteilung der gewonnenen Daten erfolgen. Für eine spätere eingehende Analyse wird eine Datei angelegt in die die mit einem Zeitstempel versehenen Einzelereignisse geschrieben werden.

### 3.4.1 Detektorsignale

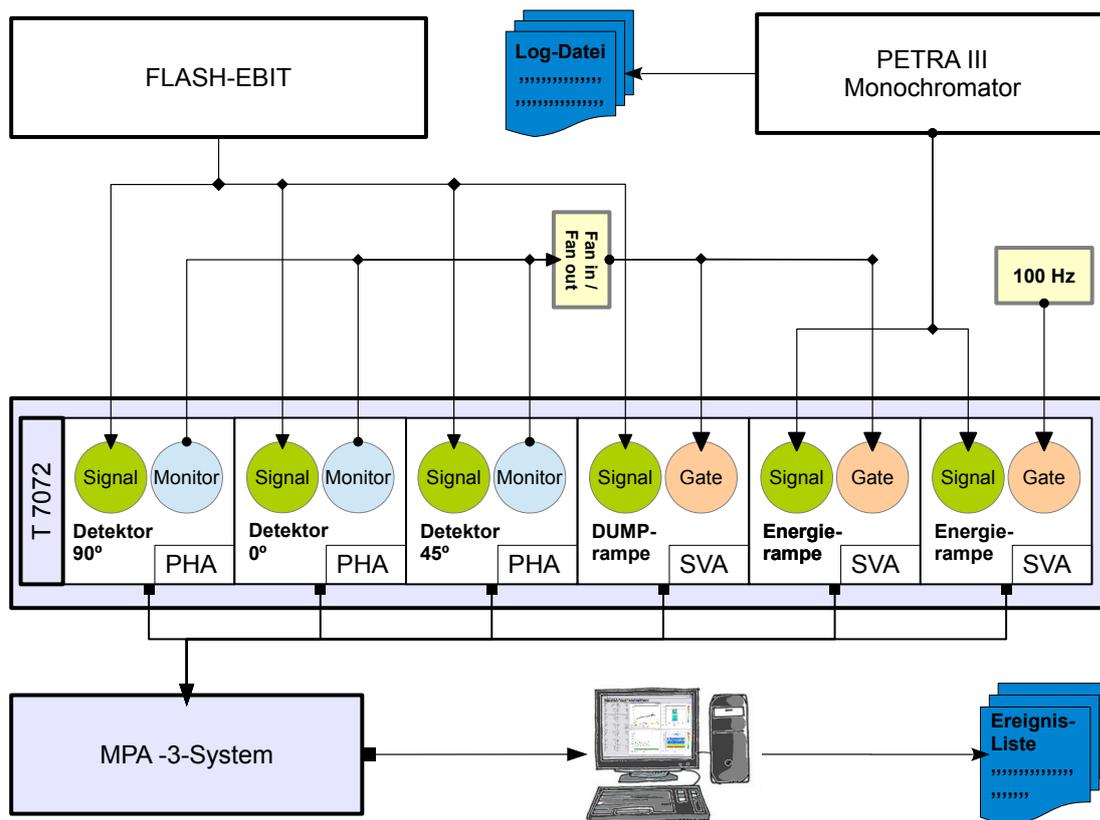
Die verwendeten Germaniumdetektoren erzeugen Spannungspulse, deren Höhe abhängig von der Energie des auftreffenden Photons ist. Sie haben eine Amplitude von wenigen mV und werden, um vom *MPA*-System registriert werden zu können, in einem Spektroskopie-Verstärker weiter verarbeitet. Es wurden Spektroskopie-Verstärker der Firma *ORTEC*<sup>®</sup> mit der Modellnummer 672 verwendet [74]. Diese geben das verstärkte Spannungssignal als positiven Puls aus, welcher dann an einen im PHA-Modus betriebenen ADC weitergeleitet wird.

### 3.4.2 Weitere Parameter

Um die erhaltenen Detektorsignale, der von *PETRA III* gelieferten Photonenenergie zuordnen zu können, wird für jedes Ereignis und jeden Detektor ein analoges Spannungssignal von einem ADC im SVA-Modus gelesen. Das einzulesende Spannungssignal im

Bereich zwischen 0,5 V und 9,5 V wird mittels eines separaten Programms, das im lokalen Netzwerk die Photonenenergie des Monochromators ausliest, erzeugt. Der zugehörige Energiebereich war von Durchlauf zu Durchlauf anpassbar. Ein zweiter ADC nahm dieses Signal, unabhängig von den Detektoren, 100 Mal in der Sekunde auf, wozu er mit TTL-Pulsen eines Funktionsgenerators ausgelöst wurde.

Das Steuerprogramm des Dump-Zyklus (vergleiche Abschnitt 3.3, Seite 56) gibt ebenfalls ein analoges Spannungssignal aus. In der Zeit zwischen zwei Entleerungen der Falle, wird eine Spannungsrampe von 0,5 V bis 7,5 V ausgegeben. Während eines Dumps läuft das Spannungssignal von 8,5 V bis 9,5 V. Damit ist eine klare Trennung beider Zustände gegeben. Diese Spannungsrampe wird ebenfalls zusammen mit jedem Detektorereignis digitalisiert.



**Abb. 3.18:** Schematische Darstellung des Datenaufnahmesystems und der registrierten Signale.

### 3.4.3 *PETRA III* Datenaufnahme

Die Steuerungssoftware des Strahlrohres erzeugt für jeden Scan eine eigene Logdatei. Darin ist wie bereits in Abschnitt 3.2.2.2 beschrieben, für jeden Schritt des Monochromators die Photonenenergie gespeichert. Außerdem werden der aktuelle Ringstrom des Synchrotrons und das Intensitätssignal des Photonenstrahls für jeden Energieschritt des Monochromators digitalisiert. Die Kopfzeile der Datei beinhaltet darüber hinaus eine Liste der während eines Scans unveränderten Parameter und ihrer Werte.

## 3.5 Datenanalyse

Ziel der Datenanalyse ist es, aus der Gesamtheit aller registrierten Photonen die Fluoreszenzsignale der Spektren zu separieren und auszuwerten. Aus den Linienprofilen sollen die Mittenenergie und die Linienbreite bestimmt werden. Insbesondere die natürliche Linienbreite eines Übergangs ist ein wichtiges zu untersuchendes Merkmal.

Es bedarf zunächst einer Vorbereitung der Messdaten, die an Hand des Analyseschemas der Messzeit 2012 erläutert wird.

### 3.5.1 Zuordnung der *MPA*- und *PETRA III* Logdaten

Die mit *MPANT* als Ereignisliste gespeicherten Messungen müssen den zugehörigen Logdateien der Monochromatorsteuerung zugeordnet werden. Beide Dateien sind mit Zeitstempeln versehen, die im ASCII-kodierten Dateikopf ausgelesen werden können und lassen sich darüber leicht vergleichen. Nach der Zuordnung liegt in digitaler Form ein vereinter Datensatz des durchlaufenen Energiebereichs und die Zahl der Energieschritte für die *MPA*-Daten vor.

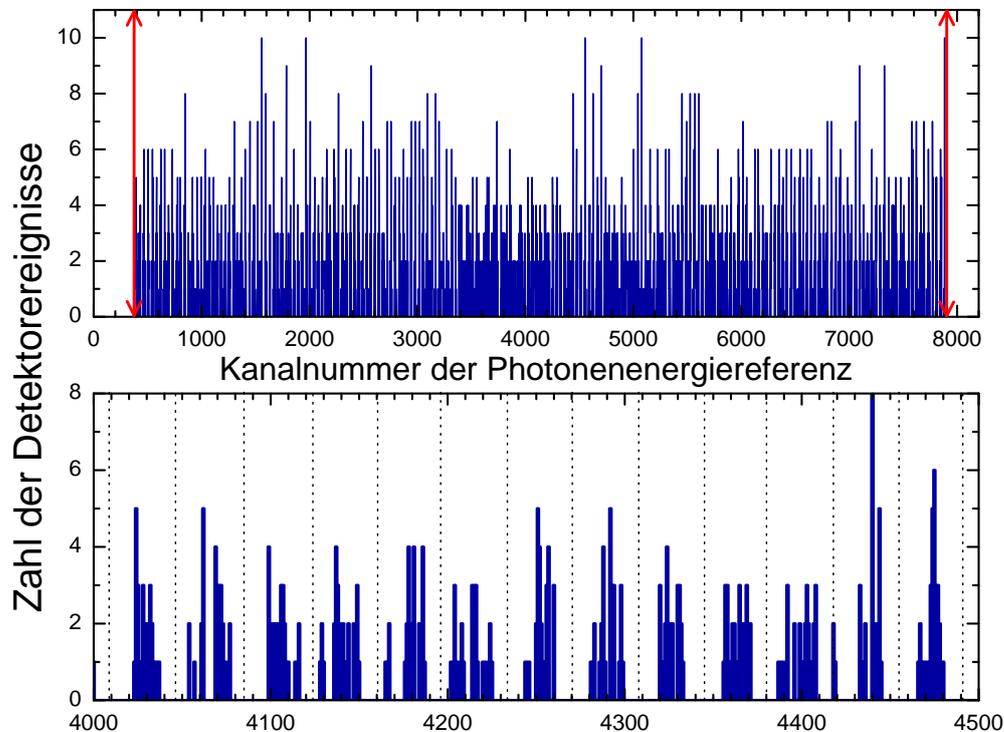
### 3.5.2 Vereinfachung der *MPA*-Ereignislisten

Das Format der *MPA*-Ereignislisten ist nicht vollständig in ASCII-Schreibweise. Der Datenteil ist binär kodiert [36]. Um später einfacheren Zugriff zu haben, wurden die Ereignislisten zunächst mit einem in der Programmiersprache *Lua* [51] geschriebenen Skript, unter Verwendung der von *Sven Bernitt* erstellten Bibliothek *lualst2.dll* [11], abgearbeitet und für jeden Detektor in eine separate ASCII-Liste aufgeteilt. Diese Listen enthalten die Kanalnummer der Photonenenergie rampe, des Detektorsignals und des Dumpsignals. Für die mit 100 Hz digitalisierte Photonenenergie rampe wurde ein Histogramm in einer separaten Datei erstellt. Dieses Photonenenergie referenzsignal  $T_{\text{ref}}(E_\gamma)$  repräsentiert die Verweildauer des Monochromators bei jedem Energieschritt. Weitere Skripte zur Analy-

se und Auswertung der Daten sind in der Programmiersprache *Python* [79] im Rahmen dieser Arbeit entstanden.

### 3.5.3 Voranalyse

Die digitalisierte Photonenenergieampe wurde nicht für alle Messungen auf den gleichen Kanalbereich abgebildet. Es musste daher für ein späteres Binning der Daten ein Histogramm mit der Zahl der Detektorereignisse pro Kanal der Energierampe erstellt und daraus von Hand der Aufnahmebereich festgelegt werden. Siehe hierzu auch Abbildung 3.19. Es folgt eine Unterteilung des Spektrums in, der Zahl der durchgeführten Energieschritte entsprechend viele, gleichgroße Bereiche. Die Zählereignisse innerhalb eines solchen Segments werden zu einem Eintrag zusammengefasst.

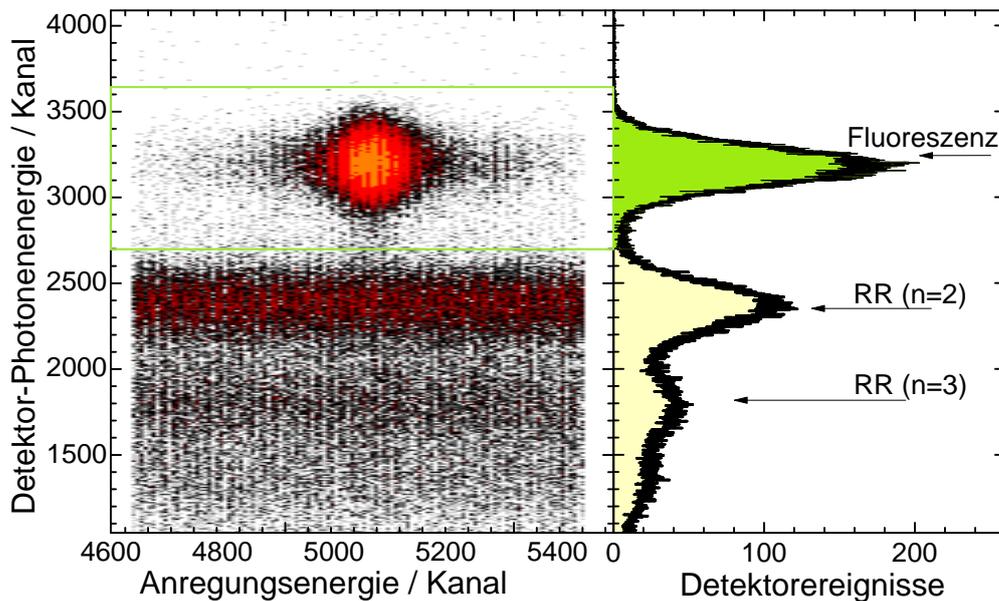


**Abb. 3.19:** Ereigniszahl der Photonenenergieferenzkanäle. An Hand dieser Spektren wurden die Kanäle für den durchfahrenen Energiebereich festgelegt (oben, rote Markierungen). Unten: In der Vergrößerungsansicht ist die klare Unterteilung des Bereichs in äquidistante Energieschritte mit gestrichelten Linien hervorgehoben.

Eine zweidimensionale Darstellung der Detektorereignisse in Abhängigkeit von der Energie der Synchrotronstrahlung (Spannungsrampe der Photonenenergie) zeigt das eindeutig vom konstanten Untergrund abgesetzte, energieabhängige Fluoreszenzsignal, wie in Abbildung 3.20 dargestellt. Nach einer Analyse der zweidimensionalen Spektren, wurde

der auszuwertende Kanalbereich für die Detektoren festgelegt. Innerhalb dieses Bereichs treten alle Fluoreszenzereignisse auf, jedoch keine Untergrundphotonen aus Wechselwirkungen des Elektronenstrahls mit den Ionen der Falle. Dies gilt für die folgenden Kanalbereiche:

IGLET-Detektor ( $45^\circ$ )	Kanal: 2700 – 3200
vertikaler GLP-Detektor ( $90^\circ$ )	Kanal: 2700 – 3650
horizontaler GLP-Detektor ( $180^\circ$ )	Kanal: 1700 – 2400

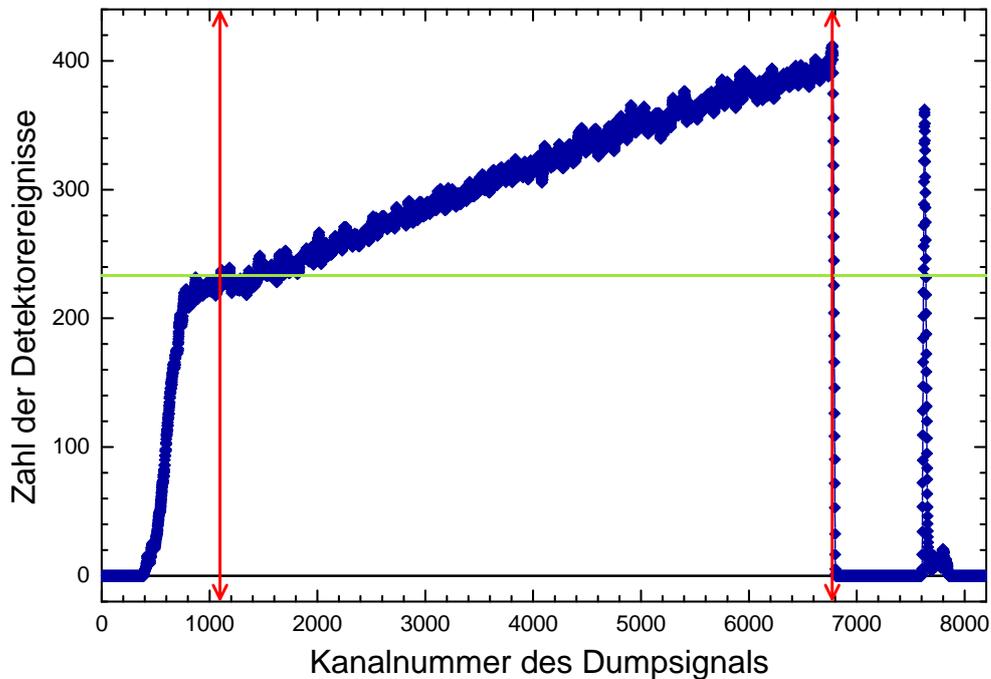


**Abb. 3.20:** Links: Typisches Photonenemissionsspektrum. Deutlich zeichnet sich das von der Anregungsenergie abhängige Signal über dem konstanten Untergrund ab. Für die Auswertung berücksichtigte Fluoreszenzphotonen markiert der grüne Kasten. Unterhalb dieses Bereichs beginnt der durch Elektronenstoßanregung verursachte Untergrund. Die horizontalen Bänder erhöhten Untergrundsignals sind auf RR mit Einfang eines Elektrons in die  $n = 2$  und  $n = 3$  Schale zurückzuführen. Rechts: Detektierte Untergrundphotonen (gelb), Fluoreszenzphotonen (grün).

### 3.5.4 Nichtberücksichtigung von Daten während eines Dumps

In Abbildung 3.21 ist ein typischer Verlauf der Zahl aller registrierten Photonen eines Spektrums der Kampagne 2012 in Abhängigkeit des Dumpsignals dargestellt. Nach einem Dump füllt sich die Falle wieder sehr schnell mit Ionen, erkennbar an der steil ansteigenden Flanke im ersten Drittel der Kurve. Danach folgt ein Knick und die registrierte Photonenzahl steigt deutlich langsamer. Neben dem Knick ist folgender charakteristischer

Punkt der Kurve wichtig für die Auswertung. Beginnt das Entleeren der Falle, macht das Signal einen Sprung, was zu einer breiten Lücke im Spektrum 3.21 führt. Diese trennt die Bereiche mit geöffneter beziehungsweise geschlossener Falle.

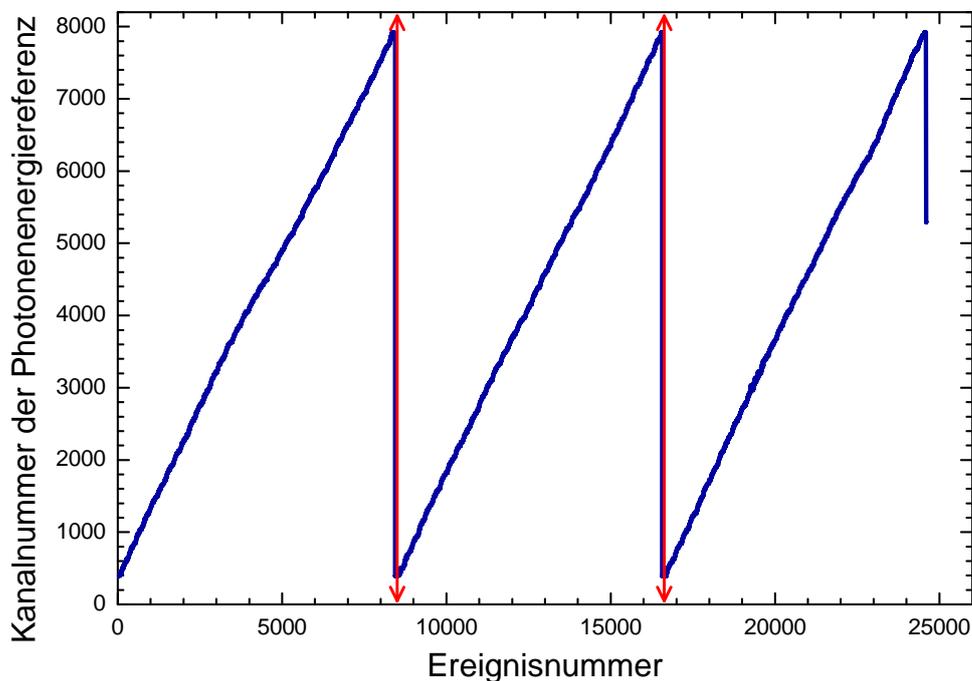


**Abb. 3.21:** Typischer Verlauf der Zahl der detektierten Photonen in einem Dump-Zyklus. Während des Entleerens der Falle (Kanal 7600 bis 7900) werden zunächst viele Photonen detektiert bevor keine emittierenden Ionen mehr vorhanden sind. Nach dem Dump beginnt sich die Falle erneut zu füllen, die Zahl der Detektorereignisse nimmt nach einem anfangs steilen Anstieg nur noch moderat zu (Kanal 400 bis 6900).

Nur nach dem Wiederauffüllen und vor dem Entleeren können stabile Bedingungen in der Falle für die Ionen angenommen werden. Die Auswahl der Detektorereignisse innerhalb dieses Bereichs erfolgt durch Bestimmung der Position des Knicks der Kurve und dem senkrechten Abfall mit folgendem Algorithmus. Zunächst wird mit einem gleitenden Durchschnitt das Spektrum geglättet um unerwünschte Ausreißer zu eliminieren. Wie sich gezeigt hat, kann das Ende der steilen Flanke sehr gut mit dem erstmaligen Erreichen des Mittelwerts der Ereignisse pro Kanal beschrieben werden. Erreicht im Anschluss der Wert eines Kanals Null, wird dieser beziehungsweise der Vorgänger zur oberen Grenze des Bereichs stabiler Fallenbedingungen erklärt. Zur Auswertung werden nun nur noch Detektorereignisse berücksichtigt, die das *MPA*-System zwischen den hier gefundenen Grenzen des Dump-Zyklus aufgenommen hat.

### 3.5.5 Trennung der Einzeldurchläufe

Nach der Vorabanalyse wurden in einem modifizierten Verfahren nochmals die Ereignislisten abgearbeitet. Waren mehrere Durchläufe des Energiescans in der gleichen Ereignisliste festgehalten, so ist für jeden einzelnen Durchlauf der Energierampe eine separate Datei, wie in Abschnitt 3.5.2 beschrieben, angelegt worden. Eine Trennung des Datensatzes fand jeweils dann statt, wenn die Kanalzahl der Energierampe die Schwelle bei 97% des bekannten Maximalwertes überschritten hatte und anschließend einen weiteren Schwellwert 100 Kanäle oberhalb des Minimalwertes unterschritt. Dieses Verfahren ist an Hand von Abbildung 3.22 nachzuvollziehen.



**Abb. 3.22:** Zeitliche Abfolge der digitalisierten Photonenenergiereferenz. Ist die festgelegte Schwelle, bei 97% des bekannten Maximalwertes, erreicht und anschließend wird der Energiebereich erneut durchfahren wird der Datensatz an dieser Stelle, markiert mit roten Trennlinien, geteilt.

### 3.5.6 Normierung des Fluoreszenzsignals

Im letzten Schritt der Datenanalyse wurden die Detektorsignale  $D$  in den Ereignislisten, nach den in den Abschnitten 3.5.3 und 3.5.4 diskutierten Bereichen, selektiert. Das „dump-freie“ Fluoreszenzsignal  $F$  wird anschließend durch den vom Elektronenstrahl produzierten Untergrund niedrigerer Energie  $U_{\text{EBIT}}$  geteilt. Schwankungen des Elektro-

nenstrahls, die sich auf die Ionenzahl in der Falle auswirken, werden so bereinigt, da eine Veränderung der Ionenzahl sich direkt in der Intensität des Untergrundsignals niederschlägt.

Unterschiedlich lange Verweildauern können zu Schwankungen der Intensität im Fluoreszenzsignal führen. Mit der Division durch das Photonenenergiereferenzsignal  $T_{\text{ref}}$  werden diese korrigiert. Es zeigte sich, dass der Monochromator innerhalb der Ausleseungenaugigkeit des Signals keinen zeitlichen Schwankungen unterlag.

Die Datensätze wurden nach den bisherigen Korrekturen, wie in Abschnitt 3.5.3 angekündigt, entsprechend der Zahl der Energieschritte des Scans einem Binning unterzogen. Danach erfolgte die Vereinigung mit den Photonenenergien aus der Logdatei der Monochromatorsteuerung, die darin ebenfalls enthaltenen Photonenstrahlintensitäten  $I_\gamma$  dienen dazu, das Fluoreszenzsignal auf den Photonenfluss zu normieren.

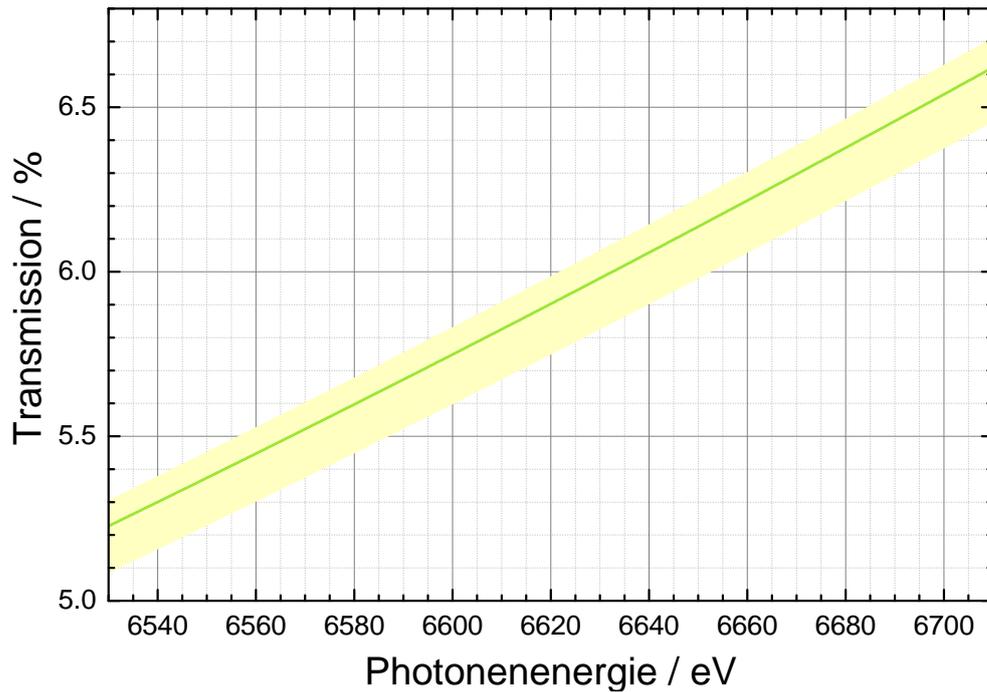
$$F_n = \frac{F}{U_{\text{EBIT}} \cdot T_{\text{ref}} \cdot I_\gamma} \quad (3.2)$$

### 3.5.7 Unterschiede der Analyse in 2011

Prinzipiell folgte die Analyse der in der Messzeit 2011 gewonnenen Daten demselben Schema wie im Jahr 2012. In der Datenaufnahme (Abschnitt 3.4) wurde jedoch weder ein Referenzsignal  $T_{\text{ref}}$  mit konstanter Frequenz digitalisiert noch das Dumpsignal mitgeschrieben. Schwankungen der Verweildauer pro Energieschritt können mit dem Referenzsignal  $T_{\text{ref}}$  korrigiert werden. Da sich 2012 zeigte, dass es im Rahmen der Messgenauigkeit keine Schwankung gab, kommt es durch die nicht erfolgte Korrektur zu keiner Beeinträchtigung der Qualität der Daten aus der ersten Kampagne, unter der Voraussetzung, dass zu diesem Zeitpunkt der Monochromator gleichermaßen arbeitete.

Der Einfluss des Entleerens der Falle auf das Photonsignal ist jedoch nicht vernachlässigbar. Eine verringerte Ionen Zahl bewirkt eine Abnahme der Detektorereignisse sowohl für Fluoreszenzphotonen als auch für solche des niederenergetischen Untergrunds. Durch die Normierung auf das Untergrundsignal, konnte so der Einfluss des regelmäßigen Dumps abgeschwächt werden.

Des Weiteren befand sich die Ionisationskammer zur Messung der Photonenstrahlintensität 2011 nicht direkt vor dem Eintrittsfenster der EBIT, wie dies in 2012 der Fall war, sondern weiter strahlaufwärts direkt hinter dem Monochromator. Der Strahl musste bis zur EBIT einige absorbierende Luftstrecken, sowie Kaptonfenster passieren (Abbildung 3.16). Mit den verwendeten Berylliumlinsen, die zum Fokussieren verwendet wurden, musste der Photonenstrahl weitere Absorber passieren, vergleiche Abschnitt 3.2.2.5. Aus der Länge der unterschiedlichen Flugstrecken in absorbierenden Materialien konnte mit der gemessenen Photonenstrahlintensität hinter dem Monochromator die effektive



**Abb. 3.23:** Energieabhängige Transmission des Photonenstrahls von der Ionisationskammer bis zum Experiment während der Kampagne 2011. Die in Abschnitt 3.2.2.5 beschriebenen Elemente im Strahlengang wurden entsprechend nach [46] in Bezug auf ihre energieabhängige Transmission ausgewertet.

Photonenstrahlintensität berechnet werden. Die Absorptionskoeffizienten der Absorbiermaterialien sind energieabhängig. Um den Photonfluss, der in der Wechselwirkungszone in der EBIT erreicht wird zu bestimmen, wurde die energieabhängige Absorption [46] mitberücksichtigt. Eine Darstellung der Ergebnisse der Transmission des Photonenstrahls vom Monochromator bis zum Experiment ist in Abbildung 3.23 zu finden.

### 3.5.8 Absolute Energiekalibrierung

Ziel ist es, für die gemessenen Linien eine absolute Energiekalibrierung zu finden. Nur so können die Messungen mit anderen experimentellen und theoretischen Werten verglichen werden. Der Monochromator des *PETRA III* Strahlrohres P01 liefert keine absoluten Energiewerte. Um diese angeben zu können, müssen die gemessenen Datensätze kalibriert werden. Darüber hinaus erfolgt die Umrechnung des Braggwinkels in Energie mittels der Gitterkonstanten von Silizium bei Raumtemperatur und dem Umrechnungsfaktor  $hc$  nach veralteten Standards. Der daraus resultierende Fehler betrifft die in den Logdateien protokollierten Werte jedoch nicht die relativen Winkeländerungen. Diese können somit die Grundlage einer Energiekalibrierung bilden.

	Steuersoftware	korrigierter Wert
$hc/\text{\AA}$	12 398,424 eV	12 398,419 30 (27) eV
$d_{111}(\text{Si})$	3,135 532 \AA	3,134 855 (4) \AA
$d_{311}(\text{Si})$	1,637 478 \AA	1,637 125 (2) \AA

**Tabelle 3.1:** Parameter wie sie in der Steuersoftware des *PETRA III* Strahlrohrs P01 verwendet werden [101] und die zur Kalibrierung verwendeten korrigierten Werte [69]. Die korrigierten Werte der Netzebenenabstände  $d_{hkl}$  wurden mit der Gitterkonstante von Silizium bei einer Temperatur von 80 K berechnet, (siehe auch Abschnitt 2.4.3).

Die Energiewerte der aufgenommenen Datensätze müssen entsprechend der Umrechnung aus der P01-Steuersoftware in den entsprechenden Braggwinkel umgewandelt werden, der sich von dem absoluten Winkel nur um einen konstanten Versatz unterscheidet. Eine Kalibrierung erfolgt durch Korrektur dieses Braggwinkels, woraus sich der absolute Energiewert errechnen lässt. Zu berücksichtigen sind dabei der genaue Umrechnungsfaktor  $hc$  nach CODATA 2010 [69] und vor allem die veränderte Gitterkonstante des Monochromators. Durch die Kühlung des Kristalls mit flüssigem Stickstoff muss der Wert der Gitterkonstante bei einer Temperatur von 80 K verwendet werden, (siehe Abschnitt 2.4.3). Bei der Auswertung der Fluoreszenzspektren kamen zwei unterschiedliche Methoden der Kalibrierung zur Anwendung.

### 3.5.8.1 Kalibrierung mit Referenzlinien

Bei der Kalibrierung mit einer Referenzlinie wurde als Referenz die genaueste experimentelle Absolutmessung einer Linie des Spektrums verwendet. In diesem Fall handelt es sich um die stärkste Linie in heliumartigem Eisen  $w$ , deren Übergangsenergie von *Kubiček* [59] zu 6700,442 (23) eV absolut bestimmt wurde. Die Messungen von *Kubiček* wurden mit einem Kristallspektrometer ebenfalls an der FLASH-EBIT durchgeführt. Mit der Bond-Methode konnten absolute Energien der Emissionslinien, der durch Elektronenstoß angeregten Ionenwolke ohne die Verwendung von Referenzlinien, bestimmt werden [58, 59].

Der Braggwinkel dieser Linie  $\vartheta_{\text{Bragg}}^{\text{ref}}(w)$ , aus der Referenzenergie für den verwendeten Reflex des Siliziumkristalls berechnet, dient als Ankerpunkt der Kalibrierung. Aus der relativen Winkeländerung am Kristall  $\Delta\vartheta_{\text{Bragg}}(i)$  eines jeden Messpunktes  $i$  mit  $\theta_{\text{Bragg}}^{\text{exp}}(i)$  zu dem für die Linie  $w$  gemessenen Braggwinkel  $\theta_{\text{Bragg}}^{\text{exp}}(w)$ ,

$$\Delta\vartheta_{\text{Bragg}}(i) = \theta_{\text{Bragg}}^{\text{exp}}(i) - \theta_{\text{Bragg}}^{\text{exp}}(w), \quad (3.3)$$

wird der korrigierte Braggwinkel  $\vartheta_{\text{Bragg}}^{\text{kalibriert}}(i)$ , auf der Grundlage des Referenzwertes

$\vartheta_{\text{Bragg}}^{\text{ref}}(w)$ , bestimmt. Daraus ergibt sich mit Gleichung (2.28) und  $E = \frac{hc}{\lambda}$  der absolute Energiewert.

$$\vartheta_{\text{Bragg}}^{\text{kalibriert}}(i) = \vartheta_{\text{Bragg}}^{\text{ref}}(w) + \Delta\vartheta_{\text{Bragg}}(i) \quad (3.4)$$

$$E^{\text{kalibriert}}(i) = \frac{h \cdot c}{2d_{\text{hkl}} \cdot \sin\left(\vartheta_{\text{Bragg}}^{\text{kalibriert}}(i)\right)} \quad (3.5)$$

### 3.5.8.2 Kalibrierung mit Absorptionskanten

Um unabhängig von anderen Messungen derselben Übergänge zu sein, wurde eine weitere Methode zur absoluten Kalibrierung angewendet. Als Referenz dienen dabei Transmissionskurven des Photonenstrahls in der Umgebung der K-Kanten verschiedener Metallfolien (Mn, Fe, Co, Ni, Cu). Diese Absorptionskanten sind von *Kraft et al.* [56] ausführlich untersucht und mit einer experimentellen Unsicherheit von 20 meV angegeben worden (siehe Tabelle 3.2). Die Messungen dieser Referenzenergien wurden mit einem Mono-

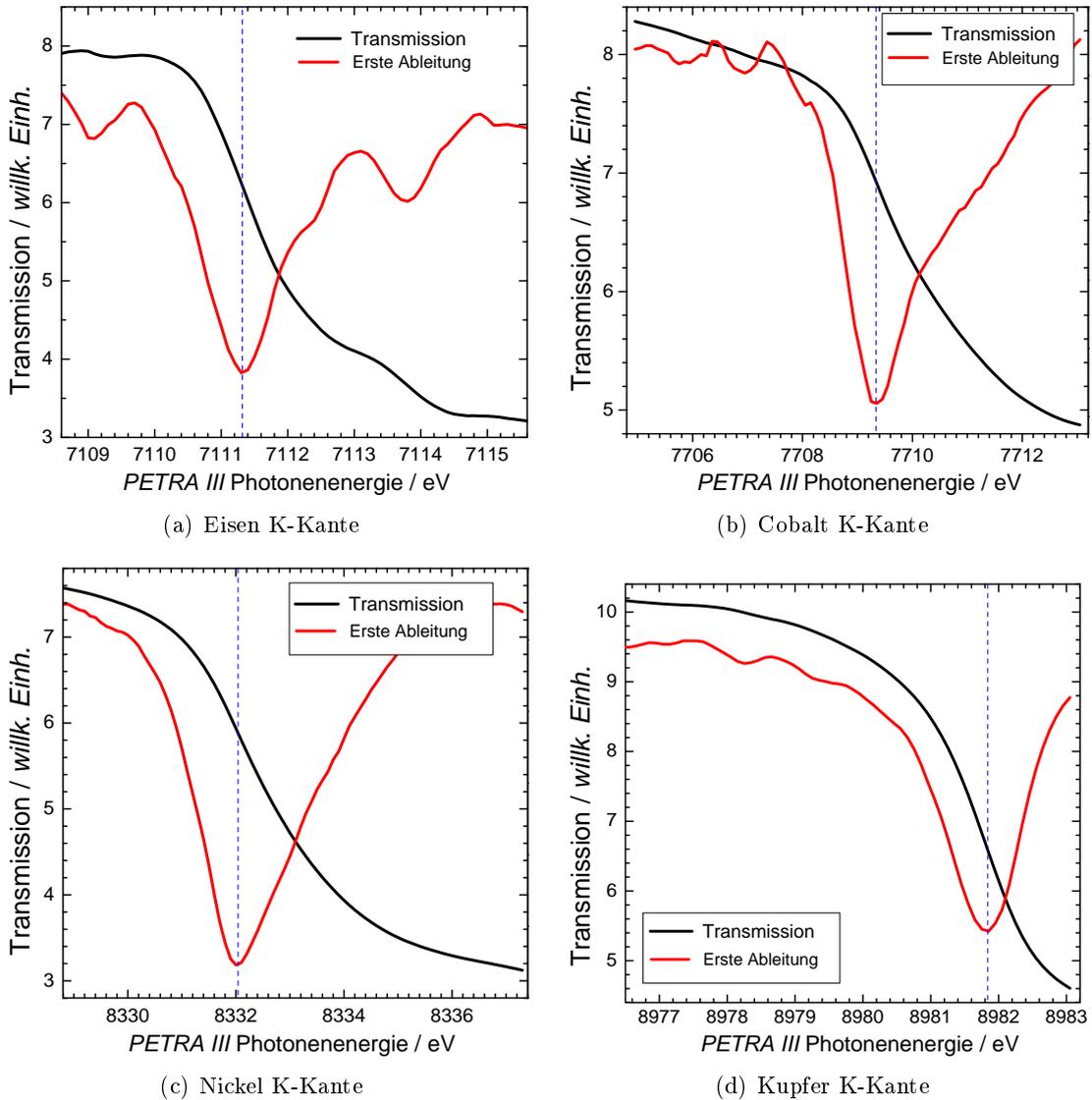
Element	Referenzenergie <i>K</i> -Kante	Braggwinkel $d_{311}$ (Si)
Mn	6537,67 (2) eV	35,394 58 (13)°
Fe	7110,75 (2) eV	32,176 15 (10)°
Co	7708,78 (2) eV	29,420 27 (09)°
Ni	8331,49 (2) eV	27,032 64 (07)°
Cu	8980,48 (2) eV	24,938 98 (06)°

**Tabelle 3.2:** Referenzenergien der *K* Kanten, der zur Kalibrierung verwendeten Metallfolien, nach *Kraft et al.* [56] und der für den 311-Reflex am Monochromator abgeleitete Braggwinkel.

chromator aus vier Kristallen durchgeführt, der in mehreren Punkten Vorteile gegenüber einem mit nur zwei Kristallen bietet. So lieferte der Vierfachkristall eine deutlich schärfere Energieverteilung des Photonenstrahls und unterdrückt Photonen höherer Ordnungen quadratisch gegenüber dem Doppelkristall [56].

Die Dicke der Absorberfolie kann auf den Verlauf der Transmissionskurve beziehungsweise den Absorptionskoeffizienten Einfluss nehmen. Hauptsächlich wird dies als Effekt der Breite der Flügel der Photonenenergieverteilung beschrieben [76]. Mittels Modellrechnungen sagen *Kraft et al.* [56] nur im Fall des Zweifach-Kristall-Monochromators eine Veränderung des Absorptionskoeffizienten für verschiedene Absorberdicken vorher. Bei Verwendung eines Zweifach-Kristall-Monochromators ist demnach bei der Bestimmung der Kantenenergie ein systematischer Fehler anzunehmen, um Verschiebungen durch die Absorberdicke zu berücksichtigen.

Abbildung 3.24 zeigt eine Auswahl der „Absorptionskanten“ die während des Expe-



**Abb. 3.24:** Die schwarze Kurve zeigt jeweils die Transmission des Photonenstrahls. Die Abnahme des Photonenflusses mit steigender Photonenergie ist deutlich zu erkennen, jedoch kann die Kante erst eindeutig mittels der ersten Ableitung des Spektrums (rote Kurve) bestimmt werden. Mit der blau gestrichelte Linie ist der Umkehrpunkt der Transmissionskurve, beziehungsweise das Minimum der ersten Ableitung markiert, welches als Position der Kante der Vergleichsexperimente definiert ist [56].

riments aufgenommen wurden. Das Maximum der ersten Ableitung niedrigster Energie definiert die Position der Kante, analog zu der Definition von *Kraft et al.* [56]. Damit dieser Punkt nicht durch kleine Schwankungen der Messkurve verfälscht wird, wurden die Daten mit einem *Savitzky-Golay*-Filter geglättet [83]. Nach dem Vergleich von Glättungen unterschiedlicher Breiten für die einzelnen Spektren, wurde festgestellt, dass kein

Informationsverlust durch Glättungen vernünftiger Breite auftritt. Der Mittelwert der Kantenpositionen aus den einzelnen Spektren bildet den endgültigen Wert für den verwendeten Absorber. Die Unsicherheit der Messung wurde durch die maximale Abweichung der Einzelwerte vom Mittelwert bestimmt, da für die unterschiedlichen Absorber meistens nicht mehr als 6 Einzelwerte vorlagen und diese stark streuten.

Zusätzlich wurde ein systematischer Fehler von 200 meV angenommen, der eine mögliche Verschiebung der Kantenposition durch die Breite der Photonenenergieverteilung und der Dicke der Absorptionsfolie berücksichtigt.

Die gemessenen Energiewerte der Kanten  $E(\text{Kante})$  sind Ausgangspunkt der Zuordnung des entsprechenden Braggwinkels  $\theta_{\text{Bragg}}^{\text{exp}}(\text{Kante})$ . Er wird analog des Algorithmus der Steuerungssoftware des P01 Monochromators berechnet. Der Vergleich mit den tatsächlichen Braggwinkeln  $\vartheta_{\text{Bragg}}^{\text{ref}}(\text{Kante})$ , bezogen auf die Kantenenergie nach *Kraft et al.* (siehe Tabelle 3.2), liefert den Winkelversatz  $\varphi_0$ , um den der Monochromator falsch kalibriert war.

$$\varphi_0 = \vartheta_{\text{Bragg}}^{\text{ref}}(\text{Kante}) - \theta_{\text{Bragg}}^{\text{exp}}(\text{Kante}) \quad (3.6)$$

Während der Kampagne 2012 wurden Absorptionsfolien aus Mangan, Eisen, Cobalt, Nickel und Kupfer (Mn, Fe, Co, Ni, Cu) verwendet. Der Winkelversatz  $\varphi_0$  jeder Einzelmessung ist in Abbildung 3.25 gegen die Energie der Absorptionskanten aufgetragen. Der gewichtete Mittelwert daraus liegt bei  $\Phi_0 = 0,0094 (4)^\circ$ . Dementsprechend war der Monochromatorwinkel um etwa 0,01 Grad zu niedrig angegeben. Die Energie des Messpunktes  $i$  wird gemäß folgendem Ausdruck neu berechnet:

$$E(i) = \frac{hc}{2d_{\text{hkl}} \cdot \sin \vartheta'(i)} \quad (3.7)$$

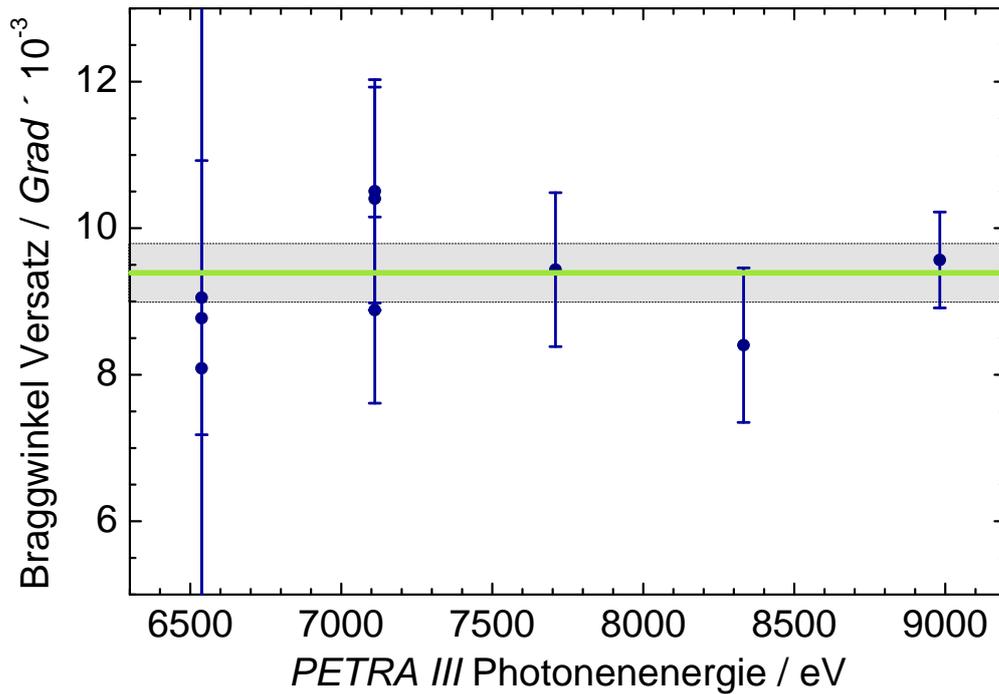
mit dem kalibrierten Winkel

$$\vartheta'(i) = \theta_{\text{Bragg}}^{\text{exp}}(i) + \varphi_0 \quad (3.8)$$

### 3.5.9 Fehlerrechnung

Bevor die Ergebnisse der Messreihen präsentiert und diskutiert werden, soll in diesem Abschnitt auf die experimentellen Unsicherheiten der gemessenen Größen, und die der von ihnen abgeleiteten Werte eingegangen werden. Das normierte Fluoreszenzsignal  $F_{\text{norm}}$  berechnet sich nach Gleichung (3.2) aus den Messgrößen  $F$ ,  $U_{\text{EBIT}}$ ,  $T_{\text{ref}}$  und  $I_\gamma$ .

Die Unsicherheit der Zahl der Fluoreszenzereignisse  $F$  wird als einfacher Zählfehler angenommen. Für den Fall, dass in einem Kanal kein Ereignis gezählt wurde, wird



**Abb. 3.25:** Winkelversatz des Silizium-(311)-Kristallmonochromators während der zweiten Messzeit. Bestimmt wurde der Versatz aus den einzeln aufgenommenen Absorptionskanten der unterschiedlichen Metallfolien und Vergleich der Braggwinkel mit den Referenzwerten aus Tabelle 3.2.

dennoch eine Unsicherheit von  $\Delta F = 1$  angenommen.

$$\Delta F = \begin{cases} 1, & \text{für } F = 0 \\ \sqrt{F}, & \text{für } F \geq 1 \end{cases} \quad (3.9)$$

Gleiches gilt für den Zählfehler der Untergrundereignisse aus der EBIT.

$$\Delta U_{\text{EBIT}} = \begin{cases} 1, & \text{für } U_{\text{EBIT}} = 0 \\ \sqrt{U_{\text{EBIT}}}, & \text{für } U_{\text{EBIT}} \geq 1 \end{cases} \quad (3.10)$$

Mit einer großzügigen Abschätzung wird die Ungenauigkeit der Photonenstrahlintensität  $I_\gamma$  mit 10% angenommen. Aufgrund einer zeitweise sehr geringen Ausleserate der Monochromatorposition, muss für die Unsicherheit der Verweilzeit des Monochromators pro Kanal  $T_{\text{ref}}$  ein Wert von 0,1s angenommen werden.

$$\Delta T_{\text{ref}} = 0,1 \text{ s} \quad (3.11)$$

$$\Delta I_\gamma = 0,1 \cdot I_\gamma \quad (3.12)$$

Nach dem Gauß'schen Fehlerfortpflanzungsgesetz gilt für die Unsicherheit der Größe  $F_n$

$$\begin{aligned}
 \Delta F_n &= \left[ \left( \frac{\partial F_n}{\partial F} \cdot \Delta F \right)^2 + \left( \frac{\partial F_n}{\partial U} \cdot \Delta U \right)^2 + \left( \frac{\partial F_n}{\partial T} \cdot \Delta T \right)^2 + \left( \frac{\partial F_n}{\partial I_\gamma} \cdot \Delta I_\gamma \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \\
 &= \left[ \left( F_n \cdot \frac{\Delta F}{F} \right)^2 + \left( F_n \cdot \frac{\Delta U}{U} \right)^2 + \left( F_n \cdot \frac{\Delta T}{T} \right)^2 + \left( F_n \cdot \frac{\Delta I_\gamma}{I_\gamma} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \\
 &= F_n \cdot \left[ \frac{1}{F} + \frac{1}{U} + \frac{0,01}{T^2} + 0,01 \right]^{\frac{1}{2}} \tag{3.13}
 \end{aligned}$$

Neben der statistischen Unsicherheit der einzelnen Messpunkte  $\Delta F_n$ , werden die Angaben der absoluten Photonenenergie aus der Energiegleichung mittels Absorptionskanten, Gleichung (3.7) zusätzlich mit einem systematischen Fehler versehen. Die Ungenauigkeit der Gitterkonstanten  $d_{311}$  ist Tabelle 3.1 zu entnehmen und die des Braggwinkels  $\vartheta'$  ist durch die Unsicherheit des Winkelversatzes  $\Delta\vartheta' = \Delta\varphi_0 = 0,00041^\circ$  bestimmt. Aus diesen Größen ergeben sich nach dem Gauß'schen Fehlerfortpflanzungsgesetz folgende systematischen Fehler der Energiegleichung.

$$\begin{aligned}
 \Delta E_{\text{sys}}(hkl) &= \sqrt{\left( \frac{\partial E}{\partial d_{\text{hkl}}} \cdot \Delta d_{\text{hkl}} \right)^2 + \left( \frac{\partial E}{\partial \vartheta'} \cdot \Delta \vartheta' \right)^2} \\
 &= \sqrt{\left( E \cdot \frac{\Delta d_{\text{hkl}}}{d_{\text{hkl}}} \right)^2 + \left( E \cdot \frac{\Delta \vartheta'}{\tan \vartheta'} \right)^2} \tag{3.14}
 \end{aligned}$$

$$\Delta E_{\text{sys}}(311) = 1,22 \times 10^{-6} \cdot E \cdot \sqrt{1 + \frac{5,86}{\tan^2 \vartheta'}} \tag{3.15}$$



## 4 Ergebnisse

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der in dieser Arbeit durchgeführten Experimente diskutiert und mit theoretischen Vorhersagen und anderen experimentell gewonnenen Daten verglichen. In den zwei Messzeiten im Jahr 2011 und 2012 konnten erstmals K-Schalen-Übergänge in hochgeladenen Eisenionen mit Photonen angeregt werden.

Während der ersten Messreihe von Mitte September bis Anfang Oktober 2011 war das Strahlrohr P01 noch nicht im offiziellen Nutzerbetrieb, was wie in Abschnitt 3.2.2 diskutiert, zur Folge hatte, dass nicht die volle Leistungsfähigkeit des Strahlrohres verfügbar war. Die Folgen der Fehleinstellungen des Monochromators, wie in Abschnitt 3.2.2.2 beschrieben, konnten glücklicherweise innerhalb weniger Tage behoben werden, sodass die Messzeit, nach kurzer Unterbrechung, fortgesetzt wurde. Die zuvor gewonnenen Daten sind mit nicht berechenbaren systematischen Fehlern behaftet und finden, insbesondere bezüglich einer absoluten Energiekalibrierung, keine Berücksichtigung in der Datenanalyse.

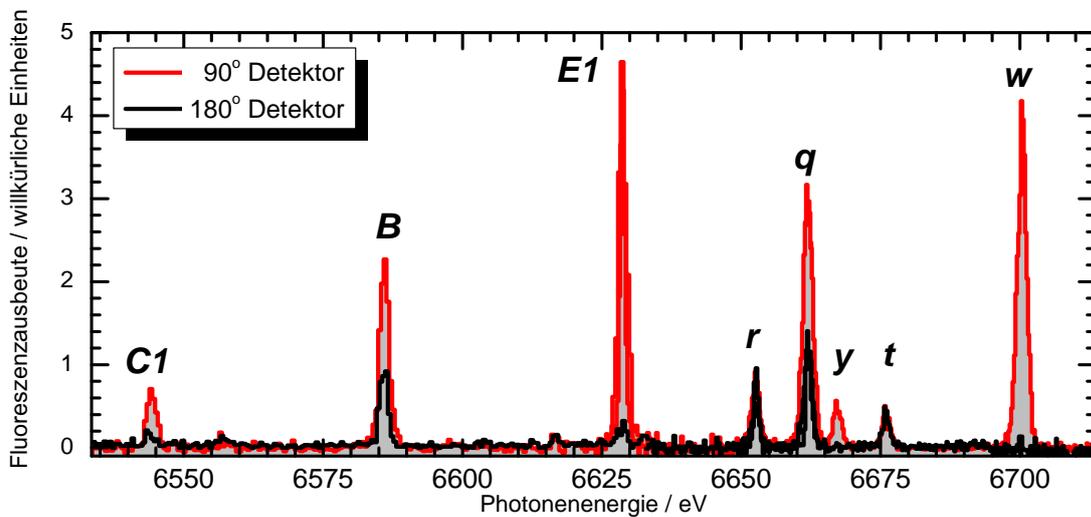
Die zweite Messzeit fand Ende Oktober 2012 statt. Die Untersuchung der  $K_\alpha$ -Übergänge aus dem Jahr 2011 in den Ladungszuständen  $\text{Fe}^{20+}$  bis  $\text{Fe}^{24+}$  im Energiebereich von 6530 eV bis 6710 eV wurde nochmals wiederholt und in ihren Ergebnissen bestätigt. Eine Erweiterung des Energiebereichs bis 6400 eV schließt ebenfalls die  $K_\alpha$ -Übergänge der Ladungszustände  $\text{Fe}^{17+}$  bis  $\text{Fe}^{19+}$  ein. Ebenfalls Teil dieser Arbeit sind  $K_\beta$ -Übergänge in lithiumartigen Eisenionen,  $\text{Fe}^{23+}$  und heliumartigen Eisenionen,  $\text{Fe}^{24+}$ . Fluoreszenzphotonen aus höheren Zuständen angeregter Ionen wurden bis zur Schale  $n = 7$  in heliumartigem Eisen beobachtet. Zunächst werden jedoch im folgenden Abschnitt die Ergebnisse der Messzeit 2011 präsentiert.

### 4.1 $K_\alpha$ (1s-2p) Übergänge

#### 4.1.1 Messung 2011

Um eine Übersicht über die aufgenommenen Übergänge zu gewinnen, wird zunächst mit Abbildung 4.1 ein kombiniertes Übersichtsspektrum über den untersuchten Energiebe-

reich von 6530 eV bis 6710 eV gezeigt. Darin ist die Photonenausbeute sowohl für den  $90^\circ$  als auch den  $180^\circ$  GLP-Detektor aufgetragen. Wegen relativ niedriger Zählraten auf den Resonanzen, konnten nur die stärksten  $1s - 2p$  Übergänge in den Ladungszuständen  $\text{Fe}^{20+}$  bis  $\text{Fe}^{24+}$  beobachtet werden. Für den IGLET-Detektor waren die Zählraten zu gering, um überhaupt eindeutige Fluoreszenzspektren zu erhalten. Durch Vergleich der gemessenen Übergangsenergien mit eigenen Vorhersagen [80] mit dem *Flexible Atomic Code* (FAC) [42] und anderen experimentellen Ergebnissen konnten einzelne Resonanzen identifiziert und bestimmten Übergängen der Eisenionen zugeordnet werden. Alle identifizierten  $K_\alpha$ -Linien sind in Tabelle 4.1 aufgelistet. Die Bezeichnung der Übergänge in heliumartigen und lithiumartigen Eisenionen ist nach *A. H. Gabriel* [38] gewählt.

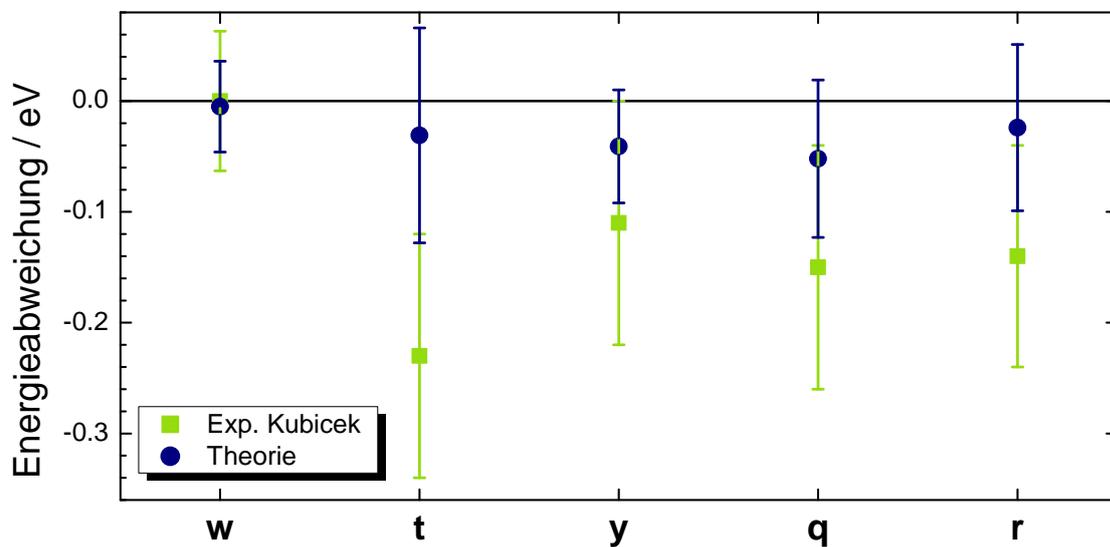


**Abb. 4.1:** Übersichtsspektrum der 2011 gemessenen  $K_\alpha$ -Übergänge in  $\text{Fe}^{q+}$ -Ionen mit  $20 \leq q \leq 24$  sowohl für den  $90^\circ$ - als auch den  $180^\circ$ -GLP-Detektor.

#### 4.1.1.1 Absolute Linienenergien

Die Bestimmung absoluter Linienenergien wurde, wie in Abschnitt 3.5.8.1 beschrieben mittels Kalibrierung mit einer Referenzlinie durchgeführt. Alle Spektren erhalten zunächst die Energieskala, die den *PETRA*-Logdateien entspricht. Daraufhin erfolgt, für die einzelnen Übergänge, die Bestimmung der Mittenposition der Linien mit einem Gaußfit. Aus dem gewichteten Mittelwert der Mittenpositionen wird die relative Winkeländerung bezüglich Linie  $w$  errechnet und mit dem Referenzwert für  $w$  nach *Kubiček* [59] die Mittenenergie bestimmt. Die so kalibrierten  $K_\alpha$ -Linien sind in Tabelle 4.1 aufgelistet und mit theoretischen Vorhersagen sowie den experimentellen Werten von *Beiersdorfer et al.* und *Kubiček* verglichen [9, 59]. Eine graphische Darstellung der Abweichung dieser Werte von den hier ermittelten Übergangsenergien ist in Abbildung 4.2 gegeben. Die Theorie

stimmt innerhalb der experimentellen Unsicherheit mit den Messergebnissen überein. Obwohl die Energieeichung mit der Linie  $w$  von *Kubiček* durchgeführt wurde, sind die Energiewerte der anderen von *Kubiček* vermessenen Übergänge, bis zu 0,2 eV niedriger als die hier bestimmten Werte. Diese Diskrepanz kann darauf zurückgeführt werden, dass *Kubiček* nur für  $w$  eine Absolutbestimmung vorgenommen hat. Die weiteren Übergangsenergien wurden aus der Dispersionsrelation des Detektors relativ zu  $w$  bestimmt [59]. Diese Relativbestimmung birgt weitere Unsicherheiten, die zu einer solchen Abweichung der nicht direkt bestimmten Linien führen können. Darüber hinaus war die Zahl der Ereignisse pro Linie im Vergleich zu  $w$  um einen Faktor 2–3 reduziert. Diese verminderte statistische Genauigkeit mag sich ebenfalls in einer veränderten Energiebestimmung niedergeschlagen haben.



**Abb. 4.2:** Vergleich der Ergebnisse dieser Arbeit mit den theoretischen Vorhersagen und experimentellen Werten in Tabelle 4.1. Die angegebenen Fehlerbalken berücksichtigen jeweils die Unsicherheit der Linienenergie dieser Arbeit und die Unsicherheit des Vergleichswerts.

Ion	Linie	Grundzustand	angeregter Zustand	diese Arbeit		Experiment Kubicek [59]	Theorie	FAC [80]	Exp. [9]		
				2011							
Fe <sup>24+</sup>	<i>w</i>	1s <sup>2</sup>	1s 2p	( <sup>1</sup> P <sub>1</sub> )	6700,44 (4)	6700,44 (2)	6700,435 (1)	[2]	6700.0	6700.8	
	<i>y</i>	1s <sup>2</sup>	1s 2p	( <sup>3</sup> P <sub>1</sub> )	6667,62 (5)	6667,51 (6)	6667,579 (1)	[2]	6666.6	6667.9 (4)	
	<i>t</i>	1s <sup>2</sup> 2s	1s 2s 2p	( <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub> )	6676,16 (5)	6675,93 (6)	6676,129 (47)	[104]	6675.7	⟨6676.8 (7)⟩	
Fe <sup>23+</sup>	<i>q</i>	1s <sup>2</sup> 2s	1s 2s 2p	( <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub> )	6662,24 (6)	6662,09 (5)	6662,188 (11)	[104]	6661.3	6662.1 (5)	
	<i>r</i>	1s <sup>2</sup> 2s	1s 2s 2p	( <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub> )	6652,80 (5)	6652,66 (5)	6652,776 (25)	[104]	6651.9	⟨6654.2 (7)⟩	
Fe <sup>22+</sup>	<i>E1</i>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup>	1s 2s <sup>2</sup> 2p	( <sup>1</sup> S <sub>0</sub> )	6628,78 (6)	-	6627,29	[89]	6628.3	6628.9 (3)	
Fe <sup>21+</sup>	<i>B</i>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p	( <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub> )	1s 2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	( <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub> )	⟨6586,01 (24)⟩	-	6587,2	[17]	6585.1	⟨6585,9 (5)⟩
				1s 2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	( <sup>2</sup> D <sub>3/2</sub> )	⟨6586,01 (24)⟩					6585.8
Fe <sup>20+</sup>	<i>C1</i>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	( <sup>3</sup> P <sub>0</sub> )	1s 2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup>	( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> )	6544,02 (25)			6544.2	⟨6544,6 (9)⟩	

**Tabelle 4.1:** In dieser Arbeit aus den Daten der Kampagne 2011 bestimmte Linienenergien von Eisenionen, im Vergleich mit anderen Experimenten und Theorie. Bei den angegebenen Unsicherheiten handelt es sich um  $1\sigma$  Fehler. Alle Werte sind in eV angegeben. Spitze Klammern umgeben experimentelle Werte, die in ihrer Genauigkeit durch eine Überlagerung mit anderen Übergängen beeinträchtigt sind.

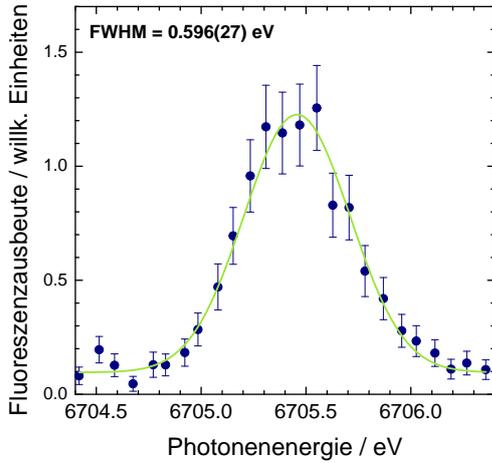
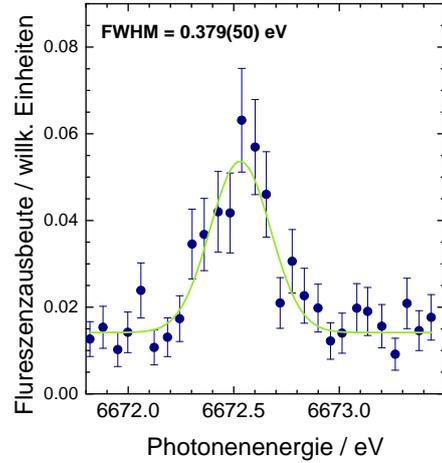
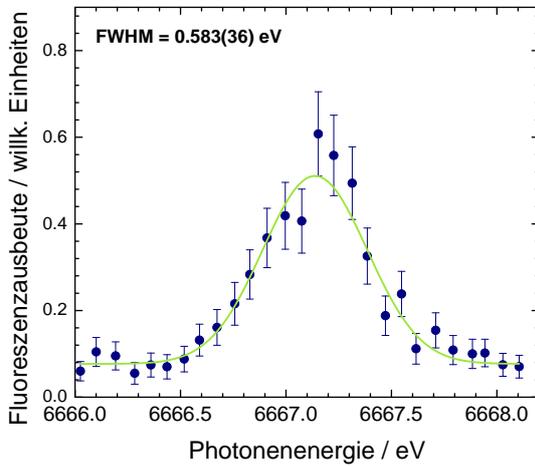
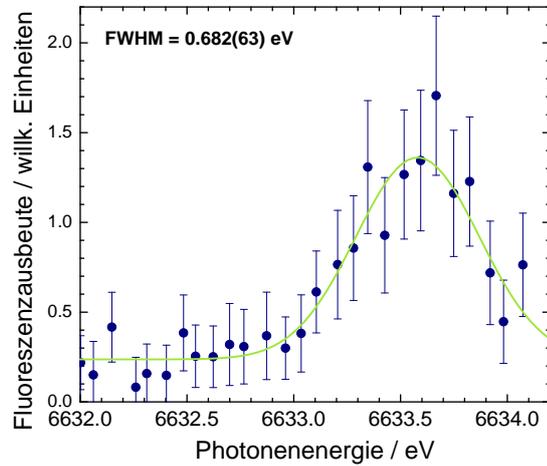
### 4.1.1.2 Abschätzung natürlicher Linienbreiten

Mit einer Vielzahl von feinschrittigen Energiescans wurden Linienprofile vermessen. Ein besonderer Fokus lag dabei auf den Übergängen  $w$  und  $y$  der heliumartigen Eisenionen. Die Ionentemperatur und somit die Dopplerbreite der Linien, konnte mit der Technik der evaporativen Ionenkühlung reduziert werden [8, 61]. Die Falltiefe wird dabei gesenkt, sodass Ionen niedriger Ladungszustände, die schwächer gebunden sind, und solche mit hoher kinetischer Energie die Falle verlassen und damit die Gesamtenergie der Ionenwolke vermindern. Nur die „kühlen“ hochgeladene Ionen verbleiben in der Falle. Ziel war, durch die Ionenkühlung die Dopplerbreite auf die Größenordnung der natürlichen Linienbreite zu reduzieren und so das Linienprofil von einer Gaußform in ein Voigtprofil zu überführen, aus dem sich direkt die natürliche Linienbreite bestimmen lässt. Auf Grund der geringen Zählstatistik ist dies nicht gelungen, wie in Abbildung 4.3(a) zu sehen ist. Die Abbildung zeigt ein Spektrum der Linie  $w$ , bei der das Potential der Falle, soweit wie dies möglich war, reduziert wurde, ohne diese vollständig zu entleeren. Spektren weiterer Übergänge, die bei gleichen Bedingungen aufgenommen wurden, sind in Abbildung 4.3(b)-4.3(d) dargestellt. Dennoch ist es möglich, aus den so gewonnenen Spektren Aussagen über die natürliche Linienbreite der Übergänge zu treffen. Für die Interkombinationslinie  $y$  wird eine relativ zu der gemessenen Breite von  $(0,376 \pm 0,035)$  eV vernachlässigbar kleine natürliche Linienbreite von etwa 0,029 eV vorhergesagt [75]. Die Linienbreite des Gaußprofils der Linie  $y$  entspricht daher nahezu vollständig der, durch die Ionenbewegung verursachten, Dopplerbreite  $\delta E_D$ .

$$\delta E_D \simeq \delta E(y) \quad (4.1)$$

Für die anderen vermessenen Linien, deren natürliche Linienbreite in der Größenordnung der Dopplerbreite erwartet wird, wurde ebenfalls nur ein Gaußprofil und kein Voigtprofil beobachtet. Eine mögliche Erklärung für das fehlen der Lorentzflügel in den beobachteten Linienprofilen ist die sehr niedrige Zählrate während den Messungen. So können die Flügelmerkmale in den Schwankungen des Untergrundsignals untergegangen beziehungsweise aufgrund statistischer Schwankungen des Signals nicht hervorgetreten sein. Nicht einmal in Scans über einen längeren Zeitraum konnte ein Voigtprofil aufgenommen werden. Es wird nun angenommen, dass hier eine Faltung zweier Gaußprofile vorliegt. Eine obere Grenze für die natürliche Linienbreite  $\delta E_n$  der Linien, die bei den gleichen EBIT-Einstellungen aufgenommen wurden wie Linie  $y$ , kann so aus der Linienbreite  $\delta E(y)$  abgeschätzt werden.

$$\delta E_n \approx \sqrt{\delta E^2 - \delta E_D^2} \quad (4.2)$$

(a) Linie  $w$  in heliumartigem Eisen(b) Linie  $y$  in heliumartigem Eisen(c) Linie  $q$  in lithiumartigem Eisen(d) Linie  $E1$  in berylliumartigem Eisen

**Abb. 4.3:** Spektren einzelner Übergänge, aufgenommen 2011, mit dem Silizium-(311)-Kristall. Die Messungen sind bei gleichen EBIT-Einstellungen durchgeführt worden, mit Ausnahme der Linie  $E1$ , die mit einer etwas tieferen Falle vermessen wurde. Die Energieskala der dargestellten Spektren ist nicht kalibriert.

Der Tabelle 4.2 sind gemessene Linienbreite und die daraus errechneten natürlichen Linienbreiten der Übergänge  $w, y, q$  und  $E1$  zu entnehmen. Die Fallenpotentiale waren bei allen Messungen identisch, lediglich die Aufnahme der Linie  $E1$  erfolgte für ein um 10 V tieferes Fallenpotential. Generell liegt der experimentell bestimmte Wert etwa 0,1 eV über der Vorhersage. Die MCDF-Rechnungen von *Zoltan Harman* [80] liefern zusätzlich zu der Gesamtbreite die radiative Breite und Augerbreite der Übergänge.

Linie	Experiment 2011		Theorie	MCDF		
	$\delta E$	$\delta E_n$	$\delta E_n$ [75]	$\delta E^{\text{rad}}$	$\delta E^{\text{Auger}}$	$\delta E_n$
$w$	0,55 (2)	0,40 (4)	0,30	0,30	0	0,30
$y$	0,38 (4)	-	0,03	0,03	0	0,03
$q$	0,57 (2)	0,42 (4)	0,31	0,31	0,000 08	0,31
$r$			0,23	0,21	0,03	0,24
$t$			0,17	0,11	0,05	0,16
$E1$	0,67 (9)	0,52 (12)	0,38	0,29	0,10	0,39

**Tabelle 4.2:** Gemessene Linienbreiten  $\delta E$  und die daraus bestimmten oberen Grenzen für die natürlichen Linienbreiten  $\delta E_n$  im Vergleich mit der Theorie. Bei den angegebenen Unsicherheiten handelt es sich um  $1\sigma$  Fehler. Alle Angaben sind in Einheiten von eV.

#### 4.1.1.3 Intensitätsverhältnisse

Um über die Intensitätsverhältnisse einzelner Linien Aussagen zu treffen, habe ich die Übersichtsspektren, die mehrere Übergänge bei gleichen Fallenbedingungen enthalten, analysiert. Da die Ionenanzahl für unterschiedliche Ladungszustände in der EBIT nicht gleich ist, gilt ein solcher Vergleich nur für Übergänge innerhalb des gleichen Ions. Die Linienbreiten  $\delta E_{\text{rad}}$  und  $\delta E_{\text{gesamt}}$  der MCDF-Rechnungen liefern Vergleichswerte für die aus den Flächen der gefitteten Linienprofile gebildeten Linienverhältnisse, da diese in direkter Abhängigkeit zu den radiativen Raten, beziehungsweise Auger-Raten stehen. Die Anregung der Zustände erfolgt entsprechend der radiativen Rate. Die beobachtete Linienintensität wird zusätzlich vom Verzweigungsverhältnis der konkurrierenden Fluoreszenz- und Augerprozesse bestimmt. Für das Verhältnis zweier Linien  $a$  und  $b$  in der Fluoreszenz  $R_{a,b}^{\text{rad}}$  gilt allgemein

$$R_{a,b}^{\text{rad}} = \frac{\delta E_a^{\text{rad}} \cdot \frac{\delta E_a^{\text{rad}}}{\delta E_a^{\text{gesamt}}}}{\delta E_b^{\text{rad}} \cdot \frac{\delta E_b^{\text{rad}}}{\delta E_b^{\text{gesamt}}}} = \left( \frac{\delta E_a^{\text{rad}}}{\delta E_b^{\text{rad}}} \right)^2 \cdot \frac{\delta E_b^{\text{gesamt}}}{\delta E_a^{\text{gesamt}}} \quad (4.3)$$

Die experimentell gewonnenen Linienverhältnisse sind in Tabelle 4.3, für die Detektoren in den unterschiedlichen Orientierungen zur Polarisationsachse des Photonenstrahls, aufgelistet. Zusätzlich werden die Werte mit den Vorhersagen der MCDF-Rechnungen verglichen. Es fällt auf, dass die Verhältnisse der Linien  $y / w$  und  $t / r$  innerhalb der Fehlergrenzen mit der Vorhersage übereinstimmen. Beide Linienpaare stammen von Übergängen mit jeweils gleichem Gesamtdrehimpuls im Anfangszustand und gleichem Gesamtdrehimpuls im Endzustand. Das heißt, die Fluoreszenz hat für beide Übergänge die gleiche Winkelverteilung, wie bereits in Abschnitt 2.3 beschrieben. Ein Rückschluss

auf die Übergangsraten aus den gemessenen Linienverhältnissen ist daher nur möglich, falls die Übergänge dieselbe Abstrahlcharakteristik aufweisen.

Die Winkelverteilung der Linie  $q$  ist isotrop, da es sich um einen  $\Delta J = 0$  Übergang handelt, während  $t$  und  $r$  jeweils einem Übergang zwischen einem  $J = \frac{3}{2}$  und einem  $J = \frac{1}{2}$  Niveau entstammen. Korrigiert man die Werte der beiden Detektoren entsprechend der unterschiedlichen Intensitäten in der Abstrahlcharakteristik des Übergangs, so ist das Linienverhältnis für beide Detektoren wieder dasselbe. Im Vergleich mit den MCDF Vorhersagen fallen die Werte jedoch um einen Faktor 2 zu klein aus, siehe Tabelle 4.3. Der Raumwinkel des Detektors hat auf die effektive Winkelverteilungen der Fluoreszenz einen vernachlässigbar kleinen Einfluss. Einzig und allein im Fall der Linie  $w$  hat der Einfluss des Raumwinkels des Detektors einen messbaren Effekt. Im horizontalen Detektor konnte ein sehr schwaches, von null verschiedenes Fluoreszenzsignal für  $w$  registriert werden. Dieses Signal unterlag starken Schwankungen und konnte nicht eindeutig beziffert werden. Daher finden sich hierzu auch keine Angaben in Tabelle 4.3.

	Detektor 90°	Detektor 180°	MCDF	Detektor 90° korr.	Detektor 180° korr.
$y/w$	14 (1) %	-	10 (3) %		
$t/q$	11 (1) %	26 (1) %	25 (8) %	14 (1) %	13 (1) %
$r/q$	20 (1) %	51 (1) %	58 (18) %	25 (1) %	25 (1) %
$t/r$	53 (5) %	52 (3) %	42 (13) %		

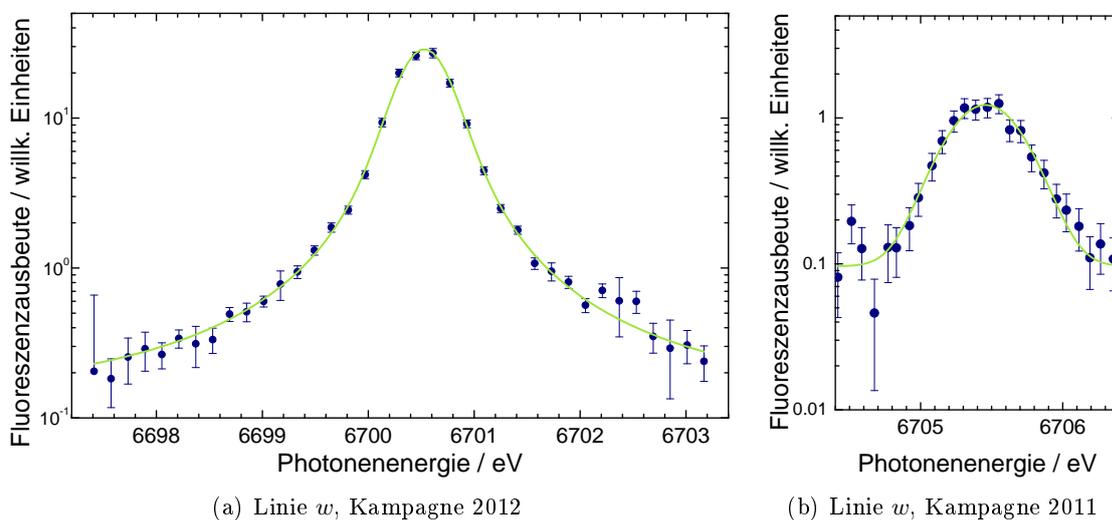
**Tabelle 4.3:** Experimentell bestimmte Linienverhältnisse im Vergleich mit den erwarteten Werten auf Grundlage der MCDF-Rechnungen. Ebenfalls aufgeführt sind die Linienverhältnisse nach der Korrektur der experimentellen Daten um den Einfluss der Abstrahlcharakteristiken der verschiedenen Übergänge.

#### 4.1.2 Messung 2012

Die Ergebnisse der Kampagne in 2012 sind in ihrer Qualität und Quantität denen aus 2011 voraus. Es wurden insgesamt mehr Spektren pro Übergang aufgenommen und diese zeichnen sich durch hohe Zählraten im Bereich der Resonanz von mehreren 100 Hz aus.

Abbildung 4.4 zeigt zwei Spektren der Linie  $w$ , jeweils eins aus 2011 und 2012 mit logarithmischer Intensitätsskala, an der der Unterschied in der Auflösung der Experimente deutlich wird. Der in Abschnitt 2.2.4 besprochene langsam abfallende Flügel, der vom Lorentzanteil des Linienprofils stammt, konnte 2011 nicht aufgelöst werden. Im Spektrum von 2012 jedoch ist der Lorentzflügel, noch 2 eV vom Linienzentrum entfernt, eindeutig erkennbar. Dieser Vergleich gilt ähnlich für die anderen Übergänge, die vermessen wur-

den, sofern die natürliche Linienbreite im Bereich der Dopplerbreite liegt. In Tabelle 4.4 sind die während der Kampagne 2012 vermessenen Übergänge mit der Konfiguration des angeregten Niveaus und des Grundzustands aufgelistet.



**Abb. 4.4:** Vergleich des Linienprofils der Linie  $w$ , zwischen der Kampagne 2012 und 2011.

#### 4.1.2.1 Absolute Linienenergien

Zur Bestimmung absoluter Übergangsenergien der Linien, wurde die Energieskala mit den aufgenommenen Absorptionskanten von Mangan, Eisen, Cobalt, Nickel und Kupfer kalibriert. Ausführlich wurde auf die Kalibrierung mit Absorptionskanten bereits in Abschnitt 3.5.8.2 eingegangen. Die mit dieser Methode gewonnene Energieskala ist nicht von anderen Messungen der gleichen Übergänge oder theoretischen Vorhersagen abhängig. Daher können die Ergebnisse vollkommen unabhängig mit anderen Experimenten und unterschiedlichen Theorien verglichen werden, siehe Tabelle 4.4.

Die Genauigkeit der bestimmten Linienenergien liegt bei rund 10 ppm. Für die Schwerpunktbestimmung der Linien konnte sogar eine Genauigkeit von etwa 1 ppm erreicht werden. Der größte Beitrag zur Gesamtunsicherheit der Ergebnisse stammt von der Energiekalibrierung, deren systematischer Fehler aus der Unsicherheit der Auswertung des Braggwinkelsatzes bestimmt wird. Die so gewonnenen absoluten Energiewerte stimmen sehr gut mit denen der Kampagne 2011 überein, obwohl die Energieskalen mit unterschiedlichen Methoden kalibriert wurden. Änderungen der Linienenergien im Vergleich zu 2011 sind geringer als 50 meV. In den Abbildungen 4.5-4.10 sind Spektren der verschiedenen aufgenommenen Übergänge dargestellt.

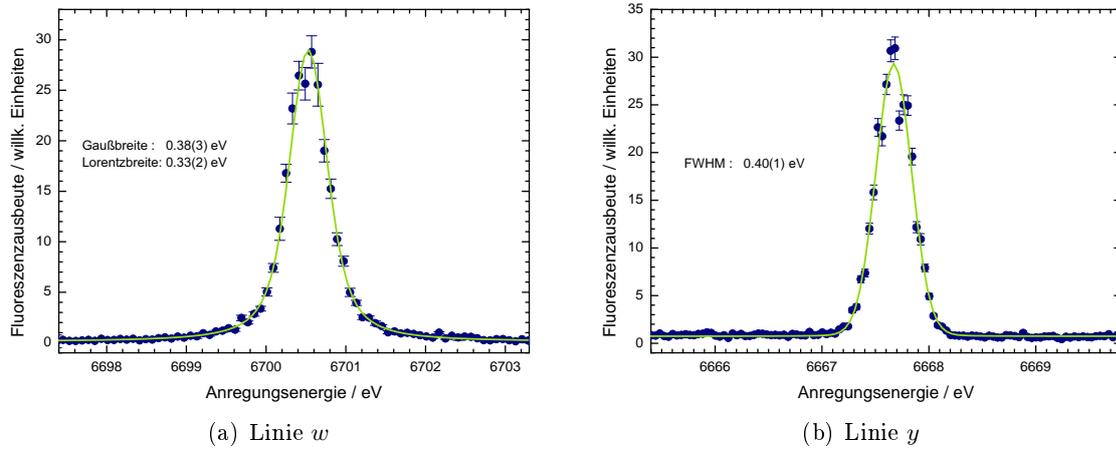


Abb. 4.5: Hochaufgelöste Linienprofile der Übergänge in  $\text{Fe}^{24+}$ , aufgenommen 2012.

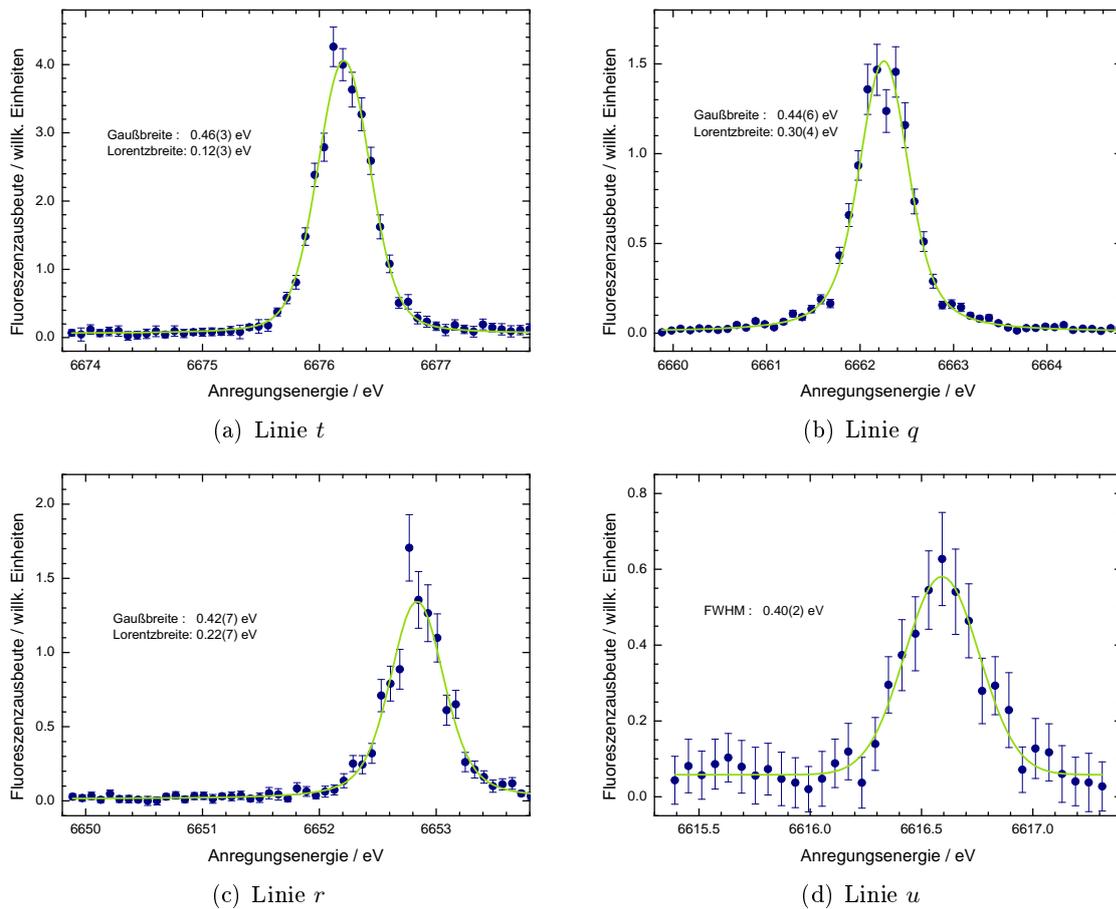
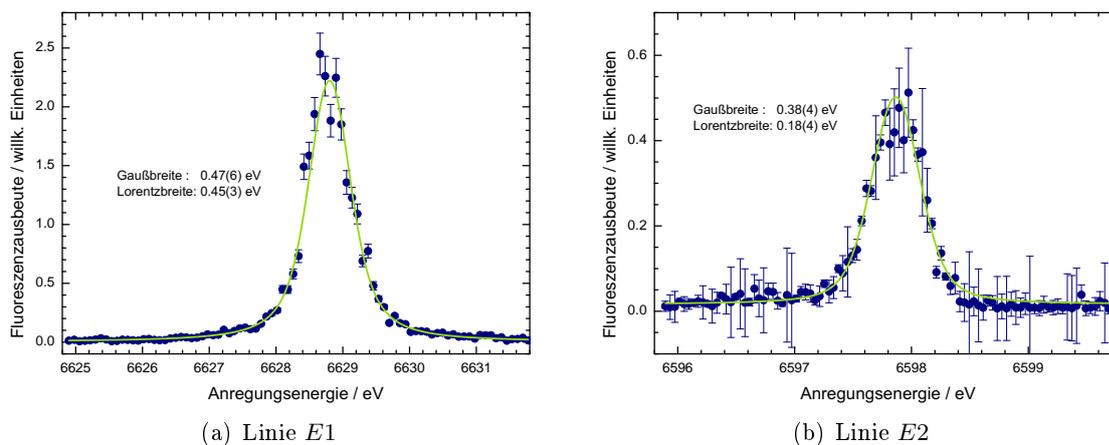
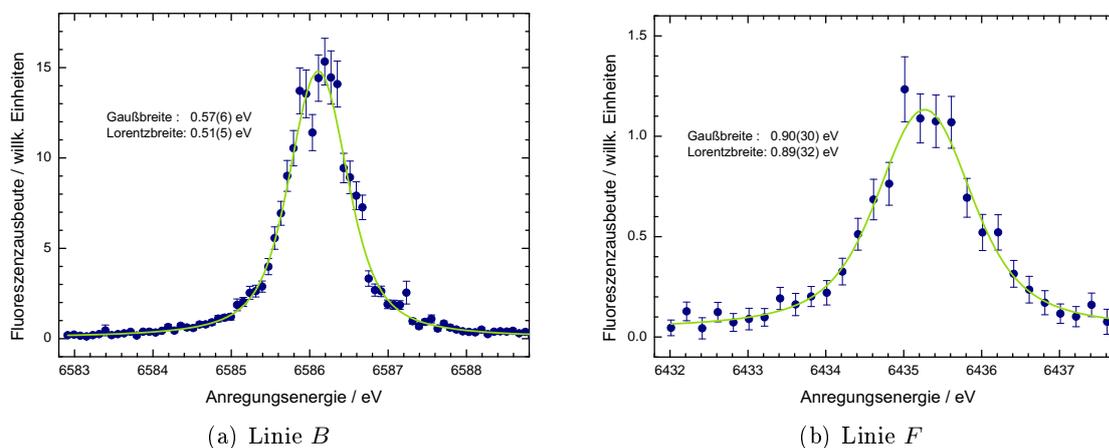


Abb. 4.6: Hochaufgelöste Linienprofile der Übergänge in  $\text{Fe}^{23+}$ , aufgenommen 2012.

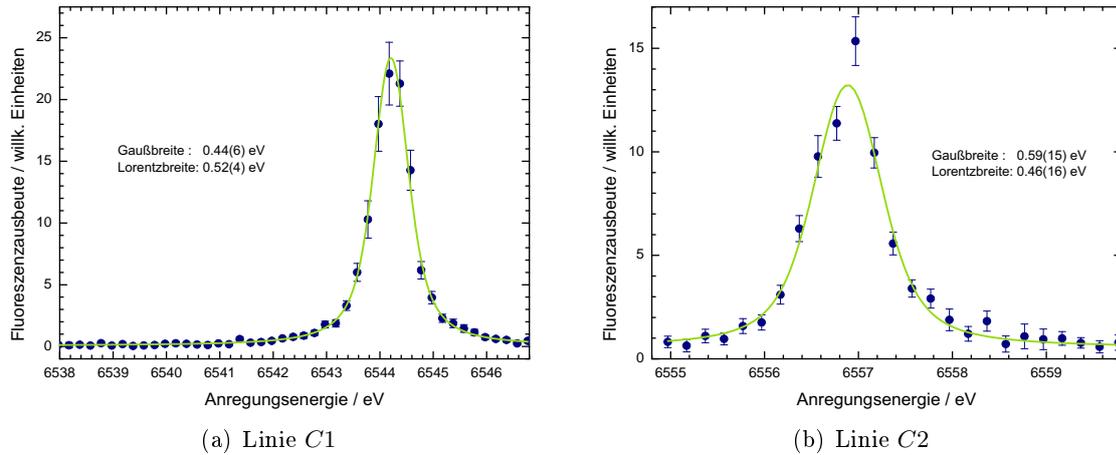


**Abb. 4.7:** Hochaufgelöste Linienprofile der Übergänge in  $\text{Fe}^{22+}$ , aufgenommen 2012.

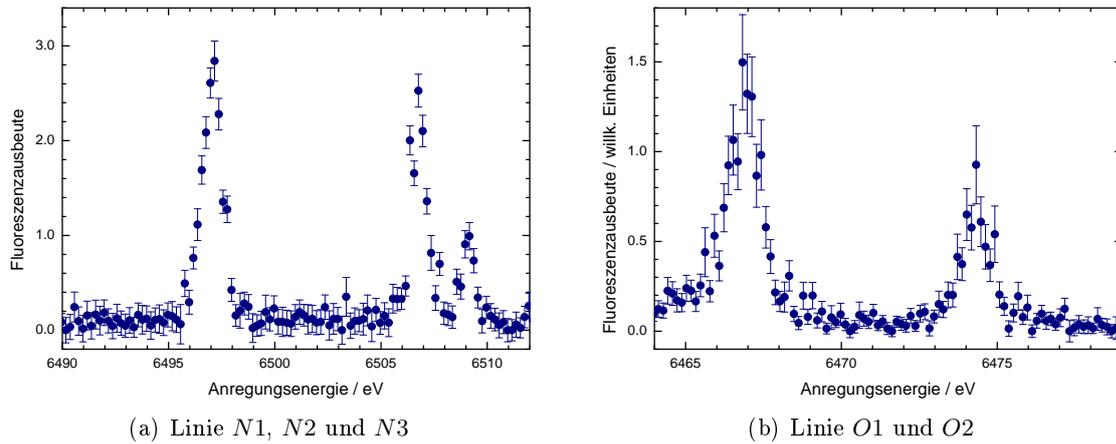


**Abb. 4.8:** Hochaufgelöstes Linienprofil der Linie B und F, aufgenommen 2012.

Zur Linienzuordnung waren die experimentellen Werte von *Beiersdorfer et al.* [9], sowie die Rechnungen mit *FAC* sehr hilfreich. Sie liegen jedoch tendenziell einige 100 meV oberhalb, beziehungsweise unterhalb der Werte dieser Arbeit. Die Messungen von *Decaux et al.* [22] an einem Tokamakplasma schwanken ebenfalls um die hier bestimmten Werte, kommen ihnen jedoch sehr nahe. Die angegebenen Unsicherheiten von *Decaux et al.* [22] liegen bei  $0,3\text{ m}\text{\AA}$  bis  $0,5\text{ m}\text{\AA}$ , dies entspricht bei den untersuchten Wellenlängen einer Unsicherheit von mindestens 1 eV und fällt somit etwa 15mal so groß aus wie in dieser Arbeit. Daher sind diese Werte nicht als ernsthafte Vergleichswerte verwendbar. Ähnlich große Unsicherheiten weisen, die Linienenergien von *Beiersdorfer et al.* [9] auf, deren Spektren ebenfalls über wasserstoffartige Referenzlinien kalibriert wurden. Die von *Beiersdorfer et al.* und *Decaux et al.* [9, 22] beobachteten Übergänge in mit Elektronenstoß



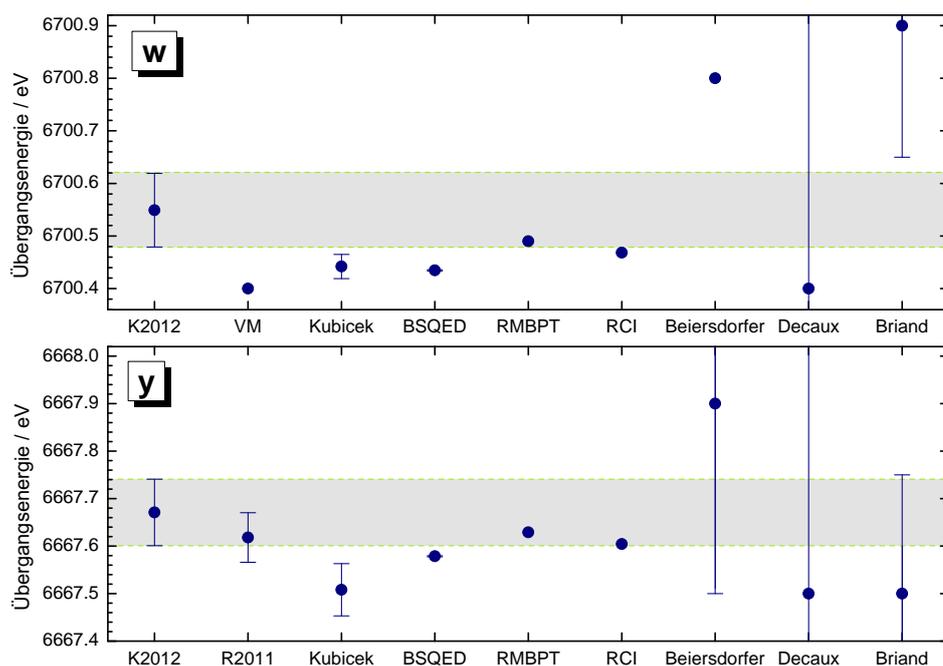
**Abb. 4.9:** Hocho aufgelöste Linienprofile der Übergänge in  $\text{Fe}^{20+}$ , aufgenommen 2012.



**Abb. 4.10:** Übersichtsspektren der Übergänge in  $\text{Fe}^{19+}$  und  $\text{Fe}^{18+}$ , aufgenommen 2012.

angeregten Plasmen einer EBIT und in Tokamakplasmen sind oftmals von benachbarten Übergängen überlagert. Die Anregung dieser Übergänge mit Photonen ist dabei nur um Größenordnungen unterdrückt möglich. Ebenso berichten *Beiersdorfer et al.* und *Decaux et al.* [9, 22], dass zum Teil eine Überlagerung mit Satellitenlinien aus DR-Prozessen zu einer Verschiebung der Mittenposition der gemessenen Linien führt. Dies reduziert die Genauigkeit der angegebenen Übergangsenergien dieser Experimente im Vergleich zu den Werten dieser Arbeit.

Experimente von *Briand et al.* [16] für heliumartiges Eisen gehen auf die Methode der Messung mit einer Strahlfolie zurück. Die Ergebnisse mit dieser Methode weichen gerade für  $w$  (6700,9 eV) mit 350 meV sehr vom hier bestimmten Wert (6700,549 eV) nach



**Abb. 4.11:** Vergleich, der in dieser Arbeit experimentell bestimmten K-Schalen-Übergangsenergien in heliumartigen Eisenionen mit anderen experimentellen Werten und theoretischen Vorhersagen. Eigene Werte aus Relativbestimmung „R2011“ und mit Absorptionskanten kalibrierten Spektren „K2012“. Theoretische Werte: „BSQED“ [2], „VM“ [29], „RCI“ [19], „RMBPT“ [78]. Weitere experimentelle Resultate: „Kubicek“ [59], „Beiersdorfer“ [9], „Decaux“ [22], „Briand“ [16].

oben ab. Eines der Probleme dieser Methode ist die mögliche Präsenz verschiedener Satellitenlinien, die die Mittenposition des Spektrums verschieben können. Dies wurde von *Briand et al.* [16] systematisch untersucht und bei der Messung unterdrückt. Eine große Unsicherheit in der Bestimmung der Ionengeschwindigkeit führt letztlich zu einem Fehler von 0,25 eV. Weitere Unsicherheiten bezüglich der Kalibrierung der Spektren relativ zur  $\text{Fe}^{25+}$  Lyman- $\alpha$  Linie sind jedoch denkbar und könnten die große Abweichung des Wertes erklären.

In Abbildung 4.11 sind die experimentell bestimmten Übergangsenergien der Linie  $w$  und  $y$  in heliumartigem Eisen mit verschiedenen theoretischen Vorhersagen [2, 19, 78] und weiteren Experimenten [9, 16, 22, 59] verglichen. Es zeigt sich, dass die theoretischen Vorhersagen alle unterhalb des experimentellen Wertes dieser Arbeit liegen. Einzig die RMBPT-Rechnungen von *Plante et al.* [78] stimmen für beide Übergänge innerhalb der experimentellen Unsicherheit mit dem Ergebnis dieser Arbeit überein.

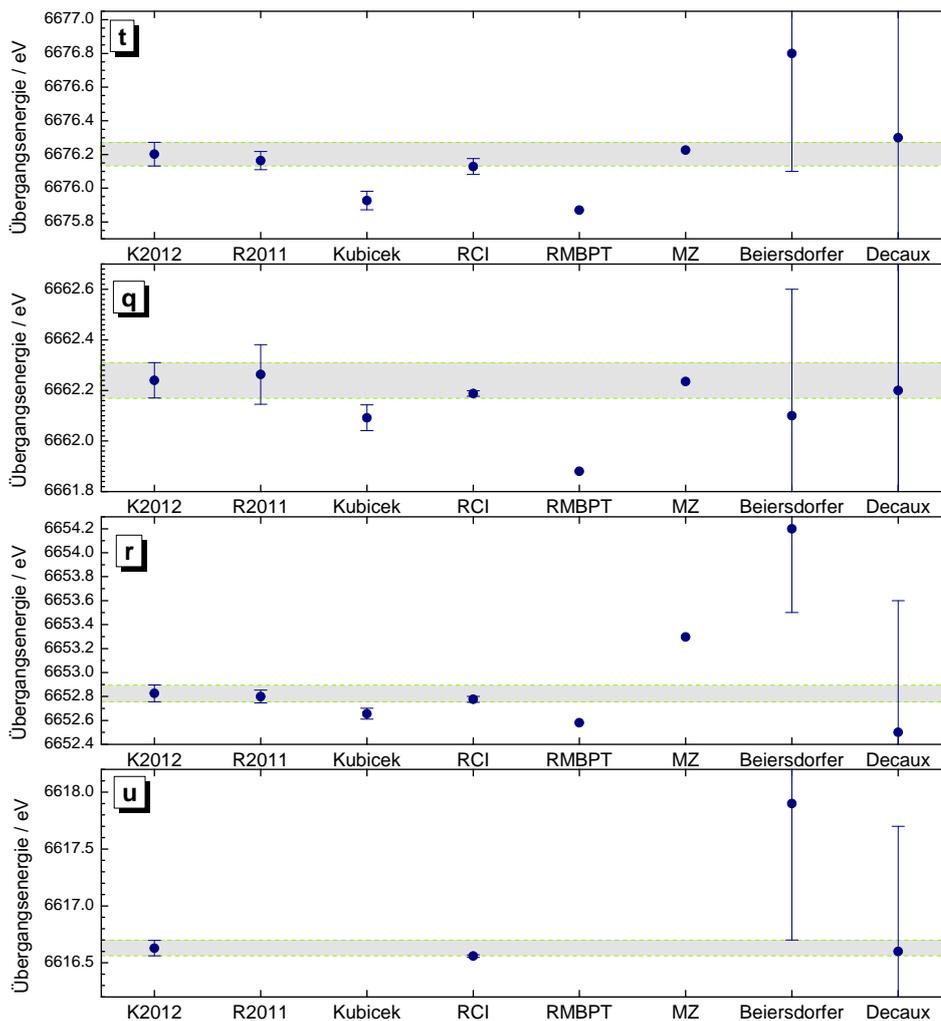
*Drake* [29] unterschätzt mit einem vereinheitlichten relativistischen Ansatz den Wert um etwa 150 meV. Diese Rechnung liegt signifikant außerhalb der experimentellen Unsi-

cherheit des Resultats dieser Arbeit. Diese Methode gilt als unvollständig und kann gerade atomare Systeme mittlerer Kernladung ( $10 \leq Z \leq 30$ ) nur unzureichend beschreiben.

Die RCI-Rechnungen von *Cheng und Chen* [19] kommen dem Wert dieser Arbeit relativ nahe. Im Fall der Linie *w* liegt der berechnete Wert knapp außerhalb für *y* hingegen liegt der Wert innerhalb der experimentellen Unsicherheit. QED-Korrekturen werden von *Cheng und Chen* [19] mit der Verwendung von Dirac-Kohn-Sham Potentialen berechnet. Ebenfalls wird die frequenzabhängige Breit-Wechselwirkung in die Rechnungen zur Berücksichtigung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung eingeschlossen. Beiträge der Massenspolarisation zur Bindungsenergie der Zustände übernehmen *Cheng und Chen* [19] aus [29]. Es bleibt eine gewisse Unsicherheit inwiefern getroffene Vereinfachungen sich auf das Ergebnis der Rechnungen auswirken und ob mit den verwendeten 8000 alle ergebnisrelevanten Konfigurationen berücksichtigt wurden.

Mit einem BSQED-Ansatz haben *Artemyev et al.* [2] die Ionisierungsenergien verschiedener Zustände in heliumartigen Ionen berechnet. Für die Linien *w* und *y* in Eisen liegen die daraus abgeleiteten Übergangsenergien etwa 100 meV unter dem in dieser Arbeit bestimmten Wert. Es handelt sich um die umfassendsten Rechnungen die bisher durchgeführt wurden und bis in hohe Ordnungen Zwei-Elektron QED-Korrekturen berücksichtigen. Ein Unsicherheitsfaktor ist der Umgang mit quasi-entarteten Zuständen, auf deren Berechnung von *Artemyev et al.* [2] ausführlich eingegangen wurde. Diese Zustände verkomplizieren die Rechnung sehr und es ist nicht ersichtlich inwiefern dieser Punkt bei der angegebenen Unsicherheit der Rechnung hinzugezählt wurde.

Die in dieser Arbeit bestimmten Energien der Übergänge in lithiumartigem Eisen sind in Abbildung 4.12 mit theoretischen Vorhersagen [104, 81] und weiteren experimentellen Untersuchungen der Übergangsenergien [9, 22, 59] verglichen. Die Übereinstimmung der anderen Experimente mit dieser Arbeit ist vergleichbar mit der für die heliumartigen Übergänge. Der großen Unsicherheit der Messung von *Decaux et al.* [22] geschuldet stimmen diese Werte letztlich mit denen dieser Arbeit überein. Gleiches gilt für die Linienbeobachtungen von *Beiersdorfer et al.* [9], wobei die Linienpositionen für *r*, *t* und *u* zu höheren Energien verschoben sind. Dies ist auf eine Überlagerung mit Emissionslinien ähnlicher Energie angeregter Zustände zurückzuführen. Linie *r* konnte von *Beiersdorfer et al.* [9] nur zusammen mit dem Übergang *k* ( $1s^2 2p^2 P_{1/2} - 1s 2p^2 {}^2D_{3/2}$ ) beobachtet werden. Und der Energiewert von *t* wurde durch Beiträge der Linie *m* ( $1s^2 2p^2 P_{3/2} - 1s 2p^2 {}^2S_{1/2}$ ) verschoben. Zwei mögliche Übergänge in berylliumartigem Eisen ( $1s^2 2s 2p - 1s 2s 2p^2$ ) können von *Beiersdorfer et al.* [9] nicht getrennt von *u* gemessen werden und verschieben daher dessen beobachteten Energiewert. Alle 2011 mit einer Relativmessung bestimmten Übergangsenergien für die lithiumartigen Eisenionen wurden 2012 durch die mit Absorptionskantenmessungen kalibrierten Werte bestätigt. Wohingegen, die von *Ku-*



**Abb. 4.12:** Vergleich, der in dieser Arbeit experimentell bestimmten K-Schalen-Übergangsenergien in lithiumartigen Eisenionen mit anderen experimentellen Werten und theoretischen Vorhersagen. Eigene Werte aus Relativbestimmung „R2011“ und mit Absorptionskanten kalibrierten Spektren „K2012“. Theoretische Werte: „RCI“ [104], „MZ“ [81], „RMBPT“ [81]. Weitere experimentelle Resultate: „Kubicek“ [59], „Beiersdorfer“ [9], „Decaux“ [22].

*biček* [59] gemessenen Werte, wie bereits in Abschnitt 4.1.1.1 diskutiert, unterhalb der hier bestimmten Linienenergien liegen.

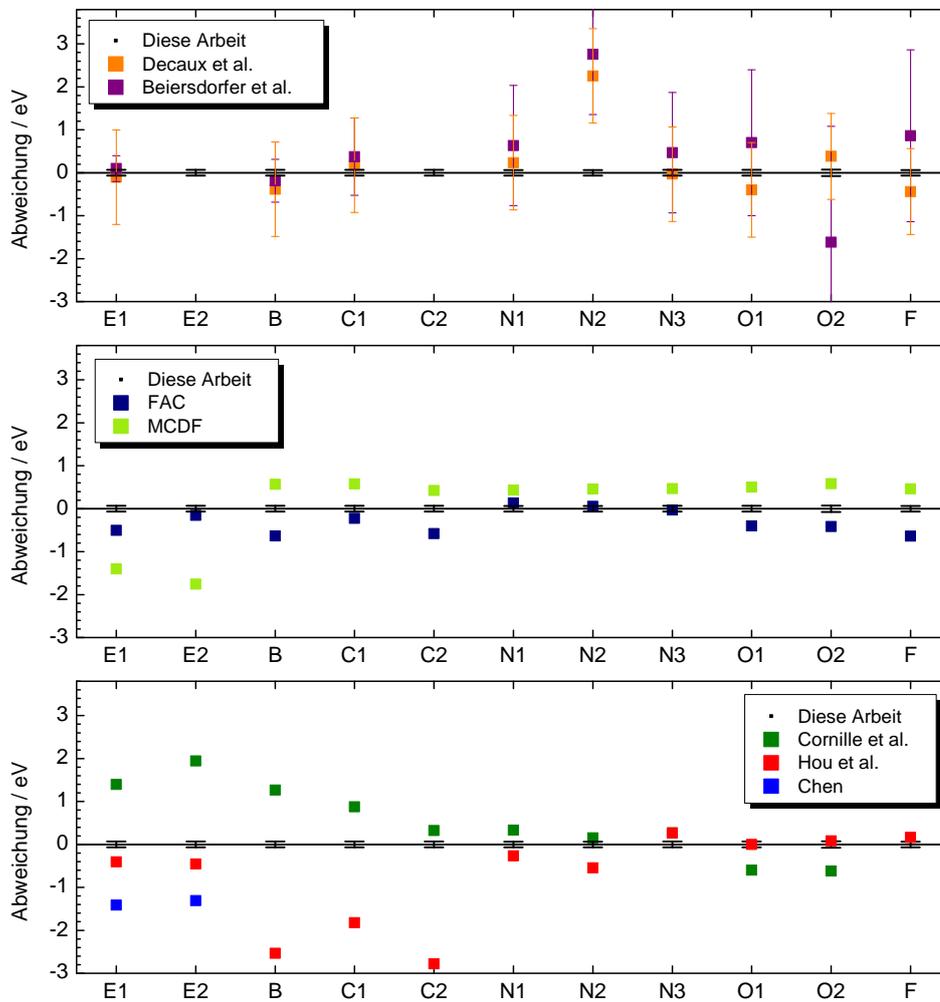
Die theoretischen Vorhersagen durch *Yerokhin et al.* [104] mit der RCI-Methode decken sich mit den Ergebnissen dieser Arbeit. Zur Berechnung der Energieniveaus wurden verschiedene QED-Korrekturen in einem lokalen Potential berechnet, sowie die frequenzabhängige Elektron-Elektron-Wechselwirkung berücksichtigt. Die Mischung von Autoionisationszuständen und Kontinuumszuständen in lithiumartigen Systemen macht eine

sehr große Auswahl von Konfigurationen notwendig. Mit steigender Zahl der Konfigurationen erhöht sich allerdings auch die Schwierigkeit die Konvergenz der Rechnung sicherzustellen. Daher liegt in der Auswahl und Anzahl der verwendeten Konfigurationen die größte Unsicherheitsquelle dieser Methode. Durch Auswahl verschiedener Sets der Konfigurationen erfolgte durch *Yerokhin et al.* [104] eine Auswertung der Genauigkeit der Rechnungen.

War für die heliumartigen Übergänge die RMBPT-Methode noch die mit der besten Übereinstimmung der Werte mit dieser Arbeit, treten für die lithiumartigen Systeme mit nur einem Elektron mehr für diese Methode erhebliche Schwierigkeiten auf. Die Resultate der RMBPT-Rechnungen von *Safronova et al.* [81] liegen mehr als  $2\sigma$  unter den Werten dieser Arbeit. Der nicht relativistische Ansatz von *Safronova et al.* [81] MZ, ergibt für die Linien  $q$  und  $t$  eine gute Übereinstimmung mit dieser Arbeit. Für  $r$  ist die Abweichung jedoch mit 500 meV sehr groß, sodass auch der MZ-Ansatz nicht als geeignete Wahl für die Berechnung der Übergangsenergien in lithiumartigen Eisenionen erscheint.

Die Ergebnisse dieser Arbeit für Übergangsenergien der Linien in berylliumartigen bis fluorartigen Eisenionen werden in Abbildung 4.13 mit weiteren experimentellen Werten und theoretischen Vorhersagen verglichen. Die Aussagekraft der Experimente von *Beiersdorfer et al.* [9] und *Decaux et al.* [22] ist für die niedrigeren Ladungszustände weiter reduziert, da hier fast jede Linie mit Beiträgen anderer Übergänge überlagert ist, (siehe Tabelle 4.4).

Von der Seite der Theorie sind die berechneten Übergangsenergien für diese Ladungszustände mit deutlich größeren Abweichungen behaftet. Die Vorhersagen schwanken zum Teil um mehr als 2 eV je nach Übergang um den Wert dieser Arbeit. Es ist weder für die unterschiedlichen Ansätze noch deren individueller Umsetzung eine eindeutige Systematik in der Abweichung erkennbar. Die große Zahl von Elektronen in den beteiligten Systemen stellt die Theorie vor Probleme, die keine ebenso präzisen Berechnungen wie für die heliumartigen Ionen zulassen.



**Abb. 4.13:** Vergleich, der in dieser Arbeit experimentell bestimmten K-Schalen-Übergangsenergien in fluorartigen bis berylliumartigen Eisenionen mit anderen experimentellen Eisenionen und theoretischen Vorhersagen. Eigene experimentelle Werte, mit Absorptionskanten kalibrierter Spektren „K2012“ und eigene Rechnungen „FAC“ [80], „MCDF“ [80]. Weitere theoretische Vorhersagen: MCDF „Chen“ [17], MZ „Cornille et al.“ [20, 89], MCDF „Hou et al.“ [48]. Weitere experimentelle Resultate: „Beiersdorfer et al.“ [9], „Decaux et al.“ [22].

Ion	Linie	Grundzustand	angeregter Zustand	diese Arbeit 2012	Theorie	FAC <sup>a</sup>	MCDF <sup>b</sup>	Exp. [9]	Exp. [22]
Fe <sup>24+</sup>	<i>w</i>	1s <sup>2</sup> 1S <sub>0</sub>	1s 2p <sup>1</sup> P <sub>1</sub>	6700,549 (5) (70)	6700,4347 (11) [78]	6700,0	6701,7	6700,8	6700,4
Fe <sup>24+</sup>	<i>y</i>	1s <sup>2</sup> 1S <sub>0</sub>	1s 2p <sup>3</sup> P <sub>1</sub>	6667,671 (2) (69)	6667,5786 (12) [78]	6666,6	6668,6	6667,9 (4)	6667,5
Fe <sup>23+</sup>	<i>t</i>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	1s 2s 2p <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub>	6676,202 (3) (69)	6676,129 (47) [81]	6675,7	6677,7	⟨6676,8 (7)⟩	6676,3
Fe <sup>23+</sup>	<i>q</i>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	1s 2s 2p <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>	6662,240 (6) (69)	6662,188 (11) [81]	6661,3	6663,0	6662,1 (5)	6662,2
Fe <sup>23+</sup>	<i>r</i>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	1s 2s 2p <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub>	6652,826 (3) (69)	6652,776 (25) [104]	6651,9	6653,7	⟨6654,2 (7)⟩	6652,5
Fe <sup>23+</sup>	<i>u</i>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	1s 2s 2p <sup>4</sup> P <sub>3/2</sub>	6616,629 (4) (68)	6616,559 (11) [90]	6615,1	6616,4	⟨6617,9 (1,2)⟩	6616,6
Fe <sup>22+</sup>	<i>E1</i>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 1S <sub>0</sub>	1s 2s <sup>2</sup> 2p <sup>1</sup> P <sub>1</sub>	6628,804 (5) (68)	6631,057 [17]	6628,3	6627,4	6628,9 (3)	6628,7
Fe <sup>22+</sup>	<i>E2</i>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 1S <sub>0</sub>	1s 2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup> P <sub>1</sub>	6597,858 (3) (67)	6596,55 [17]	6597,7	6596,1		
Fe <sup>21+</sup>	<i>B</i>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub>	1s 2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> 2P <sub>1/2</sub>	⟨6586,085 (7) (67)⟩	6587,2 [20]	6585,1	6586,3	⟨6585,9 (5)⟩	⟨6585,7⟩
Fe <sup>20+</sup>	<i>C1</i>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup> P <sub>0</sub>	1s 2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup> D <sub>1</sub>	6544,225 (4) (66)	6545,1 [20]	6544,0	6544,8	⟨6544,6 (9)⟩	⟨6544,4⟩
Fe <sup>19+</sup>	<i>C2</i>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> 3P <sub>0</sub>	1s 2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup> S <sub>1</sub>	6556,879 (16) (66)	6557,2 [20]	6556,3	6557,3		
Fe <sup>19+</sup>	<i>N1</i>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup> 4S <sub>3/2</sub>	1s 2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup> P <sub>5/2</sub>	6497,067 (5) (65)	6497,4 [20]	6497,2	6497,5	⟨6497,7 (1,4)⟩	6497,3
Fe <sup>19+</sup>	<i>N2</i>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup> 4S <sub>3/2</sub>	1s 2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup> P <sub>3/2</sub>	6506,845 (7) (65)	6507,0 [20]	6506,9	6507,3	⟨6509,6 (1,4)⟩	⟨6509,1⟩
Fe <sup>19+</sup>	<i>N3</i>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup> 4S <sub>3/2</sub>	1s 2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup> P <sub>1/2</sub>	6509,133 (14) (65)	6509,4 [20]	6509,1	6509,6	⟨6509,6 (1,4)⟩	⟨6509,1⟩
Fe <sup>18+</sup>	<i>O1</i>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup> 3P <sub>2</sub>	1s 2s <sup>2</sup> 2p <sup>5</sup> 3P <sub>2</sub>	6466,900 (14) (64)	6466,3 [20]	6466,5	6467,4	6467,6 (1,7)	⟨6466,5⟩
Fe <sup>18+</sup>	<i>O2</i>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup> 3P <sub>2</sub>	1s 2s <sup>2</sup> 2p <sup>5</sup> 3P <sub>1</sub>	6474,318 (33) (66)	6473,7 [20]	6473,9	6474,9	⟨6472,7 (2,7)⟩	⟨6474,7⟩
Fe <sup>17+</sup>	<i>F</i>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>5</sup> 2P <sub>3/2</sub>	1s 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup> 2S <sub>1/2</sub>	6435,239 (14) (63)		6434,6	6435,7	6436,1 (2,0)	6434,8

**Tabelle 4.4:** In dieser Arbeit aus den Daten der Kampagne 2012 bestimmte K<sub>α</sub>-Übergangsenergien von Eisenionen, im Vergleich mit anderen Experimenten und Theorie. Die experimentelle Unsicherheit setzt sich aus einem (statistischen)(systematischen) Teil zusammen, dabei handelt es sich um 1σ Fehler. Alle Werte sind in eV angegeben. Spitze Klammern umgeben experimentelle Werte, die in ihrer Genauigkeit durch eine Überlagerung mit anderen Übergängen beeinträchtigt sind.

<sup>a</sup>Eigene Rechnungen von Maurice Leutenegger mit FAC [42], das Standard *configuration-interaction* Paket nutzend.

<sup>b</sup>Eigene Rechnungen von Zoltan Harman auf der Grundlage der Multi-Configuration-Dirac-Fock Methode (MCDF) [92].

### 4.1.2.2 Natürliche Linienbreiten

An die hochaufgelösten Linienprofile aus der Messreihe 2012 kann im Gegensatz zu 2011 ein Voigtprofil, eine Faltung aus einem Gauß- und Lorentzprofil, angepasst werden. Mit diesem Fit werden sowohl die natürliche Linienbreite (Lorentzbreite des Voigtprofils), als auch die Dopplerbreite (Gaußbreite) der Linie bestimmt. Für Linie  $B$  konnte keine natürliche Linienbreite bestimmt werden, da zu dieser Linie zwei sich überlappende Übergänge beitragen. Die Interkombinationslinien  $y$  und  $u$  sind durch ihre Dopplerbreite dominiert, so dass auch hier keine Bestimmung der natürlichen Linienbreite möglich war. In Tabelle 4.5 sind die experimentellen Ergebnisse für die natürlichen Linienbreiten der einzelnen Übergänge mit theoretischen Vorhersagen verglichen.

Für die Übergänge mit einer relativ großen experimentellen Unsicherheit, vor allem bei den niedrigen Ladungszuständen, ist die Zahl der aufgenommenen Spektren geringer als beispielsweise für Linie  $w$ . Darüber hinaus erklärt sich die große Unsicherheit des experimentellen Werts dadurch, dass teilweise die Übergänge eines Ladungszustands nur gemeinsam in einem etwas breiteren Übersichtsspektrum vermessen wurden, was in einer geringeren Energieauflösung resultierte (beispielsweise  $O1$ ,  $O2$ ).

Die aus MCDF-Rechnungen von *Zoltan Harman* sind neben der Gesamtlinienbreite, als Teilergebnis auch die radiative Breite und Auger-Breite der Übergänge bekannt. *Harman* gibt nach einer Analyse möglicher Fehlerquellen der Rechnung, wie die Mischung von Kontinuumszuständen eine Unsicherheit von etwa 10% für die Breiten an. Untereinander ist die Übereinstimmung zwischen den theoretischen Vorhersagen teilweise sehr gut, es treten jedoch Unterschiede von bis zu 55 meV bei einzelnen Linienbreiten auf.

Innerhalb der experimentellen Unsicherheit stimmen die theoretischen Vorhersagen nur für die Linien  $w$ ,  $E2$ ,  $N3$ ,  $O1$ ,  $O2$  und  $F$  mit den Werten dieser Arbeit überein. Für die anderen Linienbreiten ergeben sich Abweichungen, die größer sind als die experimentelle Unsicherheit. Im Fall der Linienbreite  $C1$  liegen die Vorhersagen auf unterschiedlichen Seiten des experimentellen Wertes, sodass sich kein eindeutiger Trend in den Abweichungen der Theorie ableiten lässt.

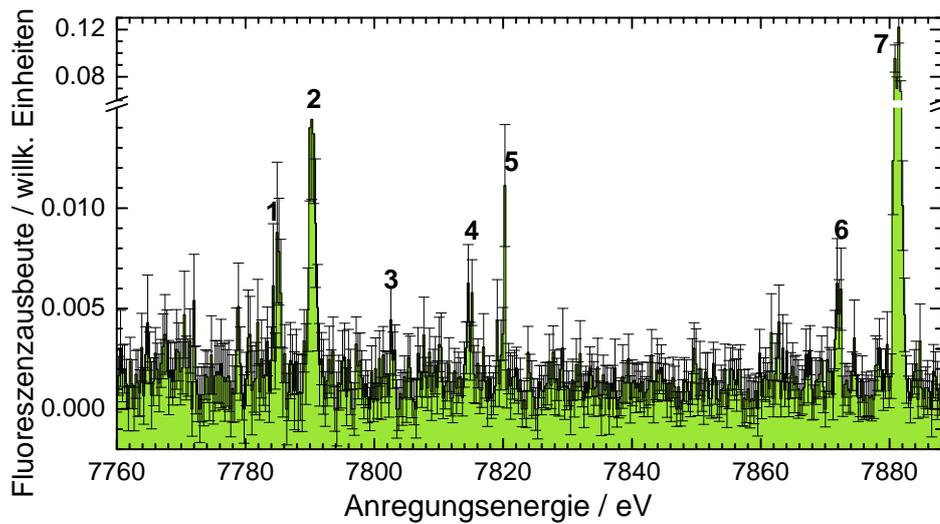
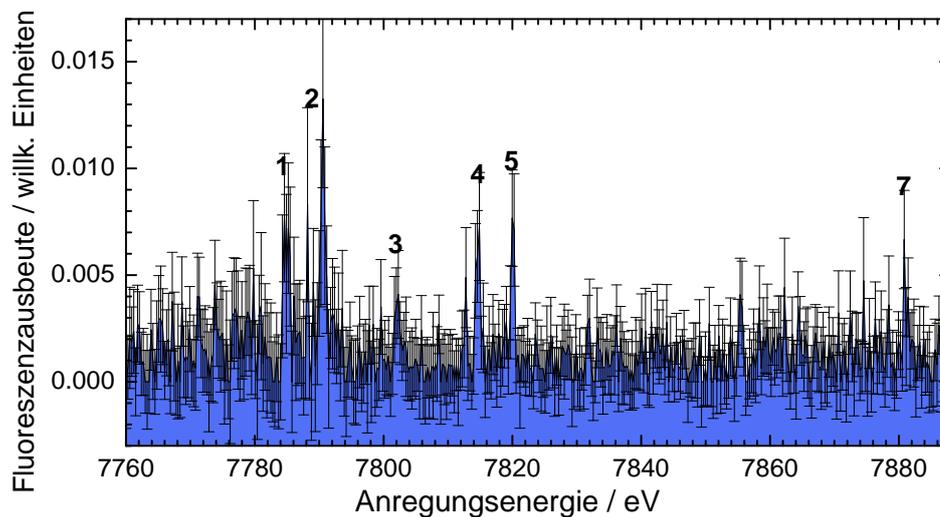
## 4.2 $K_\beta$ (1s-3p) Übergänge

Nach der ausführlichen Untersuchung der  $K_\alpha$ -Übergänge in  $\text{Fe}^{24+}$  bis  $\text{Fe}^{17+}$  Ionen folgen in diesem Abschnitt  $K_\beta$  (1s-3p) Übergänge. Der Wirkungsquerschnitt zur Anregung der  $K_\beta$ -Übergänge ist gegenüber den  $K_\alpha$ -Übergängen kleiner. Um dennoch ein starkes Fluoreszenzsignal zu erhalten musste die Zahl der Ionen in der Falle deutlich vergrößert werden. Dazu wurde neben dem Elektronenstrom das Einschlusspotential der Ionenwolke erhöht. Im Übersichtsspektrum des Photonenenergiebereichs von 7760 eV bis 7890 eV

Linie	Experiment	Theorie		MCDF		
				rad.	Auger	gesamt
$w$	311 (10)	301	[30]	301	0	301
		303	[75]			
		315	[44]			
$y$	-	29	[75]	29	0	29
$q$	255 (31)	310	[75]	312	0.081	312
$r$	250 (11)	226	[75]	208	32	241
$t$	131 (29)	167	[75]	112	52	163
$u$	-	10	[75]	11	0.14	11
$E1$	437 (12)	382	[75]	292	95	387
$E2$	178 (34)	149	[75]	31	136	167
$C1$	524 (12)	499	[75]	218	334	552
$C2$	385 (207)	611	[75]	412	135	547
$N1$	565 (45)	498	[75]	146	400	546
$N2$	594 (50)	504	[75]	164	338	502
$N3$	570 (109)	505	[75]	155	360	515
$O1$	859 (229)	756	[75]	264	529	793
$O2$	772 (228)	785	[75]	304	518	822
$F$	998 (203)	989	[75]	351	651	1020

**Tabelle 4.5:** Vergleich der in dieser Arbeit bestimmten natürlichen Linienbreiten mit theoretischen Vorhersagen. Die Linienbreiten sind in meV angegeben. Die MCDF-Rechnungen sind auf etwa 10 % genau. Es werden neben der Gesamtbreite, die berechnete radiative Breite und Augerbreite angegeben.

(Abbildung 4.14) sind mehrere  $K_\beta$ -Linien erkennbar, die den heliumartigen und lithiumartigen Eisenionen zuzuordnen sind. Die Linien sind durchnummeriert, beginnend mit der Linie niedrigster Energie. Eine Zuordnung zu bestimmten Übergängen erfolgt durch Vergleich der Energien mit theoretischen Vorhersagen, (siehe Tabelle 4.6). Die Vorhersagen von *Nilsen* [72] und auch die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten FAC-Rechnungen weichen meist um einige eV von den experimentellen Ergebnissen ab. Die CI-Methode erscheint in diesen beiden Ausführungen zur genauen Berechnung der  $K_\beta$ -Übergangsenergien daher als nicht geeignet. Für gebundene Zustände verwendet *Nilsen* [72] einen MCDF-Ansatz und die Kontinuumszustände der Elektronen berechnet er mit verzerrten Dirac-Wellenfunktionen. Ebenfalls mit großen Abweichungen zum Experiment fallen die Vorhersagen von *Chen* [18] aus. Mit der MCDF-Methode unter Verwendung einer verallgemeinerten Breit-Wechselwirkung und QED-Korrekturen unterschätzt *Chen* [18] die lithiumartigen  $K_\beta$ -Übergangsenergien dieser Arbeit um etwa 1,5 eV. Mit einem anderen MCDF-Ansatz wurden von *Hou et al.* [48] die  $K_\beta$ -Übergangsenergien in heliumartigem Eisen berechnet. Mit einer Abweichung von 0,38 eV zu niedrigeren Energi-

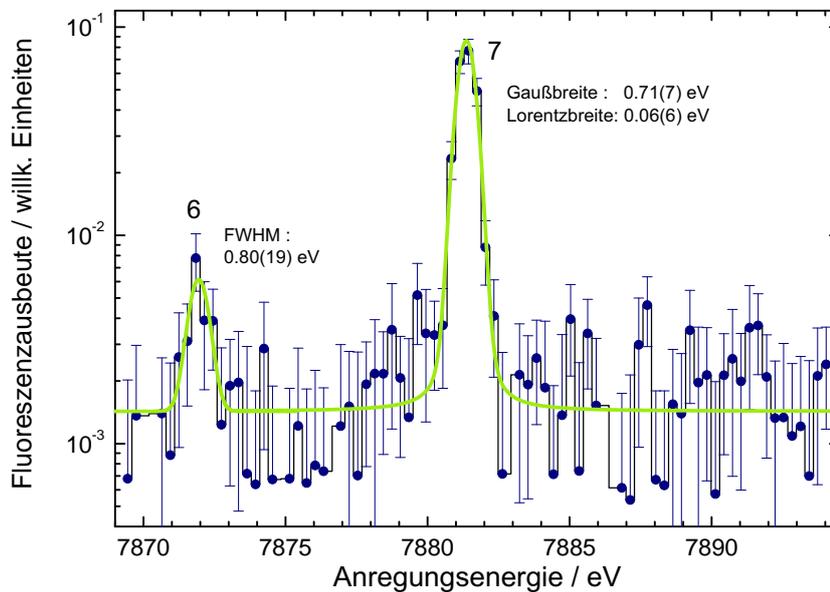
(a)  $90^\circ$  GLP-Detektor(b)  $180^\circ$  GLP-Detektor**Abb. 4.14:**  $K_\beta$ -Übersichtsspektrum für beide großen GLP-Detektoren.

en liegen diese Vorhersagen ebenfalls außerhalb der experimentellen Unsicherheit dieser Arbeit, kommen den Werten jedoch am nächsten. Weitere experimentell Werte wurden von *Smith et al.* [94] an einem Tokamak-Plasma aufgenommen. Mit Abweichungen von bis zu 0,7 eV nach oben beziehungsweise 1,3 eV nach unten, treten darin teilweise deutliche Schwankungen um die Werte dieser Arbeit auf. Im Vergleich mit dieser Arbeit können in Tokamak-Plasmen durch Elektronenstoß auch dipolverbotene Übergänge in hohem Maße angeregt werden. Können solche Übergänge nahe den eigentlich beobachteten Übergängen nicht aufgelöst werden, so kann es zu einer Verschiebung der Mittenposition der Linie

kommen.

Abbildung 4.14(a) zeigt ein Übersichtsspektrum der mit dem  $90^\circ$  GLP-Detektor aufgenommenen  $K_\beta$ -Übergänge. Es wird von Linie 7 dominiert, deren Intensität um eine Größenordnung größer ist als die der Linien 1 – 6. Diese Linie ist in Abbildung 4.14(b), aufgenommen mit dem  $180^\circ$  GLP-Detektor, nur andeutungsweise zu erkennen. Es handelt sich um einen Übergang von  $J = 1$  nach  $J = 0$ , dessen Winkelverteilung eine Beobachtung unter dem gegebenen Winkel streng ausschließt. Der Raumwinkel des Detektors ermöglicht es, dennoch ein sehr schwaches Fluoreszenzsignal zu registrieren.

Die Fluoreszenzlinien 6 und 7 in heliumartigem Eisen sind nochmals detaillierter in Abbildung 4.15 dargestellt. Mit gegenüber dem Übersichtsspektrum (Abbildung 4.14) verbesserter Auflösung, konnte an die Linien ein Gaußprofil (Linie 6) beziehungsweise Voigtprofil (Linie 7) gefittet werden. Die Breite der Interkombinationslinie 6 wurde auf  $(0,80 \pm 0,19)$  eV und die Gaußbreite des Voigtprofils von Linie 7 auf  $(0,71 \pm 0,07)$  eV bestimmt. Innerhalb der experimentellen Unsicherheit stimmen beide Werte sehr gut überein. Da beide Linien in demselben Durchlauf aufgenommen wurden, entspricht dies den Erwartungen für die Dopplerbreite beider Übergänge. Aus Gleichung (2.17) ergibt sich mit einer Dopplerbreite von 0,72 eV eine Ionentemperatur von etwa 79 eV. Der Beitrag von 0,2 eV der Energieauflösung des Kristalls kann dabei vernachlässigt werden. Die Gaußbreite der vermessenen  $K_\alpha$ -Linien war mit etwa 0,4 eV deutlich geringer, als die der



**Abb. 4.15:**  $K_\beta$ -Übersichtsspektrum für heliumartige Eisenionen (blau), mit dem  $90^\circ$  GLP-Detektor aufgenommen. Daran wurde in grün ein Gaußprofil (Linie 6) und ein Voigtprofil (Linie 7) angepasst.

$K_\beta$ -Linien. Daraus ergibt sich eine Iontemperatur von etwa 34 eV. Durch die große Falltiefe für die  $K_\beta$ -Messungen erhöhte sich nicht nur die Zahl der Ionen sondern auch die Iontemperatur, was sich anhand der größeren Gaußbreite der Übergänge zeigt.

Die natürliche Linienbreite von Linie 7 mit  $\delta E_n = (0,06 \pm 0,06)$  eV ist Ergebnis des Voigtfits. Durch die Dominanz der Dopplerbreite bei dieser Linie, ist die gemessene natürliche Linienbreite mit einem relativ großen Fehler behaftet. Die Vorhersage der natürlichen Linienbreite liegt bei 0,089 eV nach *Nilsen* [72] beziehungsweise 0,082 eV nach eigenen FAC-Rechnungen. Aufgrund der großen experimentellen Unsicherheit können die Rechnungen nicht eindeutig verifiziert werden. Gegenüber der  $K_\alpha$ -Linie  $w$  hat die natürliche Linienbreite von 7 bereits deutlich abgenommen und wird für einen  $1s-4p$  Übergang, bei gleicher Dopplerbreite, nicht mehr bestimmbar sein. Die Anregungsrate und so die natürliche Linienbreite nimmt mit der Hauptquantenzahl ab und wird so gegenüber der Dopplerbreite mit zunehmendem  $n$  vernachlässigbar klein.

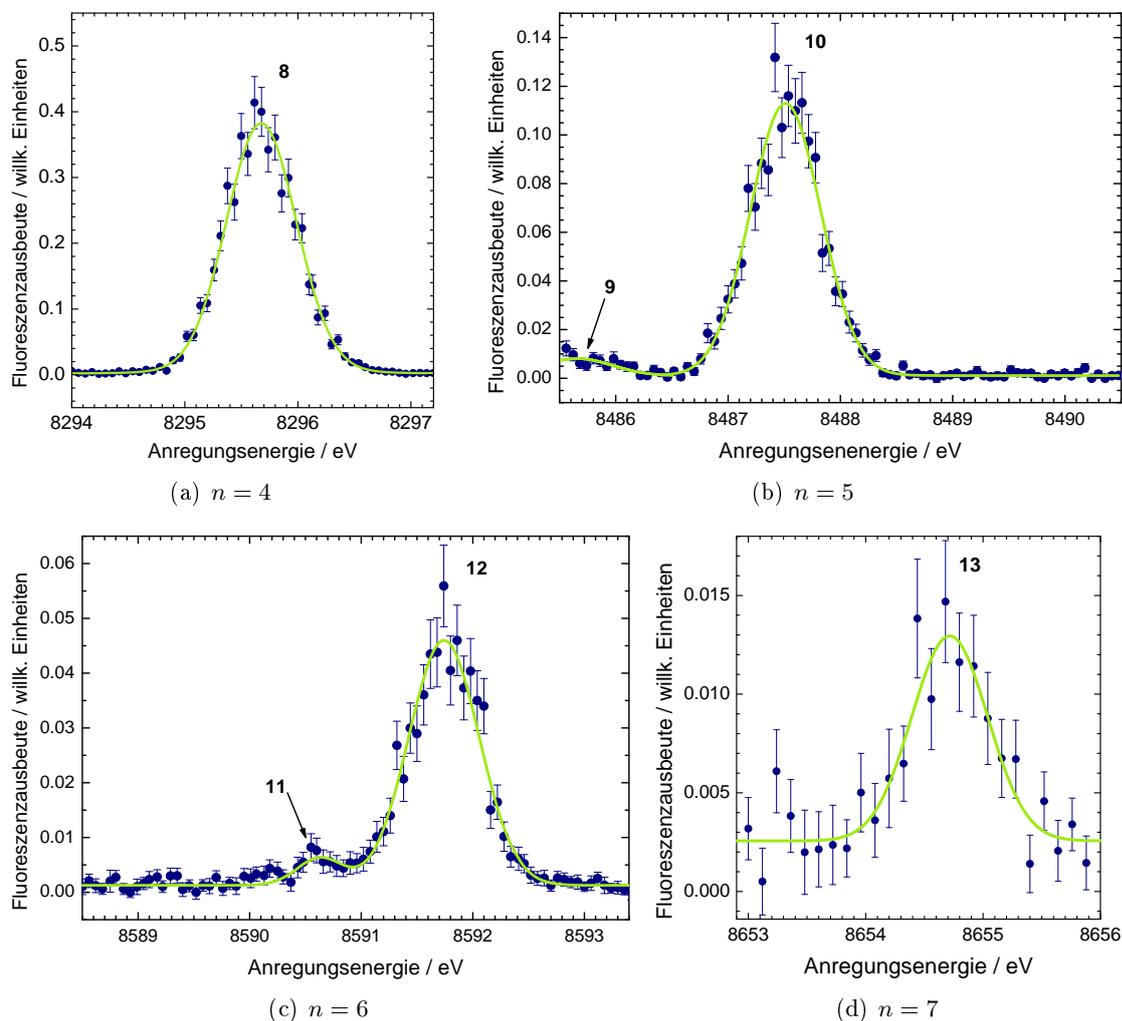
Ion	Linie	Grundzustand	angeregter Zustand	diese Arbeit	Experiment [94]	Theorie	Theorie [18]	FAAC [80]
Fe <sup>23+</sup>	1	1s <sup>2</sup> 2s ( <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub> )	1s 2s ( <sup>3</sup> S) 3p ( <sup>4</sup> P <sub>1/2</sub> ) 1s 2s ( <sup>3</sup> S) 3p ( <sup>4</sup> P <sub>3/2</sub> )	<7785,03 (6) (10)>		7782,0 [72] 7782,6 [72]		7785,2 7784,4
Fe <sup>23+</sup>	2	1s <sup>2</sup> 2s ( <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub> )	1s 2s ( <sup>3</sup> S) 3p ( <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub> ) 1s 2s ( <sup>3</sup> S) 3p ( <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub> )	<7790,36 (3) (10)>	<7790,84 (20)>	7788,0 [72] 7788,4 [72]	7788,9 7789,4	7794,3 7795,6
Fe <sup>23+</sup>	3	1s <sup>2</sup> 2s ( <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub> )	1s 2p 3s ( <sup>4</sup> P <sub>3/2</sub> )	7802,79 (14) (10)		7805,2 [72]		7805,7
Fe <sup>23+</sup>	4	1s <sup>2</sup> 2s ( <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub> )	1s 2s ( <sup>1</sup> S) 3p ( <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub> )	7814,78 (11) (10)	7813,47 (24)	7812,3 [72]	7813,0	7817,2
Fe <sup>23+</sup>	5	1s <sup>2</sup> 2s ( <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub> )	1s 2s ( <sup>1</sup> S) 3p ( <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub> )	7820,15 (16) (10)	7819,88 (20)	7817,8 [72]	7818,4	7822,3
Fe <sup>24+</sup>	6	1s <sup>2</sup> ( <sup>1</sup> S <sub>0</sub> )	1s 3p ( <sup>3</sup> P <sub>1</sub> )	7871,88 (7) (10)	7871,31 (25)	7867,8 [72]		7870,5
						7871,5 [48]		
Fe <sup>24+</sup>	7	1s <sup>2</sup> ( <sup>1</sup> S <sub>0</sub> )	1s 3p ( <sup>1</sup> P <sub>1</sub> )	7881,37 (1) (10)	7880,67 (15)	7877,2 [72]		7879,9
						7881,0 [48]		
Fe <sup>24+</sup>	8	1s <sup>2</sup> ( <sup>1</sup> S <sub>0</sub> )	1s 4p ( <sup>1</sup> P <sub>1</sub> )	8295,67 (1) (12)				8293,9
Fe <sup>24+</sup>	9	1s <sup>2</sup> ( <sup>1</sup> S <sub>0</sub> )	1s 5p ( <sup>3</sup> P <sub>1</sub> )	8485,66 (9) (12)				8483,8
Fe <sup>24+</sup>	10	1s <sup>2</sup> ( <sup>1</sup> S <sub>0</sub> )	1s 5p ( <sup>1</sup> P <sub>1</sub> )	8487,51 (1) (12)				8485,7
Fe <sup>24+</sup>	11	1s <sup>2</sup> ( <sup>1</sup> S <sub>0</sub> )	1s 6p ( <sup>3</sup> P <sub>1</sub> )	8590,63 (4) (13)				8588,8
Fe <sup>24+</sup>	12	1s <sup>2</sup> ( <sup>1</sup> S <sub>0</sub> )	1s 6p ( <sup>1</sup> P <sub>1</sub> )	8591,75 (1) (13)				8589,9
Fe <sup>24+</sup>	13	1s <sup>2</sup> ( <sup>1</sup> S <sub>0</sub> )	1s 7p ( <sup>1</sup> P <sub>1</sub> )	8654,72 (4) (13)				8652,8

**Tabelle 4.6:** In dieser Arbeit bestimmte K- $\beta$ -Übergangsenergien heliumartiger und lithiumartiger Eisenionen sowie weiterer 1s – np Übergangsenergien ( $4 \leq n \leq 7$ ) in heliumartigen Eisen, im Vergleich mit theoretischen Vorhersagen. Die experimentelle Unsicherheit setzt sich aus einem (statistischen)(systematischen) Teil zusammen. Alle Werte sind in eV angegeben. Spitze Klammern umgeben experimentelle Werte, die in ihrer Genauigkeit durch eine Überlagerung mit anderen Übergängen beeinträchtigt sind.

### 4.3 $1s-np$ Übergänge in $Fe^{24+}$ ( $4 \leq n \leq 7$ )

Die Serie der  $1s-np$  Übergänge wurde für höhere  $n$  fortgesetzt. Wie im vorangegangenen Abschnitt 4.2 gesehen, ist der Singulett-P-Zustand des heliumartigen Eisens am besten anzuregen. Daher wurde die Aufnahme von Übergängen zu Niveaus höherer Hauptquantenzahlen auf diesen Zustand beschränkt, denn die Übergangsrate wird mit steigendem  $n$  deutlich abnehmen. Dies ist an den Abbildungen 4.16(a)-4.16(d) zu erkennen, die die Übergänge  $1s-np$  ( $^1P_1$ ) in heliumartigem Eisen, für  $4 \leq n \leq 7$  zeigen.

Alle Spektren wurden bei gleichen Bedingungen aufgenommen, sodass die Intensität

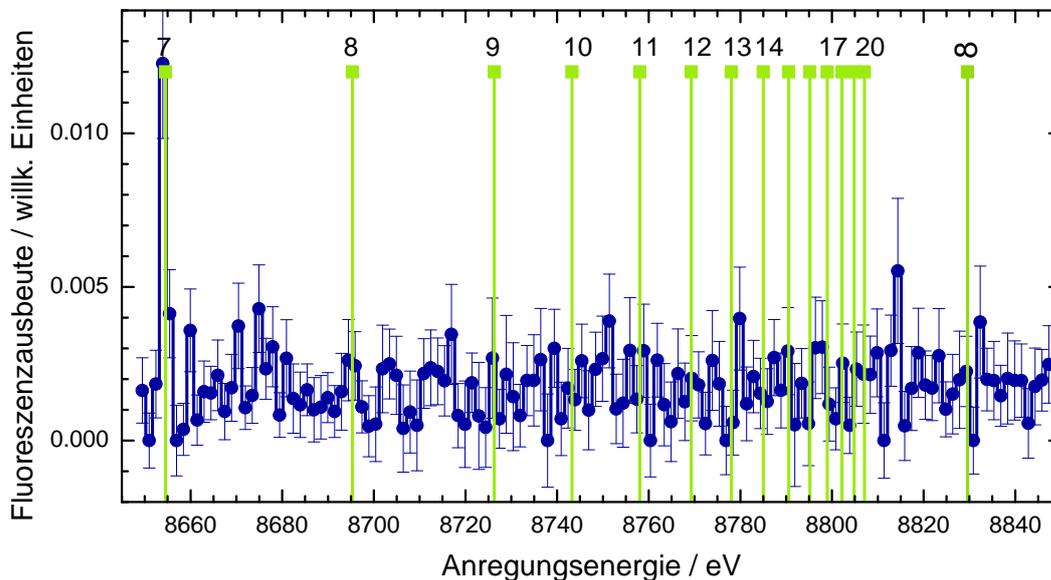


**Abb. 4.16:** Linien verschiedener  $1s-np$  ( $^1P_1$ ) Übergänge in heliumartigem Eisen  $Fe^{24+}$ . In (b) und (c) ist jeweils ein Übergang aus dem Triplettzustand als schwaches Nebenmaximum zu erkennen.

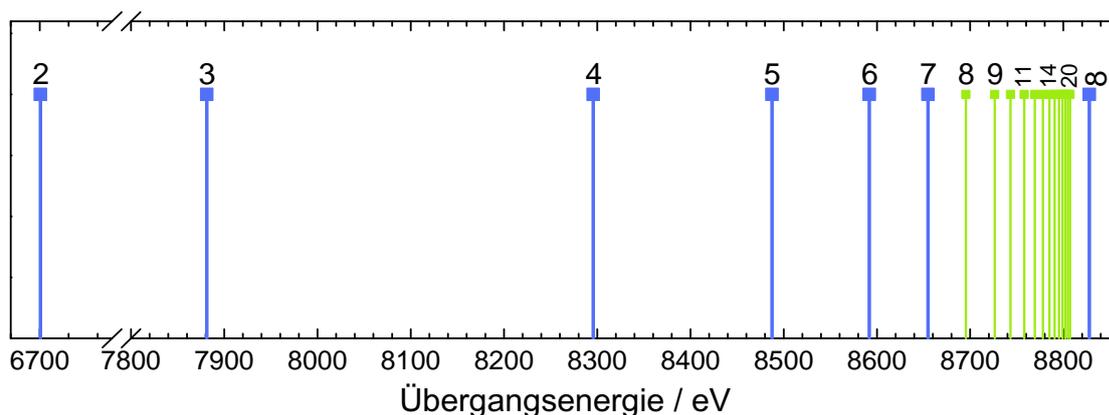
der Linien vergleichbar ist. Es wird deutlich, dass mit steigendem  $n$  die Signalstärke der Fluoreszenzlinien abnimmt. Für Linie 13 mit  $n = 7$  hebt sich das Signal der Fluoreszenzphotonen nur noch sehr schwach vom Untergrund ab. Die Fluoreszenz angeregter Zustände höherer Hauptquantenzahl konnte nicht beobachtet werden, hier war ein mögliches Signal nicht vom Untergrund zu trennen. In Abbildung 4.17 ist das Fluoreszenzspektrum jenseits Linie 13 mit den erwarteten Positionen weiterer Übergänge dargestellt.

Der Abstand benachbarter Zustände nimmt mit steigendem  $n$  ab, sodass der Übergang des Triplett-P Zustands in den Grundzustand, im gleichen Spektrum wie die Fluoreszenz des Singulett-P-Zustands für  $n = 5$  und  $n = 6$  beobachtet werden konnte. In den beiden anderen Fällen liegt der Übergang außerhalb des aufgenommenen Energiebereichs ( $n = 4$ ) beziehungsweise ist das Signal, auf Grund der geringen Anregungsrate des Übergangs, nicht mehr vom Untergrund zu trennen ( $n = 7$ ).

Die, wie in Abschnitt 4.1.2.1 beschrieben, mit Absorptionskanten kalibrierten Übergangsenergien der Linien 8 – 13 sind in Tabelle 4.6 mit eigenen FAC-Rechnungen verglichen. Die berechneten Energien liegen jeweils knapp 2 eV über dem experimentellen Wert dieser Arbeit. Ähnlich große Abweichungen zeigen die Rechnungen von *Nilsen* [72], die den experimentellen Wert jedoch systematisch unterschätzen. Abbildung 4.18 zeigt die Energiepositionen der einzelnen experimentell bestimmten Linien und der daraus extrapolierten Seriengrenze.



**Abb. 4.17:** Fluoreszenzspektrum des heliumartigen Eisens im Bereich der Seriengrenze. In grün sind die durch FAC-Rechnungen erwartete Positionen der Übergänge in den Grundzustand aus den Schalen  $n = 7$  bis  $n = 20$  und die erwartete Seriengrenze bei  $n = \infty$  markiert.



**Abb. 4.18:** Die Energiepositionen der experimentell bestimmten  $1s - np$  Übergänge heliumartigen Eisens sind in blau dargestellt. Die Bezeichnung der Linien entspricht der Schale  $n$  des angeregten Niveaus. Weitere Linien werden nach FAC-Rechnungen an den grün markierten Positionen erwartet.

Eine Bestimmung der natürlichen Linienbreite aus einem Voigtfit war, wie bereits vermutet für diese Übergänge, nicht möglich. Das Linienprofil wird für Grundzustandsübergänge aus Zuständen dieser Hauptquantenzahlen zu sehr durch den Gaußanteil der Dopplerverbreiterung dominiert, um ein verlässliches Ergebnis eines Voigtfits zu erhalten.

Betrachtet man die allgemeine Formel für die Energiedifferenz zweier Niveaus unterschiedlicher Hauptquantenzahl  $n_i, n_k$  nach *Moseley*, Gleichung (2.27), so kann man für den Fall  $n_k \rightarrow \infty$ , die Ionisierungsenergie  $E_I = E_{i\infty}$  der Schale  $n_i$  bestimmen, falls die effektive Kernladung  $Z_{\text{eff}} = Z - S$  des Systems bekannt ist.

$$E_{i\infty} = Z_{\text{eff}}^2 \cdot \text{Ry} \cdot \frac{1}{n_i^2} \quad (4.4)$$

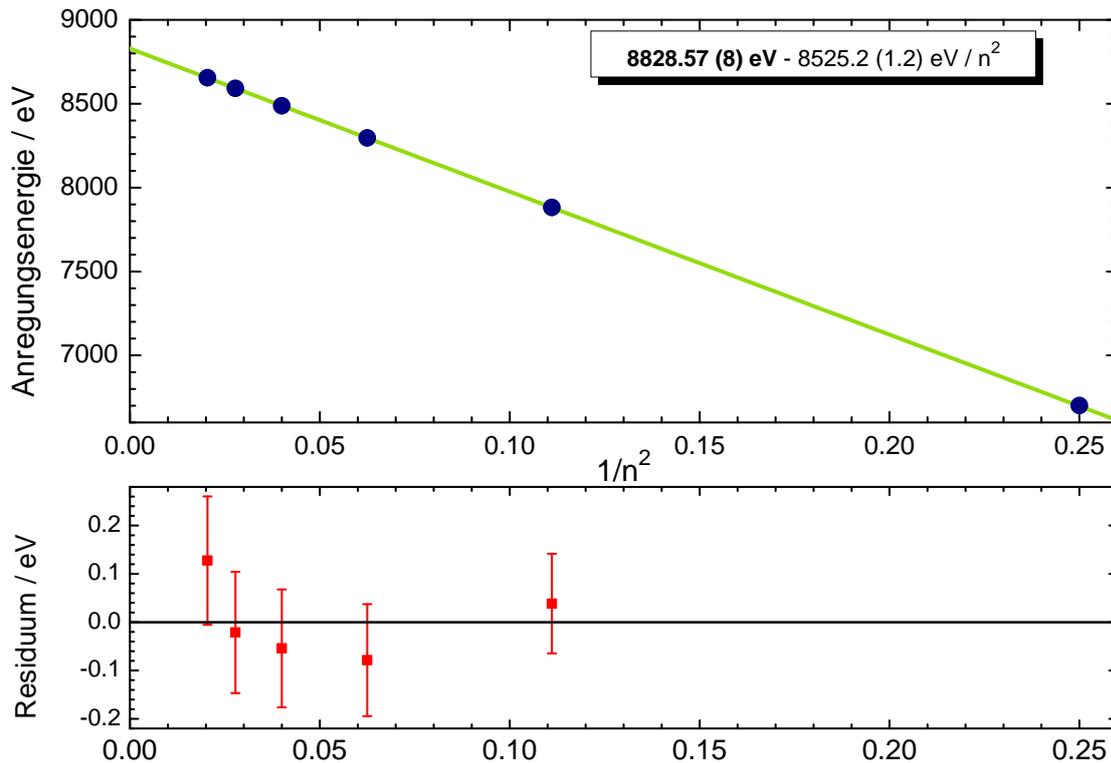
mit: Rydbergkonstante  $\text{Ry} = 13,605\,692\,53\,(30)\,\text{eV}$ [69]

Trägt man die experimentell bestimmten Energiewerte der  $1s - np$  Übergänge gegen das inverse Quadrat der Hauptquantenzahl  $n$ , wie in Abbildung 4.19 auf, so erhält man durch lineare Extrapolation, auch ohne Kenntnis von  $Z_{\text{eff}}$ , die Ionisierungsenergie  $E_I$  des Grundzustands von  $Fe^{24+}$ .

$$E_I(Fe^{24+}) = (8828,57 \pm 0,08)\,\text{eV} \quad (4.5)$$

Setzt man die Ionisierungsenergie in Gleichung (4.4) ein, so erhält man eine effektive Kernladung des heliumartigen Eisenions ( $Z = 26$ ) von

$$Z_{\text{eff}} = 25,47 \quad (4.6)$$



**Abb. 4.19:** Experimentell bestimmte Anregungsenergie verschiedener  $1s-np$  ( $^1P_1$ ) Übergänge gegen das inverse Quadrat der Hauptquantenzahl  $n$  aufgetragen (blau), mit linearem Fit des Verlaufs der Datenpunkte (grün) zur Bestimmung des Ionisationspotentials. Wegen seines großen Quantendefekts wurde der Wert von  $n = 2$  dabei nicht berücksichtigt.

Daraus lässt sich ableiten, dass das zweite Elektron 0,53 Kernladungen abschirmt. Im Vergleich dazu erhält man für Helium, mit sehr viel kleinerer Kernladung  $Z = 2$  und  $E_I = 24,587\,3879(5)$  eV [53] eine etwas größere Abschirmung von rund 0,66 Ladungen.

Es liegt eine schwache Abhängigkeit der effektiven Kernladung  $Z_{\text{eff}}$  von der Hauptquantenzahl  $n$  vor. Die Abweichungen des effektiven Potentials vom reinen Coulombpotential ergeben sich aus dem räumlichen Überlapp der Wellenfunktionen des angeregten Elektrons und der anderen Elektronen des Ions und sind folglich für  $n = 2$  am größten. Der sogenannte Quantendefekt beschreibt diese Abweichungen, die mit steigendem  $n$  kleiner werden. Daher erfolgte die Extrapolation des Ionisationspotentials nur für die Übergänge  $n \geq 3$ . Der so bestimmte Wert liegt etwa 0,38 eV oberhalb des von *Artemyev et al.* [2], unter Einbeziehung der Quantenelektrodynamik, berechneten Werts von 8828,1870 (11) eV. Das Ionisationspotential des Grundzustands liegt nach *Cheng und Chen* [19] und *Plante et al.* [78] bei 8828,2532 eV beziehungsweise 8828,2609 eV. Wie bereits für die Übergangsenergie der Linie  $w$  liegen die theoretischen Vorhersagen etwas

unterhalb des Wertes dieser Arbeit. Bei der Angabe des experimentellen Fehlers handelt es sich um einen rein statistischen Fehler. Der systematische Fehler durch die Vernachlässigung des von  $n$  abhängigen Quantendefekts kann nicht absolut beziffert werden. Dennoch konnten wir hiermit zeigen, dass Ionisationspotentiale, über resonante Anregung mehrerer Rydbergzustände und Bestimmung der Übergangsenergien, gemessen werden können.



## 5 Zusammenfassung und Ausblick

Ziel dieser Arbeit war die spektroskopische Untersuchung photoangeregter K-Schalen-Übergänge in hochgeladenen Eisenionen. Bisher war die Untersuchung dieser Übergänge nur durch Anregung mittels Elektronenstoß durchführbar. Atomare Übergänge mit Röntgenphotonen mehrere keV anzuregen, ist erst durch den Bau der aktuell brillantesten Synchrotronstrahlungsquelle *PETRA III* möglich geworden. In der Astrophysik spielt Eisen als vergleichsweise schweres Element hoher relativer Häufigkeit eine ganz besondere Rolle. Aus beobachteten  $K_{\alpha}$ -Linien lassen sich beispielsweise Rückschlüsse auf Eigenschaften lokaler photoionisierter Plasmen ziehen. Gerade, um aus der Dopplerverschiebung verschiedener Resonanzlinien die Geschwindigkeit astrophysikalischer Objekte zu bestimmen, ist eine sehr genaue Kenntnis der Übergangsenergien unerlässlich. Die Röntgensatellitenmission *ASTRO-H* wird ab 2015 K-Schalen-Emissionsspektren liefern. Darin werden mit einem Auflösungsvermögen von 7 eV oder besser die Hauptemissionslinien von den Interkombinationslinien in den Spektren heliumartiger Ionen getrennt beobachtbar sein.

In dieser Arbeit ist es erstmals gelungen an den Ladungszuständen  $\text{Fe}^{17+}$  bis  $\text{Fe}^{24+}$  hochauflösende Messungen mit der Methode der Fluoreszenzspektroskopie zu realisieren. Vermessen wurden insgesamt 17 dipolerlaubte  $K_{\alpha}$ -Übergänge der genannten Ladungszustände (siehe Tabelle 4.4 und 4.5). Die Übergangsenergien konnten mit bisher unerreichter experimenteller Genauigkeit auf bis zu 10 ppm bestimmt werden. Dies bedeutet eine Verbesserung der Auflösung gegenüber früherer Messungen [9, 16, 22, 59] um zum Teil mehr als eine Größenordnung. In den anderen Experimenten wurden die Linienenergien relativ zur Lyman- $\alpha_1$  Linie in  $\text{Fe}^{25+}$  bestimmt. Zur absoluten Kalibrierung der Energieskala wurden in dieser Arbeit mehrere sehr genau bekannte Absorptionskanten von Mangan, Eisen, Cobalt, Nickel und Kupfer verwendet [56]. Die Messung und Bestimmung der Kantenposition folgte dabei den Maßgaben der zugrunde gelegten Experimente mit denen die Referenzwerte gemessen wurden. Damit sind die Ergebnisse dieser Arbeit nicht von einer einzelnen berechneten oder experimentell bestimmten Übergangsenergie abhängig, sondern auf mehrere, über einen breiten Energiebereich verteilte, Kalibrationspunkte gestützt. Bei der erreichten Genauigkeit des Experiments konnten verschiedene theoretische

Vorhersagen auf ihre Aussagekraft hin überprüft werden. Eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment für die heliumartigen Übergänge zeigten die RCI-Rechnungen von *Cheng und Chen* [19] sowie die Ergebnisse von *Plante et al.* [78] mit der RMBPT-Methode. Für die  $K_\alpha$ -Übergangsenergien in den lithiumartigen Eisenionen liegen die Ergebnisse *Yerokhin et al.* [104] mit einem RCI-Ansatz im Vergleich mit dieser Arbeit alle innerhalb der experimentellen Unsicherheit. Andere Vorhersagen, wie diese RMBPT- beziehungsweise MZ-Rechnungen [81, 89] liegen teilweise um mehr als  $2\sigma$  neben den experimentellen Werten. Die Elektron-Elektron-Wechselwirkung ist für die Vorhersagen bei Systemen mit drei Elektronen bereits sehr schwierig und erklärt die großen Abweichungen vieler Ansätze zum Experiment. Dies zeigt sich gerade auch für die Übereinstimmung verschiedener Vorhersagen mit den  $K_\alpha$ -Übergangsenergien in berylliumartigen bis fluorartigen Eisenionen. Die Abweichungen haben für die Systeme mit mehr Elektronen deutlich im Vergleich zu den Zwei- beziehungsweise Drei-Elektronen-Systemen zugenommen.

Darüber hinaus sind mehrere  $K_\beta$ -Linien und K-Schalen-Übergänge aus Niveaus mit größerer Hauptquantenzahl  $n \leq 7$  für  $\text{Fe}^{24+}$  untersucht worden. Auch hier zeigt sich, die große Schwierigkeit der Theorie diese Übergänge vorherzusagen.

Zur Durchführung der Experimente wurde die transportable FLASH-EBIT am Strahlrohr P01 der Synchrotronstrahlungsquelle *PETRA III* betrieben, das einen Photonenfluss von bis zu  $10^{12}$  Photonen/s bei einem Energieauflösungsvermögen von  $> 10\,000$  erzielt. Die in der EBIT gespeicherte Ionenwolke wurde mit dem Photonenstrahl durchstimmbarer Energie ausgeleuchtet. Fluoreszenzphotonen resonant angeregter Eisenionen wurden mit mehreren Germanium-Detektoren aufgenommen. Die Energie des Elektronenstrahls der EBIT, welcher durch schrittweise Stoßionisation die untersuchten Ladungszustände  $\text{Fe}^{17+}$  bis  $\text{Fe}^{24+}$  erzeugte, wurde so gewählt, dass eine Anregung der K-Schalen Elektronen nicht möglich war. Dies erlaubte eine untergrundfreie Messung des Fluoreszenzsignals.

Durch den Einsatz eines Zweikristallmonochromators liegt die Energieauflösung des Photonenstrahls bei P01 für Photonenenergien um 6700 eV bei etwa 0,2 eV. Aufgrund des hohen Auflösungsvermögens  $E/\Delta E$  von rund 33 500 konnte ein Messschema angewendet werden, welches ohne den Einsatz hochauflösender, technisch sehr aufwendiger Spektrometer auskommt. Der hochaufgelöste Photonenstrahl der Synchrotronstrahlungsquelle wurde in kleinen Energieschritten über den Bereich der Resonanzenergie durchgestimmt. Fluoreszenzphotonen konnten innerhalb eines Energiebereichs um die Übergangsenergien von der Größenordnung der Detektorauflösung untergrundfrei aufgenommen werden. Mit der Auflistung der Zahl der detektierten Fluoreszenzphotonen in Abhängigkeit von der Anregungsenergie ist es gelungen, hochaufgelöste Linienprofile zu messen und Resonanzenergien (Tabelle 4.4) sowie die natürliche Linienbreiten (Tabelle 4.5) der stärksten  $K_\alpha$ -Übergänge zu bestimmen.

Die Energieskala der aufgenommenen Spektren wurde durch eine Eichung mit sehr genau bekannten Absorptionskanten festgelegt. Die relative Unsicherheit der so bestimmten absoluten Resonanzenergien liegt im besten Fall bei etwa 70 meV. Der größte Beitrag zu dieser Unsicherheit hat seinen Ursprung in der Energiekalibrierung. Systematische Unsicherheiten, die auf Festkörpereffekten der Absorptionsfolien beruhen, müssen für eine genauere Kalibrierung reduziert werden. Aus der Bestimmung der Mittenposition der Linie ergab sich eine deutlich kleinere Unsicherheit im Bereich einiger meV, die generell eine genauere Festlegung der Energie zulässt. Hier kann eine zusätzliche systematische Untersuchung der Absorptionskanten den gewünschten Erfolg bringen. Auch der Messaufbau zur Aufnahme der Absorptionsspektren bietet noch Optimierungspotential, das aus zeitlichen Gründen während der Messzeiten nicht ausgeschöpft werden konnte.

Gelingt es die Energiekalibrierung zu verbessern, erlaubt dieses Verfahren zukünftig Röntgenübergänge in Wenig-Elektronen-Systemen mit einer Genauigkeit zu vermessen, mit der sich theoretische Vorhersagen zweifelsfrei verifizieren lassen. Auf Beiträge der Quantenelektrodynamik ist man gerade bei K-Schalen-Übergängen besonders sensitiv, da sie dort am größten sind. Um diese Einflüsse zu überprüfen, liegt die Wahl von Elementen höherer Kernladungszahlen als Untersuchungsobjekt nahe.

Astrophysikalische Fragestellungen beschränken sich nicht allein auf Eisen. Die Untersuchung von Elementen geringerer Kernladung bei niedrigeren Photonenenergien kann ebenso zum weiteren Verständnis astronomischer Objekte und Prozesse führen.  $K_{\alpha}$ -Übergänge in heliumartigem Magnesium, Silizium oder Schwefel, die ebenfalls in photoionisierten astrophysikalischen Plasmen beobachtbar sind, können bereits mit Photonenenergien von 1,3 keV bis 2,5 keV angeregt werden.

Darüber hinaus ist die Festlegung neuer Wellenlängenstandards im Röntgenbereich mittels K-Schalen-Übergängen eine Perspektive, die den Einsatz hochgeladener Ionen auf das Gebiet der Metrologie erweitert.



# Literaturverzeichnis

- [1] ANDERS, E. ; GREVESSE, N.:  
Abundances of the elements - Meteoritic and solar.  
In: *Geochimica et Cosmochimica Acta* 53 (1989), S. 197–214
- [2] ARTEMYEV, A. N. ; SHABAEV, V. M. ; YEROKHIN, V. A. ; PULNIEN, G. ; SOFF, G.:  
QED calculation of the  $n = 1$  and  $n = 2$  energy levels in He-like ions.  
In: *Phys. Rev. A* 71 (2005), S. 062104
- [3] ASHCROFT, Neil W. ; MERMIN, David N.:  
*Festkörperphysik*.  
4., verb. Aufl.  
München : Oldenbourg, 2013. –  
ISBN 978-3-486-71301-5 ; 3-486-71301-9
- [4] ATTWOOD, David:  
*Soft x-rays and extreme ultraviolet radiation : principles and applications*.  
Cambridge : Univ. Press, 2000. –  
ISBN 0-521-65214-6
- [5] BALASHOV, V. V. ; GRUM-GRZHIMAILO, A. N. ; KABACHNIK, N. M.:  
*Polarization and correlation phenomena in atomic collisions : a practical theory course*.  
New York, NY [u.a.] : Kluwer Acad., Plenum Publ., 2000 (Physics of atoms and molecules). –  
ISBN 0-306-46266-4
- [6] BAUTISTA, M. A. ; MENDOZA, C. ; KALLMAN, T. R. ; PALMERI, P.:  
Atomic data for the K-vacancy states of Fe XXIV.  
In: *Astronomy and Astrophysics* 403 (2003), 339-355
- [7] BEIERSDORFER, P.:  
Laboratory X-ray astrophysics.  
In: *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* 41 (2003), S. 343–390
- [8] BEIERSDORFER, P. ; OSTERHELD, A. L. ; DECAUX, V. ; WIDMANN, K.:  
Observation of Lifetime-Limited X-Ray Linewidths in Cold Highly Charged Ions.  
In: *Phys. Rev. Lett.* 77 (1996), Nr. 27, S. 5353

- [9] BEIERSDORFER, P. ; PHILLIPS, T. ; JACOBS, V. L. ; HILL, K. W. ; BITTER, M. ; VON GOELER, S.:  
High-resolution measurements, line identification, and spectral modeling of K-alpha transitions in Fe-XVIII - Fe-XXV.  
In: *Astrophys. J.* 409 (1993), Nr. 2, Part 1, S. 846–859
- [10] BERNITT, S. ; BROWN, G. V. ; RUDOLPH, J. K. ; STEINBRÜGGE, R. ; GRAF, A. ; LEUTENEGGER, M. ; EPP, S. W. ; EBERLE, S. ; KUBIČEK, K. ; MÄCKEL, V. ; SIMON, M. C. ; TRÄBERT, E. ; MAGEE, E. W. ; BEILMANN, C. ; HELL, N. ; SCHIPPERS, S. ; MÜLLER, A. ; KAHN, S. M. ; SURZHYKOV, A. ; HARMAN, Z. ; KEITEL, C. H. ; CLEMENTSON, J. ; PORTER, F. S. ; SCHLOTTER, W. ; TURNER, J. J. ; ULLRICH, J. ; BEIERSDORFER, P. ; CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R.:  
An unexpectedly low oscillator strength as the origin of the Fe XVII emission problem.  
In: *Nature* 492 (2012), Nr. 7428, S. 225–228
- [11] BERNITT, Sven:  
*Resonante Anregung astrophysikalischer Röntgen-Übergänge in hochgeladenen Eisenionen mit dem Freie-Elektronen-Laser LCLS*, Naturwissenschaftlich-mathematische Gesamtfakultät der Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Diss., 2013
- [12] BEYER, H. F. (Hrsg.) ; SHEVELKO, V. P. (Hrsg.):  
*Atomic physics with heavy ions*.  
Berlin [u.a.] : Springer, 1999 (Springer series on atoms + plasmas ; 26). – ISBN 3-540-64875-5
- [13] BITTER, M. ; HILL, K. W. ; SAUTHOFF, N. R. ; EFTHIMION, P. C. ; MESERVEY, E. ; RONEY, W. ; GOELER, S. von ; HORTON, R. ; GOLDMAN, M. ; STODIEK, W.:  
Dielectronic Satellite Spectrum of Heliumlike Iron (Fe XXV).  
In: *Phys. Rev. Lett.* 43 (1979), S. 129–132
- [14] BOHR, N:  
On the Constitution of Atoms and Molecules.  
In: *Philosophical magazine* 26 (1913), Nr. 151, S. 1–25
- [15] BRIAND, J. P.:  
X-ray and atomic inner-shell physics.  
In: *AIP Conf. Proc.* 94 (1982), S. 271
- [16] BRIAND, J. P. ; TAVERNIER, M. ; MARRUS, R. ; DESCLAUX, J. P.:  
High-precision spectroscopic study of heliumlike iron.  
In: *Phys. Rev. A* 29 (1984), Jun, S. 3143–3149
- [17] CHEN, M. H.:  
Relativistic Auger and x-ray emission rates of the  $1s2l^n(2l')^m$  configurations of Be-like ions.  
In: *Phys. Rev. A* 31 (1985), Mar, S. 1449–1457

- [18] CHEN, M. H.:  
Dielectronic satellite spectra for He-like ions.  
In: *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 34 (1986), Nr. 2, 301 - 356
- [19] CHENG, K. T. ; CHEN, M. H.:  
Energy levels of the low-lying states of mid- $Z$  heliumlike ions.  
In: *Phys. Rev. A* 61 (2000), Mar, 044503
- [20] CORNILLE, M. ; DUBAU, J. ; LOULERGUE, M. ; BELY-DUBAU, F. ; FAUCHER, P. ;  
SAFRONOVA, U. I. ; SHLYAPTSEVA, A. S. ; VAINSHTEIN, L.:  
Fe XXIII-Fe XIX theoretical spectra in two calculational methods.  
In: *J. Phys. B* 21 (1988), Nr. 20, S. 3347
- [21] CURRELL, Fred J. (Hrsg.):  
*The Physics of Multiply and Highly Charged Ions: Volume 1: Sources, Applications  
and Fundamental Processes*. Bd. 1.  
Springer, 2003. –  
ISBN 1-4020-1565-8
- [22] DECAUX, V ; BEIERSDORFER, P ; KAHN, S. M. ; JACOBS, V. L.:  
High resolution measurement of the  $K\alpha$  spectrum of Fe xxv-xviii: New spectral  
diagnostics of nonequilibrium astrophysical plasmas.  
In: *Astrophysical journal* 482 (1997), Nr. 2, S. 1076-1084
- [23] DECAUX, V. ; BEIERSDORFER, P. ; OSTERHELD, A. ; CHEN, M. ; KAHN, S. M.:  
High-resolution measurements of the K-alpha spectra of low-ionization species of  
iron - A new spectral signature of nonequilibrium ionization conditions in young  
supernova-remnants.  
In: *Astrophysical journal* 443 (1995), Nr. 1, S. 464-468
- [24] DEMTRÖDER, Wolfgang:  
*Experimentalphysik 3 : Atome, Moleküle und Festkörper*.  
Berlin, Heidelberg, 2009 (Springer-Lehrbuch). –  
Online-Ausg.:
- [25] DEMTRÖDER, Wolfgang:  
*Experimentalphysik 4: Kern-, Teilchen- und Astrophysik*.  
3., überarb. und erw. Aufl.  
Berlin, Heidelberg, 2010 (Springer-Lehrbuch)
- [26] DESY, Deutsches Elektronen-Synchrotron:  
*PETRA III*.  
[http://photon-science.desy.de/facilities/petra\\_iii/index\\_eng.html](http://photon-science.desy.de/facilities/petra_iii/index_eng.html).  
Version: Juni 2013
- [27] DESY, Deutsches Elektronen-Synchrotron:  
*PETRA III - Facility information*.  
[http://photon-science.desy.de/facilities/petra\\_iii/facility\\_](http://photon-science.desy.de/facilities/petra_iii/facility_)

- information/index\_eng.html.  
Version: Juni 2013
- [28] DIRAC, P. A. M.:  
The quantum theory of the electron.  
In: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing papers of a mathematical and physical character* 117 (1928), Nr. 778, S. 610–624
- [29] DRAKE, G. W.:  
Theoretical energies for the  $n=1$  and 2 states of the helium isoelectronic sequence up to  $Z=100$ .  
In: *Canadian Journal of Physics* 66 (1988), Nr. 7, 586-611
- [30] DRAKE, G. W. F.:  
Unified relativistic theory for  $1s2p\ ^3P_1 - 1s^2\ ^1S_0$  and  $1s2p\ ^1P_1 - 1s^2\ ^1S_0$  frequencies and transition rates in heliumlike ions.  
In: *Phys. Rev. A* 19 (1979), Apr, S. 1387–1397
- [31] EPP, S. W. ; CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R. ; BRENNER, G. ; MÄCKEL, V. ; MOKLER, P. H. ; TREUSCH, R. ; KUHLMANN, M. ; YURKOV, M. V. ; FELDHAUS, J. ; SCHNEIDER, J. R. ; WELLHOEFER, M. ; MARTINS, M. ; WURTH, W. ; ULLRICH, J.:  
Soft X-ray laser spectroscopy on trapped highly charged ions at FLASH.  
In: *Phys. Rev. Lett.* 98 (2007), May, S. 183001
- [32] EPP, S. W. ; CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R. ; SIMON, M. C. ; BAUMANN, T. ; BRENNER, G. ; GINZEL, R. ; GUERASSIMOVA, N. ; MÄCKEL, V. ; MOKLER, P. H. ; SCHMITT, B. L. ; TAWARA, H. ; ULLRICH, J.:  
X-ray laser spectroscopy of highly charged ions at FLASH.  
In: *J. Phys. B* 43 (2010), S. 194008
- [33] EPP, Sascha W.:  
*Röntgen-Laserspektroskopie hochgeladener Ionen in einer EBIT am Freie-Elektronen-Laser FLASH*, Naturwissenschaftlich-mathematische Gesamtfakultät der Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Diss., 2007
- [34] ERIKSSON, K. B. S. ; PETERSSON, J. E.:  
New Measurements in the Spectrum of the Neutral Nitrogen Atom.  
In: *Physica Scripta* 3 (1971), Nr. 5, 211
- [35] FAST COMTEC GMBH, D-82041 Oberhaching Germany:  
*7072T Dual Timing 500ns ADC User Manual*.  
<http://www.fastcomtec.com/ftp/manuals/7072tdoc.pdf>
- [36] FAST COMTEC GMBH, D-82041 Oberhaching Germany:  
*MPA-3 Multiparameter Data Acquisition System User Manual*.  
<http://www.fastcomtec.com/ftp/manuals/mpa3doc.pdf>

- [37] FRIEDRICH, Harald:  
*Theoretische Atomphysik.*  
2. Auflage.  
Berlin [u.a.] : Springer, 1994 (Springer-Lehrbuch). –  
ISBN 3-540-58267-3
- [38] GABRIEL, A. H.:  
Dielectronic satellite spectra for highly-charged helium-like ion lines.  
In: *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 160 (1972), Nr. 1, S. 99
- [39] GOWARD, F. K. ; BARNES, D. E.:  
Experimental 8 Mev. Synchrotron for Electron Acceleration-.  
In: *Nature* 158 (1946), S. 413
- [40] GRANT, I. P.:  
Relativistic calculation of atomic structures.  
In: *Advances in Physics* 19 (1970), Nr. 82, S. 747-811
- [41] GROSS, Rudolf ; MARX, Achim:  
*Festkörperphysik.*  
München : Oldenbourg, 2012. –  
ISBN 3-486-71294-2 ; 978-3-486-71294-0
- [42] GU, M. F.:  
The flexible atomic code.  
In: *Canadian Journal of Physics* 86 (2008), Nr. 5, S. 675-689
- [43] HAKEN, Hermann ; WOLF, Hans C.:  
*Atom- und Quantenphysik.*  
8., aktualisierte und erw. Aufl.  
Berlin [u.a.] : Springer, 2004 (Springer-Lehrbuch). –  
ISBN 3-540-02621-5 ; 978-3-540-02621-1
- [44] HATA, J. ; GRANT, I. P.:  
Wavelengths and radiative transition rates for selected lines of 2-, 3- and 4-electron systems for the elements from Ca to Cu.  
In: *Mon. Not. astr. Soc.* 211 (1984), S. 549-557
- [45] HEISENBERG, W.:  
Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik.  
In: *Zeitschrift für Physik* 43 (1927), Nr. 3-4, 172-198
- [46] HENKE, B.L. ; GULLIKSON, E.M. ; DAVIS, J.C.:  
X-ray interactions: photoabsorption, scattering, transmission, and reflection at E=50-30000 eV, Z=1-92.,  
In: *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 54 (1993), July, Nr. 2, S. 181-342

- [47] HOLT, S. S. ; MCCRAY, R.:  
Spectra of Cosmic X-Ray Sources.  
In: *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* 20 (1982), Nr. 1, S. 323–365
- [48] HOU, HaiJun ; JIANG, Gang ; HU, Feng ; HAO, LiangHuan:  
Relativistic configuration interaction calculations for the  $K\alpha$  and  $K\beta$  X-ray satellites of iron.  
In: *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 95 (2009), Nr. 2, 125 - 140
- [49] HUNKLINGER, Siegfried:  
*Festkörperphysik*.  
<http://www.oldenbourg-link.com/isbn/9783486711547>.  
Version:3., verb. und aktual. Aufl., 2011
- [50] IBACH, Harald ; LÜTH, Hans:  
*Festkörperphysik : Einführung in die Grundlagen : mit 104 Übungen*.  
7. Aufl.  
Berlin [u.a.] : Springer, 2009 (Springer-Lehrbuch). –  
ISBN 3–540–85794–X ; 978–3–540–85794–5
- [51] IERUSALIMSKY, R. ; DE FIGUEIREDO, L. H. ; CELES, W.:  
*Lua 5.1 Reference Manual*.  
<http://www.lua.org/manual/5.1/>
- [52] JACKSON, John D.:  
*Klassische Elektrodynamik*.  
2., verb. Aufl., 1. Nachdr.  
Berlin [u.a.] : de Gruyter, 1985. –  
ISBN 3–11–009579–3
- [53] KANDULA, D. Z. ; GOHLE, C. ; PINKERT, T. J. ; UBACHS, W. ; EIKEMA, K. S. E.:  
Extreme Ultraviolet Frequency Comb Metrology.  
In: *Phys. Rev. Lett.* 105 (2010), S. 063001
- [54] KIRKPATRICK, P. ; BAEZ, A. V.:  
Formation of optical images by X-rays.  
In: *Journal of the Optical Society of America* 38 (1948), Nr. 9, S. 766–74
- [55] KITTEL, Charles:  
*Einführung in die Festkörperphysik*.  
14., überarb. und erw. Aufl.  
München [u.a.] : Oldenbourg, 2006. –  
ISBN 3–486–57723–9 ; 978–3–486–57723–5
- [56] KRAFT, S. ; STÜMPEL, J. ; BECKER, P. ; KUETGENS, U.:  
High resolution xray absorption spectroscopy with absolute energy calibration for the determination of absorption edge energies.  
In: *Rev. Sci. Instrum.* (1996), S. 681–687

- [57] KRECKEL, H. ; BRUHNS, H. ; MILLER, K. A. ; WÄHLIN, E. ; DAVIS, A. ; HÖCKH, S. ; SAVIN, D. W.:  
A simple double-focusing electrostatic ion beam deflector.  
In: *Review of scientific instruments* 81 (2010), Nr. 6, S. 063304
- [58] KUBIČEK, K. ; BRAUN, J. ; BRUHNS, H. ; CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R. ; MOKLER, P. H. ; ULLRICH, J.:  
High-precision laser-assisted absolute determination of x-ray diffraction angles.  
In: *Rev. Sci. Instrum.* 83 (2012), S. 013102
- [59] KUBIČEK, Katharina:  
*Absolut- und Relativbestimmungen der Energien von 2p-1s-Übergängen in wasserstoff-, helium- sowie lithiumartigen Schwefel-, Argon- und Eisenionen*, Naturwissenschaftlich-mathematische Gesamtfakultät der Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Diss., 2010
- [60] LAMB, W. E. ; RETHERFORD, R. C.:  
Fine structure of the hydrogen atom by a microwave method.  
In: *Physical Review* 72 (1947), Nr. 3, S. 241–243
- [61] LEVINE, M. A. ; MARRS, R. E. ; BARDSLEY, J. N. ; BEIERSDORFER, P. ; BENNETT, C. L. ; CHEN, M. H. ; COWAN, T. ; DIETRICH, D. ; HENDERSON, J. R. ; KNAPP, D. A. ; OSTERHELD, A. ; PENETRANTE, B. M. ; SCHNEIDER, M. B. ; SCOFIELD, J. H.:  
The use of an electron beam ion trap in the study of highly charged ions.  
In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics B* 43 (1989), S. 431
- [62] LEVINE, M. A. ; MARRS, R. E. ; HENDERSON, J. R. ; KNAPP, D. A. ; SCHNEIDER, M. B.:  
The Electron Beam Ion Trap: A New Instrument for Atomic Physics Measurements.  
In: *Phys. Scr.* T22 (1988), S. 157
- [63] LIU, Y. F. ; YAO, K. ; HUTTON, R. ; ZOU, Y.:  
Numerical simulations using an improved calculational scheme for ion charge state distribution and ion temperature evolution in an EBIT.  
In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 38 (2005), Nr. 17, S. 3207
- [64] LYON, K. G. ; SALINGER, G. L. ; SWENSON, C. A. ; WHITE, G. K.:  
Linear thermal expansion measurements on silicon from 6 to 340 K.  
In: *J. Appl. Phys.* (1977), S. 865–868
- [65] MARRS, R. E. ; BEIERSDORFER, P. ; SCHNEIDER, D.:  
The Electron Beam Ion Trap.  
In: *Physics Today* 10 (1994), S. 27
- [66] McMILLAN, E. M.:  
The Synchrotron—A Proposed High Energy Particle Accelerator.  
In: *Phys. Rev.* 68 (1945), Sep, S. 143–144

- [67] MITSUDA, K. ; KELLEY, R. L. ; BOYCE, K. R. ; BROWN, G. V. ; COSTANTINI, E. ; DIPIRRO, M. J. ; EZOE, Y. ; FUJIMOTO, R. ; GENDREAU, K. C. ; DEN HERDER, J.-W. ; HOSHINO, A. ; ISHISAKI, Y. ; KILBOURNE, C. A. ; KITAMOTO, S. ; MCCAMMON, D. ; MURAKAMI, M. ; MURAKAMI, H. ; OGAWA, M. ; OHASHI, T. ; OKAMOTO, A. ; PALTANI, S. ; POHL, M. ; PORTER, F. S. ; SATO, Y. ; SHINOZAKI, K. ; SHIRRON, P. J. ; SNEIDERMAN, G. A. ; SUGITA, H. ; SZYMKOWIAK, A. ; TAKEI, Y. ; TAMAGAWA, T. ; TASHIRO, M. ; TERADA, Y. ; TSUJIMOTO, M. ; DE VRIES, C. ; YAMAGUCHI, H. ; YAMASAKI, N. Y.:  
The high-resolution x-ray microcalorimeter spectrometer system for the SXS on ASTRO-H.  
In: ARNAUD, Monique (Hrsg.) ; MURRAY, Stephen S. (Hrsg.) ; TAKAHASHI, Tadayuki (Hrsg.): *Space Telescopes and Instrumentation 2010: Ultraviolet to Gamma Ray* Bd. 7732, S. 773211
- [68] MOHR, P. J. ; PLUNIEN, G. ; SOFF, G.:  
QED corrections in heavy atoms.  
In: *Physics reports* 293 (1998), Nr. 5-6, S. 227–369
- [69] MOHR, P. J. ; TAYLOR, B. N. ; NEWELL, D. B.:  
CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2010.  
In: *Rev. Mod. Phys.* 84 (2012), S. 1527–1605
- [70] MOSELEY, H. G. J.:  
The High-Frequency Spectra of the Elements.  
In: *Philosophical magazine* 26 (1913), S. 1024–1034
- [71] MOTZ, H.:  
Applications of the radiation from fast electron beams.  
In: *Journal of applied physics* 22 (1951), Nr. 5, S. 527–535
- [72] NILSEN, J.:  
Dielectronic satellite spectra for helium-like ions.  
In: *Atomic data and nuclear data tables* 38 (1988), Nr. 2, S. 339–379
- [73] NOLTING, Wolfgang:  
*Grundkurs: Theoretische Physik 3.*  
7. Aufl.  
Berlin [u.a.] : Springer, 2004 (Springer-Lehrbuch). –  
ISBN 3–540–20509–8
- [74] ORTEC®:  
*672 Spectroscopy Amplifier.*  
<http://www.ortec-online.com/download/672.pdf>
- [75] PALMERI, P. ; MENDOZA, C. ; KALLMAN, T. R. ; BAUTISTA, M. A.:  
A complete set of radiative and Auger rates for K-vacancy states in Fe XVIII-Fe XXV.  
In: *Astron. & Astrophys.* 403 (2003), Nr. 3, S. 1175–1184

- [76] PARRATT, L. G. ; HEMPSTEAD, C. F. ; JOSSEM, E. L.:  
“Thickness Effect” in Absorption Spectra near Absorption Edges.  
In: *Phys. Rev.* 105 (1957), S. 1228–1232
- [77] PENETRANTE, B. M. ; BARDSLEY, J. N. ; DEWITT, D. ; CLARK, M. ; SCHNEIDER, D.:  
Evolution of ion-charge-state distributions in an electron-beam ion trap.  
In: *Phys. Rev. A* 43 (1991), May, S. 4861–4872
- [78] PLANTE, D. R. ; JOHNSON, W. R. ; SAPIRSTEIN, J.:  
Relativistic all-order many-body calculations of the  $n = 1$  and  $n = 2$  states of heliumlike ions.  
In: *Phys. Rev. A* 49 (1994), S. 3519–3530
- [79] PYTHON SOFTWARE FOUNDATION, BEAVERTON, OR 97008, USA:  
*Python v2.7.2 documentation.*  
<http://docs.python.org/release/2.7.2/>
- [80] RUDOLPH, J. K. ; BERNITT, S. ; EPP, S. W. ; STEINBRÜGGE, R. ; BEILMANN, C. ; BROWN, G. V. ; EBERLE, S. ; GRAF, A. ; HARMAN, Z. ; HELL, N. ; LEUTENEGGER, M. ; MÜLLER, A. ; SCHLAGE, K. ; WILLE, H.-C. ; YAVAŞ, H. ; ULLRICH, J. ; CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R.:  
X-Ray Resonant Photoexcitation: Linewidths and Energies of  $K\alpha$  Transitions in Highly Charged Fe Ions.  
In: *Phys. Rev. Lett.* 111 (2013), Sep, 103002
- [81] SAFRONOVA, U. I. ; SAFRONOVA, A. S. ; JOHNSON, W. R.:  
Relativistic many-body calculations of dielectronic satellite spectra created by autoionizing  $1s2l2l'$  states in Li-like ions.  
In: *J. Phys. B* 43 (2010), Nr. 14, S. 144001
- [82] SAPIRSTEIN, J.:  
Theoretical methods for the relativistic atomic many-body problem.  
In: *Reviews of modern physics* 70 (1998), Nr. 1, 55–76
- [83] SAVITZKY, A. ; GOLAY, M. J. E.:  
Smoothing and Differentiation of Data by Simplified Least Squares Procedures.  
In: *Anal. Chem.* 36 (1964), S. 1627–1639
- [84] SCHRÖDINGER, E.:  
Quantisierung als Eigenwertproblem.  
In: *Annalen der Physik* 79 (1926), Nr. 4, S. 361–U8
- [85] SCHRÖDINGER, E.:  
Quantisierung als Eigenwertproblem.  
In: *Annalen der Physik* 384 (1926), Nr. 6, S. 489–527

- [86] SCHRÖDINGER, E.:  
Quantisierung als Eigenwertproblem.  
In: *Annalen der Physik* 385 (1926), Nr. 13, S. 437–490
- [87] SCHRÖDINGER, E.:  
Quantisierung als Eigenwertproblem.  
In: *Annalen der Physik* 386 (1926), Nr. 18, S. 109–139
- [88] SERLEMITSOS, P. J. ; BOLDT, E. A. ; HOLT, S. S. ; RAMATY, R ; BRISKEN, A. F.:  
X-ray-spectrum of Cassiopeia A: Evidence for iron line emission.  
In: *The Astrophysical Journal* 184 (1973), L1-L5
- [89] SHLYAPTSEVA, A. S. ; GOLOVKIN, I. E. ; SAFRONOVA, U. I.:  
Spectra of dielectronic satellites due to 2 - 1 transitions and line polarization used for high-temperature plasma diagnostics.  
In: *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 56 (1996), Nr. 2, S. 157 – 166
- [90] SHLYAPTSEVA, A. S. ; MANCINI, R. C. ; NEILL, P. ; BEIERSDORFER, P. ; CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R. ; WIDMANN, K.:  
Polarization-dependent spectra of x-ray dielectronic satellite lines of Be-like Fe.  
In: *Physical review. A* 57 (1998), Nr. 2, S. 888–898
- [91] SIMON, M. C. ; CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R. ; BEILMANN, C. ; SCHWARZ, M. ;  
HARMAN, Z. ; EPP, S. W. ; SCHMITT, B. L. ; BAUMANN, T. M. ; BEHAR, E. ;  
BERNITT, S. ; FOLLATH, R. ; GINZEL, R. ; KEITEL, C. H. ; KLAWITTER, R. ;  
KUBIČEK, K. ; MÄCKEL, V. ; MOKLER, P. H. ; REICHARDT, G. ; SCHWARZKOPF,  
O. ; ULLRICH, J.:  
Resonant and Near-Threshold Photoionization Cross Sections of Fe14+.  
In: *Phys. Rev. Lett.* 105 (2010), Oct, S. 183001
- [92] SIMON, M. C. ; SCHWARZ, M. ; EPP, S. W. ; BEILMANN, C. ; SCHMITT, B. L. ;  
HARMAN, Z. ; BAUMANN, T. M. ; MOKLER, P. H. ; BERNITT, S. ; GINZEL, R. ;  
HIGGINS, S. G. ; KEITEL, C. H. ; KLAWITTER, R. ; KUBIČEK, K. ; MÄCKEL, V. ;  
ULLRICH, J. ; CRESPO LÓPEZ-URRUTIA, J. R.:  
Photoionization of N3+ and Ar8+ in an electron beam ion trap by synchrotron  
radiation.  
In: *J. Phys. B* 43 (2010), Nr. 6, S. 065003
- [93] SIMON, Martin C.:  
*Photoionisation hochgeladener Ionen durch weiche Röntgenstrahlung in einer  
Elektronenstrahl-Ionenfalle*, Naturwissenschaftlich-mathematische Gesamtfakultät  
der Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Diss., 2010
- [94] SMITH, A. J. ; BITTER, M. ; HSUAN, H. ; HILL, K. W. ; VON GOELER, S. ; TIM-  
BERLAKE, J. ; BEIERSDORFER, P. ; OSTERHELD, A.:  
K $\beta$  spectra of heliumlike iron from tokamak-fusion-test-reactor plasmas.  
In: *Phys. Rev. A* 47 (1993), 3073–3079

- [95] SNIGIREV, A. ; KOHN, V. ; SNIGIREVA, I. ; LENGELER, B.:  
A compound refractive lens for focusing high-energy X-rays.  
In: *Nature* 384 (1996), Nr. 6604, S. 49
- [96] SURZHYKOV, Andrey:  
*Photoexcitation and subsequent radiative decay.*  
private Mitteilung, Juli 2013
- [97] TAKAHASHI, T. ; ET AL.:  
The ASTRO-H X-ray Observatory.  
In: TAKAHASHI, Tadayuki (Hrsg.) ; MURRAY, Stephen S. (Hrsg.) ; HERDER, Jan-Willem A. (Hrsg.): *Space Telescopes and Instrumentation 2012: Ultraviolet to Gamma Ray* Bd. 8443, S. 84431Z
- [98] VEKSLER, V.:  
A new method of acceleration of relativistic particles.  
In: *J. Phys. (USSR)* 9 (1945), S. 153
- [99] WANG, Q. D. ; NOWAK, M. A. ; MARKOFF, S. B. ; BAGANOFF, F. K. ; NAYAKSHIN, S. ; YUAN, F. ; CUADRA, J. ; DAVIS, J. ; DEXTER, J. ; FABIAN, A. C. ; GROSSO, N. ; HAGGARD, D. ; HOUCK, J. ; JI, L. ; LI, Z. ; NEILSEN, J. ; PORQUET, D. ; RIPPLE, F. ; SHCHERBAKOV, R. V.:  
Dissecting X-ray-Emitting Gas Around the Center of Our Galaxy.  
In: *Science* 341 (2013), Nr. 6149, 981-983
- [100] WILLE, H.-C. ; FRANZ, H. ; RÖHLSBERGER, R. ; CALIEBE, W. A. ; DILL, F.-U.:  
Nuclear resonant scattering at PETRA III : Brilliant opportunities for nano – and extreme condition science.  
In: *Journal of Physics: Conference Series* 217 (2010), Nr. 1, S. 012008
- [101] WILLE, Hans-Christian ; KRACHT, Thorsten:  
*Auszüge aus DCM Energie-Macro.*  
private Mitteilung, November 2012
- [102] WILLE, Klaus:  
*Physik der Teilchenbeschleuniger und Synchrotronstrahlungsquellen : eine Einführung.*  
2., überarb. und erw. Aufl.  
Stuttgart : Teubner, 1996 (Teubner-Studienbücher). –  
ISBN 3-519-13087-4
- [103] YAVAŞ, Hasan:  
*Design details of the inelastic X-ray scattering (IXS) instrument.*  
private Mitteilung, November 2012
- [104] YEROKHIN, V. A. ; SURZHYKOV, A.:  
Relativistic configuration-interaction calculation of energy levels of core-excited states in lithiumlike ions: Argon through krypton.  
In: *Phys. Rev. A* 86 (2012), S. 042507



# Versicherung

Ich erkläre: Ich habe die vorgelegte Dissertation selbständig und ohne unerlaubte fremde Hilfe und nur mit den Hilfen angefertigt, die ich in der Dissertation angegeben habe. Alle Textstellen, die wörtlich oder sinngemäß aus veröffentlichten Schriften entnommen sind, und alle Angaben, die auf mündlichen Auskünften beruhen, sind als solche kenntlich gemacht. Bei den von mir durchgeführten und in der Dissertation erwähnten Untersuchungen habe ich die Grundsätze guter wissenschaftlicher Praxis, wie sie in der „Satzung der Justus-Liebig-Universität Gießen zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis“ niedergelegt sind, eingehalten.

Gießen, den 07. Oktober 2013

Jan K. Rudolph