Atomphysik sehr starker Zentralfelder: Die Röntgenstrahlung der schwersten Ein- und Zwei-Elektronensysteme

Habilitationsschrift

vorgelegt beim Fachbereich der Physik
der Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt

von
Thomas Stöhlker
aus Friedberg

Darmstadt 1998

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Einleitung

Mit der Inbetriebnahme des **E**xperimentier-**S**peicher-**R**ings (ESR) der *Gesellschaft für Schwerionenforschung* in Darmstadt wurde Anfang der neunziger Jahre ein neues Kapitel für die Grundlagenforschung mit hochgeladenen Schwerionen aufgeschlagen. So eröffnen die brillanten Strahlen an hochgeladenen und gekühlten Ionen, die nun den Experimenten am ESR zur Verfügung stehen, einen einzigartigen Einblick in fundamentale Bereiche der Atom- und Kernphysik, wie er noch Jahre zuvor als unmöglich erschien. Als bedeutende Schlüsselexperimente, die bereits erfolgreich am ESR durchgeführt werden konnten, seien beispielhaft der Nachweis des gebundenen β-Zerfalls genannt [JuB92], ebenso wie die erstmalige Vermessung der Hyperfeinstruktur-Aufspaltung des $1s$-Grundzustands in einem schweren Ein-Elektronensystem [KlB94] und der Einsatz des ESR als präzises Massenspektrometer für stabile und radioaktive Nuklide [RaK97].

Von besonderem atomphysikalischen Interesse sind die einzigartigen Möglichkeiten, die der ESR zur Untersuchung der Struktur schwerster Ein-Elektronensysteme bietet, so z.B. an wasserstoffartigem Uran. Hier ist das gebundene Elektron extrem starken elektrischen Feldern ausgesetzt und die atomare Struktur ist wesentlich durch relativistische und quantenelektrodynamische Effekte bestimmt. Folglich eignen sich diese exotischen, aber auch – im Sinne des Vielteilchenaspektes – einfachen atomaren Systeme besonders zum Studium der Quantenelektrodynamik in starken Feldern.

Die Quantenelektrodynamik (QED), die die Abweichung der atomaren Bindungsverhältnisse von den Vorhersagen der relativistisch korrekten Formulierung der Quantenmechanik – der Dirac-Theorie – erklären konnte, stellt heutzutage eine wesentliche Säule unseres physikalischen Weltbildes dar und wird häufig als die am besten überprüfte Theorie angesehen. In der Tat ist es mittlerweile gelungen, die Vorhersagen der QED für leichte Atome mit einer extrem hohen Genauigkeit zu bestätigen. Diese Untersuchungen sind jedoch im wesentlichen sensitiv auf die QED-Korrekturen niedrigster Ordnung. Mit Zunahme des Coulomb-Potentials des Kerns gewinnen Terme höherer Ordnung immer mehr an Bedeutung, deren experimentelle Überprüfung noch nicht erfolgte. Für eine Messung dieser Korrekturen sind daher die extrem starken Felder, wie sie in den schwersten H-artigen Ionen vorliegen, besonders geeignet. Da die Bindungsenergien eine Z^2-Abhängigkeit aufweisen und die QED-Effekte mit Z^4 skalieren, bieten diese Ionen zudem den Vorteil, daß die Lamb-Verschiebung mit 0.4% eine bedeutende Korrektur wird, während sie für den $1s$-Zustand des Wasserstoffatoms nur ein Effekt auf dem Niveau von 10^{-6} ist.

Einen Schwerpunkt der vorliegenden Habilitationsschrift bilden die Untersuchungen zur Röntgenstrahlung der schwersten Ein-Elektronensysteme, die erstmals im Detail an der ESR-Speicherringanlage erfolgen konnten. Diese Strahlung, die den Zerfall angeregter elektronischer Zustände begleitet, ermöglicht den bislang direktesten experimentellen Zugang zur Erforschung der QED-Effekte in starken Coulomb-Feldern. So läßt sich aus der Spektroskopie der Röntgenstrahlung, die bei den Übergängen in den Grundzustand entsteht, direkte Information über die Bindungsverhältnisse des $1s$-Niveaus gewinnen. Die Energie dieser – auch Lyman-Strahlung genannter – Photonen ist direkt proportional zur $1s$-Bindungsenergie. Somit ermöglicht deren präzise Vermessung eine genaue Bestimmung der Stärke der QED-Korrekturen für den Grundzustand. Die Herausforderung, mit der hierbei der Experimentator konfrontiert wird, ergibt sich zum einen aus den hohen Röntgenenergien, die es zu untersuchen gilt und die im Bereich von 100 keV liegen. Laserspektroskopische Methoden, welche erst die hohe Genauigkeit ermöglichten, mit der die Struktur des atomaren Wasserstoffs untersucht werden kann, sind somit von vornherein ausgeschlossen. Zum anderen erfordern diese Untersuchungen eine Strategie zur Kontrolle des Dopplereffektes, dem die Lyman-Photonen unterworfen sind. Diese Problematik ist eine direkte Folge der Methode, die an einer Beschleunigeranlage zur Erzeugung hochgeladener Ionen angewendet wird. So sind z.B. für Uran Geschwindigkeiten von circa 60% der Lichtgeschwindigkeit erforderlich, um es beim Durchdringen von Festkörperfolien vollständig zu ionisieren. Folglich werden die Lyman-Photonen aus sich schnell bewegenden Projektilen emittiert, und der Experimentator beobachtet – abhängig vom Beobachtungswinkel – eine stark *rot*- bzw. *blauverschobene* Strahlung. Eine präzise Bestimmung dieser Dopplerkorrekturen ist somit die Voraussetzung zur genauen Bestimmung der Übergangsenergien im Emittersystem.

Die bislang am ESR durchgeführten Experimente zur $1s$-Lamb-Verschiebung werden im Rahmen dieser Arbeit eingehend diskutiert, wobei die unterschiedlichen Experimentstrategien und deren Resultate im Detail dargestellt werden. Zudem wird den Eigenschaften der Lyman-Strahlung und deren Erzeugung besonderes Gewicht eingeräumt. Lyman-Übergänge werden durch Elektroneneinfang in die nackten Ionen hervorgerufen, die entweder in Stößen mit neutralen Targetatomen oder freien Elektronen stattfinden. Dieser Aspekt der Stoßdynamik hochgeladener schwerster Ionen ist eng gekoppelt mit deren Struktur. Genaue Erkenntnisse über die selektive Bevölkerung einzelner Niveaus, die Intensität der Strahlung und ihre Winkelverteilung bzw. Polarisation lassen sich nur durch ein Studium der Stoßdynamik erzielen. Diese Parameter sind von ausschlaggebender Bedeutung für alle Spektroskopieexperimente und wurden daher auch im Rahmen der Experimente zur $1s$-Lamb-Verschiebung genauestens untersucht.

In einer Serie erster Experimente zur $1s$-Lamb-Verschiebung an schwersten H-artigen Ionen am ESR gelang es, die Genauigkeit unseres experimentellen Wissens über die QED in starken Feldern um nahezu eine Größenordnung zu steigern. Trotzdem befinden sich die Experimente erst an der Schwelle zum sensitiven Test dieser QED-Effekte, für den eine weitere Steigerung um ca. eine Größenordnung erforderlich ist. Ein Schlüssel hierzu scheint die Abbremstechnik zu sein, mit der selbst nackte Uranionen im ESR auf niedrige Energien abgebremst werden können, um so den Einfluß systematischer Fehlerquellen zu reduzieren, die durch die Ionenenergien bedingt sind. Zudem weisen die Röntgenspektren abgebremster Schwerionen eine Brillanz und Intensität auf, die bei den hohen Stoßenergien nicht vorzufinden ist. Dies kann eindrucksvoll anhand der Röntgenspektren belegt werden, die bereits in einem ersten Experiment mit abgebremsten nackten Uranionen gemessen werden konnten.

Neben der Röntgenspektroskopie an den schwersten Ein-Elektronensystemen dürfen auch die Experimente nicht unerwähnt bleiben, die die Untersuchung der Bindungsverhältnisse im Grundzustand der schwersten Zwei-Elektronensysteme zum Ziele haben. Die Erforschung der einfachsten Mehr-Elektronensysteme hat in den letzten Jahren zunehmend an Bedeutung gewonnen, was sich auf experimenteller Seite durch die Inbetriebnahme der Falle für hochgeladene Ionen – der Super-EBIT in Livermore, USA – erklären läßt. Bei der Super-EBIT handelt es sich um einen weiteren Meilenstein in der Ionenquellen- bzw. Beschleuniger-Entwicklung, der es ermöglicht, Experimente an stationären, höchstgeladenen Ionen bis hin zu nacktem Uran durchzuführen. Diese Experimentieranlage, die nahezu zeitgleich mit dem ESR in Betrieb genommen werden konnte, eignet sich insbesondere zur Untersuchung schwerer Viel-Elektronensysteme. Hier ist es möglich, durch Relativmessungen der Röntgenübergänge in H- und He-artigen Ionen den Zwei-Elektronen-Beitrag zur Bindungsenergie direkt zu vermessen. Ziel dieser Experimente, die als komplementär zu denen am ESR angesehen werden dürfen, ist eine genaue Bestimmung der spezifischen QED-Korrekturen für die Elektron-Elektron-Wechselwirkung in Gegenwart starker Zentralfelder. Dies würde einen sehr wertvollen zusätzlichen Test der QED in starken Feldern erlauben. Tatsächlich sind in den letzten Jahren auf dem theoretischen Gebiet der Struktur atomarer Vielkörpersysteme so beeindruckende Fortschritte zu verzeichnen gewesen, daß die Bindungsenergien für den Grundzustand in schweren He-artigen Ionen mittlerweile mit einer Präzision berechnet werden können, die bislang nur von den Ein-Elektronensystemen bekannt war. Folglich sind begleitende experimentelle Untersuchungen zwingend erforderlich.

Schließlich sei hier darauf hingewiesen, daß sich auch die Hyperfeinstruktur-Aufspaltung schwerer H-artiger Ionen [KlB94] ebenso wie die schweren Li-artigen Systeme, die jeweils sehr unterschiedliche physikalische Aspekte beleuchten, hervorragend zur Untersuchung der atomaren Struktur eignen [BeO98]. Mit Li-artigen Ionen gewinnt man Einblicke in die QED komplexer Viel-Elektronensysteme, während bei der Hyperfeinstruktur-Aufspaltung das Interesse an der QED in starken magnetischen Feldern im Vordergrund steht. Eine Behandlung dieser sehr interessanten Forschungsgebiete würde jedoch weit über den Rahmen der vorliegenden Arbeit hinausgehen.

Die vorliegende Arbeit ist folgendermaßen aufgebaut: Im Kapitel 2 wird ein Überblick über den gegenwärtigen theoretischen Stand der atomaren Strukturtheorie gegeben, wobei die H-artigen Ionen einen besonderen Schwerpunkt bilden. So werden neben den Bindungsenergien auch die Zerfallsraten angeregter Zustände erläutert, die wesentlich die Röntgencharakteristik bestimmen. Ebenso werden hier die Zwei-Elektronensysteme erörtert. Hierauf folgt im Kapitel 3 eine eingehende und zusammenfassende Darstellung der relativistischen Stoßphysik, die die Wechselwirkung der hochgeladenen Schwerionen mit Materie bestimmt. Dies soll anhand eines eingehenden Vergleiches zwischen experimentellen Daten und theoretischen Modellen erfolgen, wobei ein Großteil der dargestellten Daten im Rahmen eingehender Voruntersuchungen ermittelt werden konnte. Die dabei gewonnenen Erkenntnisse sind für die korrekte Beschreibung der Röntgenemission zwingend notwendig und werden ebenso für die optimale Produktion höchstgeladener Schwerionen benötigt.

Im Anschluß – Kapitel 4 – werden die beiden Experimentieranlagen ESR und Super-EBIT vorgestellt, die weltweit die einzigen Anlagen sind, an denen atomare Struktur- und Stoßuntersuchungen für schwere, hochgeladene Ionen durchgeführt werden können. Die folgenden drei Kapitel (Kapitel 5, Kapitel 6 und Kapitel 7) konzentrieren sich auf die am ESR durchgeführten Untersuchungen. Im Kapitel 5 werden die beiden am ESR vorhanden Experimentierplätze zur Röntgenspektroskopie mit ihren spezifischen Eigenschaften erörtert. Hier erfolgt zudem die Diskussion der Emissionseigenschaften von sich schnell bewegenden Projektilen. Hingegen wird im Kapitel 6 das Experiment erläutert, in dem erstmals die Abbremstechnik angewendet werden konnte. Neben wichtigen experimentellen Aspekten, wie z.B. den gemessenen Lebensdauern der gespeicherten Ionenstrahlen, werden die Röntgenspektren abgebremster H-artiger Uranionen gezeigt und interpretiert. Basierend auf diesen Betrachtungen werden im Kapitel 7 alle Experimente und die dazugehörenden Experimentstrategien und Methoden dargestellt, die bislang zur $1s$-Lamb-Verschiebung in schweren H-artigen Ionen durchgeführt wurden. Ein besonderer Schwerpunkt bildet hierbei das Experiment mit den abgebremsten Uranionen, in dem die bislang größte Genauigkeit erreicht werden konnte, das aber auch die Grenzen der gegenwärtigen Techniken verdeutlich. Alle vorliegenden Ergebnisse zur $1s$-Lamb-Verschiebung werden zudem zusammenfassend diskutiert.

Im folgenden Kapitel 8 wird ein Überblick über den gegenwärtigen experimentellen Stand der Forschung auf dem Gebiet der schweren Zwei-Elektronensysteme gegeben und eine neue Experimentiertechnik dargestellt, mit der der Zwei-Elektronen-Beitrag am Ionisationspotential direkt vermessen werden kann. Neben einem Vergleich der experimentellen Ergebnisse mit den theoretischen Vorhersagen wird auch die Möglichkeit erörtert, diese Untersuchungen auf angeregte Zustände auszudehnen, über die bislang nahezu keine Informationen vorliegen. Schließlich werden im Ausblick (Kapitel 9) neue Experimentiertechniken vorgestellt, die gegenwärtig entwickelt werden und die in naher Zukunft eine weitere wesentliche Steigerung der experimentellen Präzision erlauben sollten. Hier wird auch auf die Perspektiven Bezug genommen, die sich aus der Speicherring-Technologie für die Experimente zur Stoßdynamik schwerster, hochgeladener Ionen ergeben.

Kapitel 2

Die Struktur schwerer Ein- und Zwei-Elektronensysteme

Das Wasserstoff- und das Heliumatom spielten als einfachste atomare Systeme eine bedeutende Rolle in der Entwicklung der Atom- und Quantenphysik. Für die grundlegenden Gesetze, die der atomaren Struktur zugrunde liegen, ist das Wasserstoffatom von zentraler Bedeutung. Hier treten bereits relativistische und quantenelektrodynamische Effekte auf, die letztlich auch unsere makroskopische Welt bestimmen. Man denke hierbei an die Bedeutung der Bindungsenergien für den Aufbau des Periodensystems und für die Bildung chemischer Substanzen. Im Vergleich zum Wasserstoffatom sind solche Viel-Elektronensysteme bereits sehr komplex und das Verständnis ihrer Struktur erfordert zudem ein detailliertes Wissen über die Wechselwirkung der Elektronen untereinander. Zur Untersuchung der Natur dieser Systeme kommt dem einfachsten Mehr-Elektronensystem, dem Heliumatom, eine herausragende Bedeutung zu.

Mittlerweile ist unsere Kenntnis von der atomaren Struktur des Wasserstoff- und Heliumatoms extrem präzise [Hae95, InC95], und die Ausdehnung der Forschung auf die isoelektronischen Sequenzen bis hin zu den schwersten Ein- und Zwei-Elektronensystemen ist ein zentraler Gegenstand der aktuellen Atomphysik. So erfahren mit steigender Kernladungszahl Z die gebundenen Elektronen eine starke Zunahme des elektrischen Feldes dem sie ausgesetzt sind, was wiederum zur Folge hat, daß die relativistischen und die QED-Korrekturen wesentlich an Bedeutung gewinnen. Die mittlere elektrische Feldstärke $\langle|E|\rangle$, die ein Elektron in einem H-artigen System erfährt [SoB98], ist in Abbildung 2.1 für die niedrigst liegenden Zustände als Funktion der Kernladungszahl Z wiedergegeben. Die Zunahme von $\langle|E|\rangle$ um mehr als sechs Größenordnungen von Z=1 nach Z=92 zeigt deutlich, daß in den schwersten Systemen extrem starke elektrische Felder herrschen, deren Auswirkung auf die atomare Struktur sich nicht mit leichten Ionen untersuchen läßt.
Im folgenden wird im Detail auf die atomare Struktur H- und He-artiger Systeme eingegangen, wobei den quantenelektrodynamischen Effekten besondere Bedeutung beigemessen wird.

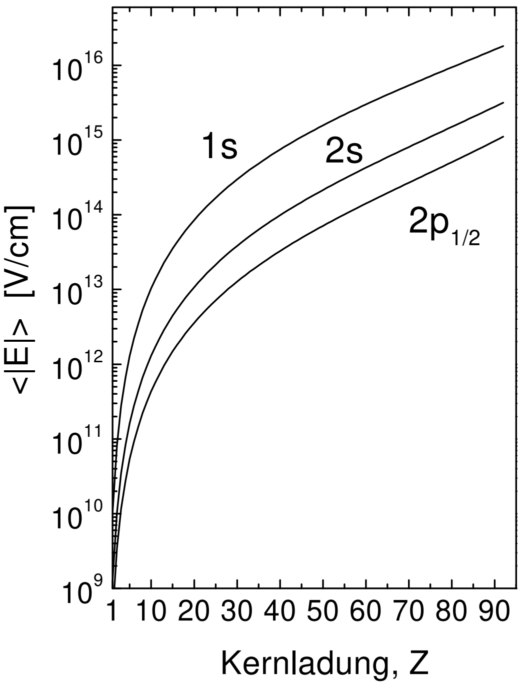


Abbildung 2.1. *Der Mittelwert der elektrischen Feldstärke $\langle|E|\rangle$ für die am stärksten gebundenen Zustände in H-artigen Ionen als Funktion der Kernladungszahl Z [SoB98].*

2.1 Wasserstoffartige Ionen

Die Abhängigkeit der elektronischen Bindungsenergien E_{B} von der Kernladungszahl Z und der Hauptquantenzahl n wurde bereits durch das 1913 postulierte Bohr'sche Atommodell annähernd beschrieben. In der Tat lassen sich bereits mit der einfachen Rydbergformel

$$E_{\mathrm{B}} = -Ry \cdot Z^2/n^2 \tag{2.1}$$

die Linienenergien des Wasserstoffspektrums verstehen, wobei Ry die Rydbergkonstante darstellt ($Ry \simeq 13.6$ eV). So folgt aus der Rydbergformel die bereits 1885 von Balmer gefundene n-Skalierung der Röntgenenergien. Dieses auch als *allgemeine Balmerformel* bekannte Skalierungsgesetz

$$E = Ry \cdot (1/n^2 - 1/m^2), \tag{2.2}$$

mit den Hauptquantenzahlen n, m und $n < m$, wurde empirisch aus den vier im sichtbaren Bereich des Wasserstoffspektrums liegenden Linien hergeleitet. Es sei an dieser Stelle an die spektroskopische Notation für die Serien erinnert, auf die im folgenden häufig Bezug genommen wird: n=1: Lymanserie, n=2: Balmerserie, n=3: Paschenserie. Das Bohr'sche Atommodell war jedoch nur in grober Übereinstimmung mit den spektroskopischen Daten und lieferte insbesondere keine Erklärung für die schon früh beobachtete Feinstrukturaufspaltung der Spektrallinien. Hingegen war die klassische Quantenmechanik in der Lage, auch diese Details der atomaren

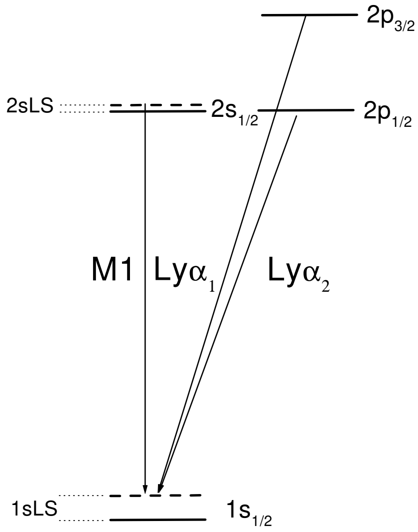


Abbildung 2.2. Termdiagramm, das aus der Dirac-Theorie für die niedrigsten atomaren Niveaus in H-artigen Ionen folgt. Die gestrichelten Linien deuten schematisch den Einfluß der QED-Korrekturen an.

Struktur zu beschreiben. Hierzu war es jedoch erforderlich, dem Elektron einen Eigendrehimpuls zuzuschreiben, da diese Eigenschaft des Elektrons – der Spin (s=1/2$\hbar$) – sich nicht aus der klassischen Quantenmechanik ergibt. Der Spin des Elektrons folgt jedoch zwanglos aus der relativistisch korrekten Formulierung der Quantenmechanik, der Dirac-Theorie (1928), die die Grundlage unseres heutigen Verständnisses der atomaren Struktur darstellt. Aus der zeitunabhängigen Dirac-Gleichung folgt für den Energieeigenwert E_{nj} eines Zustands in einem Ein-Elektronensystem und unter Annahme eines punktförmigen und unendlich schweren Kerns:

$$E_{\mathrm{nj}} = mc^2 / \sqrt{1 + \left(\frac{Z\alpha}{n - |j + 1/2| + \sqrt{(j+1/2)^2 - (Z\alpha)^2}} \right)^2} \qquad (2.3)$$

mit der Ruhemasse des Elektrons m, c der Lichtgeschwindigkeit und $\alpha = 1/137.036$ der Feinstrukturkonstante. Der Bahndrehimpuls mit seiner Quantenzahl ℓ koppelt mit dem Spin des Elektrons zum Gesamtdrehimpuls mit der Quantenzahl $j = \ell \pm 1/2$. Nach der Dirac-Theorie sind somit alle Zustände mit gleicher Haupt- und Gesamtdrehimpulsquantenzahl entartet und die Bindungsenergien ergeben sich aus

$$E_{\mathrm{B}} = E_{\mathrm{nj}} - mc^2. \qquad (2.4)$$

Das Termdiagramm, das aus der Dirac-Theorie für die niedrigsten atomaren Niveaus in H-artigen Ionen folgt, ist in Abbildung 2.2 dargestellt. Zudem wird in der Abbildung die spektroskopische Notation Lyman-α_1 (Lyα_1) und Lyman-α_2 (Lyα_2) für den $2p_{3/2}$→$1s_{1/2}$ bzw. $2p_{1/2}$→$1s_{1/2}$ Übergang eingeführt. Die aufgeführte Bezeichnung **M1** bezieht sich hierbei auf den magnetischen Dipolzerfall des $2s_{1/2}$-Zustands, der zwar für atomaren Wasserstoff keine Bedeutung hat, jedoch für die schwersten Systeme von großer Relevanz ist.

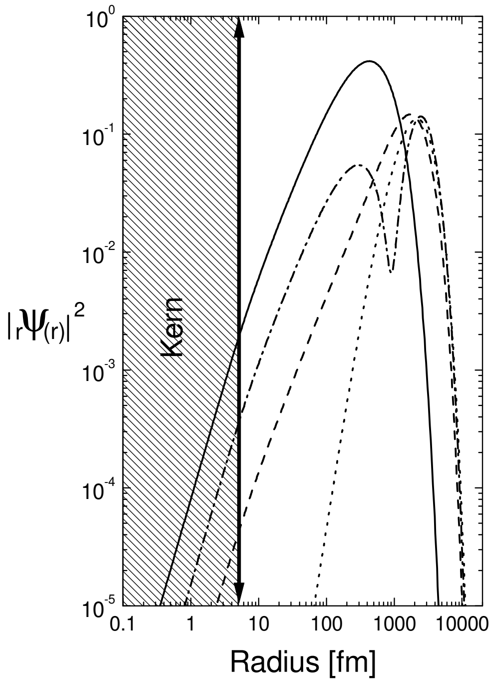
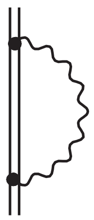


Abbildung 2.3. *Der Radialteil der Wellenfunktionen für* $_{92}\mathrm{U}^{91+}$ *(— $1s$-Orbital, -.-.- $2s$-Orbital, – – – $2p_{1/2}$-Orbital, ...$2p_{3/2}$-Orbital). Der Pfeil markiert die Ausdehnung des Kerns, wobei ein Kernradius von 7.4 fm angenommen wurde [Bei97].*

2.1.1 Die Lamb-Verschiebung

Im Jahre 1947 konnten Lamb und Retherford [LaR47, LaR52] nachweisen, daß im Widerspruch zur Dirac-Theorie die beiden $j = 1/2$-Zustände der L-Schale des atomaren Wasserstoffs – das $2s_{1/2}$- und das $2p_{1/2}$-Niveau – nicht entartet sind. Somit war offensichtlich, daß selbst die Dirac-Theorie keine vollständige Beschreibung atomarer Systeme liefert. Die damalige Diskrepanz zwischen Theorie und Experiment, die sogenannte *klassische* Lamb-Verschiebung, läßt sich im Rahmen der Quantenelektrodynamik (QED) erklären, die die Wechselwirkung des gebundenen Elektrons mit seinem eigenen virtuellen Photonenfeld beschreibt. Grundsätzlich sind von diesen QED-Korrekturen alle atomaren Zustände betroffen, jedoch werden die Korrekturen um so bedeutender, je größer die radiale Dichte der Wellenfunktion am Ursprung des Zentralpotentials ist. Somit sind die Bindungsenergien der s-Zustände – und hier vor allem die des $1s$-Grundzustands – am stärksten von QED-Korrekturen beeinflußt. In Abbildung 2.3 ist der Radialteil der $1s$-, $2s$-, $2p_{1/2}$- und $2p_{3/2}$-Wellenfunktion im Uran als Funktion des Kernabstandes dargestellt, in der deutlich der große Überlapp des $1s$- und des $2s$-Orbitals mit dem Kernvolumen zu erkennen ist, während die p-Orbitale, und hier insbesondere das $2p_{3/2}$-Niveau, nahezu keinen Überlapp aufweisen.

An dieser Stelle muß darauf hingewiesen werden, daß allgemein unter dem Begriff *der Lamb-Verschiebung eines Zustands* die Differenz zwischen der tatsächlich vorliegenden Bindungsenergie im Atom und der Vorhersage der Dirac-Theorie für einen punktförmigen Kern verstanden wird. Somit tragen zur Lamb-Verschiebung nicht nur QED-Korrekturen bei, sondern alle Effekte, die Einfluß auf die Energieeigenwerte haben. Eine Ausnahme stellt jedoch die Korrektur dar, die durch die endliche Masse



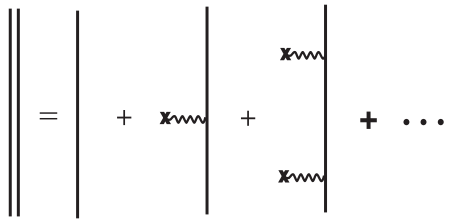


Abbildung 2.4: *Linke Seite: Feynman-Diagramm für die Selbstenergie eines gebundenen Elektrons. Rechte Seite: Zerlegung des Propagators für gebundene Elektronen in eine Reihe freier Propagatoren.*

des Atomkerns hervorgerufen wird, und die nicht-relativistisch gegeben ist durch

$$E_{\mathrm{rm}} = \frac{m}{m+M}\left(-E_{\mathrm{B}}\right), \tag{2.5}$$

wobei M die Kernmasse bezeichnet (siehe z.B. [ArS95]). Aus traditionellen Gründen wird diese Korrektur nicht als Lamb-Verschiebungseffekt verstanden, da sie nicht zur *klassischen* Lamb-Verschiebung – der $2s_{1/2} - 2p_{1/2}$ Aufspaltung – beiträgt. In schweren Systemen reicht die nicht-relativistische Beziehung in Gleichung 2.5 nicht mehr aus, um den Einfluß der endlichen Kernmasse zu bestimmen. Vielmehr müssen relativistisch korrekte Berechnungen durchgeführt werden, die zur sogenannten *Recoil* Korrektur E_{R} führen. Um der Konvention zu genügen, wird häufig der künstliche *Relativistic Recoil* Term angegeben, der sich aus der Differenz $E_{\mathrm{R}} - E_{\mathrm{rm}}$ ergibt [ArS95]. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird von dieser Konvention abgewichen, und es werden alle Effekte als Lamb-Verschiebungskorrekturen angesehen, die zur Abweichung von der Dirac-Theorie führen.

Im wesentlichen läßt sich für s-Zustände der Einfluß der Lamb-Verschiebung durch folgende Gleichung wiedergeben [JoS85]:

$$\Delta E_{LS} = \frac{\alpha}{\pi}\frac{(Z\alpha)^4}{n^3} \cdot \mathcal{F}(Z\alpha) \cdot mc^2, \tag{2.6}$$

aus der insbesondere die starke Abhängigkeit der Lamb-Korrekturen ($\propto Z^4$) hervorgeht. $\mathcal{F}(Z\alpha)$ ist hierbei eine nur geringfügig mit Z variierende Funktion, die für leichte Systeme durch eine Entwicklung in $Z\alpha$ berechnet werden kann. Die Hauptbeiträge zur Lamb-Verschiebung, die durch Gleichung 2.6 berücksichtigt werden, stammen von der Selbstenergie, der Vakuumpolarisation und der endlichen Kernausdehnung.

2.1.2 Selbstenergie

Die Selbstenergie stellt die bedeutendste Strahlungskorrektur für leichte Systeme dar und führt zu einer Verminderung der Bindungsenergie. Hierbei emittiert und reabsorbiert das Elektron ein- und dasselbe virtuelle Photon, was jedoch in jeder klassischen

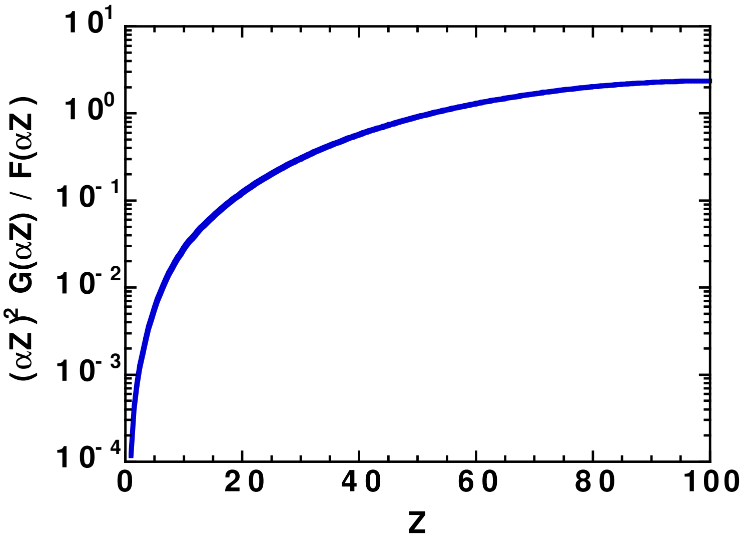


Abbildung 2.5. *Der Beitrag der höheren Ordnungskorrekturen zur 1s-Selbstenergie (SE) als Funktion der Kernladungszahl Z, wie er sich aus Gleichung 2.8 ergibt[Bei97].*

Theorie zu einer unendlichen Masse und somit zu einem unendlichen Selbstenergiebeitrag führt [Hei54]. Die ersten erfolgreichen Rechnungen zur Selbstenergie, die es erlaubten, die Lamb-Verschiebung im Wasserstoff zu erklären, wurden von Bethe durchgeführt [Bet47]. Bethe gelang dies, indem er auf eine Idee Kramers – die sogenannte Massen-Renormierung – zurückgriff (für eine umfassende Darstellung der Entwicklung der QED siehe [Sch94]). Hierbei führt die Wechselwirkung mit den virtuellen Photonen zu einer Änderung der Elektronenmasse. Dieser Effekt ist immer gegenwärtig und die meßbare Elektronenmasse $m = m_e - \delta m$ beinhaltet bereits die Strahlungskorrektur. Somit kann die Selbstenergiekorrektur für einen gebundenen Zustand als Massendifferenz zwischen dem gebundenen Elektron und einem freien Elektron der Masse m_e betrachtet werden, das zum Zeitpunkt $t = -\infty$ keiner Wechselwirkung mit dem elektromagnetischen Feld unterliegt.

Das entsprechende Feynman-Diagramm für die Selbstenergie ist in Abbildung 2.4 dargestellt. Hierbei repräsentiert die doppelte Linie ein stark gebundenes Elektron (Propagator des gebundenen Elektrons) und die geschlängelte Linie die Emission und Absorption eines virtuellen Photons. Der Propagator des gebundenen Elektrons läßt sich symbolisch in eine Reihe freier Propagatoren zerlegen, wie es in Abbildung 2.4 dargestellt ist. Jede Ankopplung an das externe Potential ($\times$) entspricht hierbei einer Potenz in $Z\alpha$. Wird der Selbstenergie-Beitrag E_{SE} zur Funktion $\mathcal{F}(Z\alpha)$ im Rahmen einer $Z\alpha$ Reihenentwicklung betrachtet, so findet man für die Terme niedriger Ordnung [Moh96]

$$\begin{aligned}\mathcal{F}(Z\alpha) &= \mathcal{A}_{40}(Z\alpha) + \mathcal{A}_{41}\ln(Z\alpha)^{-2} + \mathcal{A}_{50}(Z\alpha) \\ &+ (Z\alpha)^2\mathcal{A}_{60} + (Z\alpha)^2\mathcal{A}_{61}\ln(Z\alpha)^{-2} + (Z\alpha)^2\mathcal{A}_{62}\ln^2(Z\alpha)^{-2} \\ &+ (Z\alpha)^2\mathcal{G}(Z\alpha)_{SE}. \end{aligned} \tag{2.7}$$

Die Funktion $\mathcal{G}_{SE}$ beinhaltet alle höheren Ordnungsbeiträge, die nicht explizit ange-

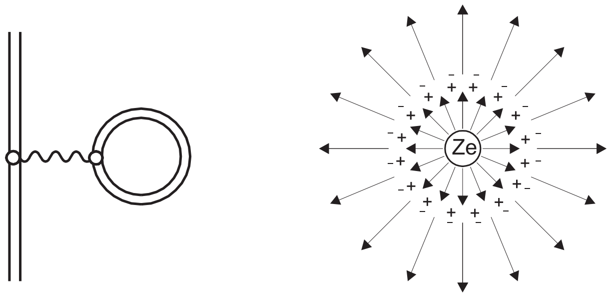


Abbildung 2.6: *Linke Seite: Feynman-Diagramm für die Vakuumpolarisation eines gebundenen Elektrons. Rechte Seite: Anschauliche Darstellung der Polarisation des Vakuums [SoB98].*

geben wurden. Im Grenzbereich $Z\alpha \to 0$ nimmt sie den Wert $\mathcal{G}(0)_{SE} =$ -30.92890(1) an. Für großes Z jedoch ist die gegebene Reihenentwicklung vollständig durch die höheren Ordnungsbeiträge geprägt.

In Abbildung 2.5 ist der Beitrag der höheren Ordnungen (E_{HO}) an der totalen Selbstenergie-Korrektur als Funktion der Kernladungszahl wiedergegeben, also [MuG86]:

$$\frac{E_{HO}}{E_{SE}} = \frac{\mathcal{G}_{SE}(Z\alpha) \cdot (Z\alpha)^2}{\mathcal{F}_{SE}(Z\alpha)}. \tag{2.8}$$

Aus dieser Darstellung wird ersichtlich, daß für schwere Ionen ($Z\alpha \to 1$) die Funktion $\mathcal{G}_{SE}(Z\alpha)$ in allen Ordnungen in $Z\alpha$ behandelt werden muß [PeS97, SoB98] und von einer Entwicklung in $Z\alpha$ keine sinnvollen Resultate mehr erwartet werden können.

2.1.3 Vakuumpolarisation

Die Vakuumpolarisation ist ein bedeutender QED-Effekt sowohl in myonischen Systemen als auch in schweren Ionen, d.h. in Systemen, bei denen der Überlapp der Wellenfunktionen mit dem Kern besonders groß ist. Die Vakuumpolarisation wird durch die Wechselwirkung des Elektrons mit einem virtuellen Elektron-Positron-Paar hervorgerufen und kann nur im Rahmen der Renormierung der Ladung behandelt werden in Analogie zur Massen-Renormierung bei der Selbstenergie [Hei54].

Das entsprechende Feynman-Diagramm ist in Abbildung 2.6 dargestellt. In Gegenwart externer Felder verhalten sich die virtuellen Elektron-Positron-Paare wie ein polarisierbares Medium und beeinflussen somit auch die Bindungsenergie des Elektrons. Aufgrund dieser Analogie zur klassischen Physik würde man vermuten, daß die Vakuumpolarisation wie die Selbstenergie zu einer *Lockerung* der Bindung führt. Daß jedoch das Gegenteil der Fall ist, kann nur als Folge der notwendigen Renormierung angesehen werden. Eine anschauliche Darstellung der Polarisation des Vakuums in

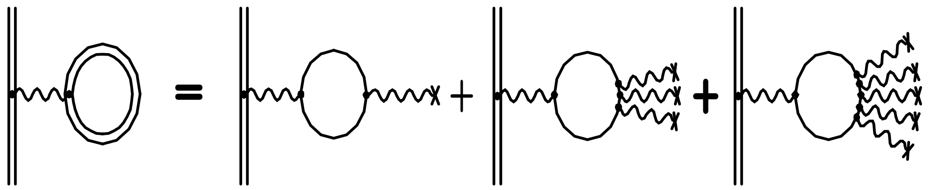


Abbildung 2.7: *Zerlegung des Vakuumpolarisations-Diagramms in Graphen der Ordnung $(Z\alpha)^n$, wobei nur ungerade Ordnungen einen Beitrag liefern. Der erste Term in der Entwicklung stellt den Uehling-Beitrag dar, wogegen die restlichen Graphen als Wichman-Kroll-Korrektur bezeichnet werden.*

Anwesenheit eines elektrischen Zentralfeldes ist in Abbildung 2.6 gegeben [SoB98]. Wird der Effekt der Vakuumpolarisation in Potenzen von $Z\alpha$ entwickelt, so zeigt sich, daß nur der erste Term divergent ist, der auch den bei weitem wichtigsten Beitrag liefert und für das anziehende Verhalten verantwortlich ist. Er wurde erstmals 1935 von Uehling berechnet [Ueh35], zu einer Zeit also, in der noch keine klaren Methoden zur Renormierung vorlagen. Im Rahmen der *heutigen* QED erfolgte die Berechnung des Uehling-Terms erstmalig durch Schwinger im Jahr 1949 [Sch49]. Alle höheren Terme in $Z\alpha$, die zur Vakuumpolarisation beitragen, werden als Wichmann-Kroll-Korrektur bezeichnet [WiK56], die heutzutage vollständig in allen Ordnungen berechnet werden können. In Abbildung 2.7 ist die entsprechende Zerlegung des Vakuumpolarisations-Diagramms in Graphen der Ordnung $(Z\alpha)^n$ gegeben. Im Gegensatz zur Uehling-Korrektur verringert der Wichmann-Kroll-Beitrag die Bindungsenergie, liefert jedoch selbst für Uran nur einen vergleichsweise geringen Beitrag zur gesamten Vakuumpolarisation.

2.1.4 Kernausdehnung

Die Kernausdehnung ist vor allem für die schwersten Ionen von größter Bedeutung und führt zu einer Reduzierung der Bindungsenergien [JoS85]. Dieser Effekt beeinflußt nicht nur die Eigenwerte der Dirac-Theorie, sondern führt auch zu einer Änderung der QED-Beiträge. In den schwersten Systemen sind die Kerneffekte fast von gleicher Bedeutung wie der Selbstenergie-Beitrag. Um sie genau beschreiben zu können, ist eine präzise Kenntnis der Kernladungsverteilung und des mittleren quadratischen Kernradius zwingend erforderlich. Diese Größen müssen jedoch aus Kernmodellen bzw. experimentellen Befunden abgeleitet werden. Unsicherheiten in diesen Parametern stellen somit ein fundamentales Problem für den Test der QED in schweren Systemen dar. So änderte sich während der letzten Jahre der experimentell bestimmte Wert für den mittleren quadratischen Kernradius von ^{238}U um ca. 2% von $< r^2 >^{1/2}$=5.751 fm [JaV74] auf $< r^2 >^{1/2}$=5.860 fm [ZuS84], was für die theoretische $1s$-Bindungsenergie eine Korrektur von 4.9 eV zur Folge hatte.

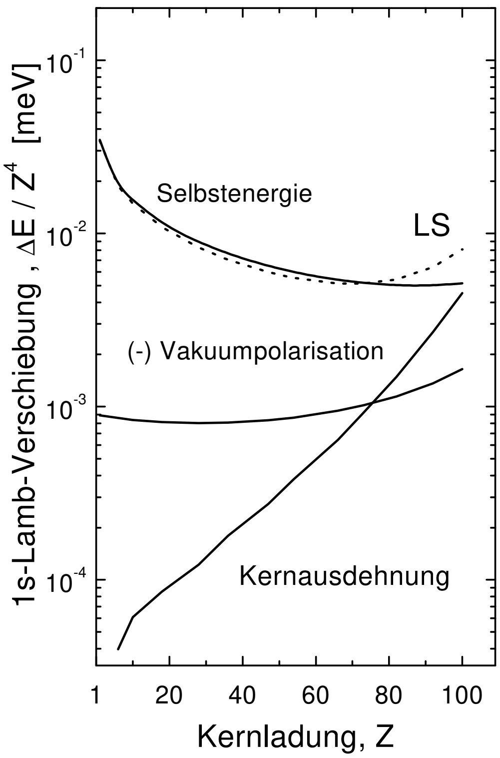


Abbildung 2.8. *Normierte Beiträge zur Lamb-Verschiebung (LS) in H-artigen Ionen als Funktion der Kernladungszahl Z [JoS85]. Im Unterschied zur Selbstenergie und zur Kernausdehnung hat die Vakuumpolarisation eine anziehende Wirkung und ist entsprechend mit einem Minuszeichen markiert.*

Der Einfluß der Kernladungsverteilung auf die Bindungsenergien wurde von Franosch und Soff untersucht [FrS91]. Für den Grundzustand in U^{91+} folgt hieraus eine Unsicherheit von $\pm$ 0.36 eV. Diese Abschätzung wurde durch Vergleichsrechnungen gewonnen, bei denen zum einen eine homogene kugelsymmetrische Verteilung und zum anderen eine Fermi-Verteilung angenommen wurde. Für Uran ist es somit durchaus vorstellbar, daß die Kerneffekte einen experimentellen Test der QED auf dem Niveau von wesentlich besser als $\pm$ 1 eV verhindern [BeP97]. Für den *doppelt magischen* ^{208}Pb Kern sind die Kernparameter jedoch sehr präzise bekannt, so daß hier wesentlich günstigere Voraussetzungen vorliegen [BeP97].

Zusammenfassend ist in Abbildung 2.8 der jeweilige Beitrag der drei diskutierten Korrekturen zur Lamb-Verschiebung in H-artigen Ionen dargestellt, aus der sich die relative Bedeutung der einzelnen Effekte als Funktion von Z entnehmen läßt. Die dargestellten Daten beziehen sich auf den $1s$-Grundzustand.

2.1.5 Strahlungskorrekturen der Ordnung α^2

Bei den diskutierten QED-Korrekturen handelt es sich um Effekte der Ordnung α, d.h. um Korrekturen, bei denen das gebundene Elektron mit *einem* virtuellen Quant wechselwirkt. Zusätzlich gilt es aber auch, die Korrekturen der Ordnung α^2 zu berücksichtigen, die durch die Wechselwirkung mit *zwei* Quanten hervorgerufen werden. Die entsprechenden Feynman-Diagramme für H-artige Ionen sind in Abbildung 2.9 dargestellt. Eine grobe Abschätzung für die Größe dieser Korrekturen ergibt sich

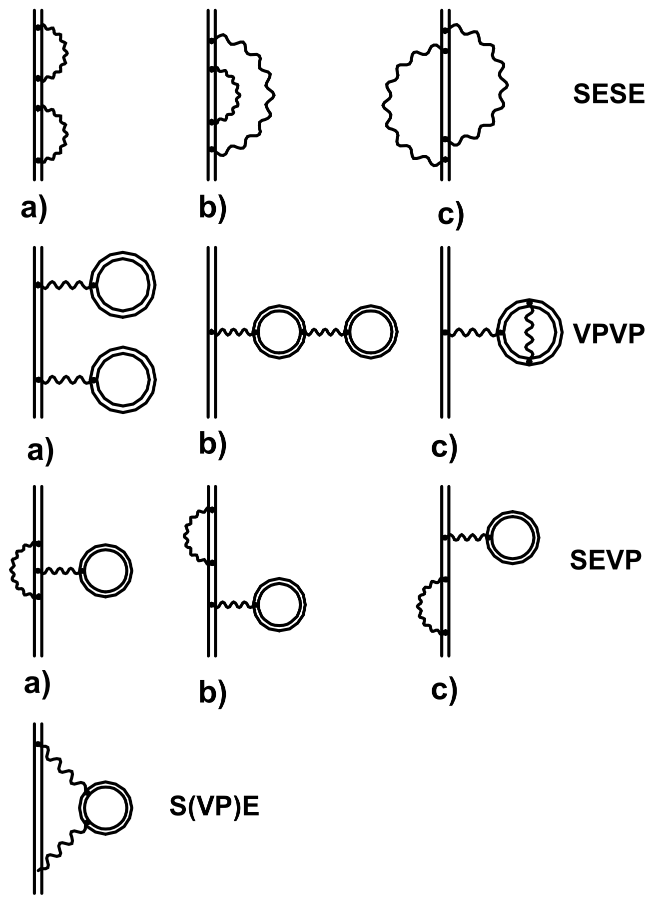


Abbildung 2.9. *Feynman-Diagramme für die QED-Korrekturen der Ordnung α^2 für H-artige Ionen.*

unter Berücksichtigung des führenden Terms, der für eine Korrektur n'ter Ordnung in α durch $(\alpha/\pi)^n$ gegeben ist. Somit sollten die α^2-Korrekturen um den Faktor $\alpha/\pi \approx 1/400$ kleiner sein. Für schwerste Systeme, wie z.B. H-artiges Uran, in denen die Effekte erster Ordnung einen Wert von ca. 400 eV erreichen, entspricht dies einer Korrektur von ca. 1 eV.

Wie bereits ausgeführt, müssen für schwere Ionen die QED-Strahlungskorrekturen in allen Ordnungen in $Z\alpha$ berechnet werden. Für die Terme der Ordnung α^2 ist dies noch nicht vollständig gelungen [PeS97]. In Abbildung 2.9 sind die Feynman-Diagramme aller α^2-Terme, aufgeteilt in vier Gruppen, dargestellt. Bei den Gruppen Selbstenergie-Selbstenergie (SESE), Selbstenergie-Vakuumpolarisation (SEVP) und der kombinierten Selbstenergie-Vakuumpolarisation (S(VP)E) handelt es sich jeweils um einen eichinvarianten Satz von Diagrammen, wogegen die Vakuumpolarisation-Vakuumpolarisation (VPVP) noch weiter unterteilt werden kann. Im Fall der Zwei-Photonen-Selbstenergie (SESEabc) konnte bislang nur ein Beitrag zum ersten Diagramm (SESEa) berechnet werden [MiL95]. Hingegen sind die Diagramme der gemischten Selbstenergie-Vakuumpolarisation (SEVPabc) und ebenso der kombinierte Selbstenergie-Vakuumpolarisation (S(VP)E) in der Uehling-Näherung für die Vakuumpolarisation ausgewertet worden [PeL96]. Das gleiche gilt für die Zwei-

Zustand	$1s_{1/2}$		$2s_{1/2}$	$2p_{1/2}$	$2p_{3/2}$
Dirac Eigenwert	–132279.96		–34215.49	–34215.49	–29649.8
Kernausdehnung	198.82	±0.36	37.77(08)	4.42(01)	
Reduzierte Masse	0.30		0.08	0.08	
Relativ. Recoil	0.21	±0.10	0.05	0.01	
Kernpolarisation	–0.19	±0.10	–0.03	0.00	
VP	–88.60		–15.64	–2.70	
SE	355.05		65.42	9.55	
SESE	–	±2			
VPVP	–0.97	±0.10	–0.16	–0.02	
SEVP	1.14		0.21	0.02	
S(VP)E	0.13		0.02	0.00	
Lamb-Verschiebung	465.89	±2	87.60(08)	11.37 (01)	8.8
Bindungs-energie	–131814.07	±2	–34127.78(08)	–34204.13(01)	–29640.99

Tabelle 2.1: *Bindungsenergien und QED-Korrekturen der ersten und zweiten Ordnung in α für die K- und L-Schalen-Elektronen in H-artigem Uran [BeM97]. Die Energieeinheit ist eV. Der Rechnung liegt ein mittlerer quadratischer Radius $< r^2 >^{1/2}$ =5.86 fm zugrunde. Für den $1s$-Grundzustand wurden die theoretischen Unsicherheiten explizit aufgeführt [PeS97], wobei die Unsicherheit von 2 eV eine Abschätzung für die bislang noch nicht bestimmten SESE-Korrekturen darstellt. Für das $2s_{1/2}$- und das $2p_{1/2}$-Niveau wurde die Unsicherheit, die sich aus der Kernausdehnung ergibt, berücksichtigt. Die Bindungsenergie für den $2p_{3/2}$ Zustand wurde der Ref. [Ind98] entnommen.*

Photonen-Vakuumpolarisation VPVPbc [BeS88, ScG93] während, für VPVPa bereits eine vollständige Behandlung erfolgte [PeL93, PeL96].

Zusammenfassend sind in der Tabelle 2.1 alle theoretischen Werte für die individuellen Lamb-Verschiebungs-Korrekturen in U^{91+} gegeben, wobei ebenso die theoretischen Bindungsenergien für den Grundzustand und die L-Schale in aufgeführt sind. Anzumerken sei hier, daß in der Tabelle auch der Effekt der Kernpolarisation berücksichtigt wurde, bei dem es sich um den Einfluß einer möglichen virtuellen Kernanregung handelt [PlM91]. Hingegen wurde, der Empfehlung von Persson folgend [PeS97], der berechnete Beitrag zum Diagramm (SESEa) nicht berücksichtigt (-0.97 eV für den $1s$-Zustand), da dieser nicht eichinvariant ist. Die sich hieraus ergebenden Energien für die $L \to K$ Übergänge sind separat in Tabelle 2.2 aufgeführt.

	Lyα_1	Lyα_2	**M1**
	$2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$	$2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$	$2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$
Energie (eV)	102 173.3	97 609.9	97 686.3

Tabelle 2.2: *Röntgenenergien für die L→K Übergänge in H-artigem Uran, abgeleitet aus den theoretischen Daten [BeM97], die in Tabelle 2.1 aufgeführt sind.*

2.2 Heliumartige Ionen

Für die Struktur der einfachsten atomaren Vielkörpersysteme, den heliumartigen Ionen, ist die Elektron-Elektron-Wechselwirkung von entscheidender Bedeutung. Während in H-artigen Ionen die Dirac-Gleichung eine exakte Beschreibung der atomaren Struktur liefert (abgesehen von den Lamb-Verschiebungs-Korrekturen), verhindert der Vielkörperaspekt eine entsprechende analytische Lösung für He-artige Ionen. Für nicht-relativistische Ionen muß zur Beschreibung der atomaren Niveaus in Zwei-Elektronensystemen eine Lösung für die Schrödinger-Gleichung

$$H\Psi = E\Psi \tag{2.9}$$

gefunden werden. Ψ stellt eine Zwei-Elektronen-Wellenfunktion dar und der Hamiltonoperator H ist gegeben durch

$$H = h_s(1) + h_s(2) - \frac{Ze}{r_1} - \frac{Ze}{r_2} + \frac{e}{|r_1 - r_2|} \tag{2.10}$$

mit r_1 und r_2, den Ortskoordinaten der Elektronen. Der Term $\frac{e}{|r_1-r_2|}$ beinhaltet explizit die Elektron-Elektron-Wechselwirkung, während $h_s(1)$ und $h_s(2)$ die Hamiltonoperatoren der einzelnen freien und unkorrelierten Elektronen sind. Zur näherungsweisen Lösung der Schrödinger-Gleichung lassen sich verschiedene Verfahren anwenden, wobei sich für sehr leichte Ionen die größte Genauigkeit mit Variationsmethoden erreicht läßt. Für schwere Systeme (im allgemeinen $Z > 8$) werden häufig auch störungstheoretische Ansätze angewendet, bei denen die Coulombabstoßung zwischen den Elektronen $\frac{e}{|r_1-r_2|}$ als Störung der Kern-Elektron-Wechselwirkung aufgefaßt wird. Im nicht-relativistischen Bereich bestimmt die Coulombabstoßung zwischen den Elektronen das Termschema der He-artigen Ionen, d.h. solange die Spin-Bahn-Wechselwirkung klein gegenüber der Bahn-Bahn- und der Spin-Spin-Wechselwirkung ist. Da die Stärke der Coulombwechselwirkung zwischen den Elektronen nur mit Z skaliert, hingegen der relativistische Effekt der Spin-Bahn-Kopplung mit Z^4 zunimmt, ist das Termschema schwerer He-artiger Ionen durch die jj-Kopplung geprägt. Für sehr schwere Ionen folgt die Niveaustruktur schließlich nahezu der Struktur H-artiger Systeme. In Abbildung 2.10 sind die Termdiagramme für die beiden Grenzfälle der LS- und jj-Kopplung dargestellt, wie sie in Helium bzw. He-artigem Uran vorliegen.

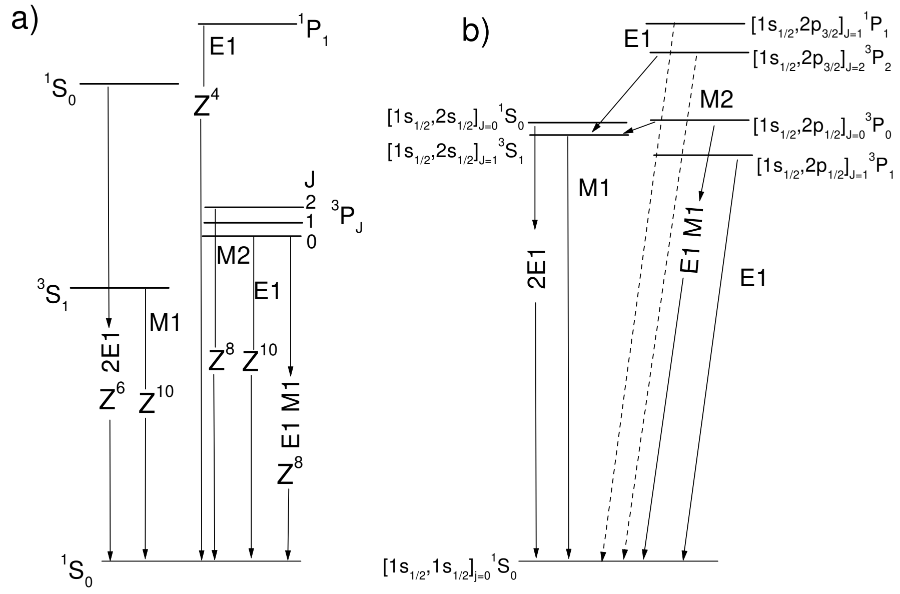


Abbildung 2.10: *Niveaudiagramm für sehr leichte He-artige Ionen (a) und für schwere He-artige Ionen (b). Zudem läßt sich aus der Abbildung der Zerfallsmodus der einzelnen Grundzustandsübergänge entnehmen, wobei die jeweilige Z-Skalierung für die Übergangsrate separat aufgeführt ist.*

In der Abbildung ist zudem die Multipolarität des jeweiligen Grundzustandsübergangs mit seiner Z-Skalierung für die Übergangsrate angegeben.

Im Heliumatom wird die Elektron-Elektron-Wechselwirkung durch die elektrostatische Coulombabstoßung bestimmt. Jedoch, wie bereits aus der klassischen Elektrodynamik bekannt, kommt es zwischen bewegten Ladungen auch zu einer Strom-Strom-Wechselwirkung, die in der Atomphysik auch als *Breit-Wechselwirkung* bezeichnet wird. Für leichte Ionen ist die Breitwechselwirkung b_{12} nur sehr schwach, obwohl rein formal die Terme der Coulomb- und Breitwechselwirkung völlig gleichberechtigt und integraler Bestandteil der Elektron-Elektron-Wechselwirkung sind. Für schwere Ionen ist es zwingend erforderlich, diesen dynamischen Aspekt der Elektron-Elektron-Wechselwirkung g_{12} in einer relativistischen Beschreibung zu berücksichtigen (siehe z.B. [Fri96]), mit

$$g_{12} = \frac{e}{|r_1 - r_2|} + b_{12} \tag{2.11}$$

und

$$b_{12} = -\frac{\boldsymbol{\alpha_1} \cdot \boldsymbol{\alpha_2}}{r_{12}} + (\boldsymbol{\alpha_1} \cdot \nabla_1)(\boldsymbol{\alpha_2} \cdot \nabla_2)\,\frac{\cos(\omega r_{12} - 1)}{\omega^2 r_{12}} \tag{2.12}$$

Hierbei sind $\boldsymbol{\alpha_1}$ und $\boldsymbol{\alpha_2}$ die Dirac-Matrizen der beiden Elektronen und ω ist der Impuls

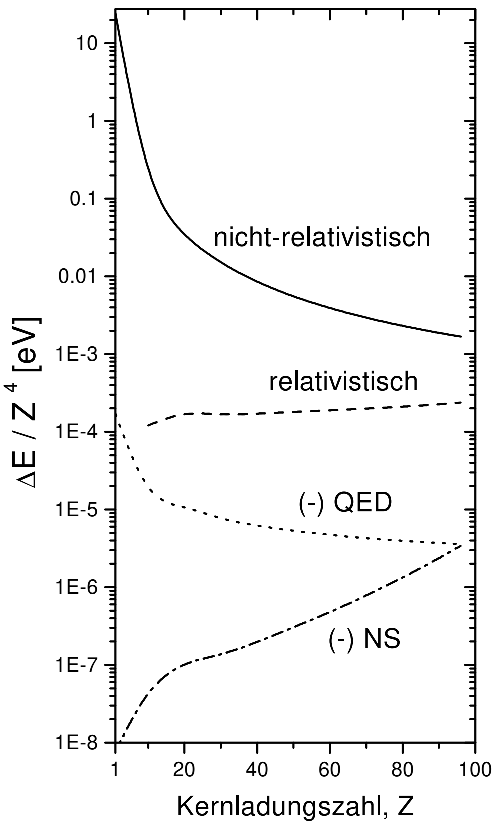


Abbildung 2.11. *Die verschiedenen Beiträge zum absoluten Ionisationspotential in He-artigen Systemen [Dra88]. Die Daten beziehen sich auf den* $1s^2\ ^1S_0$ *Grundzustand. Korrekturen, die zu einer Reduzierung des Ionisationspotentials führen, sind mit einem Minuszeichen gekennzeichnet.*

des ausgetauschten Photons. Der erste Term wird auch als *Gaunt-Wechselwirkung* bezeichnet [Gau29] und beschreibt die durch die Elektronenbewegung hervorgerufene Strom-Strom-Wechselwirkung. Zwischen gebundenen Elektronen trägt er zu etwa 90% zur Breit-Wechselwirkung bei, während die restlichen 10% durch den zweiten Term hervorgerufen werden. Dieser gibt die Retardierung der Wechselwirkung wieder.

Für den $1s^2\ ^1S_0$ Grundzustand sind in Abbildung 2.11 die nicht-relativistischen und relativistischen Beiträge zum Ionisationspotential vergleichend dargestellt. Die absoluten Bindungsenergien ergeben sich durch Addition der Grundzustands-Bindungsenergie der H-artigen Systeme. Die theoretischen Daten wurden der Arbeit von Drake [Dra88] entnommen, der erstmals die Ionisationspotentiale der $1s^2$,$1s2s\ ^1S_0$, $1s2s\ ^3S_1$, $1s2p\ ^1P_1$, $1s2p\ ^3P_{0,1,2}$ Zustände in He-artigen Systemen systematisch für alle Elemente berechnete. Drake führte hierzu eine neue Methode ein, die zum einen auf Variationstechniken zurückgreift und zum anderen eine $1/Z$-Entwicklung zur Berechnung relativistischer Korrekturen benutzt. Dieser auch als *Unified-Methode* bezeichnete Ansatz hat den großen Vorteil, daß er für kleine Z die Elektronenkorrelation präzise beschreibt, während die wichtigsten relativistischen Korrekturen ebenso mitberücksichtigt werden. Außerdem wurden auch QED-Effekte und die Kernausdehnung (NS) näherungsweise in die Berechnungen einbezogen (siehe Abbildung 2.11). Als Folge der $1/Z$-Entwicklung werden die relativistischen und QED-Effekte jedoch nicht vollständig behandelt, was zu einer Unsicherheit führt, die

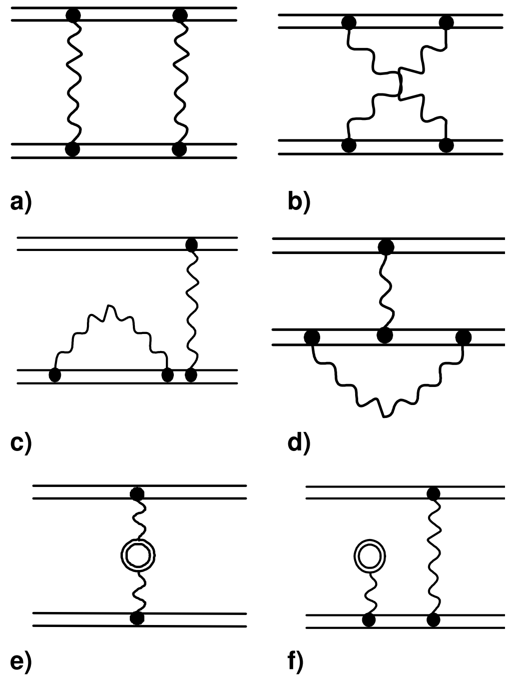


Abbildung 2.12. *Feynman-Diagramme der Zwei-Elektronen-QED-Korrekturen in He-artigen Ionen: a) ladder-Diagramm; b) cross photon-Diagramm; c,d) screened Selbstenergie; e,f) screened Vakuumpolarisation. Die Diagramme a) und b) repräsentieren die nicht-radiativen QED-Beiträge, während c, d, e, f als Lamb--Verschiebung bzw. abgeschirmte Lamb-Verschiebung bezeichnet werden.*

proportional zu $(Z\alpha)^4$ ist [Dra88]. Für die schwersten Ionen sind daher die Resultate der Unified-Methode nur bedingt aussagekräftig.

In den vergangenen Jahren konzentrierten sich die theoretischen Bemühungen auf eine möglichst präzise Beschreibung der Struktur der schwersten He-artigen Ionen [ChC93, ChC94, PlJ94, Ind95, PeS96, YeS96]. Eine tragende Rolle spielte hierbei die Viel-Teilchenstörungstheorie (MBPT, *Many-Body Perturbation Theory* [PlJ94] bzw. die *Relativistic Many-Body Perturbation Theory* (RMBPT) [PeS96]) und die *Multiconfiguration Dirac-Fock* (MCDF) Methode [Ind95]. Letztere ist eng verwandt mit dem Hartee-(Dirac)-Fock-Verfahren und eignet sich insbesondere zur Berechnung der Bindungsenergien angeregter Zustände. Die größte Genauigkeit wurde aber mit der MBPT-Methode erreicht, die es erstmals erlaubte, die Elektron-Elektron-Wechselwirkung in relativistischen Systemen in allen Ordnungen vollständig zu berechnen [LiP95, PeS96, YeS96]. Voraussetzung hierfür ist jedoch, daß die spezifischen Zwei-Elektronen-QED-Korrekturen *ab initio* in die Theorie eingebunden werden. So ist es nur im Rahmen der QED möglich, die Breit-Wechselwirkung vollständig zu beschreiben [LiP95].

2.2.1 QED-Korrekturen in He-artigen Ionen

Die Feynman-Diagramme der spezifischen Zwei-Elektronen QED-Beiträge (2eQED) sind in Abbildung 2.12 dargestellt. Sie sind integraler Bestandteil der Elektron-Elektron-Wechselwirkung in der Gegenwart externer Coulomb-Felder und stellen Korrekturen in der Ordnung α^2 dar, da jeweils zwei Photonen an der Wechselwirkung beteiligt sind. Bei den ersten beiden Diagrammen (a) *ladder*-Diagramm und (b) *crossed*-

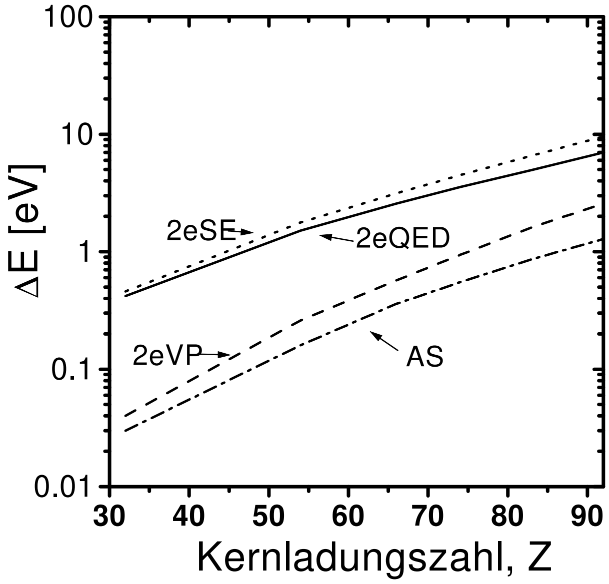


Abbildung 2.13. *Zwei-Elektronen Selbstenergie (2eSE), Zwei-Elektronen Vakuumpolarisation (2eVP) und der Araki-Sucher Beitrag (AS) zur Zwei-Elektronen QED für den Grundzustand in He-artigen Ionen [PeS96].*

photon-Diagramm handelt es sich um die sogenannten *nicht-radiativen*-Beiträge, wobei (a) im Rahmen der MBPT-Methode auch Beiträge enthält, die nicht von der QED verursacht werden. Der QED-Anteil an Diagramm (a) und das vollständige Diagramm (b) werden auch als *Araki-Sucher*-Effekt bezeichnet [Ara57, Suc58], die als erste die führenden Terme dieser Korrekturen berechneten. Die Diagramme (c,d) repäsentieren den Selbstenergie-Anteil und (e,f) den Vakuumpolarisations-Beitrag zur 2eQED und werden auch als *abgeschirmte Lamb-Verschiebung* bezeichnet. Alle aufgeführten Diagramme wurden erstmals 1996 von Persson und Mitarbeitern in allen Ordnungen in $Z\alpha$ für den $1s^2$-Grundzustand in schweren He-artigen Ionen berechnet [PeS96]. Unabhängige Rechnungen wurden von der Gruppe aus St. Petersburg vorgelegt [YeS96] und beide Vorhersagen befinden sich in hervorragender Übereinstimmung. Die individuellen Beiträge zur 2eQED sind zusammenfassend in Abbildung 2.13 dargestellt.

Die neuen theoretischen Resultate stellen einen einzigartigen Fortschritt für unser Verständnis atomarer Viel-Elektronenprobleme dar und führen zu der bemerkenswerten Situation, daß die Elektron-Elektron-Wechselwirkung in schweren He-artigen Ionen präziser verstanden zu sein scheint als die Ein-Elektronen-Effekte. Dies trifft zumindest auf den $1s^2$-Grundzustand zu, wie es anhand der Tabelle 2.3 näher erläutert ist, in der alle Ein- und Zwei-Elektronen-Beiträge zur Bindungsenergie für He-artiges Uran zusammengefaßt sind. Wie aus der Tabelle hervorgeht, bestimmen die Ein-Elektronen-Beiträge wesentlich die totale Bindungsenergie in He-artigem Uran, wobei die 2eQED-Korrekturen nur einen sehr geringen Beitrag liefern. Tatsächlich lassen sich die Ein-Elektronenbeiträge von den Zwei-Elektronenkorrekturen experimentell trennen, eine Methode, die weiter unten näher erörtert wird, so daß der Grundzustand in He-artigen Ionen eine hervorragende Möglichkeit bietet, den Einfluß von QED-Effekten auf die Elektron-Elektron Wechselwirkung in starken Coulomb-Feldern zu untersuchen. Insbesondere muß hervorgehoben werden, daß, im Unterschied zu den Ein-Elektronenbeiträgen zur Bindungsenergie, die Kerneffekte praktisch keinen Einfluß auf die Elektron-Elektron-Wechselwirkung haben.

	$1s^2$	Unsicherheit
Dirac	-132279.96×2	
Kernausdehnung	198.82×2	±0.76
Reduzierte Masse	+0.3 ×2	
Nuclear Recoil	+0.21 ×2	±0.20
Kernpolarisation	−0.19 ×2	±0.20
SE	-88.60×2	
VP	+355.05×2	
QED höherer Ordnung	-0.3×2	±4
Summe aller Ein-Elektronen-Korrekturen	−263628.14	±4
1'te Ordnung	+2265.88	±0.01
2'te Ordnung	−12.09	
Araki-Sucher	−0.79	
2eSE	−9.78	
2eVP	+2.63	
3'te Ordnung	+0.06	
Summe aller Zwei-Elektronen Korrekturen	2245.91	±0.01
Bindungsenergie	−261382.61	±4.

Tabelle 2.3. *Alle Ein- und Zwei-Elektronen-Beiträge zur totalen Bindungsenergie in* $^{238}U^{90+}$*. Die Daten (in eV) wurden der Referenz [PeS97] entnommen (siehe hierzu auch [YeS96, BeP97]).*

2.2.2 Theoretische Vorhersagen für den Grundzustand

Für den Grundzustand in He-artigen Ionen ist der gegenwärtige Stand der Theorie in Tabelle 2.4 dargestellt, in der vergleichend alle gegenwärtig vorhandenen theoretischen Vorhersagen zusammengefaßt sind. Die Auswahl der Elemente orientiert sich hierbei an einem Experiment, das in Kapitel 8 erörtert wird. Für leichtes und mittleres Z befinden sich alle theoretischen Rechnungen in sehr guter Übereinstimmung. Für die schweren Ionen zeigt sich jedoch deutlich das Defizit der Unified-Methode [Dra88] gegenüber den anderen Ansätzen. Die *All-Order*-Methode [PlJ94] berechnet die relativistischen Beiträge in allen Ordnungen, wobei die QED-Rechnungen der Arbeit von Drake entnommen wurden. Bei der MCDF-Methode von Indelicato [Ind95] wird der QED-Anteil ebenso nur näherungsweise berechnet, während die Daten von Yerokhin [YeS96] und Persson [PeS96] die QED-Beiträge vollständig in zweiter Ordnung berücksichtigen. Die nur in den beiden letzten Fällen angegebenen Unsicherheiten basieren auf einer Abschätzung der QED-Beiträge in dritter Ordnung und berücksichtigen die Unsicherheit, die durch die endliche Kernausdehnung hervorgerufen wird.

Z	[YeS96]	[PeS96]	[PlJ94]	[Ind95a]	[Dra88]
32	562.02 (1)	560.2 (10)	562.1	562.1	562.1
54	1028.16(3)	1028.2(10)	1028.4	1028.2	1028.8
66	1336.58(4)	1336.59(10)	1337.2	1336.5	1338.2
74	1573.92(6)	1574.93(10)	1574.8	1573.6	1576.6
83	1881.50(7)	1882.54(10)		1880.8	1886.3
92	2245.92(9)	2246.0 (10)			2255.1

Tabelle 2.4: *Der theoretische Zwei-Elektronenbeitrag zum Ionisationspotential einiger He-artiger Ionen (in eV).*

2.2.3 Angeregte Zustände

Wie bereits dargelegt wurde, kommt es mit zunehmender Hauptquantenzahl zu einer drastischen Abnahme der QED-Effekte, und schon für $n>2$ lassen sich die Bindungsverhältnisse in H-artigen Ionen hervorragend durch die Dirac-Gleichung beschreiben. Im Vergleich hierzu ist die Situation für die He-artigen schweren Systeme wesentlich komplexer, und es liegen hier noch keine vollständigen Rechnungen für die angeregten Zustände vor. Daß die hierdurch bedingte Unsicherheit im Bereich einiger eV liegen kann, ist in Abbildung 2.14 dargestellt. Hier sind die verschiedenen theoretischen Vorhersagen für die Energiedifferenz zwischen dem $1s_{1/2}2p_{1/2}\ ^3P_0$ Niveau und dem $1s_{1/2}2s_{1/2}\ ^1S_0$ Zustand als Funktion von Z dargestellt. Wie aus der Darstellung hervorgeht, kommt es bei Uran nahezu zu einer Entartung zwischen den beiden Zuständen und die einzelnen Theorien unterscheiden sich nicht nur im Wert für deren Energiedifferenz, sondern sogar im Vorzeichen. Dies ist von größter Bedeutung für mögliche Experimente zur Paritätsverletzung in schweren, atomaren Systemen [ScS89], da die beiden Zustände den gleichen Bahndrehimpuls jedoch unterschiedliche Parität aufweisen. Solche Untersuchungen setzen jedoch wesentlich genauere theoretische Vorhersagen voraus. Außerdem ist trotz intensivster Diskussion die experimentelle Vorgehensweise unklar [GSI97].

2.3 Übergangsraten

Eine Beschreibung der atomaren Struktur von Wenig-Elektronensystemen wäre ohne eine Darstellung der Zerfallswahrscheinlichkeiten bzw. Übergangsraten äußert unvollständig. Letztendlich entscheiden sie darüber, in welcher Stärke Übergänge zwischen atomaren Niveaus auftreten und spektroskopisch beobachtbar sind. Es kommt hinzu, daß fast ausnahmslos alle Übergangsraten mit hohen Potenzen von Z skalieren. Somit ist es nicht verwunderlich, daß sich die Emissionscharakteristik leichter Ionen vollständig von der schwerer Systeme unterscheidet.

Im Rahmen der relativistischen Quantenmechanik ist die Wahrscheinlichkeit für

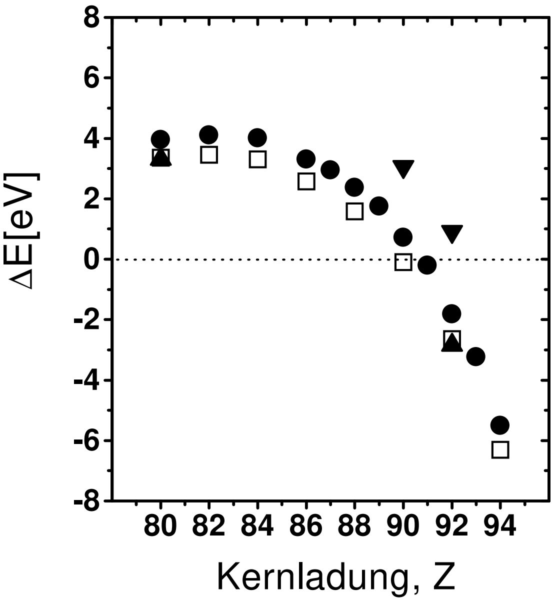


Abbildung 2.14. *Theoretische Vorhersagen für die Energiedifferenz zwischen dem $1s_{1/2}2p_{1/2}$ $^3P_0$ Niveau und dem $1s_{1/2}2s_{1/2}$ $^1S_0$ Zustand in schweren He-artigen Ionen als Funktion von Z (□ [PIJ94]; ● [Dra88]; ▲ [ChC94]; ▼ [ScS89]). Je nach Theorie kommt es im Bereich $Z = 90 - 92$ zu einer fast vollständigen Entartung zwischen beiden Zuständen.*

den Übergang eines Elektrons vom Anfangszustand $|a>$ in den Endzustand $|b>$ unter Emission eines Photons gegeben durch:

$$dA = \frac{e^2\omega}{2\pi\hbar c}| < b|\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\epsilon}^* e^{-i\mathbf{kr}}|a > |^2 d\Omega, \tag{2.13}$$

mit $\omega = (E_\mathrm{a} - E_\mathrm{b})/\hbar$ der Frequenz und $\mathbf{k}$ dem Impuls des emittierten Photons. Des weiteren stellt $\boldsymbol{\epsilon}^*$ den Polarisationsvektor und $d\Omega$ das Raumwinkelsegment dar. Im nicht-relativistischen Grenzfall und unter Berücksichtigung der Dipolnäherung $e^{-i\mathbf{kr}} \approx 1$ folgt für die totale Emissionsrate

$$A = \frac{4}{3}\frac{e^2\omega^3}{c^2}| < b|\mathbf{r}|a > |^2. \tag{2.14}$$

Insbesondere für leichte Ionen, aber auch für Übergänge in den schwersten Systemen, ist der letzte Ausdruck eine hervorragende Näherung, solange das Kriterium $kr \ll 1$ erfüllt ist. Betrachtet man jedoch die Grundzustandsübergänge in den schwersten Ein- und Zwei-Elektronensystemen, so ist dies sicherlich nicht mehr der Fall. Hier ist die Wellenlänge $\lambda = 2\pi/k$ vergleichbar mit dem mittleren Orbitalradius r und erfordert die Verwendung von Gleichung 2.13 unter Berücksichtigung der höheren Potenzen in der Multipolentwicklung

$$e^{-i\mathbf{kr}} \approx 1 - i\mathbf{kr} + \mathbf{k}^2\mathbf{r}^2 + ... \quad . \tag{2.15}$$

2.3.1 Übergangsraten in H-artigen Ionen

Tatsächlich können unter bestimmten Voraussetzungen die höheren Ordnungsterme dominant zum Zerfall eines Niveaus beitragen, insbesondere dann, wenn der Dipol-

	n_i	n_f	Γ $[1/s]$	ΔE $[eV]$
M1	$2s_{1/2}$	$1s_{1/2}$	$1.95 \cdot 10^{14}$	97686.4
E1	$2s_{1/2}$	$2p_{1/2}$	$\sim 8 \cdot 10^{9}$	76.0
E1	$2p_{1/2}$	$1s_{1/2}$	$4.73 \cdot 10^{16}$	97610.1
E1	$2p_{3/2}$	$1s_{1/2}$	$3.92 \cdot 10^{16}$	102173.3
M2	$2p_{3/2}$	$1s_{1/2}$	$2.80 \cdot 10^{14}$	102173.3
E1	$2p_{3/2}$	$2s_{1/2}$	$8.75 \cdot 10^{13}$	4487.04
M1	$3s_{1/2}$	$1s_{1/2}$	$8.12 \cdot 10^{13}$	117171.0
E1	$3s_{1/2}$	$2p_{1/2}$	$2.11 \cdot 10^{14}$	19561.2
E1	$3s_{1/2}$	$2p_{3/2}$	$8.33 \cdot 10^{14}$	14997.8
E1	$3p_{1/2}$	$1s_{1/2}$	$1.05 \cdot 10^{16}$	117149.0
E1	$3p_{1/2}$	$2s_{1/2}$	$2.33 \cdot 10^{15}$	19462.7
E1	$3p_{3/2}$	$1s_{1/2}$	$1.33 \cdot 10^{16}$	118510.0
E1	$3p_{3/2}$	$2s_{1/2}$	$1.20 \cdot 10^{15}$	20913.7
E2	$3d_{3/2}$	$1s_{1/2}$	$3.00 \cdot 10^{14}$	118506.8
E2	$3d_{3/2}$	$2s_{1/2}$	$5.54 \cdot 10^{13}$	118506.8
E1	$3d_{3/2}$	$2p_{1/2}$	$4.64 \cdot 10^{15}$	20896.5
E1	$3d_{3/2}$	$2p_{3/2}$	$7.48 \cdot 10^{14}$	16333.5
E2	$3d_{5/2}$	$1s_{1/2}$	$2.30 \cdot 10^{14}$	118854.9
E2	$3d_{5/2}$	$2s_{1/2}$	$5.78 \cdot 10^{13}$	118854.9
E1	$3d_{5/2}$	$2p_{1/2}$	$4.54 \cdot 10^{15}$	21244.7
E1	$3d_{5/2}$	$2p_{3/2}$	$7.48 \cdot 10^{14}$	16681.6

Tabelle 2.5: *Die individuellen Zerfallsmoden und Übergangsraten Γ für die Niveaus der L- und M-Schale in U^{91+}. Die Übergangsraten wurden aus Gleichung 2.13 gewonnen. Zusätzlich sind die Übergangsenergien angegeben, wobei die totalen Bindungsenergien für den $2p_{3/2}$ Zustand und für die angeregten Niveaus der M-Schale der Ref. [Ind98] entnommen wurden. Hierbei sind die wesentlichsten QED-Korrekturen mitberücksichtigt.*

zerfall verboten ist. Das bekannteste Beispiel ist der Zerfall des $2s_{1/2}$-Niveaus in H-artigen Systemen. Während dieser Zustand im Wasserstoff metastabil ist und nur über die Emission zweier Photonen in den Grundzustand zerfallen kann (**2E1**-Zerfall), kommt es in den schwersten Ionen zu einem sehr schnellen, nahezu instantanen magnetischen Dipolübergang. Es sei hier angemerkt, daß die Übergangsrate für den **2E1**-Zerfall mit Z^6 skaliert, während die **M1**-Rate eine Z^{10} Abhängigkeit aufweist (siehe z.B. Ref. [MaM78]). Des weiteren spielt in den schweren Ionen auch der elektrische Quadrupol-Zerfall (**E2**) eine nicht mehr länger zu vernachlässigende Rolle.

Aufgrund der Bedeutung der Übergangsraten für die Interpretation der Röntgenspektren, die in den späteren Kapiteln vorgestellt werden, sind in Tabelle 2.5 die Zerfallsmoden und Übergangsraten für die L- und M-Unterschalenzustände im Uran

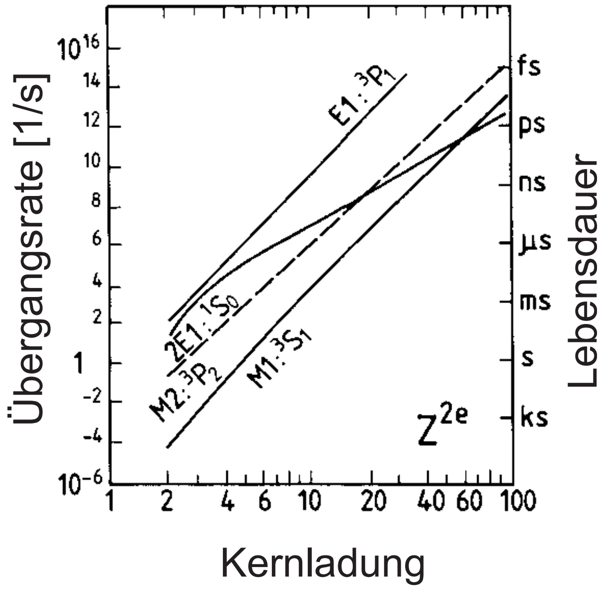


Abbildung 2.15. *Die absoluten Zerfallsraten bzw. Lebensdauern der individuellen L→K Übergänge in He-artigen Ionen als Funktion der Kernladung.*

aufgelistet. Die Übergangsraten wurden aus Gleichung 2.13 gewonnen [Gei98].

2.3.2 Übergangsraten in He-artigen Ionen

Für He-artige Ionen kommt es mit zunehmender Kernladung sowohl zu einer wesentlichen Änderung der Niveaustruktur (vgl. Abbildung 2.10) als auch zu einer drastischen Erhöhung der Zerfallsraten. Für sehr leichte Ionen ist der **E1**-Zerfall des $1s2p\ ^1P_1$-Zustands der einzige vollständig erlaubte Ein-Photonen $L \rightarrow K$ Übergang, während alle Triplett-P-Zustände über Dipolzerfälle das $^3S_1$-Niveau bevölkern. Mit zunehmendem Z kommt es hingegen zu einer außerordentlich starken Zunahme der Raten aller *verbotenen* Übergänge, die folgendes Skalierungsverhalten aufweisen [MaM78, MoS96]: $^3P_1$: Z^{10} (**E1**), $^3S_1$: Z^{10} (**M1**), $^3P_2$: Z^8 (**M2**), $^1S_0$: Z^6 (**2E1**), $^3P_0$: Z^8 (**E1M1**). Die absoluten Zerfallsraten bzw. Lebensdauern der individuellen $L \rightarrow K$ Übergänge in He-artigen Ionen sind in Abbildung 2.15 dargestellt. Folglich zerfallen in U^{90+} alle angeregten Zustände dominant in den Grundzustand über direkte Übergänge. Jedoch spielen selbst hier die Δn=0 Zerfälle des $^3P_2$ und des $^3P_0$ in den $^3S_1$ bzw. $^3S_0$ Zustand eine wichtige Rolle, die für spektroskopische Untersuchungen von besonderem Interesse sind. So manifestieren sich bei dem Zerfall des $^3P_2$-Zustands zwei gegenläufige relativistische Tendenzen. Während im niederen Z-Bereich bei zunehmendem Z der **M2**-Zerfall an Bedeutung gewinnt, kommt es im Bereich $Z > 38$ zu einer Umkehrung der Tendenz. Hier kommt es aufgrund der stark zunehmenden Energieaufspaltung $(\Delta E(^3S_1 -^3 P_2))$ zu einer erneuten Zunahme der relativen Bedeutung des $\Delta n = 0\ 2^3P_2 \rightarrow 2^3S_1$ Zerfalls. In der Abbildung 2.16 ist der Beitrag des Δn=0 Übergangs zur totalen Zerfallswahrscheinlichkeit des 2^3P_2-Niveaus aufgetragen. Im Falle von U^{90+} zerfällt dieser Zustand somit zu etwa 30% über das 2^3S_1-Niveau. Für U^{90+} sind in Tabelle 2.6 die absoluten Zerfallsraten und Energien

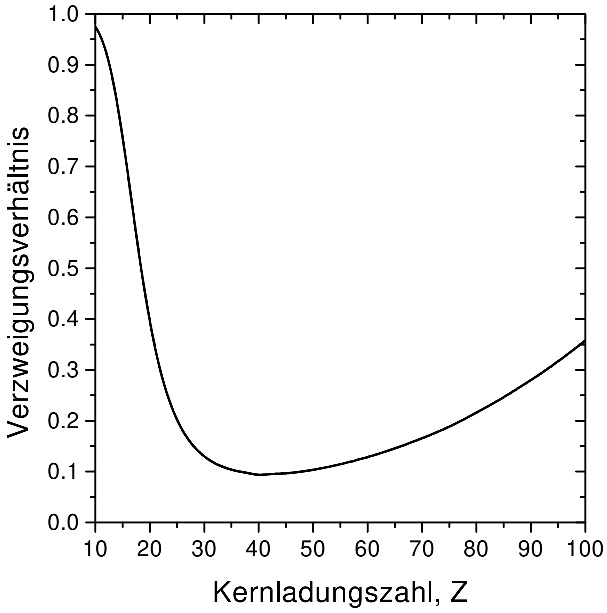


Abbildung 2.16. Verzweigungsverhältnis für den radiativen Zerfall des $1s2p\ ^3P_2$ Niveaus in den $1s2p\,^3S_1$ Zustand in He-artigen Ionen als Funktion der Kernladung [JoP95].

für beide $\Delta n = 0$ Übergänge gegeben.

n_i	n_f		ΔE [eV]	Γ [1/s]
$1s2p\ ^3P_2$	$1s2p\ ^3S_1$	E1	4510.0	$8.6 \cdot 10^{13}$
	$1s^2\ ^1S_0$	M2	100535.8	$2.1 \cdot 10^{14}$
$1s2p\ P_0$	$1s2p\ ^3S_1$	E1	252.77	$1.2 \cdot 10^{10}$
	$1s^2\ ^1S_0$	E1M1	96282.5	$5.6 \cdot 10^{9}$

Tabelle 2.6: *Absolute Übergangsraten [JoP95] und Energien [Dra88] für die Zerfallsmoden des $1s2p\ ^3P_2$ und des $1s2p\ ^3P_0$Zustands in U^{90+}.*

Kapitel 3

Zur Stoßdynamik hochgeladener Schwerionen

Die Wechselwirkungsprozesse hochgeladener Ionen mit Materie sind nicht nur von entscheidender Bedeutung für alle Experimente, die sich mit der atomaren Struktur schwerer Wenig-Elektronensysteme befassen. Vielmehr setzt die Forschung an Beschleunigern und generell der Betrieb aller Anlagen, die der Erzeugung hochgeladener Ionen dienen, ein tiefes Verständnis der atomaren Reaktionen voraus. Zentrale Fragestellungen sind hierbei:

- Erzeugung konkreter Ladungszustände Q,
- Umladungsraten für Ionen im Ladungszustand Q,
- selektive Bevölkerung atomarer Niveaus.

Tatsächlich wurden seit den vierziger Jahren die atomaren Stoßprozesse für leichte und mittelschwere Ionen intensiv untersucht (siehe z.B. [Bet72, MaM75]), während der Bereich der Stoßphysik mit extrem hochgeladenen Ionen erst seit ca. 15 Jahren experimentell zugänglich ist. Diese Systeme (z.B. U^{92+}) stellen einen extrem exotischen Materiezustand dar, und sowohl ihre Dynamik als auch ihre Struktur sind wesentlich durch die Physik starker Felder ($Z\alpha \rightarrow 1$) geprägt. In diesem Sinne sind die Struktur und die Dynamik schwerer, hochgeladener Ionen engstens miteinander verkoppelt.

Im folgenden wird auf die wichtigsten atomaren Wechselwirkungsprozesse eingegangen, wobei besonderes Gewicht auf die nicht-resonanten Einfangsreaktionen gelegt wird, die sowohl die Röntgenproduktionsquerschnitte als auch die Emissionscharakteristik bestimmen und somit von besonderer Bedeutung für spektroskopische Untersuchungen sind. In Bezug auf die resonanten Umladungsprozesse *Resonanter Einfang durch simultane Anregung* (*Resonant Transfer and Excitation*, RTE) und *Dielektronische Rekombination* (*Dielectronic Recombination*, DR), die für Projektile mit einem oder mehreren Elektronen von großer Bedeutung sein können, sei auf die Literatur verwiesen [MoS96]. Eine schematische Darstellung aller Elektronen-Einfangsprozesse ist in Abbildung 3.1 gegeben.

3.1 Strahlungsprozesse (RR und REC)

In Stößen hochgeladener Ionen mit freien Elektronen kann es zum Einfang eines Elektrons in einen gebunden Projektilzustand unter Ausstrahlung eines Photons mit der Energie

$$\hbar\omega = E_{\mathrm{KIN}} + E_{\mathrm{f}} \tag{3.1}$$

kommen, wobei E_{KIN} die kinetische Energie des freien Elektrons vor dem Stoß ist und E_{f} die Bindungsenergie des gebundenen Elektrons darstellt. Dieser Prozeß kann somit auch als die Zeitumkehrung des elementaren *Photoelektrischen Effektes* angesehen werden [Sto30]. Als Folge der erforderlichen Impuls- und Energieerhaltung stellt er den einzig möglichen Einfangsprozeß für freie Elektronen in nackte Ionen dar und wird auch als *Radiative Rekombination*(RR) bezeichnet. Für schnelle Stöße zwischen freien Elektronen und nackten Projektilen mit der Kernladung Z_{P} ist dessen Skalierungsverhalten gegeben durch (siehe z.B. [StK95]):

$$\sigma_{\mathrm{RR}} \propto \frac{1}{n^3} \cdot \frac{Z_{\mathrm{P}}^5}{E_{\mathrm{KIN}}^{3/2}}. \tag{3.2}$$

Analog hierzu kann es auch in Stößen mit Targetatomen zu einem radiativen Einfang kommen (REC,*Radiative Electron Capture*), der im Rahmen der Impulsnäherung als RR-Prozeß sehr präzise beschrieben werden kann. Voraussetzung ist jedoch, daß die kinetische Energie des Elektrons vor dem Stoß wesentlich kleiner ist als dessen Bindungsenergie im Targetatom E_{i}. Somit handelt es sich um einen Einfangsprozeß quasifreier Elektronen. Aufgrund der erforderlichen Energieerhaltung ist die Energie der REC-Photonen gegeben durch

$$\hbar\omega = E_{\mathrm{KIN}} + E_{\mathrm{f}} - |E_{\mathrm{i}}|. \tag{3.3}$$

Seit den Anfängen der Quantenmechanik ist die radiative Rekombination ein zentraler Gegenstand theoretischer Untersuchung. Zum einen liegt dies an seiner engen Verwandtschaft mit dem Prozeß der Photoionisation (vgl. hierzu Abbildung 3.2). Tatsächlich lassen sich genaue Informationen zur Photoionisation aus Untersuchungen des RR- bzw. REC-Prozesses gewinnen [EiI95, StM97]. Zum anderen besteht aber auch eine enge Beziehung zwischen dem radiativen Einfang und der Photonenemission, wie sie bei einem Elektronenübergang zwischen zwei gebundenen Zuständen auftritt. Die im Kapitel 2 ausgeführten Betrachtungen der Zerfallswahrscheinlichkeiten können von daher auch vollständig auf den Rekombinationsprozeß übertragen werden, wenn zusätzlich berücksichtigt wird, daß der elektronische Anfangszustand bei RR ein Kontinuumszustand ist. Schließlich muß die große Bedeutung des RR(REC)-Prozesses

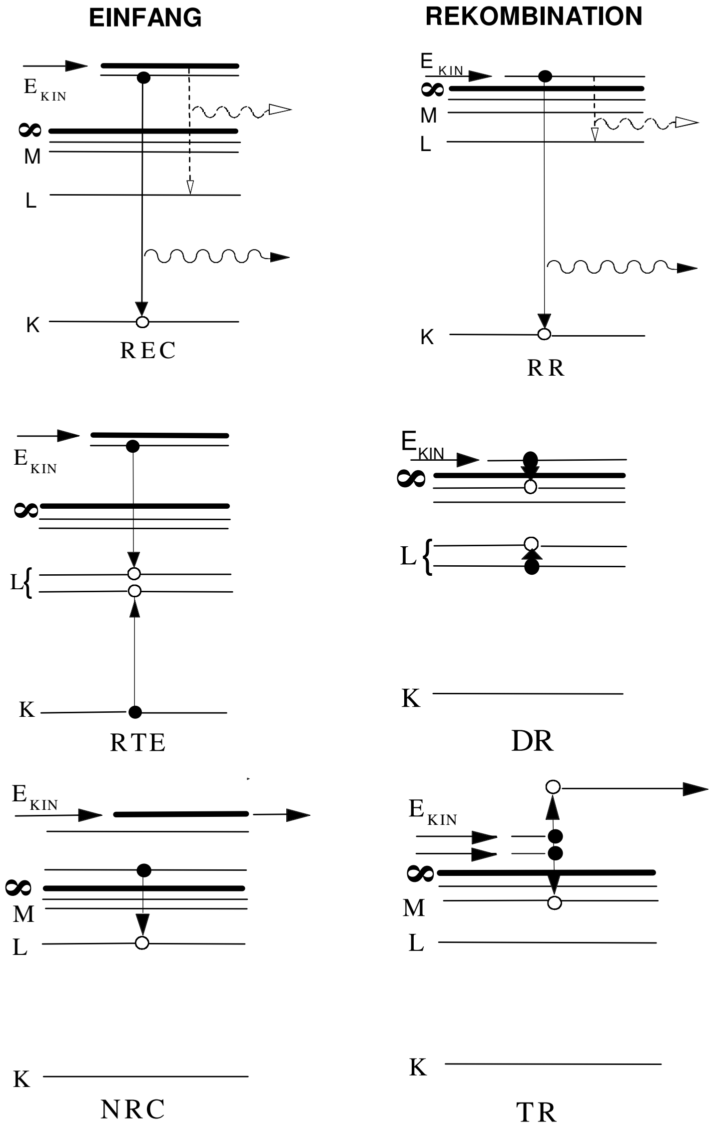


Abbildung 3.1: *Schematische Darstellung der Einfangsprozesse für nackte und H-artige Ionen in Stößen mit Targetatomen (linke Seite) und freien Elektronen (rechte Seite). Mit REC (Radiative Electron Capture) und RR (Radiative Recombination) werden die beiden strahlenden Einfangsprozesse bezeichnet, während RTE (Resonant Transfer and Excitation) und DR (Dielectronic Recombination) jeweils resonante Umladungsgprozesse darstellen, die Projektile mit mindestens einem Elektron im Eingangskanal voraussetzen. Bei dem NRC (Non-Radiative Electron Capture) und der TR (Three Body Recombination) handelt es sich jeweils um strahlungslose Prozesse, die ein drittes Teilchen (Targetkern oder ein zweites Elektron) zur Erfüllung der Impuls- und Energiebilanz voraussetzen.*

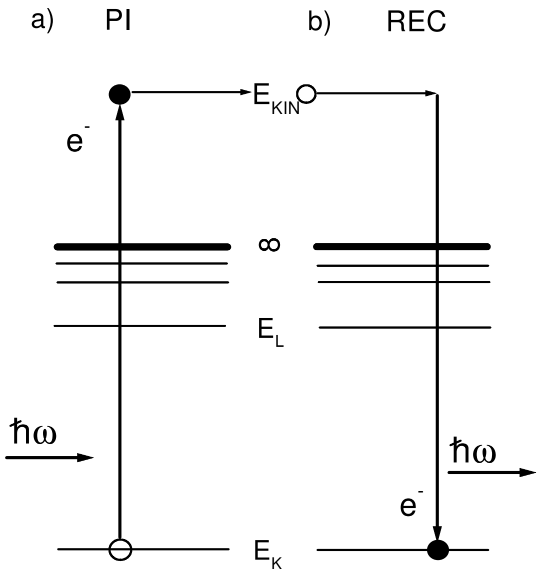


Abbildung 3.2. Schematische Darstellung der Beziehung zwischen a) Photoionisation (PI) und b) dem zeitumgekehrten Prozeß, dem radiativen Elektroneneinfang (REC).

für die relativistische Stoßphysik und für die Spektroskopie hervorgehoben werden, in denen er nicht nur ein wesentlicher Umladungskanal ist, sondern auch einen bedeutenden Röntgen-Produktionsmechanismus darstellt. Daher werden im folgenden nicht nur die totalen REC-Querschnitte diskutiert, sondern es wird auch die Emissionscharakteristik der REC-Photonen näher erläutert.

3.1.1 Dipolnäherung

Eine erste Abschätzung für die RR-Querschnitte nackter Ionen läßt sich aus der Dipolnäherung unter der Annahme $\hbar\omega \ll mc^2$ und $\alpha Z \ll 1$ gewinnen. In dieser Näherung folgt nach Stobbe [Sto30] für den Einfangsquerschnitt eines Elektrons in einen beliebigen (n, ℓ) Zustand eines nackten Ions:

$$\sigma_{nl}^{\text{Stobbe}} = \frac{\pi^2}{3}\alpha^3 a_0^2 \left(\frac{\nu^3}{1+\nu^2}\right)^2 \left((l+1)\,[C_{nl}^{l+1}(\nu)]^2 + l\,[C_{nl}^{l-1}]^2\right). \tag{3.4}$$

Hierbei ist $\nu = \alpha Z/n\beta$ der Sommerfeld-Parameter, a_0 der Bohr'sche Radius und β die Stoßgeschwindigkeit in Einheiten der Lichtgeschwindigkeit. Die Größen $C_{nl}^{l\pm1}$ stellen die Dipolmatrixelemente für den Übergang eines Elektrons aus einem Kontinuumszustand mit dem Drehimpuls $\ell \pm 1$ und der Energie E_{KIN} in einen gebundenen Zustand (n, ℓ) dar.

Die Gleichung (3.4) wurde eingehend von verschiedenen Autoren behandelt (siehe z.B [Sto30, SoR89, Bur64, McH91]). Im Bereich niedriger Stoßgeschwindigkeiten ($\beta \to 0$) skalieren die Querschnitte $\sigma_{nl}^{\text{Stobbe}}$ näherungsweise mit $1/n$, während sie im Hochenergiebereich ($\nu \ll 1$) einer $1/n^3$-Abhängigkeit folgen. Für die Berechnung totaler Querschnitte im Bereich $\beta \to 0$ hat das zur Folge, daß über alle partiellen

Querschnitte $\sigma_{nl}^{\mathrm{Stobbe}}$ bis hin zu sehr großen Hauptquantenzahlen summiert werden muß. So liegt für nackte Uranionen diese Grenze bei $n \approx 400$. Da für hochliegende Zustände die direkte Auswertung der Gleichung 3.4 sehr problematisch und aufwendig ist, werden zur Behandlung von RR-Querschnitten im Bereich $\beta \to 0$ fast immer Niederenergie-Näherungen eingeführt (siehe z.B. [BeL89, PaS92]), bzw. es wird auf die *semi-klassische* Behandlung des RR-Prozesses durch Kramers [Kra23] zurückgegriffen [KoK92]. Tatsächlich sind diese Näherungen aber nicht notwendig, denn die obige Gleichung 3.4 läßt sich exakt und sehr elegant unter Verwendung der Rekursionsbeziehung zwischen nicht-relativistischen Coulombintegralen auswerten. Diese Technik wurde bereits in den frühen fünfziger Jahren entwickelt [InH51, AlW55] und erlaubt eine sehr schnelle und stabile Berechnung der Rekombinationsquerschnitte, die auch bereits von Burgess zur Behandlung astrophysikalischer Problemstellungen eingesetzt wurde [Bur64].

Um aus dem totalen RR-Querschnitt den entsprechenden REC-Querschnitt zu gewinnen, ist es nur erforderlich, σ^{Stobbe} mit der Anzahl Z_{T} an quasifreien Elektronen zu multiplizieren [KlJ74]. Z_{T} stellt zugleich auch die Kernladung des Targetatoms dar. Falls nur der Einfang in den $1s$-Grundzustand betrachtet wird, vereinfacht sich (3.4) zu dem bekannten Ausdruck [BeS57]

$$\sigma_{1s}^{\mathrm{Stobbe}} = 9.165 \times \left(\frac{\nu^3}{1+\nu^2}\right)^2 \frac{e^{-4\nu \arctan(1/\nu)}}{1-e^{-2\pi\nu}} \times 10^{-21}\mathrm{cm}^2. \tag{3.5}$$

Es ist sehr interessant, festzustellen, daß die Projektilladung Z nicht direkt in die obigen Gleichungen eingeht, sondern nur in der Kombination mit der Stoßgeschwindigkeit v durch den Sommerfeldparameter Z/v vorkommt. Somit stellen die Gleichungen von Stobbe auch eine allgemeine Skalierungsvorschrift dar [StK95], die von großer praktischer Bedeutung ist und weiter unten näher erörtert wird. Schließlich sei noch auf die Winkelverteilung für den Einfang in den $1s$-Grundzustand hingewiesen, die nach Stobbe's nicht-relativistischer Theorie gegeben ist durch:

$$\frac{d\sigma_{1s}^{\mathrm{Stobbe}}}{d\Omega} = \sigma_{1s}^{\mathrm{Stobbe}} \frac{3}{8\pi} \sin^2\theta. \tag{3.6}$$

Hier beschreibt θ den Winkel zwischen dem einlaufenden Elektron und dem ausgestrahlten Photon. Die Stobbe-Näherung ist jedoch nur anwendbar, solange $v \ll c$ gilt und solange relativ kleine Photonenenergien auftreten. Falls die Wellenlänge vergleichbar mit dem K-Schalenradius des Projektils ist, ist es nicht mehr ausreichend, nur den Dipolterm zu betrachten. So müssen hier die höheren Terme in der Multipolentwicklung ebenso mit berücksichtigt werden (vgl. hierzu die Diskussion der Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen zwei gebundenen Zuständen).

3.1.2 Relativistische Behandlung

Zu einer exakten relativistischen Behandlung des RR- und REC-Prozesses sind folgende Schritte notwendig:

- eine relativistisch korrekte Berechnung der winkeldifferentiellen Querschnitte für die Photoionisation,
- die Anwendung des Prinzips des detaillierten Gleichgewichts, um aus den Photoionisationsquerschnitten die Rekombinationsquerschnitte herzuleiten,
- im Falle des REC müssen die Querschnitte zusätzlich mit der Impulsverteilung der Targetelektronen gefaltet werden,
- die Transformation der Ergebnisse in das Laborsystem.

Diese einzelnen Schritte, die zur exakten Beschreibung des REC-Prozesses notwendig sind, wurden im Detail von Eichler diskutiert [IcS94, Eil95, IcS96]. Hier seien nur kurz die einzelnen Punkte dargestellt.

Unter Verwendung exakter Wellenfunktionen für die gebundenen Zustände und die Kontinuumszustände werden zuerst die Photoionisationsquerschnitte $\sigma_{\mathrm{ph}}(\omega', \theta')$ für das Projektilsystem im Rahmen der Dirac-Theorie berechnet (die entsprechenden Größen sind mit einem Apostroph gekennzeichnet). Das hierbei auftretende Matrixelement ist äquivalent zu dem Matrixelement für Übergänge zwischen zwei gebundenen Zuständen mit der Ausnahme, daß der Endzustand ein Zustand im Kontinuum ist und die Kontinuumswellenfunktionen durch eine Partialwellenentwicklung beschrieben werden. Zudem werden alle höheren Multipolordnungen bei der Querschnittsberechnung mitberücksichtigt. Schließlich folgt aus dem detaillierten Gleichgewichte für den RR-Querschnitt [EiM95]

$$\frac{d^2\sigma_{\mathrm{RR}}(E', \theta')}{dE'\, d\Omega'_{\mathrm{ph}}} = (2j_{\mathrm{b}} + 1) \left(\frac{\hbar\omega'}{m_{\mathrm{e}}c^2}\right)^2 \frac{1}{\beta^2\gamma^2} \frac{d^2\sigma_{\mathrm{ph}}(E', \theta')}{dE'\, d\Omega'_{\mathrm{el}}}, \tag{3.7}$$

mit dem Lorentz-Faktor γ, der gegeben ist durch:

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}. \tag{3.8}$$

Der Faktor $(2j_{\mathrm{b}} + 1)$ in Gleichung 3.7 stellt das statistische Gewicht des gebundenen Zustands mit der Drehimpulsquantenzahl j_{b} dar.

Aus den exakten Querschnitten für die radiative Rekombination ergeben sich die REC-Querschnitte aus der Impulsnäherung durch Faltung von σ_{RR} mit der Impulsverteilung der Targetelektronen $\rho(\mathbf{q})$. Hierbei ist $\mathbf{q}$ der Impuls des Targetelektrons in Bezug auf den Targetkern. Seien E'_{i} und E'_{f} die totalen Bindungsenergien des elektronischen Anfangs- und Endzustandes (die Ruhemasse ist in den Energien mit enthalten), so folgt für den REC-Querschnitt

$$\frac{d^2\sigma_{\mathrm{REC}}(\omega', \theta')}{d\omega'\, d\Omega'} = \int d^3q\, \frac{d\sigma_{\mathrm{RR}}(\mathbf{q}')}{d\Omega'}\, \rho(\mathbf{q})\, \delta(\hbar\omega' - \hbar\omega'_0). \tag{3.9}$$

Die Deltafunktion gewährleistet die Energieerhaltung und beinhaltet die Resonanzenergie $\hbar\omega'_0$ mit

$$\hbar\omega_0' = E_{\rm KIN} + E_{\rm f}' - \gamma|E_{\rm i}| - \gamma v q_{\rm z}. \tag{3.10}$$

Üblicherweise werden bei einer solchen Faltung nur die z-Komponenten der Impulsverteilung berücksichtigt. Hingegen werden in den Arbeiten von Eichler und Ichihara [IcS94, EiI95, IcS96] relativistisch vollständige Faltungen durchgeführt. Hierzu wird die Impulsdichte $\rho(\mathbf{q})$ mit Hilfe von Roothaan-Hartree-Fock Wellenfunktionen näherungsweise berechnet [ClR74].

Als letzter Schritt muß noch die Transformation aller Größen in das Laborsystem erfolgen:

(a) Transformation der Photonenfrequenz bzw. Photonenenergie:

$$\omega' = \omega \cdot \gamma \cdot (1 - \beta\cos\theta), \tag{3.11}$$

(b) Transformation des Winkels

$$\cos\theta' = \frac{\cos\theta - \beta}{1 - \beta\cos\theta}, \tag{3.12}$$

(c) Transformation des Raumwinkels

$$\frac{d\Omega'}{d\Omega} = \gamma^2(1 - \beta\cos\theta)^2. \tag{3.13}$$

Diese Transformationen, angewandt auf Gleichung 3.9, ergeben den doppelt-differentiellen Wirkungsquerschnitt, der die REC-Photonenspektren im Laborsystem beschreibt. Häufig sind die differentiellen Querschnitte als Funktion des Beobachtungswinkels von besonderem Interesse, die sich aus Gleichung 3.9 durch Integration über die Photonenfrequenz ω' und durch Multiplikation mit dem Verhältnis der Raumwinkelelemente (Gleichung 3.13) ergeben, also:

$$\frac{d\sigma_{\rm REC}(\theta)}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{\rm REC}(\theta')}{d\Omega'}\,\frac{d\Omega'}{d\Omega}. \tag{3.14}$$

3.1.3 Vergleich der Dipolnäherung mit der exakten Theorie

Für den Fall des Einfangs in s-Zustände wurde bereits von Spindler darauf hingewiesen [SpB79], daß die einfache Winkelverteilung der nicht-relativistischen Dipolnäherung (Gleichung 3.6) selbst unter gemäßigt relativistischen Stoßbedingungen gültig ist ($\beta \lesssim 0.6$). So konnte Spindler zeigen, daß zwar mit zunehmender Geschwindigkeit die REC-Winkelverteilung im Emittersystem immer stärker zu Vorwärtswinkeln verschoben wird. Ein Beobachter im Laborsystem, in dem sich die Elektronen in Ruhe befinden, sieht jedoch die Photonenemission unter dem Beobachtungswinkel

$$\theta = \theta' - 180^\circ. \tag{3.15}$$

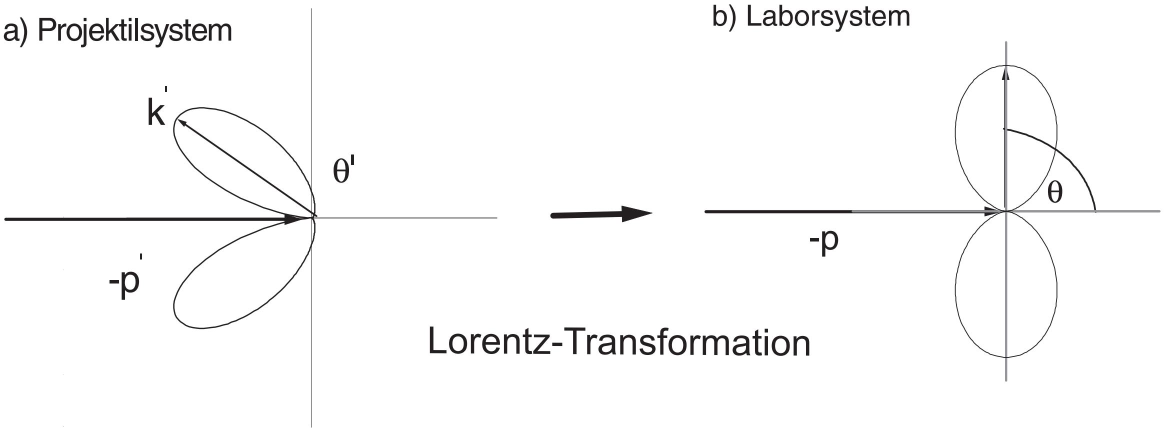


Abbildung 3.3: *a) Als Folge der Retardierung erscheint das Maximum der K-REC Winkelverteilung im Projektilsystem zu Rückwärtswinkeln verschoben. b) Durch die Lorentztransformation in das Laborsystem wird die sin*$^2\theta$*-Verteilung der nicht-relativistischen Dipolnäherung wieder hergestellt.*

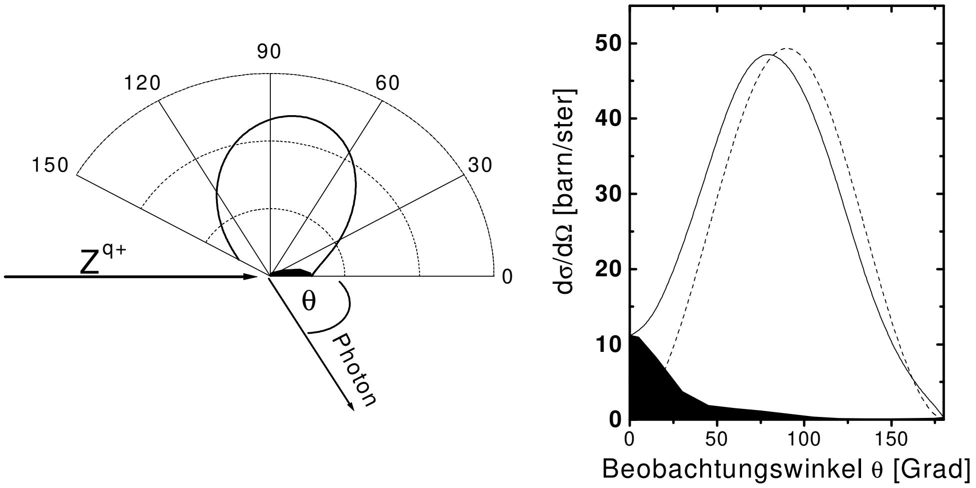


Abbildung 3.4: *Differentielle K-REC Wirkungsquerschnitte für das Stoßsystem* $\mathrm{U}^{92+} \rightarrow \mathrm{N}$*, 295 MeV/u. Gestrichelte Linie: Dipolnäherung; durchgezogene Linie: exakte Rechnung. Die relativistisch korrekte Winkelverteilung ist zudem in einer Polardarstellung wiedergegeben.*

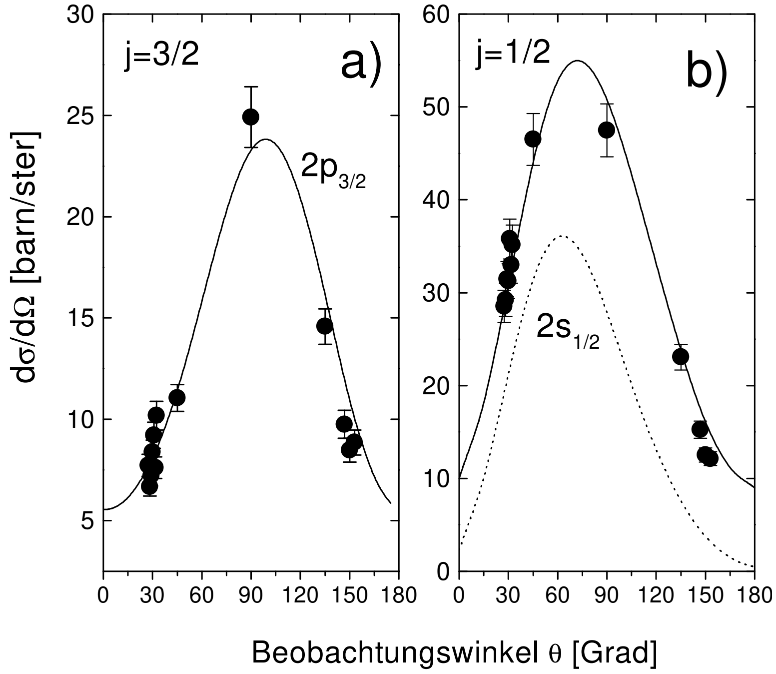


Abbildung 3.5: *Differentielle L-REC Wirkungsquerschnitte für das Stoßsystem* $\mathrm{U}^{90+} \to \mathrm{C}$*, 89 MeV/u [StG94]. (a) Winkelverteilung für Einfang in das* $2p_{3/2}$ *Niveau, (b) Winkelverteilung für Einfang in die* $j = 1/2$ *(*$2s_{1/2}$*,*$2p_{1/2}$*) Zustände. Die durchgezogenen Linien geben die entsprechenden Vorhersagen der exakten Rechnungen von Ichihara und Eichler wieder [StG94], während die gepunktete Linie sich auf das* $2s_{1/2}$*-Niveau bezieht.*

Somit erscheint für den Beobachter das Maximum der Winkelverteilung unter rückwärtigen Winkeln, wenn von einer relativistischen Raumwinkeltransformation abgesehen wird. Die relativistische Raumwinkeltransfomation wirkt dem Retardierungseffekt entgegen, so daß im Laborsystem die Winkelverteilung der Photonen wiederum einer $\sin^2\theta$-Verteilung folgt (vgl. hierzu Abbildung 3.3). Durch eine am Stoßsystem 197 MeV/u $\mathrm{Xe}^{54+} \to$ Be durchgeführte Messung der K-REC Winkelverteilung gelang es Anholt [AnA84], diesen interessanten Effekt experimentell zu bestätigen. Die vollständig relativistischen Rechnungen von Ichihara zeigen [IcS94], daß für schwere relativistische Projektile die $\sin^2\theta$-Winkelverteilung nur näherungsweise gültig ist und insbesondere für die schwersten Ionen starke Abweichungen erwartet werden können.

In der Abbildung 3.4 sind die differentiellen K-REC-Wirkungsquerschnitte dargestellt, wie sie sich zum einen aus der nicht-relativistischen Dipolnäherung und zum anderen aus der exakten Theorie ergeben. Die Rechnungen wurden für das Stoßsystem 295 MeV/u $\mathrm{U}^{92+} \to$ N durchgeführt [IcS94, StK95]. Der Vergleich zeigt deutliche Abweichungen der exakten Theorie von der $\sin^2\theta$-Verteilungen der Dipolnäherung, wobei die Abweichung bei θ=0^o besonders auffallend ist. Eine genaue Betrachtung zeigt,

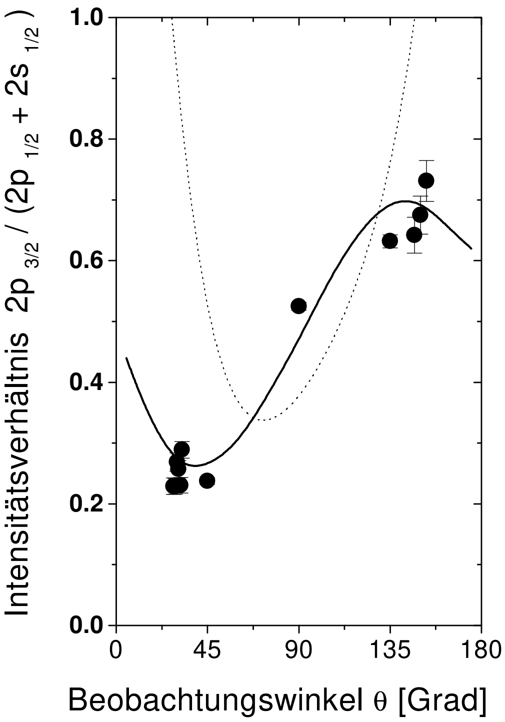


Abbildung 3.6. *Gemessenes Intensitätsverhältnis (●) für den Radiativen Einfang in die j-Unterzustände der L-Schale ($\mathrm{U}^{90+} \rightarrow \mathrm{C}$, 89 MeV/u) [StG94]. Durchgezogene Linie: relativistische Theorie; gestrichelte Linie: Dipolnäherung unter Berücksichtigung der Retardierung in der niedrigsten Ordnung [HiW87].*

daß hier nur Spinflip-Übergänge zur Photonenemission beitragen können, während aufgrund von Auswahlregeln die elektrische Multipolstrahlung keinen Beitrag liefert. Dieser sehr interessante Effekt ist in verschiedenen Veröffentlichungen eingehend diskutiert worden und wird gegenwärtig experimentell untersucht. Der Vollständigkeit halber sei hier angemerkt, daß für den Fall des radiativen Elektroneneinfangs in die L-Schale He-artiger Uranionen die Winkelverteilung für die j=$1/2$-Niveaus und für den $2p_{3/2}$-Zustand vermessen werden konnten und die Ergebnisse sich in hervorragender Übereinstimmung mit den exakten Rechnungen von Ichihara und Eichler befinden [StG94] (vgl. hierzu Abbildung 3.5). Der Unterschied zwischen korrekter relativistischer Beschreibung des REC-Prozesses und der nicht-relativistischen Dipolnäherung wird besonders deutlich, wenn das Intensitätsverhältnis für den Einfang in die j-Unterzustände als Funktion des Winkels dargestellt wird, wie es in Abbildung 3.6 der Fall ist. In der Abbildung wird die Dipolnäherung durch die gestrichelte Linie wiedergegeben, bei der auch Retardierungseffekte in niedrigster Ordnung berücksichtigt wurden. Die durchgezogene Linie stellt die Resultate der relativistischen Theorie dar. Offensichtlich versagt die Dipolnäherung vollständig in der Beschreibung des experimentellen Ergebnisses, während sich die relativistische Theorie in guter Übereinstimmung mit den Daten befindet.

Während somit die Winkelverteilung für REC in schwere Projektile stark von den Vorhersagen der Dipolnäherung abweicht, befinden sich die absoluten Querschnitte der Dipolnäherung in guter Übereinstimmung mit den exakten Rechnungen [StK95]. Für die schweren Projektile trifft das zumindest auf den Energiebereich bis etwa

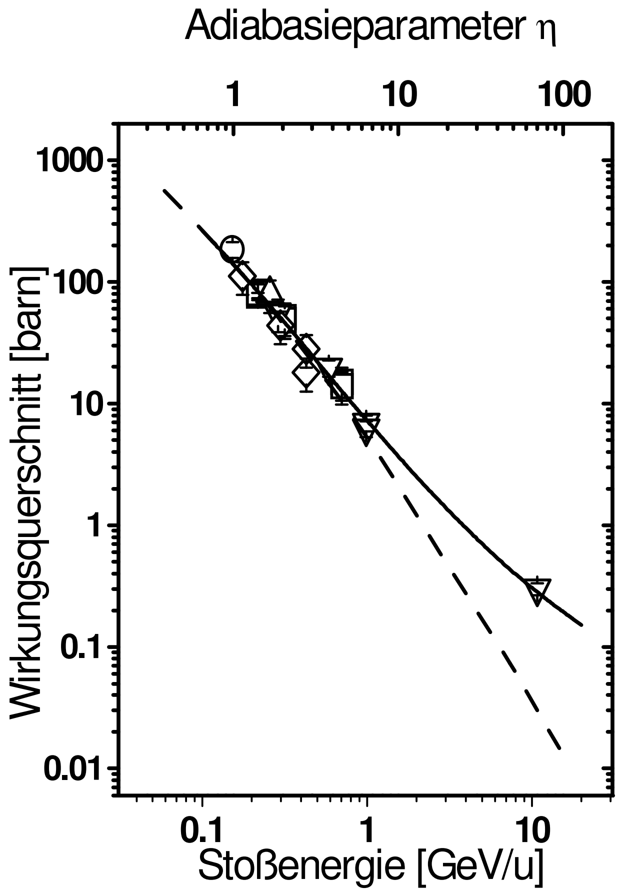


Abbildung 3.7. *Experimentelle REC-Querschnitte für schwere Projektile ($54 \leq Z_{\mathrm{P}} \leq 92$) als Funktion des η-Parameters [StK95]. Die untere x-Achse bezieht sich auf die entsprechenden Stoßenergien für Au-Projektile. Alle Daten wurden auf die Anzahl der Targetelektronen normiert. Die Dipolnäherung ist durch die gestrichelte Linie wiedergegeben, während die durchgezogene Linie sich auf die exakten Rechnungen bezieht. Der Datenpunkt bei 10.8 GeV/u wurde der Referenz [ClB97] entnommen.*

400 MeV/u zu, wohingegen es bei noch größeren Energien zu starken Abweichungen kommt. In Abbildung 3.7 sind alle vorhandenen Daten, die für schwere nackte Projektile gemessen wurden, als Funktion des η-Parameters dargestellt, wobei der Bezug zwischen η und dem Sommerfeld Parameter ν durch folgende Relation gegeben ist [StK95]:

$$\eta = 1/\nu^2 \simeq 40.31 \times \frac{E_{\mathrm{P}}}{Z_{\mathrm{P}}^2}[\mathrm{MeV/u}]. \tag{3.16}$$

Wesentlich ist, daß dieser η-Definition die Beziehung $E_{\mathrm{P}} = \frac{1}{2}Mv^2$ zugrunde liegt, d.h. es wird angenommen, daß sich das Projektil mit einer nicht-relativistischen Geschwindigkeit v bewegt. M bezeichnet hierbei die Projektilmasse und E_{P} die kinetische Projektilenergie. Unter dieser sehr fragwürdigen Annahme ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten und mit den exakten Rechnungen. Hierbei muß betont werden, daß die erzielte Übereinstimmung offensichtlich auf ein zufälliges, gegenseitiges Aufheben verschiedener relativistischer Effekte zurückzuführen ist. Wie bereits oben dargestellt, ist die Dipolnäherung nicht in der Lage, die Details des REC-Prozesses für schwere Ionen zu beschreiben.

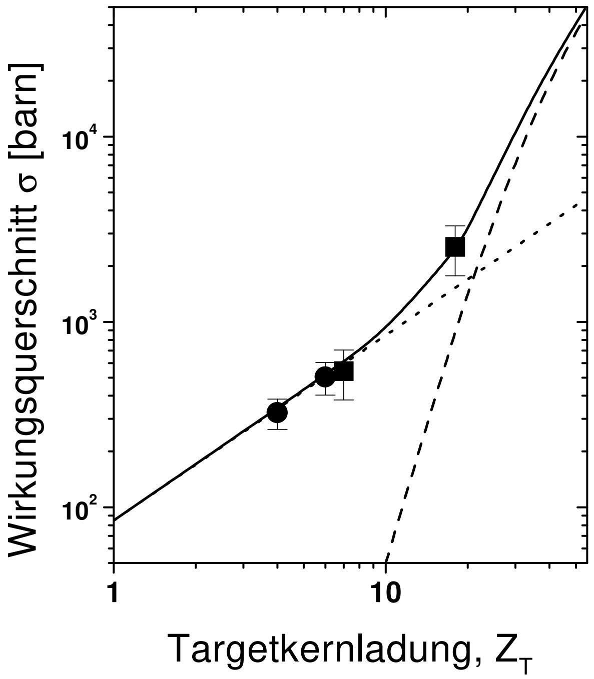


Abbildung 3.8. *Experimentelle Elektronen-Einfangsquerschnitte für 295 MeV/u U^{92+} Projektile in Stößen mit unterschiedlichen Targetatomen [StK95]. Der totale theoretische Querschnitt (durchgezogene Linie) setzt sich aus dem REC-Wirkungsquerschnitt (gepunktete Linie: Dipolnäherung) und aus dem NRC-Querschnitt (gestrichelte Linie: Eikonalnäherung) zusammen.*

3.2 Nicht-Radiativer Einfang (NRC)

In Stößen mit Targetatomen – insbesondere mit schweren Targetatomen – kann es aber auch zu einem Elektronentransfer zwischen Target und Projektil ohne Emission eines Photons kommen. Hier werden Energie und Impuls zwischen Targetkern und Projektilkern aufgeteilt, d.h. dieser Prozeß ist im wesentlichen durch den Überlapp der Elektronenimpulsverteilung des Targets mit der des Projektils bestimmt, wobei noch zusätzlich der Stoßimpuls $m_e\mathbf{v}$ zu berücksichtigen ist. Bereits aus der nicht-relativistischen Oppenheimer-Born-Kramer-Näherung (OBK) kann die allgemeine Skalierung für diesen Prozeß hergeleitet werden, der auch häufig als *Nicht-Radiativer* oder auch *Kinematischer Einfang* bezeichnet wird, und es gilt [DeE94]:

$$\sigma_{\rm NRC} \propto \frac{Z_{\rm T}^5 \cdot Z_{\rm P}^5}{E_{\rm P}^6}, \tag{3.17}$$

mit $Z_{\rm T}$ der Kernladung des Targetatoms. Auf Grund dieser Skalierungseigenschaften ist der NRC-Prozeß der bei weitem wichtigste Projektilumladungsprozeß in langsamen Stößen mit schweren Targetatomen [DeE94]. Es sei hier angemerkt, daß aus einer relativistischen Behandlung das asymptotische Verhalten $\propto E_{\rm P}^{-1}$ folgt [EiM95]. Zwar werden in der Born'schen Näherung die Skalierungseigenschaften des NRC-Prozesses korrekt beschrieben [HuM85, Moi89], jedoch verfehlen sie die experimentellen Daten um nahezu eine Größenordnung. Diese Näherungen sind symmetrisch in Bezug auf den Anfangs- und Endzustand, berücksichtigen jedoch nicht die Coulombstörungen der Wellenfunktionen.

Eine wesentlich bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Daten läßt sich im Rahmen der Eikonalnäherung erreichen [Eic85], die unsymmetrisch in Bezug auf den Anfangs- und Endzustand ist und die Coulombstörung für einen der beiden Zustände vollständig berücksichtigt. Tabellierte Querschnitte für verschiedenste Projektil-Target-Kombinationen, die zugleich auch einen weiten Stoßenergiebereich abdecken, lassen sich aus Ref. [IcS93] entnehmen. Für den nicht-relativistischen Bereich, auf den im Rahmen der vorliegenden Arbeit auch Bezug genommen wird, ist eine ausführliche theoretische Behandlung in Ref. [Eic81] gegeben. Von großer praktischer Bedeutung ist zudem ein auf der Eikonalnäherung beruhendes Skalierungsgesetz, das sich auf den Transfer eines Elektrons von einem $1s$-Projektilzustand in einen $1s$-Targetzustand bezieht und durch folgende Gleichung beschrieben wird:

$$\begin{aligned} \sigma^{\mathrm{eik}}_{1s-1s} &= \frac{2^8 \pi Z_{\mathrm{P}}^5 Z_{\mathrm{T}}^5}{5v^2(Z_{\mathrm{T}}^2+q_+^2)^5}\,\frac{\gamma+1}{2\gamma^2}\,\frac{\pi\nu_{\mathrm{T}}}{\sinh(\pi\nu_{\mathrm{T}})} \\ &\quad \times e^{-2\nu_{\mathrm{T}}\arctan(q_+/Z_{\mathrm{T}})}\,\left(S_{\mathrm{eik}}+S_{\mathrm{mag}}+S_{\mathrm{orb}}\right). \end{aligned} \tag{3.18}$$

Der in atomaren Einheiten angegebene Querschnitt $\sigma^{\mathrm{eik}}_{1s-1s}$ bezieht sich auf ein Elektron im Anfangszustand und summiert über die zwei möglichen Spin-Orientierungen im Endzustand. Des weiteren ist $q_+ = (E_{\mathrm{i}} - E_{\mathrm{f}}/\gamma)/v$ und der Sommerfeldparameter ist durch $\nu_{\mathrm{T}} = Z_{\mathrm{T}}/v$ gegeben. Der ausführlichen Diskussion von Eichler folgend [Eic85], haben die einzelnen Terme in Gleichung 3.18 folgende Bedeutung:

- S_{eik} stellt den Querschnitt für ein relativistisches Projektil und ein nicht-relativistisches Elektron dar (Elektron ohne Spin).
- Für $\gamma \to 1$ und für nicht-relativistische Bindungsenergien $E_{\mathrm{i}}, E_{\mathrm{f}}$ ergibt sich die nicht-relativistische Eikonalnäherung.
- Der Term S_{mag} wird als magnetischer Beitrag zum Einfangsprozeß betrachtet, der durch die relativistische Bewegung der Projektilladung und seiner Wechselwirkung mit dem magnetischen Moment des Elektrons hervorgerufen wird.
- S_{orb} beschreibt den Einfluß der relativistischen Spin-Bahn-Wechselwirkung auf den Elektroneneinfangsprozeß.

Eine Verallgemeinerung von Gleichung 3.18 für beliebige Target- und Projektilzustände mit den Hauptquantenzahlen n_{T} und n_{P} läßt sich erreichen, indem folgende Substitutionen durchgeführt werden:

$$\begin{aligned} Z_{\mathrm{T}} &\to Z_{\mathrm{T}}/n_{\mathrm{T}} \\ Z_{\mathrm{P}} &\to Z_{\mathrm{P}}/n_{\mathrm{P}}\,. \end{aligned} \tag{3.19}$$

Die angegebene Substitution bezieht sich auf die sogenannte *Prior*-Formulierung der Eikonalnäherung. Um die *Post*-Formulierung zu erhalten, müssen die Anfangs- und

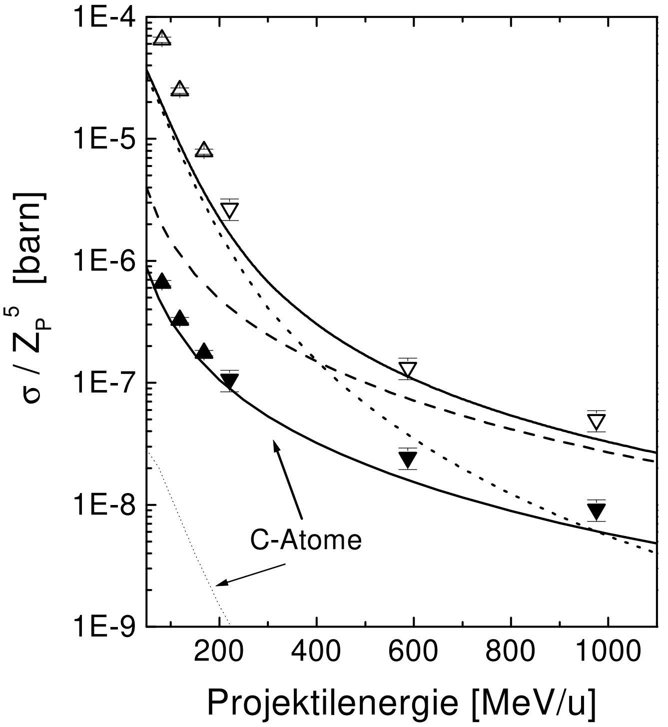


Abbildung 3.9: *Experimentelle Einfangsquerschnitte für H-artige Bi- und Au-Projektile als Funktion der Projektilenergie (▲ und △ beziehen sich auf die* Bi^{82+}*-Ionen [StM93], während ▼ und ∇ die* Au^{78+}*-Daten wiedergeben [ScG94]). Bei der Darstellung wurde das Skalierungsverhalten der Einfangsprozesse mit* Z_P^5 *ausgenutzt (vgl. Gleichung 3.2 und Gleichung 3.17). Zudem markieren die vollen Symbole die Ergebnisse, die für Kohlenstoff-Targetatome gewonnen werden konnten und die offenen Symbole repräsentieren Messungen mit Ni-Targets. Die durchgezogenen Linien geben die totalen Querschnitte wieder, wie sie sich aus der Higher-Potential Beschreibung der Eikonalnäherung (gepunktete Linien) und der Dipolnäherung für REC (gestrichelte Linien) ergeben.*

Endzustände vertauscht werden. Für schwere Projektile und leichte Targetatome sollte die *Post*-Formulierung verwendet werden, da hier die Störung der Targetorbitale durch die Projektilladung in allen Ordnungen berücksichtigt wird [EiM95]. Im allgemeinen läßt sich die beste Übereinstimmung zwischen Eikonalnäherung und experimentellen Daten erreichen, indem – einem Vorschlag von Meyerhof und Eichler folgend – das sogenannte *Higher Potential* Kriterium angewendet wird, das gegeben ist durch:

$$\mathrm{Prior-Version}: Z_\mathrm{P}/n_\mathrm{P} < Z_\mathrm{T}/n_\mathrm{T}$$

$$\text{Post} - \text{Version} : Z_\text{P}/n_\text{P} > Z_\text{T}/n_\text{T} \; . \tag{3.20}$$

Als ein Beispiel werden in Abbildung 3.9 die absoluten Wirkungsquerschnitte, die für H-artige Au- und Bi-Projektile als Funktion der Stoßenergie gemessen wurden [StM93, ScG94], mit der Vorhersage der Eikonalnäherung verglichen (gepunktete Linien in Abbildung 3.9). Den theoretischen Querschnitten liegt das *Higher Potential* Kriterium zugrunde und sie weisen eine generelle Übereinstimmung mit den experimentellen Befunden auf. Hierbei muß darauf hingewiesen werden, daß im Unterschied zur reinen *Prior*-Version bzw. *Post*-Version, das *Higher Potential* Kriterium zu Unstetigkeiten in der (n, ℓ)-Verteilung führt und nicht zu einer zustandsselektiven Beschreibung des NRC-Prozesses verwendet werden sollte [RyS96].

3.3 Ionisation und Anregung

Neben den bereits erörterten Einfangsmechanismen REC und NRC stellt die Projektilionisation den bedeutendsten Umladungsprozeß für hochgeladene Schwerionen dar. Im relativistischen Stoßbereich kommt hierbei der K-Schalenionisation eine besondere Bedeutung zu, da das Wechselspiel zwischen K-Schalenionisation und Elektroneneinfang ganz wesentlich die Ausbeute an nackten Ionen bestimmt.

Im folgenden konzentrieren wir uns auf die störungstheoretische Behandlung des Ionisationsprozesses, die eine angemessene Behandlung asymmetrischer Stoßsysteme darstellt, solange die Bedingung $Z_\text{T} \ll Z_\text{P}$ erfüllt ist. Hierbei bewegt sich das Projektil mit der Geschwindigkeit v auf einer geradlinigen, klassischen Trajektorie in z-Richtung. Die Projektilbewegung folgt hierbei der klassischen Beziehung $\mathbf{R}(t)=\mathbf{b}+\mathbf{v}t$, mit $\mathbf{b}$ dem Stoßparameter in Bezug auf den Targetkern. Mit Hilfe der obigen Bezeichnungen ist das Liénard-Wiechert Potential, das durch das Projektil im Bezugsystem des Targets hervorgerufen wird, gegeben durch [EiM95]

$$\begin{aligned}
\Phi(\mathbf{r}, t) &= \frac{\gamma Z_\text{P} e}{r'} \\
\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) &= \frac{\mathbf{v}}{c}\, \Phi(\mathbf{r}, t),
\end{aligned} \tag{3.21}$$

und die Entfernung zwischen Elektron und Target im Projektilsystem ist gegeben durch

$$r'(t) = \sqrt{(x-b)^2 + y^2 + \gamma^2 (z - vt)^2}, \tag{3.22}$$

wobei $[(x, y, z, t)]$ die Koordinaten des Elektrons im Projektilsystem sind. Ein gebundenes Projektilelektron ist somit der Störung durch das Coulombpotential $Z_\text{T} e/r$ des Targets ausgesetzt. Unter Berücksichtigung des Liénard-Wiechert Potentials folgt aus der Lösung der zeitabhängigen Dirac-Gleichung für die Übergangsamplitude vom Anfangszustand φ_i in den elektronischen Endzustand φ_f

$$A^{\mathrm{e}}_{\mathrm{fi}}(b) = \mathrm{i}\frac{\gamma Z_{\mathrm{P}} e^2}{\hbar} \int \mathrm{d}t \, \mathrm{e}^{i(E_{\mathrm{f}}-E_{\mathrm{i}})t/\hbar} \int \mathrm{d}^3 r \, \varphi^{\dagger}_{\mathrm{f}}(\mathbf{r})(1-\beta\alpha_z)\frac{1}{r'}\,\varphi_i(\mathbf{r}). \tag{3.23}$$

Hierbei ist zu beachten, daß im Unterschied zu nicht-relativistischen Stößen – als Folge des Liénard-Wiechert Potentials – die Übergangsamplitude zwei Beiträge enthält, und zwar einen elektrischen $(1/r')$ und einen magnetischen Beitrag $(\beta\alpha_z)/r')$, die kohärent addiert werden müssen. Der magnetische Term wird häufig als *transversaler* Beitrag zur Ionisation bezeichnet. Für den Anregungsquerschnitt folgt hieraus

$$\sigma_{\mathrm{fi}} = 2\pi \int_0^{\infty} |A^{\mathrm{e}}_{\mathrm{fi}}|^2 \, b \, \mathrm{d}b. \tag{3.24}$$

Für die Ionisation muß hingegen σ_{fi} durch einen energiedifferentiellen Ausdruck ersetzt werden, das heißt, hier ist eine zusätzliche Integration über alle Kontinuumszustände erforderlich, deren numerische Behandlung sehr zeitaufwendig ist. In der Praxis wird daher häufig, einem Vorschlag von Anholt [Anh79, AnB87] folgend, von einer nicht-relativistischen Behandlung im Rahmen der *Plane-Wave-Born*-Näherung (PWBA) oder *Semi-Classical*-Näherung ausgegangen [BaB78]. Auf der Grundlage dieser Theorien folgt der Ionisationsquerschnitt einem strengen Skalierungsgesetz, das gegeben ist durch

$$\sigma^{\mathrm{ION}}_{\mathrm{L}} = \mathrm{const} \cdot \frac{Z^2_{\mathrm{T}}}{Z^4_{\mathrm{P}}} \mathcal{F}(\frac{v}{v_{\mathrm{K}}}), \tag{3.25}$$

wobei v_k die mittlere Geschwindigkeit des *aktiven* K-Schalenelektrons bezeichnet. Für $v/v_{\mathrm{K}} \approx 1$ erreicht die Funktion $\mathcal{F}$ ihr Maximum, die aus verschiedenen Veröffentlichungen in tabellierter Form entnommen werden kann (siehe z.B. [BaB78]). $\sigma^{\mathrm{ION}}_{\mathrm{L}}$ wird auch häufig als *longitudinaler* Ionisationsquerschnitt bezeichnet. Um den Einfluß zu berücksichtigen, der durch die relativistischen Wellenfunktionen des schweren Projektils hervorgerufen wird, kann in einer ersten Näherung Gleichung 3.25 mit dem Faktor

$$\mathrm{F} = [1 + \left(\frac{\alpha Z_P}{2}\right)^2] \tag{3.26}$$

multipliziert werden. Schließlich muß noch der sogenannte transversale Beitrag zum Ionisationsquerschnitt in Betracht gezogen werden. Im Rahmen der Dipolnäherung folgt für diesen Korrekturterm der Ausdruck

$$\sigma^{\mathrm{ION}}_{\mathrm{T}} = \sigma^{\mathrm{ION}}_{\mathrm{L}} \cdot \frac{\ln(\gamma^2) - \beta^2}{\ln(2\beta^2)/E_{\mathrm{K}}}, \tag{3.27}$$

und der vollständige Ionisationsquerschnitt ist somit gegeben durch:

$$\sigma^{\mathrm{ION}} = \mathrm{F} \cdot [\sigma^{\mathrm{ION}}_{\mathrm{L}} + \sigma^{\mathrm{ION}}_{\mathrm{T}}]. \tag{3.28}$$

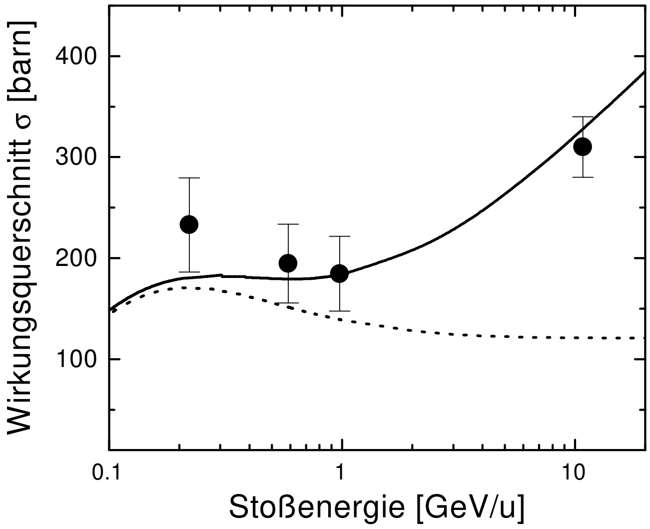


Abbildung 3.10: *Experimentelle Daten [StI97, ClB97] zur Ionisation H-artiger $_{79}Au^{78+}$ Ionen in Stößen mit Kohlenstoffatomen als Funktion der Stoßenergie. Die Linien geben die theoretische Beschreibung von Anholt wieder [AnB87] (gestrichelte Linie ohne transversalen Beitrag, durchgezogene Linie mit transversalen Beitrag).*

Eine zusammenfassende Darstellung aller experimentellen Daten im Vergleich mit dem diskutierten theoretischen Modell kann der Ref. [StI97] entnommen werden und eine detaillierte, kritische Diskussion der Näherung erfolgt in Ref. [EiM95].

Hier sei nur an einem Beispiel erläutert, wie gut das diskutierte Modell in der Lage ist, die experimentellen Daten zu beschreiben. In der Abbildung 3.10 werden die theoretischen Querschnitte (vgl. 3.28) mit den Daten verglichen, die für das Stoßsystem $Au^{78+} \rightarrow C$ gemessen wurden [StI97] und die mittlerweile bis zu einer Energie von 10.8 GeV/u vorliegen [ClB97]. Bei der durchgezogenen Linie wurde der transversale Beitrag (vgl. Gleichung 3.28) berücksichtigt, während die gestrichelte Linie nur den logitudinalen Wirkungsquerschnitt (vgl. Gleichung 3.25 und 3.26) wiedergibt. Wie aus der Abbildung ersichtlich ist, werden die experimentellen Daten gut durch die einfache Näherung beschrieben, und auch der Anstieg des Wirkungsquerschnitts mit zunehmender Stoßenergie – Folge des transversalen Beitrags – wird sehr gut durch die Theorie reproduziert. Dies ist ein bemerkenswertes Ergebnis und zeigt, daß die absoluten Querschnitte nicht sensitiv auf die Details der Wechselwirkung sind. Hingegen wurde für den Prozeß der Projektilanregung erstmals experimentell und theoretisch nachgewiesen, daß der transversale Beitrag auch zu einer Reduzierung des absoluten Wirkungsquerschnitts führen kann [StI98, StI98a]. Dies ist Folge einer Interferenz zwischen den elektrischen und magnetischen Beiträgen zum Liénard-Wiechert-Potential. Im Rahmen der obigen Näherung kann dies jedoch nicht verstanden werden, da hier der transversale Beitrag nur durch eine inkohärente Summation berücksichtigt wird.

In Abbildung 3.11 sind die experimentellen Querschnitte zur Projektilanregung

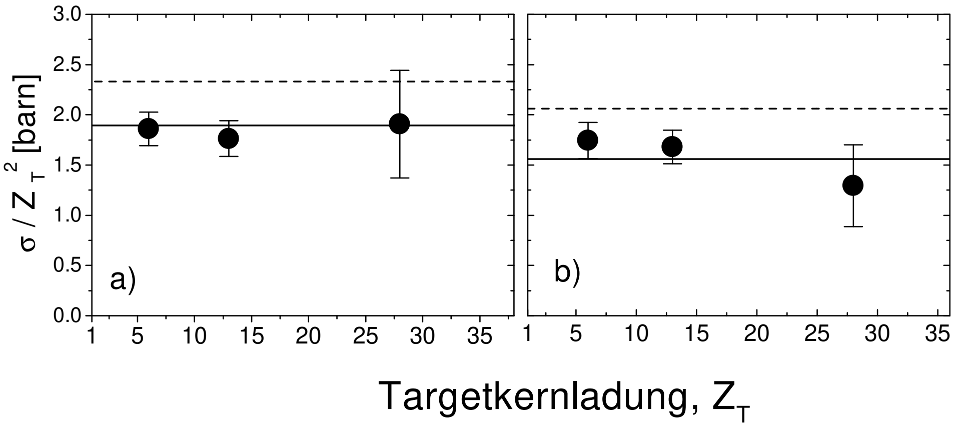


Abbildung 3.11: *Experimentelle Daten [StI98, StI98a] zur Projektilanregung H-artiger Bi-Ionen (Z=83) in Stößen mit leichten Targetatomen. Bei der Darstellung wurde das Skalierungsverhalten der Projektilanregung mit Z_{T}^2 ausgenutzt. Abbildung (a) bezieht sich auf die Produktion von Lyα_2-Übergänge als Folge der Projektilanregung während (b) den Produktionsquerschnitt für Lyα_1-Photonen wiedergibt. Die gestrichelte Linien beziehen sich auf Rechnungen, bei denen nur der elektrische Anteil an der Wechselwirkung berücksichtigt wurde. Die durchgezogenen Linien geben die Resultate wieder, die das Liénard-Wiechert Potential vollständig berücksichtigen.*

[StI98a, StI98a] H-artiger Bi-Ionen (Z=83) in Stößen mit leichten Targetatomen gezeigt. Abbildung (a) bezieht sich auf die Produktion von Lyα_2-Übergängen als Folge der Projektilanregung (zu 90% Anregung in die $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$-Niveaus), während (b) den Produktionsquerschnitt für Lyα_1-Photonen wiedergibt (zu 90% Anregung in das $2p_{3/2}$-Niveau). Die gestrichelte Linien beziehen sich auf Rechnungen, bei denen nur der elektrische Anteil der Wechselwirkung berücksichtigt wurde. Die durchgezogenen Linien geben hingegen die Resultate wieder, die das Liénard-Wiechert Potential vollständig berücksichtigen. Deutlich ist in der Abbildung zu erkennen, daß die Interferenz zwischen der elektrischen und der magnetischen Amplitude zu einer Absenkung des totalen Querschnitts um nahezu 30% führt.

Schließlich sei hier noch angemerkt, daß auch die Targetelektronen zur Projektilionisation beitragen können. Im Rahmen der Störungstheorien in erster Ordnung ist der Ionisationsprozeß unabhängig vom Vorzeichen der Störung und für Protonen- und Elektronen ergeben sich die gleichen Querschnitte. Dies gilt jedoch nur für $v \gg v_k$, da die Ionisation durch Elektronenstoß aufgrund der *kleinen* Masse ein Schwellenverhalten für $v = v_k$ aufweist und sich hier stark vom Protonenstoß unterscheidet. Zudem treten Korrelationseffekte auf (so z.B. die Breit-Wechselwirkung), die für relativistische Projektile den Querschnitt für Elektronenstoß entscheidend beeinflussen [MaE94]. Ähnliche Resultate wurden auch kürzlich für die L-Schalenionisation hochgeladener Uranionen durch Elektronenstoß gefunden [StK97].

Kapitel 4

Experimentieranlagen für höchstgeladene Ionen

Grundsätzlich sind intensive und monochromatische Strahlungsquellen die wesentliche Voraussetzung für genaue röntgenspektroskopische Untersuchungen. Die Röntgenspektroskopie an höchstgeladenen Schwerionen, wie z.B. U^{91+}, erfordert somit Experimentieranlagen, die solche Ionen mit einer möglichst hohen Intensität produzieren. Außerdem setzt sie eine sehr genaue Kenntnis aller geometrischen Faktoren voraus, die Einfluß auf die Emissionscharakteristik der Ionen haben könnten. Gegenwärtig gibt es weltweit zwei Anlagen, die diesen Anforderungen entsprechen, die sich aber konzeptionell stark voneinander unterscheiden. Dies ist die mit einem Elektronenstrahl betriebene Falle für hochgeladene Ionen *Super-Electron-Beam-Ion-Trap* (Super-EBIT) in Livermore und der *Experimentier-Speicher-Ring* (ESR) in Kombination mit dem *Schwerionensynchrotron* (SIS) der GSI in Darmstadt.

Im folgenden werden die beiden Experimentieranlagen, insbesondere im Hinblick auf röntgenspektroskopische Untersuchungen, näher vorgestellt.

4.1 Produktion hochgeladener, schwerer Ionen

Atome können in Stößen mit Photonen, Elektronen und Ionen ionisiert werden. Um selbst die Innerschalenelektronen in den schwersten Ionen zu *entfernen*, sind sehr hohe Energie- und Impulsüberträge erforderlich, die gegenwärtig nur durch intensive, hochenergetische Elektronenstrahlen und durch Beschuß mit Ionen aufgebracht werden können. Im vorangegangen Kapitel wurde bereits die Ionisation durch Teilchenbeschuß diskutiert und gezeigt, daß bei einer Stoßgeschwindigkeit $v \approx v_K$ bzw. einer Stoßenergie $E_{\mathrm{KIN}} \approx E_{\mathrm{K}}$ der Wirkungsquerschnitt annähernd sein Maximum erreicht und für $v \gg v_{\mathrm{k}}$ Elektronen- und Protonenstoßquerschnitte sich – in einer ersten Näherung – gleich verhalten. Für den Beschuß mit Ionen der Kernladungszahl Z_{T} erreicht man einen im Vergleich zum Protonenbeschuß um Z_{T}^2 höheren Ionisationsquerschnitt und die Produktion hochgeladener Schwerionen ist entsprechend

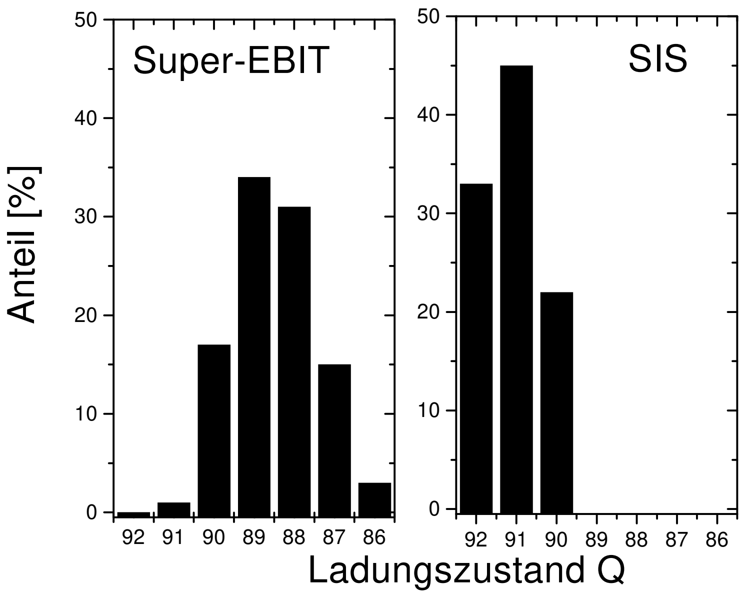


Abbildung 4.1. *Ladungsverteilung hochgeladener Uranionen, gemessen (a) an der Super-EBIT mit einem Elektronenstrom von 200 mA und einer Energie von 198 keV [Mar96] und (b) hinter dem SIS nach dem Durchgang durch eine Cu-Folie bei einer äquivalenten Stoßenergie von 360 MeV/u.*

effizient. An Beschleunigeranlagen wird genau dieses Prinzip ausgenutzt, wobei jedoch die Rolle des Targets mit dem des Projektils vertauscht wird, d.h. hier werden niedrig geladene Schwerionen (Projektile) auf eine *Stripper*-Folie geschossen und beim Durchgang durch diese Folien werden in Stößen mit den Targetatomen (Kernladung Z_{T}) die hochgeladenen Projektile erzeugt. Die hierdurch entstehenden Ladungsverteilungen lassen sich mittlerweile sehr gut für unterschiedliche Folienmaterialien und Dicken als Funktion der Stoßenergie vorhersagen (vgl. hierzu Refs. [StG91, ScS98]). Tatsächlich ist zur effizienten Produktion nackter Uranionen eine Projektilenergie von mindestens $E_{\mathrm{P}} = M/m \cdot E_{\mathrm{KIN}} = 300$ MeV/u erforderlich ($M/m = 1823$ ist das Verhältnis der atomaren Masseneinheit zur Elektronenmasse und E_{KIN} entspricht in etwa der K-Schalenbindungsenergie von 132 keV).

Zwar ist für Elektronenbeschuß der Ionisationsquerschnitt wesentlich kleiner, jedoch besteht hier die Möglichkeit, mit sehr intensiven Elektronenstrahlen und extrem hohen Stromdichten von ca. 5000 A/cm^2 bei einem Strahlradius von ca. 35-μm zu arbeiten, wie es an der Super-EBIT der Fall ist (siehe z.B. [Mar91]). In Abbildung 4.1 sind die Ladungsverteilungen dargestellt, wie sie zum einen an der Super-EBIT für Uran bei einem Elektronenstrom von 200 mA mit einer Elektronenenergie von 198 keV erzeugt wurden. An einem Beschleuniger entspricht dies einer Projektilenergie von ca. 360 MeV/u. Die entsprechende Ladungsverteilung ist ebenso in der Abbildung wiedergegeben.

Wie aus der Abbildung 4.1 entnommen werden kann, ist am Beschleuniger die Ausbeute an nackten Uranionen wesentlich höher, jedoch können einige nackte Ionen – insbesondere aber Ionen mit offener L-Schale – in der EBIT produziert werden.

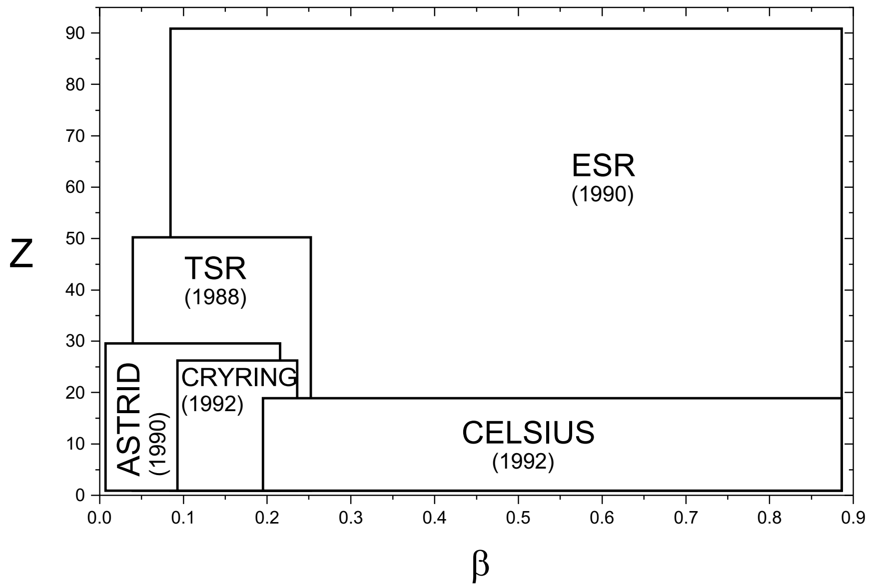


Abbildung 4.2: *Übersicht über den Operationsbereich der verschiedenen Schwerionenspeicherringe, die während der letzten Jahre in Betrieb genommen wurden.*

4.2 Speicherringe für hochgeladene Ionen

In den letzten zehn Jahren war die Atomphysik mit hochgeladenen Ionen geprägt durch die einzigartigen Experimentierbedingungen, die sich durch die Inbetriebnahme zahlreicher Speicherringe eröffneten. Obwohl sich die einzelnen Ringe im Detail sehr unterscheiden, zeichnen sie sich doch durch einige wesentliche Gemeinsamkeiten aus. So erfolgt die Erzeugung der Ionen außerhalb der Ringe, in die sie eingeschossen und solange akkumuliert werden, bis höchste Ionenströme zur Verfügung stehen. Zudem verfügen alle Ringe über einen Elektronenkühler, Garant für eine hervorragende Strahlqualität.

Abbildung 4.2 zeigt den Operationsbereich der einzelnen Ringe, d.h. die Ionengeschwindigkeiten und die Elemente, die für Experimente zur Verfügung stehen. Eine vollständige Übersicht kann der Literatur entnommen werden [Fra88, Pol91, Bos93, Sch93, Lar96, MoS96], wobei angemerkt sei, daß die Auslegung aller Ringe stark durch die Erfahrungen bestimmt ist, die am ersten Speicherring, dem Anti-Protonen Speicherring (LEAR), gesammelt wurden [Pot90].

4.3 Der Speicherring ESR

Der Experimentierspeicherring (ESR) [Fra87, Fra88] ist der einzige Ring, in dem alle Ionen einschließlich nackter Uranionen akkumuliert werden können. Sein Gesamtumfang beträgt 108.36 m, und er besitzt eine magnetische Steifigkeit von 10 Tm, wodurch es grundsätzlich möglich ist, nackte Uranionen bei einer maximalen Energie von 560 MeV/u zu speichern. Üblicherweise erfolgen die Experimente mit schweren Ionen bei einer Energie von ca. 300 MeV/u, was einer Geschwindigkeit von $\beta \simeq 0.65$ entspricht und eine Umlauffrequenz von etwa $2 \cdot 10^6$ s^{-1} zur Folge hat.

In Abbildung 4.3 ist dieser Speicherring mit seinen Diagnose- und Experimentiereinrichtungen schematisch dargestellt. Als ionenoptische Elemente besitzt der Ring sechs 60^o Dipolmagnete und außerdem sechs Quadrupol-Triplets bzw. -Dublets, die benötigt werden, um die Ionen nahe der idealen Bahn zu halten. Diese Bahn kann als ein geschlossenes Orbital betrachtet werden, auf dem sich die Teilchen mit der Energie E_{P} und dem Impuls p_{P} bewegen, die durch die Magnetfelder und den Krümmungsradius der Magnete bestimmt sind. Tatsächlich kommt es jedoch zu einer Art sinusförmiger Schwingung der Ionen um diese sogenannte Sollbahn. So fokussieren die Quadrupolmagnete jeweils in einer Ebene und wirken senkrecht zu dieser Ebene defokussierend. Da der Ionenstrahl eine Vielzahl von Quadrupolmagneten durchläuft, kommt es zu Oszillationen um die ideale Bahn, wie es in der Abbildung 4.4 schematisch dargestellt ist. Die Amplitude $A(s)$ dieser Schwingung, die auch Betatronoszillation genannt wird, setzt sich zusammen aus der Amplitudenfunktion $\beta_y(s)$, die durch die magnetischen Führungsfelder festgelegt ist, und der Emittanz des Strahls ϵ_y. y repäsentiert eine transversale Koordinate, während s die longitudinale Koordinate ist. Die Anzahl der Schwingungen pro Umlauf ergibt sich aus $\beta(s)$ durch

$$Q_y = \frac{1}{2\pi} \oint\limits_c \frac{1}{\beta(s)} \mathrm{d}s. \tag{4.1}$$

Hierbei ist darauf zu achten, daß die Umlauffrequenz nicht ganzzahlig aber auch nicht zu 1/2, 1/3, etc. gewählt werden darf (vgl. Abbildung 4.4). In diesem Fall würden die von Feldfehlern hervorgerufenen Bahnstörungen resonant verstärkt werden, da die Teilchen bei jedem Umlauf eine phasengleiche Auslenkung erfahren.

Eine weitere wichtige Beziehung besteht zwischen dem Impuls der umlaufenden Teilchen p_{P} und ihrer Umlauffrequenz f_0. Abweichungen Δp_{P} vom Sollimpuls führen zu einer Änderung der Teilchenbahn, was wiederum eine veränderte Umlauffrequenz zur Folge hat. Zwischen der relativen Impulsänderung $\Delta p_{\mathrm{P}}/p_{\mathrm{P}}$ und der relativen Frequenzänderung $\Delta f_0/f_0$ besteht die lineare Beziehung

$$\frac{\Delta f_0}{f_0} = \left(\frac{1}{\gamma^2} - \frac{1}{\gamma_{\mathrm{t}}^2}\right) \cdot \frac{\Delta p_{\mathrm{P}}}{p_{\mathrm{P}}}. \tag{4.2}$$

Der Proportionalitätsfaktor berücksichtigt zum einen die relativistische Beziehung zwischen Impuls und Geschwindigkeit eines Teilchens (der Term $1/\gamma^2$ mit $\gamma = 1/\sqrt{1-\beta^2}$) und zum anderen die Beziehung zwischen Impuls- und Bahnänderung ($1/\gamma_{\mathrm{T}}^2$) [ScB97]. γ_{T} wird auch als *transition-*γ bezeichnet, das definiert ist durch $df/dE_{\mathrm{p}}|_{\gamma=\gamma_{\mathrm{T}}} = 0$, d.h. für $\gamma = \gamma_{\mathrm{T}}$ hat eine Energie- bzw. Impulsänderung keine

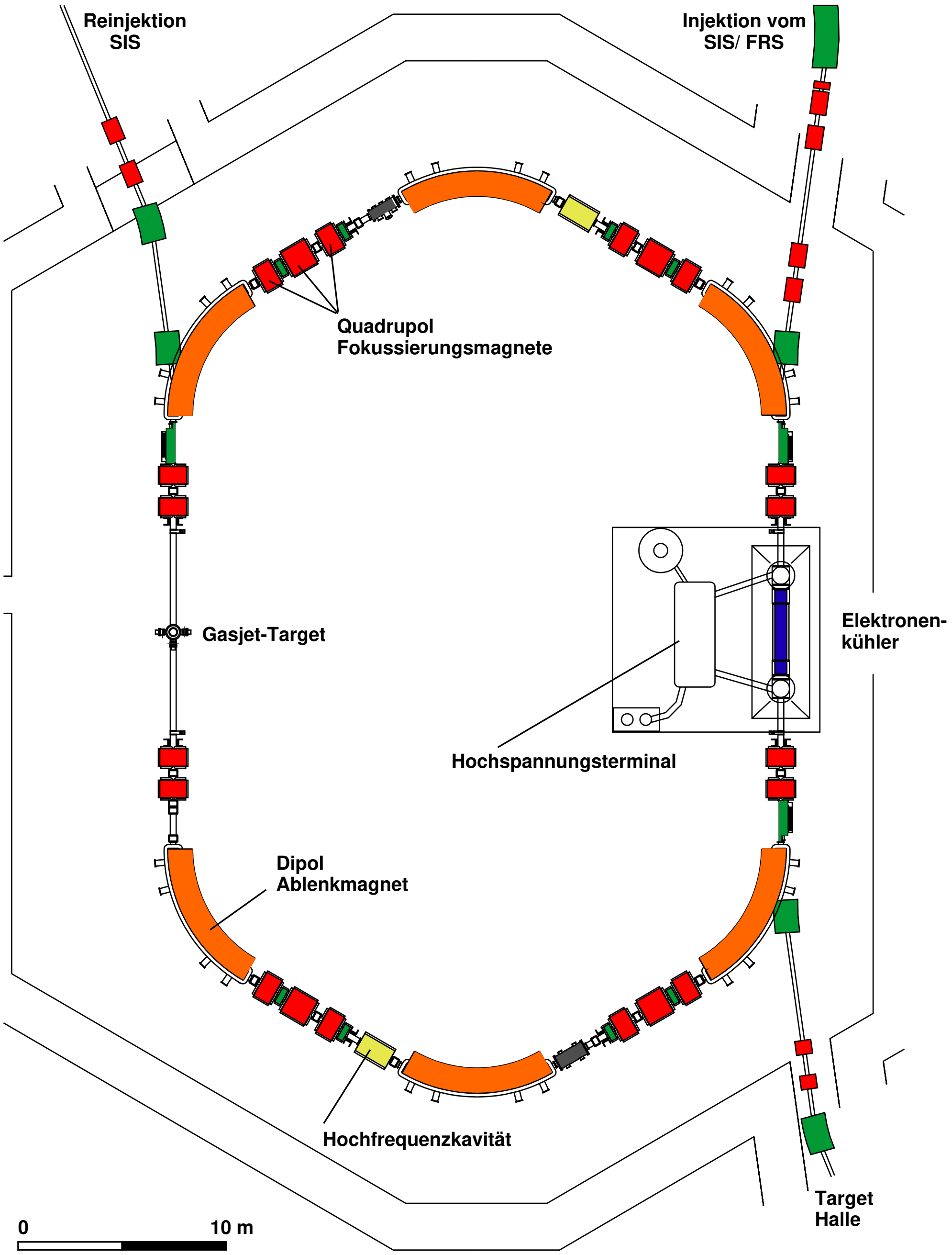


Abbildung 4.3: *Schematische Darstellung des ESR Speicherrings mitsamt seinen Diagnose- und Experimentiereinrichtungen.*

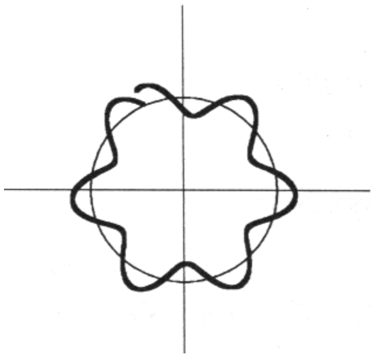


Abbildung 4.4. *Betatron-Oszillationen entlang der idealen Ionenbahn.*

Frequenzänderung zur Folge. Hingegen ist für $\gamma < \gamma_{\mathrm{T}}$ mit zunehmendem Impuls immer eine Frequenzerhöhung verbunden.

4.3.1 Elektronenkühler

Neben diesen generellen ionenoptischen Eigenschaften ist die Elektronenkühlung von zentraler Bedeutung für den Betrieb des Speicherrings. Das Prinzip der Elektronenkühlung wurde erstmals 1966 von Budker [Bud67] zum Kühlen von Protonen am NAP-M Ring in Novosibirsk erfolgreich eingesetzt [Pot90].

Die transversale und longitudinale Emittanz der Ionen kann als eine dreidimensionale willkürliche Bewegung angesehen werden, die somit durch eine Temperatur charakterisiert werden kann. Bei der Elektronenkühlung wechselwirken nun die Ionen bei jedem Umlauf mit einem parallelen Strahl gleich schneller, *kalter* Elektronen. Durch Coulombstöße zwischen den Ionen und den kalten Elektronen nehmen die Ionen zum einen die Geschwindigkeit der Elektronen an, zum anderen wird die Breite der Geschwindigkeitsverteilung erheblich herabgesetzt. Schließlich stellt sich ein Temperaturgleichgewicht ein, das in transversaler Richtung ($T_{\perp}$) durch die Kathodentemperatur des Elektronenkühlers bestimmt ist, die etwa 1300 K ($\approx$ 0.1 eV) beträgt. In longitudinaler Richtung ($T_{\|}$) werden die Elektronen auf Ionengeschwindigkeit beschleunigt, so daß hier wesentlich kleinere Temperaturen erreicht werden. So wird durch den ESR-Kühler die Impulsbreite der Ionen von $\Delta p_{\mathrm{P}}/p_{\mathrm{P}} \sim 10^{-3}$ auf einen Wert von besser als $\Delta p_{\mathrm{P}}/p_{\mathrm{P}} \sim 10^{-5}$ [WiB97, StB97a] verringert. Außerdem kompensiert die Kühlung das Aufheizen des umlaufenden Strahls, das vor allem durch Stöße der Ionen untereinander (*Intra-Beam Scattering*), insbesondere aber auch durch Stöße mit Restgasatomen hervorgerufen werden kann. Neben Umladungsverlusten ist dies ein wesentlicher Grund für die extrem hohen Vakuumanforderungen, die für den Betrieb einer Speicherringanlage erforderlich sind (im ESR bewegt sich der mittlere Druck des Restgases auf dem Niveau von 10^{-11} mbar).

In Abbildung 4.5 ist der Elektronenkühler des ESR schematisch dargestellt, in dem die Elektronen durch Magnetfelder (~ 0.1 T) auf ihrer 2.5 m langen Bahn parallel zum Ionenstrahl geführt werden. Zudem sind in der Tabelle 4.1 die wesentlichen

Durchmesser	50 mm
Strom	5 – 500 mA
Spannung	27 – 200 kV
transversale Temperatur	$\sim$ 0.1 eV
longitudinale Temperatur	$<$ 0.1 meV
Magnetfeld	0.08 – 0.12 T

Tabelle 4.1: *Betriebsparameter des ESR-Elektronenkühlers.*

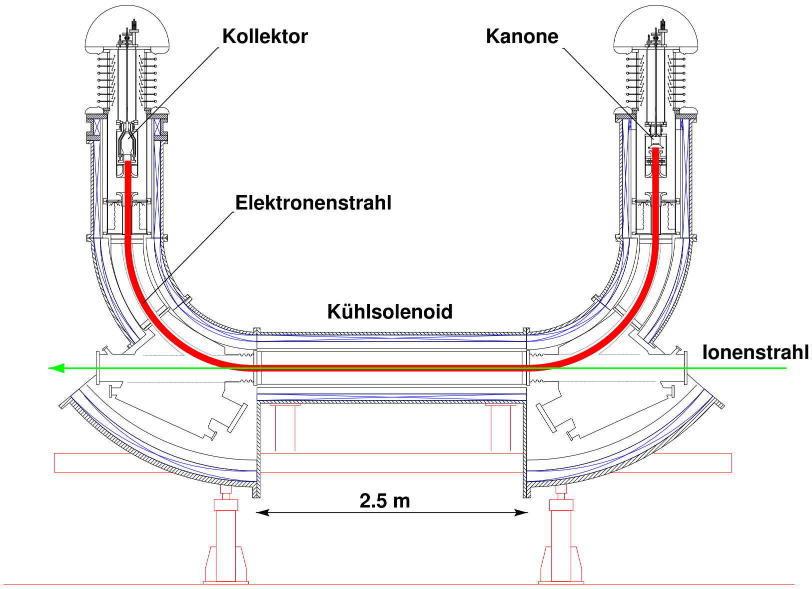


Abbildung 4.5: *Schematische Darstellung des Elektronenkühlers am Speicherring ESR. Die Elektronen, erzeugt in einer Elektronenkanone bei einer Kathodentemperatur von ≈1300 K, werden in einem ∼ 0.1 T starken Magnetfeld parallel zum Ionenstrahl geführt.*

Betriebsparameter angegeben. In Experimenten mit Schwerionenstrahlen wird üblicherweise mit Elektronenströmen im Bereich zwischen 150 und 250 mA gearbeitet, wobei der Strahldurchmesser der gekühlten Ionen im Bereich weniger Millimeter liegt [Bos89, Bos93].

4.3.2 Strahldiagnose

Eine weitere Voraussetzung für den Betrieb des Speicherrings ist eine Strahldiagnose, die die Messung der Strahllage, der Impulsverteilung, der transversalen Emittanzen und der Zeitstruktur ermöglicht. Von den Diagnosesystemen muß gefordert werden,

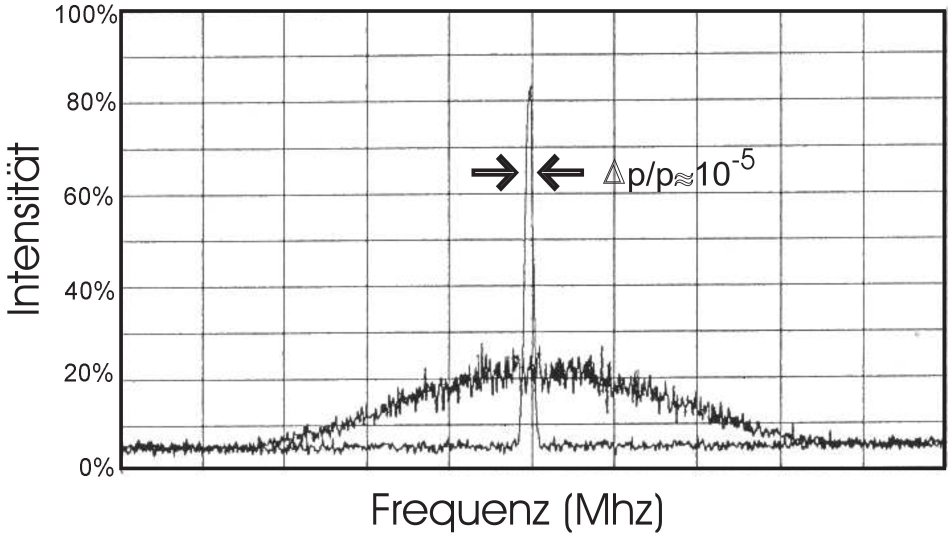


Abbildung 4.6: *Schottky-Spektren eines ungekühlten und eines gekühlten 294 MeV/u* U^{92+} *Ionenstrahls [EiB91].*

daß sie keine Rückwirkung auf den umlaufenden Strahl haben.

Eine der wichtigsten Methoden zur Strahldiagnose an Speicherringen stellt die Schottky-Analyse dar (siehe z.B. [Pot90, Bos93, Ste97]). Die Grundlage hierfür bilden die statistischen Stromschwankungen, die durch die einzelnen Ionen im Strahl hervorgerufen werden. Diese Signale (*Schottky-Rauschen*) werden mit kapazitiven Strahlsonden (*Schottky-Pickup*) aufgenommen, wobei die Signalstärke proportional zur Intensität des umlaufenden Strahls ist. Im Frequenzspektrum des Rauschsignals treten Linien bei jeder Harmonischen der Umlauffrequenz f_0 auf, deren Breite proportional zur Impulsbreite des Strahls ist (vgl. Gleichung 4.2). Als ein Beispiel sind in Abbildung 4.6 die Schottky-Spektren dargestellt, die für einen gekühlten und einen ungekühlten U^{92+} Strahl bei einer Energie von 294 MeV/u aufgenommen wurden [EiB91]. In diesem konkreten Fall verringerte die Elektronenkühlung die Impulsbreite von $\Delta p_\mathrm{P}/p_\mathrm{P} = 10^{-3}$ auf $\Delta p_\mathrm{P}/p_\mathrm{P} \approx 1 \cdot 10^{-5}$.

Zudem stehen ortsauflösende Teilchenzähler, die die umgeladenen Ionen nachweisen (vgl. Abbildung 4.3) und ein Strahlprofilmonitor zur Strahldiagnose zur Verfügung. Der Strahlprofilmonitor weist die durch den umlaufenden Strahl ionisierten Restgasatome nach und ermöglicht die Bestimmung des vertikalen und horizontalen Strahlprofils. Eine eingehende Beschreibung der verschiedenen Strahldiagnoseelemente des ESR ist in den Arbeiten von Steck [Ste97] und Winkler [WiB97] gegeben.

4.3.3 Gekühlte Ionenstrahlen

Die Temperatur des Ionenstrahls T_P in einem mitbewegten System ist definiert durch

$$k_{\rm B}T_{\rm P} = \frac{M}{2}\left(v_\perp^2 + v_\parallel^2\right) = k_{\rm B}T_\perp + k_{\rm B}T_\parallel, \tag{4.3}$$

wobei sich die Geschwindigkeitskomponenten auf die mittlere Impulsbreite $\Delta p_{\rm P}/p_{\rm P}$ beziehen mit der longitudinalen Komponente $v_\parallel$ und der transversalen Komponente $v_\perp$ [Pot90]. $k_{\rm B}$ stellt die Boltzmann-Konstante dar. Hierbei ist für die totale transversale Geschwindigkeitskomponente die Konvention $v_\perp^2 = v_{\rm x}^2 + v_{\rm y}^2$ zu beachten mit den beiden transversalen Koordinaten x und y [Pot90]. Für die nichtisotrope, abgeflachte Geschwindigkeitsverteilung (*flattened distribution*) gilt [PaS92]

$$f(v) = \frac{m^2}{2k_{\rm B}T_\perp}\left(\frac{m^2}{2k_{\rm B}T_\parallel}\right)^{1/2}\frac{1}{\pi\sqrt{\pi}}exp\left[-mv_\perp^2/2k_{\rm B}T_\perp\right]exp\left[-mv_\parallel^2/2k_{\rm B}T_\parallel\right], \tag{4.4}$$

wobei wegen $k_{\rm B}T_\parallel \ll k_{\rm B}T_\perp$ eine Maxwell-Verteilung häufig ausreichend genau das Geschwindigkeitsprofil beschreibt.

Eine weitere wichtige Größe ist die Kühlkraft, die sich unter Annahme eines kalten Elektronengases aus der Bethe-Bloch-Gleichung herleiten läßt und gegeben ist durch

$$F_C = \frac{dE}{dx} \propto \frac{Z_{\rm P}^2\rho_e}{mv^2} \tag{4.5}$$

mit der relativen Geschwindigkeit v zwischen den Elektronen und der Elektronendichte ρ_e [Pot90], [Ste97]. Wesentlich ist hierbei, daß sich aus der Kühlkraft die Kühlrate herleiten läßt, für die gilt:

$$\tau_C^{-1} \propto \frac{Z_{\rm P}^2\rho_e}{\gamma^2 mMv^3}. \tag{4.6}$$

Somit skaliert die Kühlkraft proportional zu Z^2/A (mit A der Anzahl der Nukleonen des Projektils), und die Elektronenkühlung sollte für schwere Ionen wesentlich effizienter sein als für Protonen. So sollte die Kühlzeit τ_C^{-1}, die für Protonen im Bereich einer Sekunde liegt (Elektronenstrom 1 A), für Uran aufgrund der A/Z^2-Skalierung nur noch etwa $\sim$ 50 ms betragen. Bevor der ESR in Betrieb genommen wurde, war es durchaus nicht klar, inwieweit es durch Elektronenkühlung möglich ist, das Aufheizen der Strahlen durch *Intra-Beam-Scattering* zu kompensieren, das ebenso mit $Z_{\rm P}^2$ skaliert.

In der Abbildung 4.7 sind die durch Kühlung im ESR erreichten Emittanzen und Impulsbreiten als Funktion der gespeicherten Ionen dargestellt [StB94]. Deutlich ist zu erkennen, daß selbst für intensivste Ionenstrahlen die Kühlung sowohl die Impulsbreite als auch die Emittanz um mindestens eine Größenordnung verringert. Für kleine Teilchenzahlen tritt sogar eine Reduzierung um nahezu zwei Größenordnungen auf. Oberhalb von 10^4 gespeicherten Ionen bestimmen offensichtlich die Coulomb-Stöße zwischen den Ionen die minimal erreichbare Temperatur. Für wesentlich kleinere Ionenzahlen wurde sogar eine Art Phasensprung in der Impulsbreite nachgewiesen

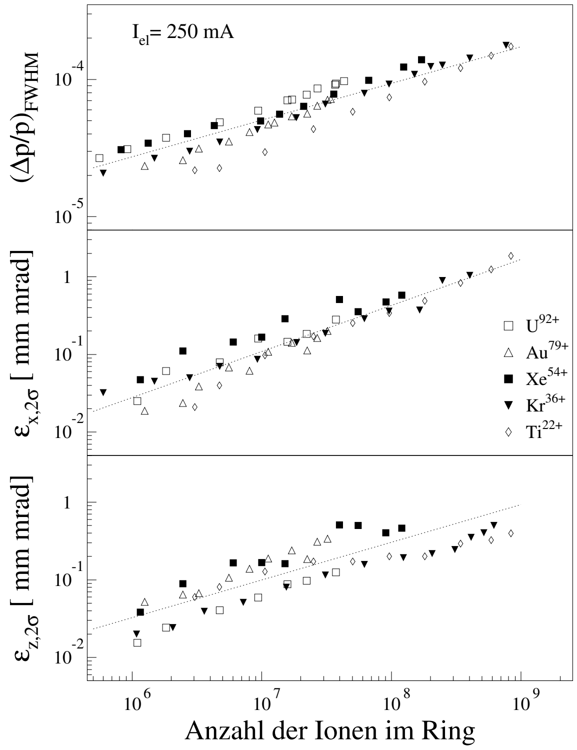


Abbildung 4.7. *Relative Impulsbreiten und transversale Emittanzen gespeicherter Ionenstrahlen im ESR [StB94]. In allen Fällen betrug der Elektronenstrom 250 mA.*

[StB96, Ste97]. Unterhalb einer gewissen Schwelle, die im Bereich einiger Tausend gespeicherter Ionen liegt, fällt die Impulsbreite drastisch auf einen konstanten Wert im 10^{-7} Bereich ab. Folglich scheinen Coulombstöße zwischen den Ionen vollständig unterdrückt zu sein, sobald der mittlere Abstand zwischen den Ionen im Zentimeterbereich liegt.

Vor Inbetriebnahme des Rings war eine weitere offene Frage das Problem des Umladungsverlustes der Strahlen als Folge der Rekombination freier Kühlerelektronen. Alle Abschätzungen erfolgten auf der Grundlage der einfachen nicht-relativistischen Stobbe-Näherung [Sto30], die es erlaubt, die für Protonen gemessenen Einfangsraten auf schwere Ionen wie z.B. Uran zu übertragen.

Die Umladungsrate λ_{RR} in einem Elektronenstrahl der Dichte ρ_e ist gegeben durch

$$\lambda_{\mathrm{RR}} = \frac{N \cdot \rho_e \cdot \eta_l}{\gamma^2} \cdot \alpha_{\mathrm{RR}}, \tag{4.7}$$

wobei N die Anzahl der gespeicherten Ionen und η_l das Verhältnis der Kühlerstrecke zur Gesamtlänge des Rings bezeichnet. Der Ratenkoeffizient α_{RR} erfordert die Faltung des RR-Querschnitts mit der Geschwindigkeit des Ionenstrahls und ist gegeben durch

$$\alpha_{\mathrm{RR}} = \int f(v) \cdot v \cdot \sigma_{\mathrm{RR}} \;\; \mathrm{d}^3 v. \tag{4.8}$$

Wird die Niederenergie-Näherung der Stobbe-Formel angenommen, so ergibt die Fal-

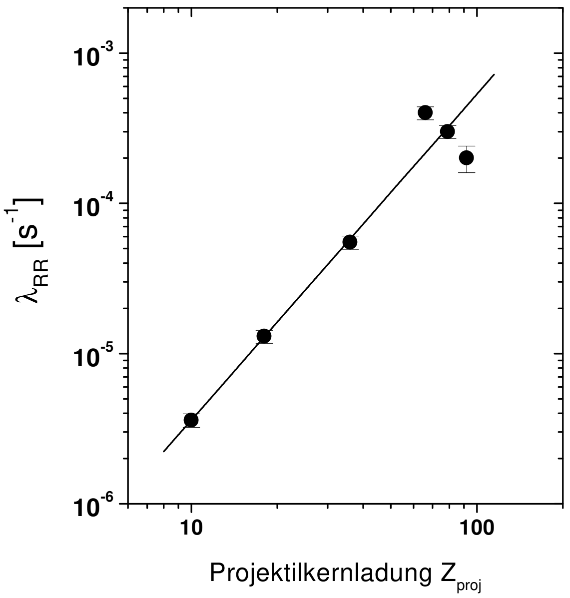


Abbildung 4.8. *Radiative Rekombinationsraten von Kühlerelektronen als Funktion der Projektilkernladung im Vergleich mit der Dipolnäherung [Bos92].*

tung mit einer Maxwell-Verteilung den folgenden einfachen Ausdruck für die Verlustrate durch Rekombination im Kühler [BeL89]:

$$\alpha_{\mathrm{RR}} = 3.02 \cdot 10^{-13} \frac{Z_{\mathrm{P}}^2}{\sqrt{kT_\perp}} \left[\ln \left(\frac{11.32 \cdot Z_{\mathrm{P}}}{\sqrt{kT_\perp}} \right) + 0.14 \cdot \left(\frac{\sqrt{kT_\perp}}{Z_{\mathrm{P}}^2} \right)^{\frac{1}{3}} \right]. \qquad (4.9)$$

In Abbildung 4.8 sind die Rekombinationsraten für Schwerionen, wie sie gleich nach der Inbetriebnahme des Speicherrings gemessen wurden [Bos92], dargestellt und mit der einfachen theoretischen Ratenabschätzung (4.8) verglichen. Offensichtlich befinden sich Theorie und Experiment in guter Übereinstimmung und die Strahllebensdauer liegt selbst für die schwersten, vollständig ionisierten Ionen im Stundenbereich.

4.3.4 Gasjettarget

Der Speicherring ESR ist der einzige Speicherring, der gegenwärtig mit einem internen Target [ReB97] ausgerüstet ist, das es ermöglicht, sowohl atomare Reaktions- als auch Spektroskopieexperimente durchzuführen [StK95].

In Abbildung 4.9 ist eine schematische Darstellung des ESR-Targets und seiner wesentlichen Betriebsparameter gegeben [ReB97]. Bei dem Target handelt es sich um einen vierstufigen Überschalljet, der sehr hohen Anforderungen genügen muß. So muß der Jet möglichst hohe Gasdichten im Bereich von 10^{12} Teilchen/cm^3 gewährleisten, wobei gleichzeitig das Vakuum des Speicherrings ($\approx 10^{-11}$ mbar) nicht beeinträchtigt werden darf. Im Standardbetrieb werden vor allem CH_4, N_2 und auch Ar als Targetgase eingesetzt, und mittlerweile können auch schwere Gase wie Kr und Xe für Experimente verwendete werden. Gegenwärtig wird zudem an einer Kühlung

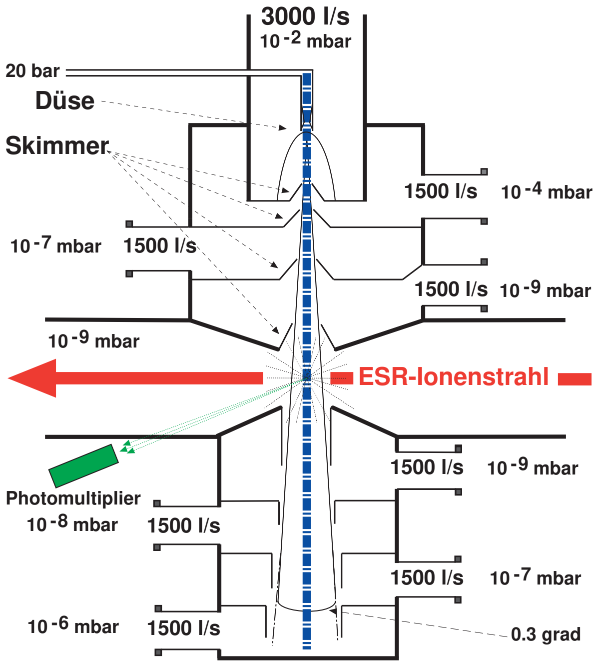


Abbildung 4.9: *Schematische Darstellung des internen Jettargets und seiner Betriebsparameter [ReB97].*

des Jettargets mit flüssigem Stickstoff gearbeitet, wodurch auch der Einsatz leichter Gase (H_2 und He) mit ausreichend hohen Dichten möglich sein sollte.

4.4 Fallen für hochgeladene Ionen

Bereits vor über 40 Jahren konnte erstmals erfolgreich demonstriert werden, daß sich hochgeladene Ionen durch aufeinander folgende Stöße mit hochenergetischen Elektronen erzeugen lassen [Plu57]. Zehn Jahre später erfolgte der eigentliche Durchbruch durch die von Donets entwickelte erste elektronenstrahlbetriebene Quelle für hochgeladene Ionen, der EBIS (*Electron Beam Ion Source*) [Don89]. Aufbauend auf dem EBIS-Konzept wurde in Livermore eine elektronenstrahlbetriebene Falle für hochgeladene Ionen entwickelt, in der zum einen hohe Ladungszustände erzeugt werden können und zum anderen Experimente mit den stationären Ionen möglich sind [MaL88, LeM89, MaB94]. Mittlerweile sind weltweit mehrere EBIT-Fallen in Betrieb, in denen üblicherweise mittelschwere hochgeladene Elemente untersucht werden. Die einzige EBIT, in der selbst nacktes Uran erzeugt werden kann, ist die Super-EBIT in Livermore [MaE94].

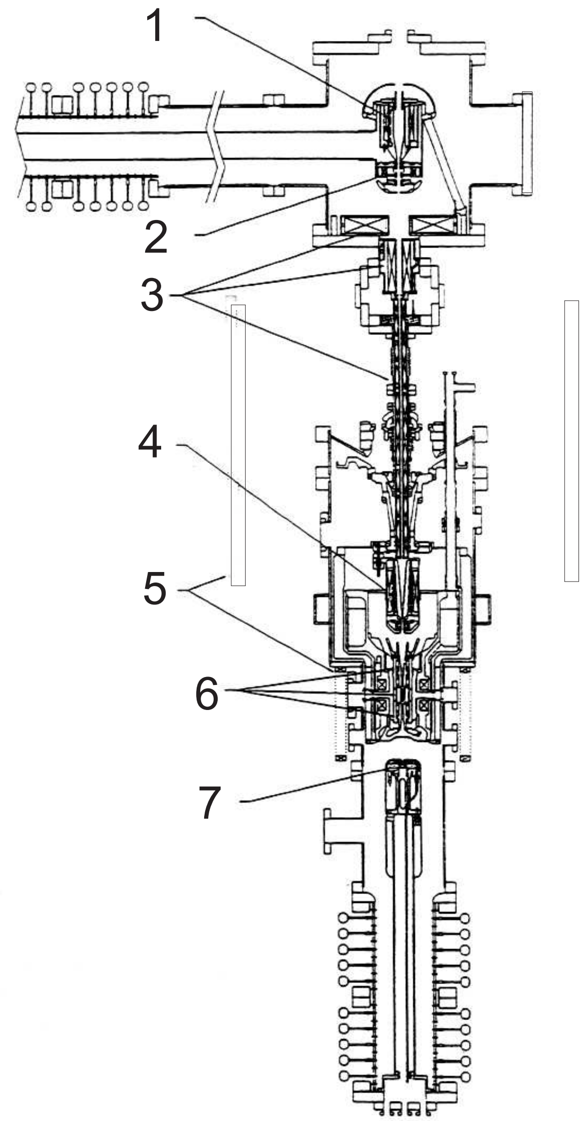


Abbildung 4.10. *Schematische Darstellung der Super-EBIT in Livermore [MaB94]:*
1) Kollektor
2) Suppressor, zur Unterdrückung von Sekundärelektronen
3) Transportmagnete
4) EBIT Kollektor
5) Bahn-Korrekturspulen
6) Driftröhren
7) Elektronenkanone
Die Elektronenkanone und der Kollektor befinden sich auf einem negativen Potential von -170 kV. Der Elektronenstrahl durchläuft die Driftröhren, die die Falle einschließen und an denen ein zusätzliches Potential von bis zu 40 kV angelegt werden kann.

4.5 Super-EBIT

Ein schematische Darstellung der Super-EBIT ist in Abbildung 4.10 gegeben, und die eigentliche Fallengeometrie kann aus Abbildung 4.11 entnommen werden.

Ein monoenergetischer Elektronenstrahl mit einer maximalen Energie von 200 keV und einer maximalen Stromstärke j von 200 mA durchläuft drei Driftröhren, wobei sich die eigentliche Falle in der mittleren Driftröhre befindet. Am Anfang eines Meßzyklus werden einfach und zweifach geladene Ionen aus einer Ionenquelle in die Falle eingeschossen. Zudem besteht auch die Möglichkeit, neutrale Gasatome (z.B. Xenon) direkt in die Falle einzulassen, in der sie durch Stöße mit den Elektronen ionisiert werden.

In der Falle werden die Ionen in radialer Richtung durch das negative Raumladungspotential des Elektronenstrahls gefangen (ca. 10 V). Zwischen der mittleren und den beiden äußeren Driftröhren wird zudem eine Potentialdifferenz zwischen 10 und 100 V angelegt, so daß die Ionen auch in axialer Richtung in der Falle gehalten werden. Außerdem befinden sich die Falle und die Driftröhren in einem drei Tesla starken Magnetfeld, das von zwei supraleitenden Spulen erzeugt wird und den Elektronenstrahl auf die extrem hohe Dichte von 5000 A/cm ^{2} komprimiert. Dies entspricht einem Strahlradius von nur 35 μm. Diese Dichte ist erforderlich, damit durch sehr häufige, aufeinander folgende Stöße hohe Ionisationswahrscheinlichkeiten erreicht werden. Die Ausdehnung der Falle beträgt in axialer Richtung 2 cm und in radialer Richtung ca. 1 mm.

Die Betriebsparameter der Super-EBIT, die zur Produktion nackter Uranionen verwendet wurden, sind zusammenfassend in Tabelle 4.2 wiedergegeben.

Strahlradius	35 μm
Strom	200 mA
Stromdichte	5000 A/cm^2 ($\rho_e \approx 10^{13}$)
Spannung	198 keV (100 eV FWHM)
Anzahl der Ionen	$\sim$5 $\times$ 10^4
Ionen Temperatur	$\sim$ 2·Q eV
Radiales Potential	$\sim$8V
Axiales Potential	30 V
Magnetfeld	3 T
Fallenlänge	2 cm

Tabelle 4.2: *Betriebsparameter der Super-EBIT, die zur Produktion nackter Uranionen verwendet wurden [Mar96].*

4.5.1 Produktion und Kühlung hochgeladener Ionen

Das dargestellte Prinzip ist aber noch nicht ausreichend, um den Betrieb der Falle zu gewährleisten. Der Beschuß der Ionen mit dem sehr intensiven und hochenergetischen Elektronenstrahl führt zu einer starken Aufheizung der Ionen, die folgender Abhängigkeit unterliegt [MaB95, StK97]:

$$\frac{\mathrm{d}E_{\mathrm{ION}}}{\mathrm{d}t} \propto \frac{j \cdot m}{E_{\mathrm{KIN}} \cdot M} \cdot Q_{\mathrm{ION}}^2, \tag{4.10}$$

mit j der Stromdichte und E_{KIN} der kinetischen Energie der Elektronen. Unter den obigen Bedingungen (Strahlenergie $\approx$200 keV und Stromstärke $\approx$200 mA) würden die U^{89+} Ionen, die im Gleichgewicht am häufigsten in der Falle vorkommen, einen Energieübertrag von 6 keV pro Sekunde erfahren. Ohne zusätzlichen Kühlmechanismus wird somit den hochgeladenen Ionen ausreichend kinetische Energie zugeführt, um das Fallenpotential zu überwinden.

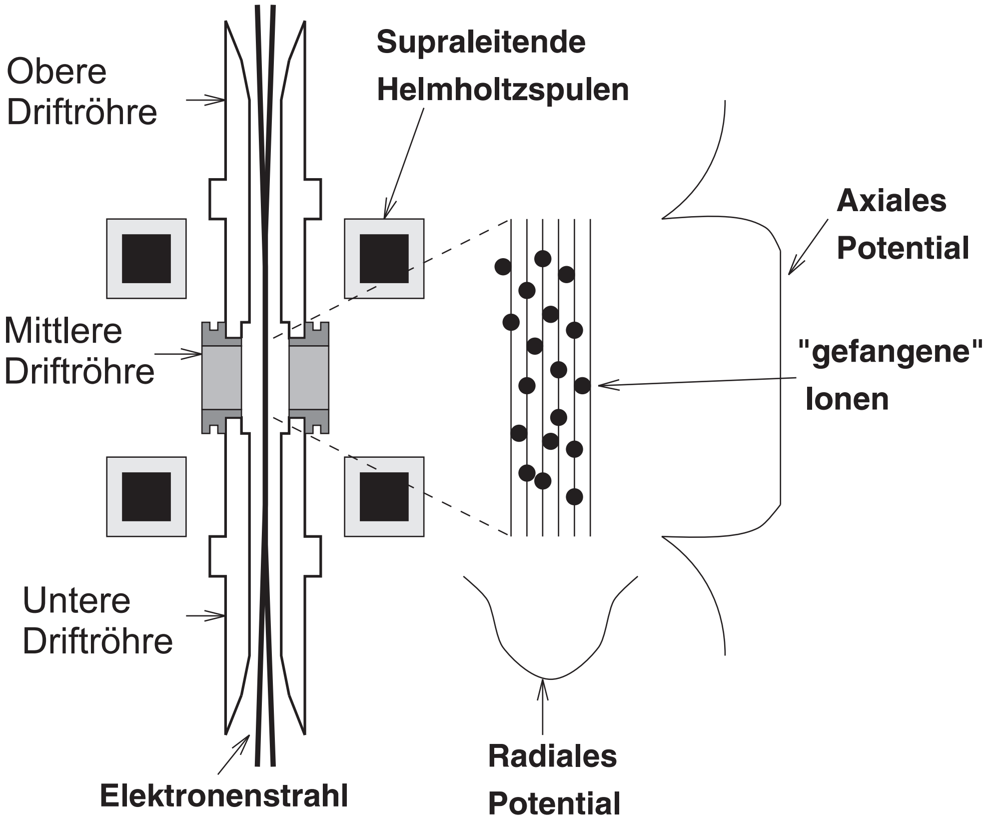


Abbildung 4.11: *Driftröhrengeometrie und der Potentialverlauf an der Super-EBIT [MaB94].*

Zum Kühlen der Ionen in der Falle wird die *evaporative* Kühltechnik angewendet (*Verdampfungskühlung*) [LeM88, ScL89], wozu ein Strahl neutraler Neonatome in die Falle eingelassen wird. Hierbei werden ca. 0.2% der Neonatome ionisiert und in die Falle eingefangen. Die Neonatome werden im wesentlichen durch Coulombstöße mit den schweren Ionen aufgeheizt (vgl. Gleichung 4.10), während das Aufheizen der Neonatome durch Stöße mit den Elektronen nahezu vernachlässigbar ist (das Prinzip der Verdampfungskühlung an der EBIT ist in Abbildung 4.12 illustriert). Durch Computersimulationen läßt sich zeigen, daß die Uranionen auf diese Weise auf eine Temperatur von etwa 80 eV abgekühlt werden können [PeB91].

Neben dem Kühlen der Ionen ist das Ladungsgleichgewicht von entscheidender Bedeutung für die Produktion der hochgeladenen Ionen. Die Gleichgewichtsladungsverteilung ist bestimmt durch die relativen Umladungsraten für Einfang und Ionisation. So folgt für das wichtige Verhältnis nackter und H-artiger Ionen in der Falle [MaB95]

$$\frac{N_{\mathrm{H}}}{N_{\mathrm{Nackt}}} = \frac{\sigma^{\mathrm{RR}}_{\mathrm{Nackt}\to\mathrm{H}}}{\sigma^{\mathrm{ION}}_{\mathrm{H}\to\mathrm{Nackt}}} + \frac{(e/j)\cdot\rho_0\cdot v\cdot\sigma^{\mathrm{CX}}_{\mathrm{Nackt}\to\mathrm{H}}}{\sigma^{\mathrm{ION}}_{\mathrm{H}\to\mathrm{Nackt}}}. \tag{4.11}$$

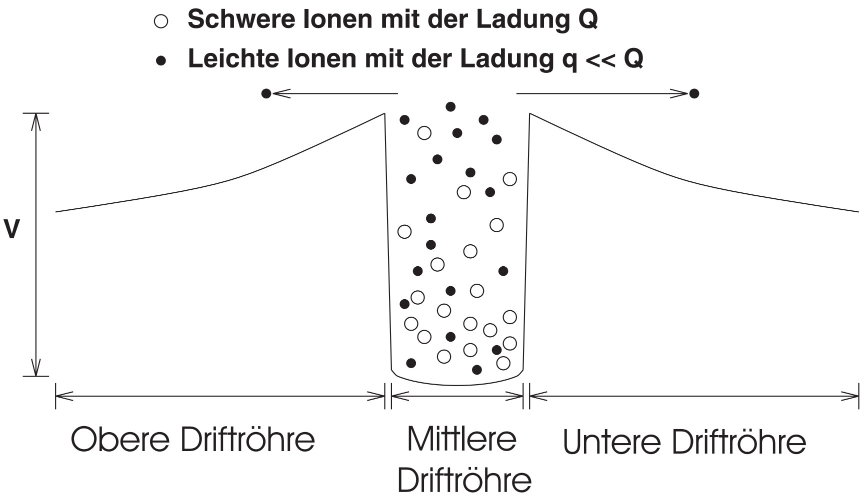


Abbildung 4.12: *Das Prinzip der Verdampfungskühlung an der EBIT. Schwere hochgeladene Ionen werden durch das Potential QV und niedrig geladene leichte Ionen durch qV in der Falle gehalten. Die Temperatur aller Ionen gleicht sich durch Ion-Ion Stöße aus. Vorzugsweise entkommen nur die niedrig geladenen Ionen.*

Der zweite Term in der Gleichung berücksichtigt den Ladungsaustausch zwischen den neutralen Gasatomen und den Ionen mit dem Wirkungsquerschnitt σ^{CX}, wobei v die mittlere Stoßgeschwindigkeit zwischen den Ionen und Atomen ist und ρ_0 die Dichte der Gasatome bezeichnet. Umladung durch Restgasatome kann hingegen vernachlässigt werden, da die gesamte Falle zum Betrieb auf eine Temperatur von 4 K abgekühlt ist. Die maximale Ausbeute an nackten Ionen läßt sich folglich nur erreichen, wenn ρ_0/j möglichst klein ist. Da für Uranionen bei einer Energie von 198 keV das Verhältnis $\sigma^{\mathrm{RR}}_{\mathrm{Nackt}\to\mathrm{H}}/\sigma^{\mathrm{ION}}_{\mathrm{H}\to\mathrm{Nackt}} \simeq 40$ ist, wird immer $N_{\mathrm{Nackt}} \ll N_{\mathrm{H}}$ gültig sein, während für leichtere Elemente bis zu 90% der Ionen vollständig ionisiert sein können. Für Uran hingegen wurden im Mittel 500 Ionen im H-artigen Zustand und etwa 10 nackte Ionen nachgewiesen, wobei insgesamt 5×10^4 hochgeladene Ionen in der Falle gefangen waren [MaE94].

4.5.2 Röntgendiagnostik

Aufgrund der Fallengeometrie stellen die Röntgenspektren der Ionen die einzige Möglichkeit dar, Information über das Ladungsgleichgewicht in der Super-EBIT zu gewinnen. So wurde bereits bei der Konstruktion der EBIT darauf geachtet, daß die mittlere Driftröhre mehrfach unterteilt ist, um eine ungehinderte Messung der Röntgenstrahlung vornehmen zu können [MaB94].

Die Röntgenstrahlung kann an mehreren Stellen außerhalb der Super-EBIT nachgewiesen werden, wobei die verwendeten Detektoren oder auch Spektrometer durch

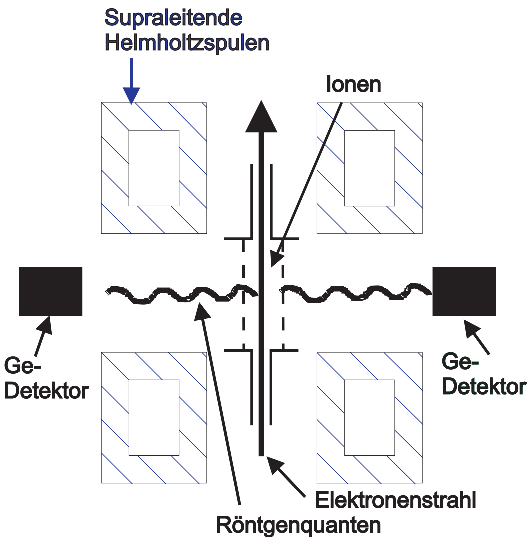


Abbildung 4.13. *Detektorgeometrie zum Nachweis hochenergetischer Röntgenstrahlung an der Super-EBIT.*

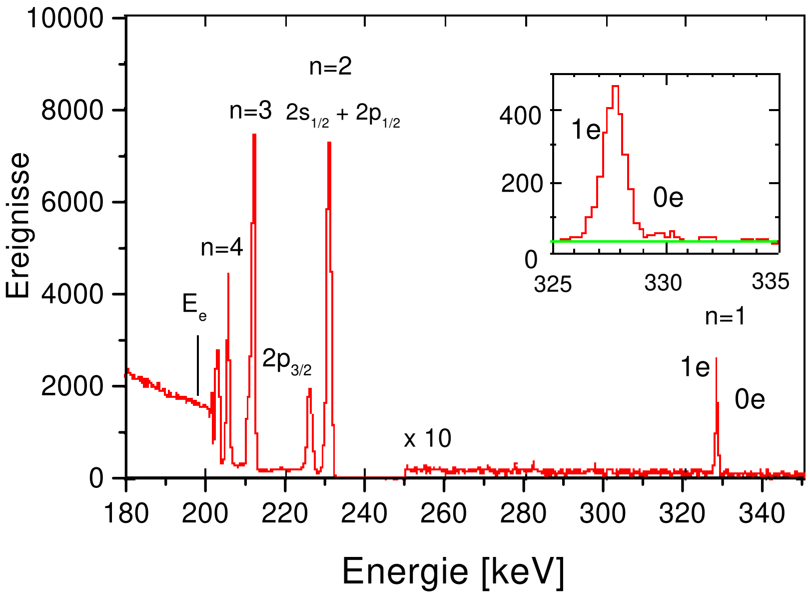


Abbildung 4.14: *Röntgenspektrum hochgeladener Uranionen. Das Spektrum wurde an der Super-EBIT gemessen [MaE94]. Die hierbei verwendeten Betriebsparameter sind in Tabelle 4.1 wiedergegeben. Im oberen Teil der Abbildung ist der K-RR Bereich des Spektrums vergrößert dargestellt.*

Be-Fenster vom Vakuum der Super-EBIT getrennt sind. In Abbildung 4.13 ist die übliche Detektorgeometrie gezeigt, wie sie zum Nachweis der hochenergetischen Röntgenstrahlung durch einen Germanium-Festkörperdetektor verwendet wird. Mit diesem Aufbau wurde auch das Röntgenspektrum von Uran aufgenommen (vgl. Abbildung 4.14) [MaE94], aus dem die oben genannten Daten zur Ladungsverteilung hochgeladener Uranionen gewonnen wurden. Nach Gleichung 4.11 läßt sich diese Information im wesentlichen aus der beobachteten Intensität der K-Schalen Rekombinationsstrahlung und der Annahme gewinnen, daß die theoretischen RR-Querschnitte hinreichend gut bekannt sind (eine ausführliche Darstellung dieser Methode ist in Ref. [MaE94] und Ref. [StK97] gegeben). Die K-Schalenrekombinationslinien treten gut aufgelöst im hochenergetischen Bereich des Röntgenspektrums auf, das noch zusätzlich separat in dem oberen Spektrum in Abbildung 4.14 dargestellt ist. Deutlich ist in dem Spektrum der drastische Intensitätsunterschied zwischen der Rekombinationslinie für nacktes und der für H-artiges Uran zu erkennen (in der Abbildung mit 0e und 1e gekennzeichnet). Ebenfalls gut zu erkennen sind die Rekombinationslinien für die j-Unterzustände der L-Schale ($2p_{3/2}$ und $2s_{1/2}$+$2p_{1/2}$) und auch die Übergänge in die M- und N-Schale bis hin zur Seriengrenze heben sich deutlich vom Untergrund ab. Die Seriengrenze überlappt mit dem Endpunkt der Bremsstrahlung des Elektronenstrahls (E_{e}), der bei 198 keV liegt.

Neben der Röntgenstrahlung lassen sich ebenso Photonenübergänge, die im optischen Bereich und im VUV und UV-Bereich liegen, zu Diagnosezwecken verwenden. Eine Übersicht über alle zusätzlichen Methoden ist in Ref. [Mar91] gegeben.

Kapitel 5

Röntgenspektroskopie mit relativistischen Schwerionen am Speicherring ESR

Sowohl der Elektronenkühler als auch das Jettarget sind die zentralen Experimentierplätze für die Röntgenspektroskopie am Speicherring. Am Elektronenkühler erfolgt die Bevölkerung angeregter Projektilniveaus durch Rekombination (vgl. Abschnitt 3.1 und Abschnitt 4.3.1) der freien Kühlerelektronen in die umlaufenden nackten Ionen, und der Zerfall dieser Niveaus führt durch Kaskadenübergänge zur Emission eines Lyman-Photons. Ebenso werden am internen Target die angeregten Niveaus durch den Einfang von Elektronen bevölkert. Hier kommt es in Stößen der Projektile mit den Targetatomen entweder zum radiativen oder zum nicht-radiativen Elektroneneinfang. Somit wird an beiden Meßplätzen die Emission von Projektilphotonen durch einen Umladungsmechanismus hervorgerufen, und der Nachweis der Photonen kann in Koinzidenz mit den umgeladenen Projektilen erfolgen.

Im folgenden werden die sehr unterschiedlichen Experimentierbedingungen am Elektronenkühler und am internen Target erläutert, und vor allem wird die Emissionscharakteristik schwerer H-artiger Projektile diskutiert. Es sei hier angemerkt, daß vor der Inbetriebnahme des ESR praktisch keine Information über die Röntgenstrahlung schwerer Projektile mit definiertem Ladungszustand vorhanden war. Erst durch die experimentellen Studien am ESR und durch die begleitende theoretische Forschung konnte ein Detailverständnis der Spektren erreicht werden. Vor der Diskussion der Röntgenemission schwerer Ionen muß jedoch erst auf die Herausforderung eingegangen werden, die sich für alle Spektroskopie-Experimente aus der relativistischen Projektilbewegung ergibt.

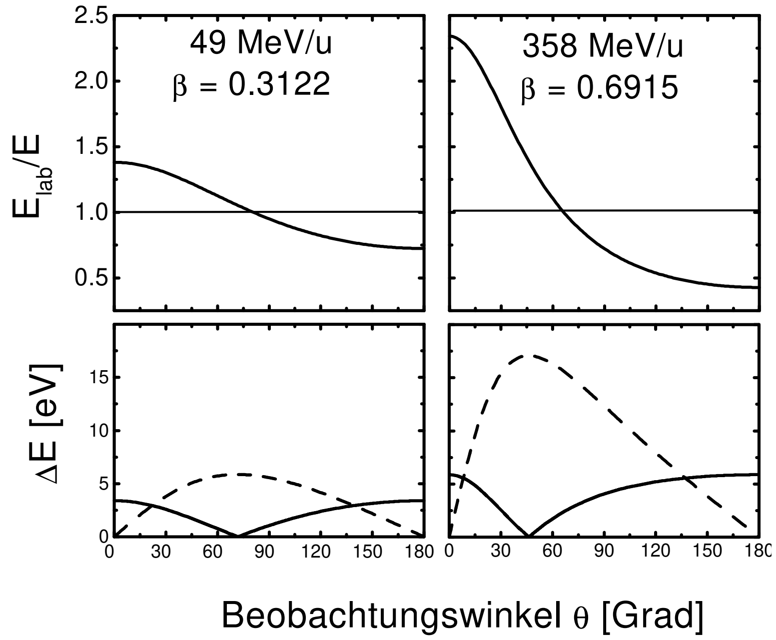


Abbildung 5.1: *Oberer Teil der Abbildung: die Stärke der Dopplerverschiebung als Funktion des Beobachtungswinkels θ für zwei Strahlenergien (vgl. Gleichung 5.1). Unterer Teil der Abbildung: Unsicherheiten für die Lyα_1-Übergangsenergie (102.171 keV) in U^{91+} als Folge der Dopplertransformation (vgl. Gleichung 5.2). Die gestrichelte Linie bezieht sich auf die Unsicherheit, die aus einem Fehler in β von $\Delta\beta = 3 \cdot 10^{-5}$ folgt. Die durchgezogene Linie gibt den Fehler wieder, der Folge einer unsicheren Kenntnis des Beobachtungswinkels θ von $\Delta\theta$=0.01° ist.*

5.1 Doppler-Korrekturen

Wie im Kapitel 4 erläutert erfordert die effiziente Produktion schwerster vollständig ionisierter Ionen eine Energie von mindestens 300 MeV/u, was bedeutet, daß sich die Ionen mit mindestens 65% der Lichtgeschwindigkeit bewegen. Hierdurch kommt der relativistische Doppler-Effekt zum Tragen, so daß die Energie der im Projektilsystem emittierten Strahlung im Laborsystem stark verschoben auftritt. Die relativistische Doppler-Transformation, die durch den Transformationsfaktor $D(\beta, \theta)$ beschrieben werden kann, ist gegeben durch

$$\begin{aligned} E &= \gamma \cdot (1 - \beta \cos\theta) \cdot E_{\mathrm{LAB}} \\ &= D(\beta, \theta) \cdot E_{\mathrm{LAB}}. \end{aligned} \tag{5.1}$$

Um aus einer Messung im Laborsystem auf die Photonenenergie im Projektilsystem schließen zu können, ist somit eine möglichst genaue Kenntnis sowohl des Beobachtungswinkels θ als auch der absoluten Geschwindigkeit β erforderlich. Die Unsicherheiten in β und in θ bestimmen schließlich die erreichbare Genauigkeit einer Messung. Der Einfluß beider Faktoren hängt wiederum stark von der Wahl der Geschwindigkeit und des Beobachtungswinkels ab und läßt sich aus der Ableitung von Gleichung 5.1 bestimmen, die gegeben ist durch:

$$\left(\frac{\Delta E}{E}\right)^2 = \left(\frac{\beta \sin\theta}{1-\beta\cos\theta}\cdot\Delta\theta\right)^2 + \left(\gamma^2\frac{\cos\theta-\beta}{1-\beta\cos\theta}\cdot\Delta\beta\right)^2 + \left(\frac{\Delta E_{\mathrm{LAB}}}{E_{\mathrm{LAB}}}\right)^2. \quad (5.2)$$

Der letzte Term in der Gleichung beschreibt den statistischen Fehler der Messung. Somit folgt aus der Gleichung, daß aufgrund des $\sin\theta$-Terms die Unsicherheit $\Delta\theta$ unter den Beobachtungswinkeln 0° und 180° keinen Einfluß auf die Meßergebnisse hat. Jedoch ist hier der Einfluß von $\Delta\beta$ am größten. Des weiteren läßt sich der durch $\Delta\beta$ hervorgerufene Fehler minimieren, indem der Beobachtungswinkel $\theta = \arccos\beta$ gewählt wird, der auch häufig als *magischer Winkel* bezeichnet wird. Jedoch erreicht hier die durch $\Delta\theta$ bedingte Unsicherheit ihren maximalen Wert. Vollständigkeitshalber muß noch angemerkt werden, daß $\Delta\theta$ und $\Delta\beta$ auch als Breiten interpretiert werden können und somit Gleichung 5.2 auch die im Laborsystem auftretende Dopplerbreite beschreibt.

In Abbildung 5.1 sind die diskutierten Eigenschaften der Doppler-Transformation für das konkrete Beispiel des Lyα_1-Übergangs (102 173 eV) in U^{91+} veranschaulicht. Im oberen Teil der Abbildung ist die Stärke der Dopplerverschiebung als Funktion des Beobachtungswinkels θ für zwei Strahlenergien dargestellt. Im unteren Teil der Abbildung sind die Unsicherheiten bzw. Breiten wiedergegeben, wie sie unter der Annahme von $\Delta\beta = 3\cdot 10^{-5}$ (durchgezogene Linie) und $\Delta\theta = 0.01°$ (gestrichelte Linie) aus der Gleichung 5.2 folgen. Die dargestellten Abhängigkeiten legen den Schluß nahe, daß ein experimenteller Aufbau entweder in Bezug auf den Beobachtungswinkel oder in Bezug auf die Ionengeschwindigkeit optimiert werden muß, je nachdem, welcher der beiden Parameter mit der größeren Genauigkeit bekannt ist. Außerdem ist offensichtlich, daß die Strahlenergie so niedrig wie möglich gewählt werden sollte, um den Einfluß der experimentellen Unsicherheiten möglichst zu reduzieren.

Schließlich sei auch noch auf den Effekt der relativistischen Raumwinkeltransformation hingewiesen, der in einem quadratischen Zusammenhang mit der Energietransfomation steht [EiM95] (siehe hierzu auch Gleichung 3.13):

$$\frac{\mathrm{d}\Omega_{\mathrm{LAB}}}{\mathrm{d}\Omega} = \left(\frac{E_{\mathrm{LAB}}}{E}\right)^2 \quad (5.3)$$

Auch diese Transformation ist von großer Relevanz für die Planung und Durchführung von Röntgenexperimenten an Beschleunigern, gibt sie doch Auskunft über die Nachweiseffizienz des geometrischen Aufbaus. So variiert bei einer Geschwindigkeit

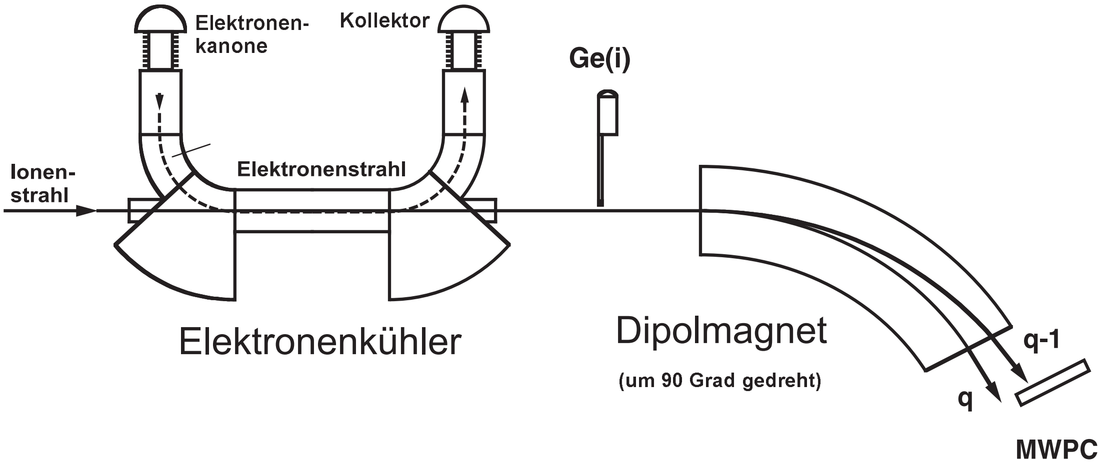


Abbildung 5.2: *Schematische Darstellung der Experimentgeometrie zum Nachweis der Röntgenstrahlung am Elektronenkühler des ESR [Bey95]. Die Photonenemission als Folge der radiativen Rekombination wird nahe unter 0° beobachtet und in Koinzidenz mit den umgeladenen Projektilen nachgewiesen. Hierzu dient der Teilchendetektor (MWPC), der sich hinter dem nächstliegenden Dipolmagneten befindet.*

von $\beta = 0.69$ die Intensität einer im Emittersystem isotropen Röntgenlinie im Laborsystem, abhängig vom Beobachtungswinkel, um eine Größenordnung.

5.2 Röntgenproduktion und Nachweis am Elektronenkühler

Die experimentelle Situation am Elektronenkühler sei anhand der Abbildung 5.2 erläutert. Die Röntgenstrahlung wird am Elektronenkühler mit einem Röntgendetektor nahe einem Beobachtungswinkel von 0° nachgewiesen, dessen Entfernung zur Mitte des Elektronenkühlers 4.2 m beträgt [BeM95]. Bei dem Röntgendetektor handelt es sich um einen konventionellen, planaren Germanium-Detektor (Ge(i)) mit einer Kristalldicke von 15 mm, der, durch ein 100 μm dickes Edelstahlfenster vom Vakuum des ESR getrennt, den Wechselwirkungsbereich zwischen Kühlerelektronen und Ionen beobachtet. Der Detektor ist über einen fernsteuerbaren Schrittmotor verfahrbar und wird für jeden Meßzyklus in vertikaler Richtung auf eine Distanz von nur wenigen Millimetern an den umlaufenden Strahl herangefahren. Wird nach dem Ende eines Meßzyklus der Ring aufs neue mit Ionen gefüllt (akkumuliert), so ist es erforderlich, den Detektor außerhalb der Strahlführung zu positionieren, da zum Akkumulieren der ungekühlten Ionen die volle Ringakzeptanz benötigt wird. In der Meßposition sieht der Detektor unter dem Winkel von 0.55° auf die Mitte des Elektronenkühlers, während über die gesamte Länge des Elektronenstrahls der Beobachtungswinkel zwischen 0.44°

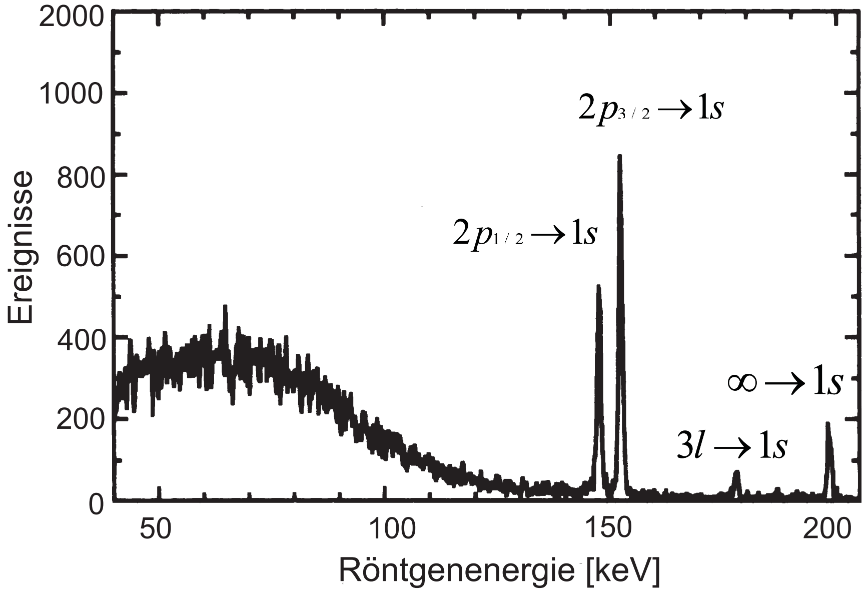


Abbildung 5.3: *Röntgenspektrum H-artiger Goldionen ($Z = 79$), aufgenommen am Elektronenkühler bei einer Energie von 266 MeV/u (Laborsystem) [BeF93]. Die Radiative Rekombinationsstrahlung für Einfang in die K-Schale ist mit $\infty \rightarrow 1s$ gekennzeichnet.*

und 0.8° variiert. Für eine typische Röntgenenergie von ca. 200 keV führt diese Winkelakzeptanz zu einer Dopplerbreite von ca. 30 eV, die im Vergleich zu der Auflösung des Detektors von 700 eV bei 122 keV vernachlässigt werden kann [Bey95, BeM95]. Wie bereits ausgeführt, sind unter diesen geometrischen Voraussetzungen die Unsicherheiten im Beobachtungswinkel unkritisch, jedoch erfordern die Experimente am Elektronenkühler eine möglichst genaue Bestimmung der Geschwindigkeit.

In den Experimenten am Kühler erfolgt die Röntgenmessung in Koinzidenz mit den umgeladenen Ionen (vgl. Abbildung 5.2), die mit einem MWPC (*Multi Wire Proportional Counter*) nachgewiesen werden, der sich hinter dem nächstliegenden Dipolmagneten befindet. Für den Fall von gespeicherten Goldionen ist ein entsprechendes, koinzidentes Röntgenspektrum in Abbildung 5.3 gezeigt [BeF93]. Hier betrug die Ionenenergie 266 MeV/u, und deutlich sind in dem Spektrum die Lyα-Übergänge zu erkennen. Wegen $E_{\mathrm{LAB}} \approx 2.1 \cdot E$ treten sie bei einer Energie von ca. 150 keV auf ($E \approx 72\ keV$). Der niederenergetische Bereich des Spektrums ist durch die Bremsstrahlung der Kühlerelektronen bestimmt, dessen Endpunkt durch die Kühlerspannung U mit

$$eU = mc^2(\gamma - 1) \tag{5.4}$$

gegeben ist.