

FACHBEREICH PHYSIK  
GOETHE UNIVERSITÄT FRANKFURT AM MAIN

DIPLOMARBEIT  
IM STUDIENGANG PHYSIK

VORGELEGT VON  
RENATE MÄRTIN  
AUS MARSBERG

2009



# Entwicklung eines Kristallspektrometers zur Untersuchung von Innerschalenübergängen in hochgeladenen Ionen

Die Arbeit wurde ausgeführt an der  
Gesellschaft für Schwerionenforschung in Darmstadt  
unter der Betreuung von

PROF. DR. THOMAS STÖHLKER

PROF. DR. REINHARD DÖRNER



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Physikalischer Hintergrund - Röntgenstrahlung</b>	<b>3</b>
2.1	Bremsstrahlung - Erzeugung von Röntgenstrahlen . . . . .	3
2.2	Charakteristische Strahlung . . . . .	4
2.2.1	Struktur der Elektronenhülle . . . . .	5
2.2.2	Feinstruktur der Elektronenhülle . . . . .	6
2.3	Absorption und Streuung von Röntgenstrahlen . . . . .	7
2.4	Natürliche Linienbreiten . . . . .	10
2.5	Neue Röntgenquellen . . . . .	10
<b>3</b>	<b>Bragg-Kristallspektrometer</b>	<b>13</b>
3.1	Das Bragg-Gesetz . . . . .	13
3.2	Typen von Kristallspektrometern . . . . .	14
3.2.1	Spektrometer mit ebenen Kristallen . . . . .	14
3.2.2	Von-Håmos-Geometrie - Vertikale Fokussierung . . . . .	15
3.2.3	Johann-Geometrie - Horizontale Fokussierung . . . . .	15
3.3	Kristallstrukturen und deren Eigenschaften . . . . .	18
3.4	Eigenschaften und Abbildungsfehler der Johann-Geometrie . . . . .	20
<b>4</b>	<b>Bragg Spektrometer - <math>K\alpha_1</math>, <math>K\alpha_2</math> Emissionsspektrum von Kupfer</b>	<b>23</b>
4.1	Satellitenübergänge . . . . .	23
4.2	Referenzlinien im Röntgenbereich . . . . .	25
4.3	Experimenteller Aufbau des Kristallspektrometers . . . . .	26
4.3.1	Der Kristall . . . . .	26
4.3.2	Röntgenröhre und Target . . . . .	29
4.3.3	Maske . . . . .	29
4.3.4	CCD-Kamera . . . . .	30
4.3.5	Clusteranalyse . . . . .	34
4.4	Experimentelle Ergebnisse und Analyse . . . . .	36
4.4.1	Clusteranalyse und Energiefenster (Energy Cuts) . . . . .	36
4.4.2	Krümmungskorrektur . . . . .	38
4.4.3	Analyse der $K\alpha_1$ , $K\alpha_2$ -Linien . . . . .	39
<b>5</b>	<b>Der <math>n=2</math> <math>^3P_2 \rightarrow ^3S_1</math> Innerschalenübergang in He-ähnlichen Uran</b>	<b>43</b>
5.1	Theorie . . . . .	43
5.2	Lamb Verschiebung - QED Effekte . . . . .	44
5.2.1	Selbstenergie . . . . .	46
5.2.2	Vakuumpolarisation . . . . .	46
5.2.3	Kerneffekte . . . . .	46

5.2.4	Mehrelektronensysteme - He-artige Systeme . . . . .	48
5.2.5	Innerschalenübergänge . . . . .	49
5.2.6	Li-artige Systeme . . . . .	50
5.2.7	$1s2p^3P_2 \rightarrow 1s2s^3S_1$ -Übergang in He-artigen Uran . . . . .	51
<b>6</b>	<b>Messung des <math>n=2</math> <math>^3P_2 \rightarrow ^3S_1</math>-Übergangs in He-ähnlichen Uran</b>	<b>53</b>
6.1	Experimenteller Aufbau und Durchführung . . . . .	53
6.1.1	Der GSI Beschleunigerkomplex . . . . .	53
6.1.2	Relativistische Korrekturen aufgrund bewegter Strahlungsquellen	57
6.2	Aufbau und Messung . . . . .	60
6.3	Datenanalyse . . . . .	63
6.3.1	Zinkspektrum . . . . .	63
6.3.2	Helium- und Li-artiges Uran . . . . .	64
6.3.3	Fehleranalyse . . . . .	66
6.4	Vergleich Experiment - Theorie . . . . .	67
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>71</b>
<b>8</b>	<b>Anhang</b>	<b>75</b>

# Kapitel 1

## Einleitung

Ernest Rutherford legte 1911 den Grundstein für die Untersuchung des Aufbaus und der Struktur der Atome. Seitdem wurden die experimentellen Methoden der Spektroskopie an Atomen und damit die Erkenntnis über deren Struktur immer vielseitiger und akkurater. Gleichzeitig wurden die Theorien, welche Modelle zur Erklärung der experimentellen Ergebnisse lieferten, entwickelt. Dirac vereinte erfolgreich Quantenmechanik und spezielle Relativitätstheorie. Diese Dirac-Theorie enthält den Spin  $\vec{s}$  des Elektrons, so dass die atomare Struktur unter Berücksichtigung der Kopplung von Spin und Bahndrehimpuls des Elektrons beschrieben werden kann. Jedoch kann Diracs Theorie die experimentell gemessenen Bindungsenergien der Elektronen in Atomen nicht vollständig wiedergeben. 1947 lieferte das Experiment von Lamb abweichende Ergebnisse für die Bindungsenergien nach der Dirac-Theorie. Entsprechende Korrekturen zur Quantenmechanik mussten eingeführt werden. Daraus entwickelte sich die Quantenelektrodynamik (QED), eine der gegenwärtig am genauesten überprüften Theorien der Physik. Dies gilt vor allem für den Bereich niedriger Kernladungen wie z.B. beim Wasserstoffatom. Im Bereich der extrem starken Coulombfelder, wie sie in den schweren Atomen oder Ionen vorzufinden sind, ist die Gültigkeit der QED nach wie vor zu überprüfen. In Systemen mit hoher Kernladungszahl sind die Korrekturen aufgrund der dort herrschenden starken Felder gravierender als in leichten Systemen und bieten somit eine ausgezeichnete Möglichkeit, diese mittels Röntgenspektroskopie zu studieren.

In den letzten Jahren fanden viele methodische Verbesserungen in der Röntgenspektroskopie statt. Zum Beispiel in der Entwicklung von positionsempfindlichen Halbleiterdetektoren und Mikrokalorimetern, welche eine immer besser werdende Energieauflösungen erreichen. Gleichzeitig eröffnen sich immer neuere Anwendungsgebiete. Diese reichen von spektroskopischen Untersuchungen von Ionen bis hin zu Experimenten an Synchrotronquellen wie auch zu Strahlungsquellen der neueren Generation (Freie Elektronen-Laser)

Eine klassische und für Präzisionsmessungen sehr gut geeignete Methode zur Spektroskopie von Röntgenstrahlen ist die Kristallspektroskopie. Seit W.L. Bragg (1912) findet diese Technik weitreichende Anwendung in vielen Feldern der Physik, u.a. in der Röntgenspektroskopie. Die hohe Auflösung ermöglicht hochpräzise Messungen mit einer Genauigkeit im Bereich von 1 eV bei Energien von einigen keV. Diese Auflösung ist mit anderen Methoden wie z.B. Halbleiterdetektoren nicht erreichbar. Somit erweist sich die Kristallspektroskopie an hochgeladenen Ionen als eines der präzisesten Verfahren, um atomare Systeme zu untersuchen und die dazugehörigen Theorien zu testen. In der vorliegenden Arbeit wird ein Bragg-Kristallspektrometer in der Johann-Geometrie

präsentiert. Dieses wurde erfolgreich zur ersten direkten Messung des Innerschalenübergangs ( $1s2p^3P_2 \rightarrow 1s2s^3S_1$ ) in He-artigen Uran eingesetzt. Darüber hinaus konnte die dazugehörige Übergangsenergie mit einer Genauigkeit von  $10^{-4}$  bestimmt werden. Diese Präzision ermöglicht u.a. die Studie von quantenelektrodynamischen Effekten und die Überprüfung der dazugehörigen Theorien. Darüber hinaus kann neben der Quantenelektrodynamik auch der Einfluss der Elektron-Elektron-Wechselwirkung auf die atomaren Bindungsenergien studiert werden. Da für Zwei-Elektronen-Systeme der hohen Kernladungszahlen  $Z$  so gut wie keine experimentellen Daten existieren, stellt sich das erfolgreich durchgeführte Experiment als besonders wichtig heraus.

Die Arbeit ist in zwei Teile gegliedert. Im ersten Teil wird zunächst das Braggkristallspektrometer vorgestellt (Kapitel 2 bis 4). Dazu gehört eine Einführung in die Theorie der Röntgenspektren und in die verschiedenen kristallspektroskopischen Untersuchungsmethoden. Eine weitere Aufgabe ist, dieses Spektrometer im Labor aufzubauen und eine Testmessung durchzuführen. Diese Aufgabe wird zum Anlass genommen, das Spektrometer und dessen Eigenschaften ausführlich zu beschreiben. Des Weiteren werden die für das Spektrometer relevanten Analysemethoden vorgestellt.

Im zweiten Teil der Arbeit (Kapitel 5 und 6) wird die Messung mit dem Kristallspektrometer in He-artigen Uran beschrieben. Dazu gehört eine Einführung in die theoretischen Beschreibungen und Motivation, der experimentelle Aufbau und eine anschließende Präsentation der Ergebnisse und deren Analyse.



# Kapitel 2

## Physikalischer Hintergrund - Röntgenstrahlung

1895 entdeckte Wilhelm Conrad Röntgen die Röntgenstrahlen, welche er als „X-Strahlen“ bezeichnete. Diese elektromagnetische Strahlung ist im Vergleich zu sichtbarem Licht sehr energiereich und hat die Eigenschaften, dass sie Materie fast ungehindert durchdringen und im Gegensatz zu geladenen Teilchen weder durch elektrische noch durch magnetische Felder abgelenkt werden kann. Des Weiteren wirken Röntgenstrahlen ionisierend auf Materie.

Man kann weiche (energieärmere) und harte (energiereichere) Röntgenstrahlen unterscheiden. Röntgenstrahlen liegen im Energiebereich von 0,1 bis 100 keV.

Heutzutage findet die Röntgenstrahlung eine vielfältige Anwendung. Insbesondere in der Medizin wird sie als diagnostisches Mittel (z.B. Computertomographie) und für den therapeutischen Zweck (z.B. Strahlentherapie) verwendet. In der Materialforschung und Kristallographie wird sie für Analyse von Festkörpern verwendet. Aber auch in der Astrophysik und in anderen Feldern findet sie ihre breite Anwendung.

Im Folgenden wird die Erzeugung der Röntgenstrahlung vorgestellt, dabei wird zwischen Röntgenbremsstrahlung und charakteristischer Röntgenstrahlung unterschieden. Zusätzlich wird die Entstehung der daraus resultierenden charakteristischen Röntgenspektren erläutert. Des Weiteren werden Typen von Röntgenquellen, welche von der Röntgenröhre bis hin zu den neuen Röntgen-Elektronen-Lasern reichen, kurz vorgestellt.

### 2.1 Bremsstrahlung - Erzeugung von Röntgenstrahlen

Durch das Abbremsen von energiereichen Elektronen (keV bis MeV) beim Eindringen in Materie entsteht eine kontinuierliche spektrale Intensitätsverteilung  $I(\nu)$  (Abb. 2.2). Die Elektronen werden im Coulombfeld der Atomkerne des Materials abgelenkt und abgebremst (Abb. 2.1). Das abgebremste Elektron stellt eine beschleunigte Ladung dar. Gemäß der klassischen Elektrodynamik strahlen beschleunigte Ladungen elektromagnetische Strahlung ab. Der Intensitätsverlauf dieser Strahlung im Bremsstrahlungsspektrum hängt von der kinetischen Energie des Elektrons und von dem Targetmaterial ab. Von diesem Effekt macht man bei der Röntgenröhre Gebrauch, die im folgenden kurz vorgestellt wird.

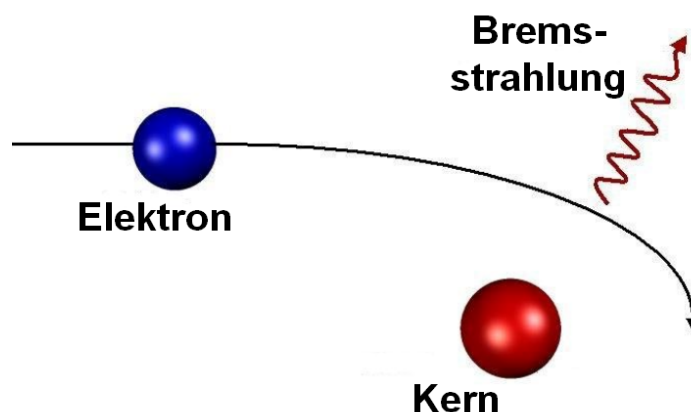


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung des Abbremsens eines Elektrons im Coulombfeld eines Atomkerns

Die durch die Spannung  $U$  beschleunigten Elektronen ( $E_e = eU$ ) werden auf eine Festkörperanode (z.B. Wolfram, Molybdän, Tantal) geschossen. Für die maximale Energie der ausgesandten Strahlung gilt:

$$E_{max} = eU = h\nu_{max} \quad (2.1.1)$$

$U$  ist die Beschleunigungsspannung,  $e^-$  die Ladung des Elektrons,  $h$  die Planckkonstante und  $\nu_{max}$  ist die sogenannte Grenzfrequenz.

Bei der Röntgenröhre beobachtet man immer das kontinuierliche Bremsspektrum und zusätzlich ein charakteristisches Linienspektrum (Abschnitt 2.2).

Bei den in dieser Arbeit durchgeführten Untersuchungen mit dem Kristallspektrometer wurde für die Erzeugung der gewünschten Kupfer- und Zinkreferenzlinien (vgl. Kapitel 4 und 6) eine Röntgenröhre mit einer Molybdänanode eingesetzt [1, 2].

## 2.2 Charakteristische Strahlung

Besitzen beschleunigte Elektronen bzw. energetische Photonen genügend Energie, so können sie gebundene Elektronen aus einer Schale eines Atoms herausschlagen. Dieser Vorgang wird als Ionisation bezeichnet. Dadurch wird das Atom in einen angeregten, instabilen Zustand versetzt. Ein Elektron aus einer höheren Schale kann nun die leere Schale auffüllen (Abb. 2.4). Dabei wird ein Photon mit der Energie

$$h\nu_{if} = E_i - E_f = \Delta E_{if} \quad (2.2.1)$$

frei.  $E_i$  bezeichnet die Energie des Anfangszustandes und  $E_f$  die Energie des Endzustandes des Elektrons. Die genaue Struktur der Elektronenhülle wird in den folgenden Abschnitten erläutert.

Sobald die notwendige Energie zum Herausschlagen eines gebundenen Elektrons vorhanden ist, ist die damit verbundene charakteristische Linie sowie alle Emissionslinien

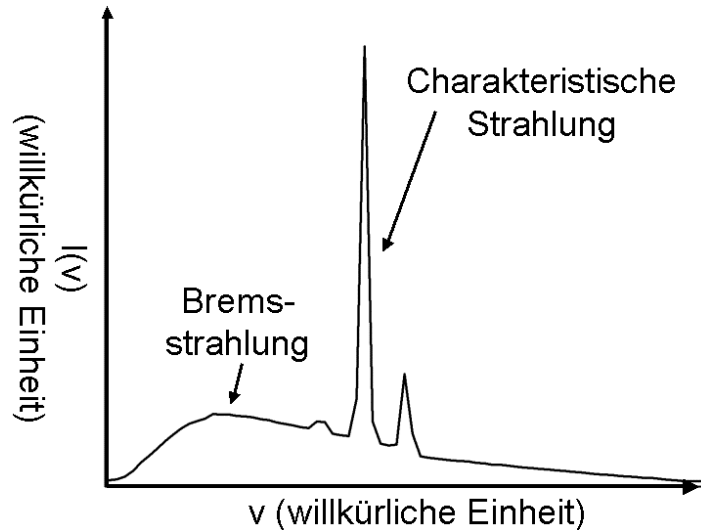


Abbildung 2.2: Röntgenspektrum von Rhodium als Anodenmaterial mit einer Beschleunigungsspannung von 40kV; simuliert mit dem XOP-Programm von ESRF [3]. Die Intensität ist gegen die Frequenz aufgetragen. Das charakteristische Spektrum überlagert das Bremsstrahlungsspektrum.

der nachfolgenden Prozesse im Röntgenspektrum nachweisbar (Abb. 2.2) [1]. Diese Eigenschaft wird als Röntgenfluoreszenz bezeichnet.

### 2.2.1 Struktur der Elektronenhülle

Die Elektronen in Atomen sind in Schalen angeordnet, welche mit K, L, M, N, O und P bezeichnet werden. Diese Bezeichnungen sind äquivalent zu den Hauptquantenzahlen  $n = 1, 2, 3, 4, 5$  und  $6$ . In den Schalen finden gemäß dem Pauliprinzip unterschiedlich viele Elektronen Platz (z.B. in der K-Schale zwei Elektronen).

Bei Röntgenspektren tritt nur eine limitierte Anzahl von Spektrallinien auf, welche man zu Serien zusammenfassen kann. Diese werden nach den Energieniveaus benannt, in welches ein Elektron von einem energetisch höher liegenden Niveau übergeht. Formel 2.3 gibt die Energie an, welche frei wird, wenn ein Elektron von einem Energieniveau in ein tieferes Niveau übergeht. Setzt man für die Energien die bekannte Bohr-Formel ein

$$E_n = -Ry \frac{Z^2}{n^2} \quad \text{mit der Rydbergkonstante } Ry = \frac{\mu e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \approx 13.61 \text{ eV} \quad (2.2.2)$$

so erhält man die Energie des emittierten Röntgenquants (*Niels Bohr* 1913):

$$\Delta E_{if} = h\nu_{if} = Ry Z^2 \left( \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) \quad (2.2.3)$$

Dies gilt jedoch nur für das Wasserstoffatom.

Beim Übergang eines Elektrons vom Anfangszustand  $n = n_i$  in den Endzustand

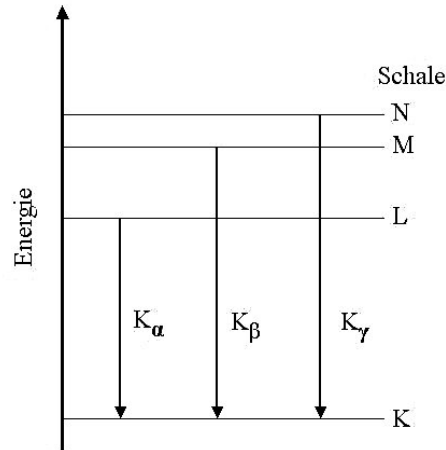


Abbildung 2.3: Schematische Darstellung der Atomaren Energieniveaus mit den Röntgenübergängen der K-Serie

$n = n_f$  in Atomen mit  $Z > 1$  gilt näherungsweise für die Energie des emittierten Quants (Moseley 1913):

$$\Delta E_{if} = h\nu_{if} = Ry \left( \frac{(Z - S_f)^2}{n_f^2} - \frac{(Z - S_i)^2}{n_i^2} \right) \quad (2.2.4)$$

$Z - S = Z_{eff}$  gibt die effektive Kernladung an und  $n_i$  gibt die Hauptquantenzahl des Anfangs- bzw.  $n_f$  des Endzustandes an.  $S$  ist ein durch die Elektronen bedingter Abschirmungsfaktor. Für die Abschirmung eines K-Schalenelektrons durch das weitere K-Schalenelektron beträgt die Konstante  $S = 0.3$ .

Die Emission von Röntgenstrahlung kann man also durch Elektronenbeschuss oder durch Röntgenfluoreszenz, d.h. durch Bestrahlung von Atomen oder Festkörpern mit Photonen anregen. Zur Röntgenlichtemission muß bei beiden Prozessen die Anregungsenergie mindestens so groß wie die Quantenenergie der kurzwelligsten, d.h. wie die der energiereichsten Linie einer Serie (d.h. alle Übergänge, welche in der gleichen Schale enden), sein.

## 2.2.2 Feinstruktur der Elektronenhülle

In der bisherigen Betrachtung wurde jeder Energiezustand nur durch die Hauptquantenzahl  $n$  bestimmt. Jedoch muß der Bahndrehimpuls  $l$  und der Spin  $s$  (bzw. der Gesamtdrehimpuls  $j$ ) in der Beschreibung der Spektren berücksichtigt werden. Aufgrund der Abschirmung in neutralen Atomen sind die Energieniveaus  $n$  mit einem Gesamtdrehimpuls  $J > 0$  durch eine Abweichung vom Coulomb-Potential (Abweichung vom  $1/r$ -Potential) nicht länger entartet: Hierdurch kommt es zur Aufspaltung der zuvor entarteten Niveaus. Hinzu kommt die Spin-Bahn-Wechselwirkung bei Atomen mit einem Elektronenspin  $s \neq 0$ , welche zur Feinstrukturaufspaltung führt, d.h. eine Aufteilung

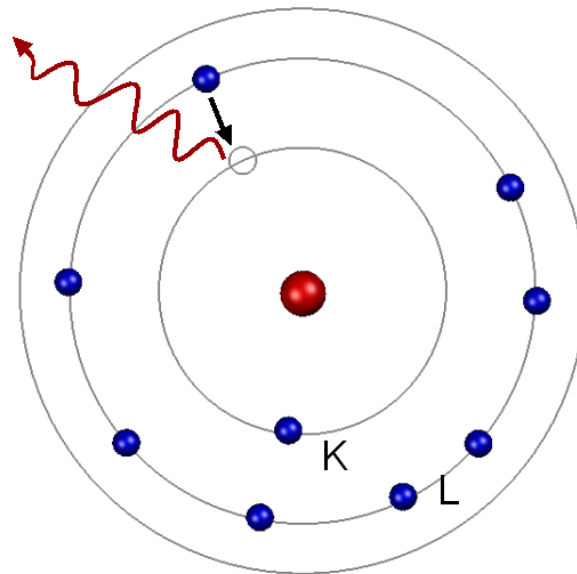


Abbildung 2.4: Vereinfachtes Schalenmodell; Elektron aus der L-Schale füllt eine Vakanz der K-Schale auf, dabei wird die charakteristische Röntgenstrahlung frei.

in Komponenten mit derselben Hauptquantenzahl  $n$ , aber verschiedenen Gesamtdrehimpulsen  $J = L + S$ . Die K-Schale  $n = 1$  zeigt keine Aufspaltung. Die L-Schale spaltet sich in drei Unterschalen ( $l = 0$ ;  $l = 1, j = 1/2$ ; and  $l = 1, j = 3/2$  bzw.  $2S_{1/2}$ ,  $2P_{1/2}$  und  $2P_{3/2}$ ) auf.

Die Feinstrukturaufspaltung kann durch die Sommerfeldsche Näherung beschrieben werden: Für ein Ein-Elektronen-System gilt:  $E_{nj} = E_n \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left( \frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right)$ . Hierbei sind Zustände mit dem gleichen Gesamtdrehimpuls  $J$  energetisch entartet<sup>1</sup>.

Da die Feinstrukturaufspaltung mit  $Z^4$  skaliert, kann die Energiedifferenz der emittierten Röntgenphotonen bei schweren Ionen einige keV erreichen (z.B. bei Uran 4.5 keV). Durch die obige Formel erhält man nun das Termschema wie in Abb. 2.5 dargestellt. Der Übergang aus der L- in die K-Schale wird z.B. mit  $K_\alpha$  benannt. Da die L-Schale sich nun in drei Unterschalen spaltet, erhält man prinzipiell drei Linien. Die Übergänge  $K\alpha_1$  ( $2^2P_{3/2} \rightarrow 1^2S_{1/2}$ ) und  $K\alpha_2$  ( $2^2P_{1/2} \rightarrow 1^2S_{1/2}$ ) erscheinen als dominierende Linien (die Nomenklatur  $n^{(2S+1)}L_J$ ,  $n$  ist die Hauptquantenzahl,  $S$  der Gesamtspin,  $L$  der Gesamtbahndrehimpuls und  $J$  Gesamtdrehimpuls). Der dritte energetisch mögliche Übergang von dem  $2^2S_{1/2}$ -Niveau in das  $1^2S_{1/2}$ -Niveau ist ein „verbotener“ Übergang (Übergänge mit  $\Delta l = 0$  sind nicht relativistisch „streng verboten“).

## 2.3 Absorption und Streuung von Röntgenstrahlen

Die Abschwächung von Röntgenstrahlung in Materie wird durch klassische elastische Streuung (Thomson- und Raleighstreuung), durch Comptonstreuung, durch Paarbildung und durch Absorption verursacht. Neben elastischer Streuung, bei welcher sich die

<sup>1</sup> Diese Entartung wird durch die sogenannte Lambverschiebung aufgehoben, Details in Abschnitt 5.2

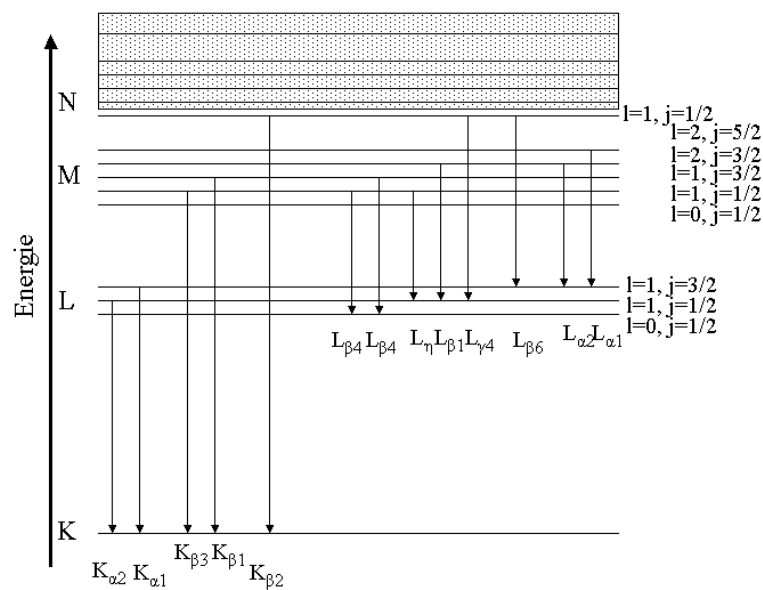


Abbildung 2.5: Schematisches Feinstrukturdiagramm von charakteristischen Röntgenübergängen.

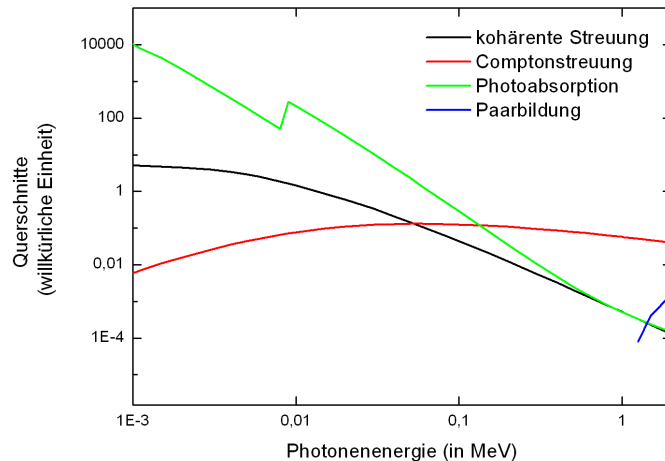


Abbildung 2.6: Querschnitte der einzelnen Wechselwirkungsprozesse für Kupfer in Abhängigkeit von Photonenenergien. Bei ca. 8 keV ist die K-Absorptionskante erkennbar. Bei der für diese Arbeit verwendete Röntgenenergie (siehe Abschnitt 4.3.2.) von 30 keV ist die Photoabsorption der dominierende Prozess. Die kohärente Streuung beschreibt die elastische Streuung neben der inkohärenten Comptonstreuung. Paarbildung tritt erst bei Energien  $>1$  MeV auf und spielt in dieser Arbeit keine Rolle. Quelle NIST Physical Reference Data [4].

Wellenlänge des gestreuten Röntgenphotons nicht ändert, kann auch inelastische Streuung auftreten. Diese tritt beim **Comptoneffekt** auf, welche die inelastische Streuung eines Photons an einem quasi freien Elektron bezeichnet.

Bei diesem Prozess wird ein Teil der Energie und des Impulses des einfallenden Photons auf das Elektron übertragen. Die Wellenlänge des gestreuten Photons ist somit größer als die des einfallenden Photons. Das inelastisch gestreute Photon kann dann von einem anderen Atom der Probe z.B. durch den **Photoeffekt** absorbiert werden.

Beim Photoelektrischen Effekt wird die gesamte Energie eines Photons  $h\nu$  von einem Elektron in einem Atom absorbiert, so dass das Elektron einen energetisch höher liegenden Zustand einnehmen oder sogar den Atomverband verlassen kann. Die Energie  $E_{kin}$  des emittierten Elektrons beträgt dann:

$$E_{kin} = h\nu - E_B \quad (2.3.1)$$

$E_B$  ist die Bindungsenergie des Elektrons.

Da ein freies Elektron nicht ein Photon absorbieren und gleichzeitig den Impuls erhalten kann, tritt der Photoeffekt nur bei gebundenen Elektronen auf, so dass der Kern den Rückstoßimpuls aufnimmt.

Bei genügend hohen Energien ( $h\nu > 1 \text{ MeV}$ ) kann es auch zur **Paarbildung** kommen, bei welcher sich ein Photon in ein Elektron-Positron-Paar umwandelt.

Der relative Anteil der drei oben genannte Prozesse bei der Schwächung hängt von der Photonenergie  $h\nu$  und der Kernladung der Targetatome ab. Bei den Röntgenenergien, welche in dieser Arbeit diskutiert werden, spielen lediglich die Photoabsorption und der Comptoneffekt eine Rolle.

Das Schwächungsvermögen eines Stoffes hängt von dem Schwächungskoeffizienten  $\mu$  ab, welcher die Summe aus dem Streukoeffizient  $\mu_{\text{streu}}$  und dem Absorptionskoeffizienten  $\mu_{\text{abs}}$  ist. Für die Abnahme der Strahlungsintensität  $I(x)$  gilt:

$$\begin{aligned} dI &= -\mu I dx \\ I(x) &= I_0 e^{-\mu x} \end{aligned} \quad (2.3.2)$$

Bei zunehmender Röntgenenergie treten sprunghafte Änderungen des Absorptionskoeffizienten auf. Bei diesen sogenannten Absorptionskanten (vgl. Abb.2.6) erfüllt die Photonenenergie eine Resonanzbedingung. Damit Röntgenstrahlung von einem Atom absorbiert wird, muss ein Elektron eine innere Schale verlassen und in einen weniger stark gebundenen Zustand gehoben werden. Da jedoch die benachbarten Schalen besetzt sind, muss das Elektron in das erste unbesetzte Niveau des Atoms gehoben werden oder jenseits der Seriengrenze einen freien Zustand einnehmen.

Bei großen Energien können auch kernnahe Elektronen (z.B. K-Schale) aus ihrem gebundenen Zustand gelöst und in einen höheren Zustand gehoben werden. Dadurch steigt der Absorptionskoeffizient mit zunehmender Energie sprunghaft an. Für die Absorptionsenergie zwischen zwei Energiezuständen  $n = i$  und  $n = f$  gilt dieselbe Abhängigkeit wie für die Röntgenspektren. Bei hohen Energien erfolgt die Absorption mit ca. 80% durch Ionisation bzw. Anregung der K-Schalenelektronen.

## 2.4 Natürliche Linienbreiten

Jede Emissionslinie besitzt eine natürliche Linienbreite, welche sich aus der Lebensdauer des Anfangszustandes ergibt. Aus der Heisenbergschen Unschärferelation kann man ableiten, dass jeder atomare Zustand eine mittlere Lebensdauer  $\tau$  besitzt. Diese bestimmt die Linienbreite des Übergangs:  $\Delta E = \hbar/\tau$ . Für die Frequenzbreite eines Übergangs von einem angeregten Zustand in den Grundzustand (der Grundzustand besitzt eine unendlich lange Lebensdauer) gilt [5]:

$$\Delta\nu = \Delta E/h = \frac{1}{2\pi\tau} \quad (2.4.1)$$

## 2.5 Neue Röntgenquellen

Die hier dargestellte Entstehung und Produktion von Röntgenstrahlung legt nur den Grundstein zur Entwicklung von immer leistungsfähigeren Licht- bzw. Strahlungsquellen, deren Eigenschaften und Anwendungsgebiete weit über die der konventionellen Röntgenröhre hinausgehen.

Ein wichtiges Maß für die Leistungsfähigkeit einer solchen Lichtquelle ist ihre Leuchtstärke<sup>2</sup>. In Abb. 2.7 ist die Leuchtstärke der verschiedenen Lichtquellen gegen die Jahreszahl aufgetragen.

Die im folgenden erwähnten Röntgenquellen beruhen auf dem Prinzip, dass Ladungen (Elektronen) auf gekrümmten Bahnen elektromagnetische Strahlung aussenden. Dabei hängt die Photonenintensität und Photonenenergie von dem Krümmungsradius und der Elektronenenergie ab.

Zu der ersten Generation solcher Quellen gehören Speicherringe und Beschleunigerstrukturen, die lediglich einfache Ablenkmagnete zur Lichterzeugung nutzen.

Zur zweiten Generation gehören Synchrotron-Beschleuniger, die bereits spezielle Magnetstrukturen ausnutzen um tausend Mal mehr Licht zu produzieren. Zu diesen gehört z.B. der Speicherring DORIS des DESY (Deutsches Elektronen Synchrotron) in Hamburg.

Die Lichtquellen der dritten Generation sind Speicherringe, in denen sich Elektronen mit nahezu Lichtgeschwindigkeit bewegen. Die Elektronen passieren spezielle Magnetstrukturen (Undulatoren<sup>3</sup>), in welchen sie Röntgenstrahlen emittieren. In Gegensatz zu der zweiten Generation erhält man hier auch stark gebündelte Strahlung. Diese Strahlung ist laserartig kohärent, d.h. sie schwingt im Gleichtakt. Zu den Synchrotronbeschleunigern gehört die Lichtquelle PETRA III des DESY und die European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) in Grenoble, Frankreich.

Die neueste Generation sind Freie-Elektronen-Laser (FEL). Bei diesen Anlagen durchlaufen Elektronen eine gradlinige Beschleunigung und durchqueren anschließend die Undulatorstrukturen. Diese Elektronenstrahlen besitzen einen deutlich reduzierten Durchmesser. Durch weitere Verstärkungsprozesse erhält man extrem intensive Röntgenstrah-

<sup>2</sup> Leuchtstärke bzw. Brillanz ist ein Maß für die Anzahl der erzeugten Photonen einer bestimmten Bandbreite pro Fläche, Raumwinkel und Zeit; gibt die Intensität und Fokussierung des Lichtstrahls an.

<sup>3</sup> lineare Folge von Dipolmagneten



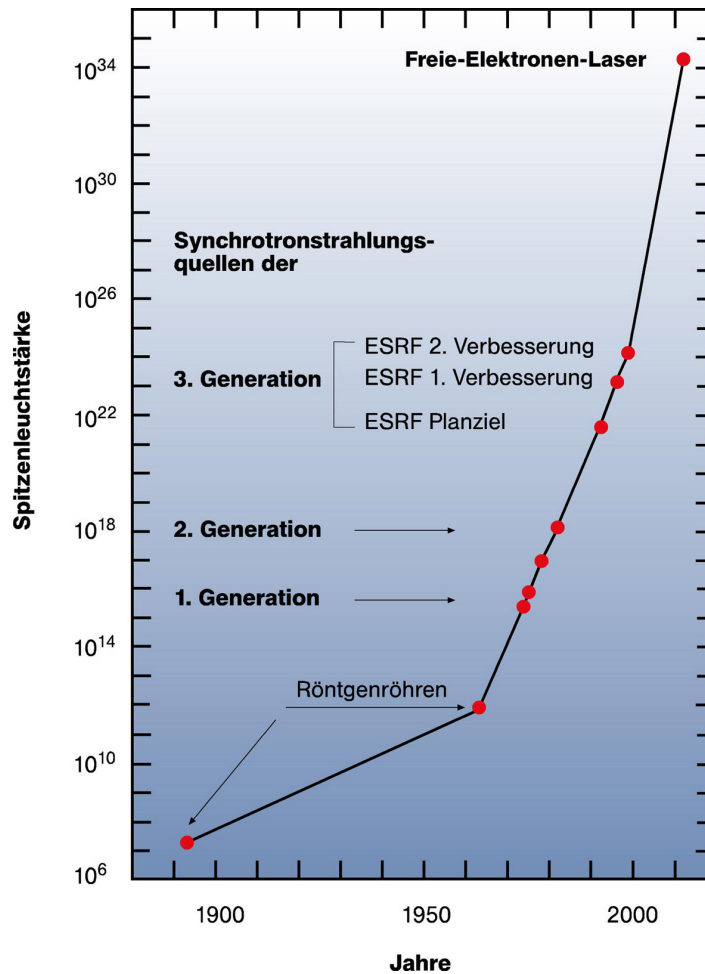


Abbildung 2.7: Graphische Darstellung (Quelle DESY) der Spitzenleuchtstärken von Röntgenquellen und deren zeitliche Entwicklung; Quelle: DESY, Hamburg.

lungsblicke. Der Freie-Elektronen-Laser FLASH am DESY ist die erste Lichtquelle dieser Art, welche höchste Spitzenlichtstärken und Lichtpulse im Femtosekundenbereich liefert. Er ist die Pilotanlage für den X-Ray Free-Electron Laser (XFEL), welcher Röntgenblitze in Bereich von unter 100 Femtosekunden und Wellenlängen von sechs bis ein Zehntel Nanometer produzieren kann. Ein ähnliches Projekt ist z.B. der LCLS in Stanford, USA <sup>4</sup>. Diese Anlagen können z.B. in Bereichen der Materialforschung oder der zeitaufgelösten Analyse von molekularen Prozessen angewendet werden. Diese Laser werden aber auch neue experimentelle Zugänge zur Plasma- und Atomphysik ermöglichen. Auch die klassische Kristallographie und die damit verbundene Röntgenspektroskopie wird ihre Anwendung dort finden.

<sup>4</sup> zu näheren Informationen wird hier auf die Homepages der einzelnen Forschungseinrichtungen und auf die Literatur verwiesen[6, 7, 8]



# Kapitel 3

## Bragg-Kristallspektrometer

Es gibt verschiedene Methoden um die Energie von Röntgenphotonen zu bestimmen. Man kann sie z.B. mit Szintillatoren oder Halbleiterdetektoren messen. Im folgenden Kapitel wird die wellenlängendispersive Methode bei der Verwendung von Kristallspektrometern vorgestellt. Zunächst wird das Prinzip der Bragg'schen Reflexion erläutert, auf welcher die Funktion des hier vorgestellten Bragg-Kristallspektrometers beruht. Es werden verschiedene Kristallspektrometergeometrien diskutiert und im Anschluss die Besonderheiten der von uns verwendeten Johann-Konfiguration behandelt.

### 3.1 Das Bragg-Gesetz

Liegt die Wellenlänge der zu untersuchenden Röntgenstrahlen im Bereich des Atomabstandes  $d$  in einem Kristallgitter, so kann die an den Elektronen der Atome gestreute Strahlung Interferenzerscheinungen aufweisen. W.H Bragg und W.L. Bragg haben dieses Phänomen zuerst beschrieben.

Im Kristall lassen sich äquidistante Netzebenen definieren. Diese verhalten sich wie ein halbdurchlässiger Spiegel, so dass Photonen an ihnen gebeugt bzw. reflektiert werden. Photonen, welche von den verschiedenen Netzebenen reflektiert werden, besitzen dieselbe Phase (sind kohärent), wenn der Gangunterschied  $\Delta s$  ein Vielfaches der Wellenlänge ist. Diese Bedingung ist nur für die Photonen, welche einen ganz bestimmten Einfallswinkel  $\Theta$  besitzen, erfüllt (vgl. Abb. 3.1). Betrachten wir parallele Ebenen mit dem Abstand  $d$  und Röntgenstrahlung mit der Wellenlänge  $\lambda$ , welche unter dem Bragg-Winkel  $\Theta_B$  einfallen. Der Gangunterschied bei Reflexion an zwei benachbarten Ebenen beträgt  $\Delta s = 2d \sin \Theta_B$ . Da der Gangunterschied ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge sein muss, kommt es zur konstruktiven Interferenz, wenn das Bragg-Gesetz erfüllt ist:

$$n\lambda = 2d \sin \Theta_B \quad (3.1.1)$$

Dabei ist  $n$  die Ordnung der Beugung.

Gemäß 3.1.1 findet eine Reflexion statt, wenn der Einfallswinkel genau dem Bragg-Winkel entspricht. Jedoch kann durch Vielfachstreuung an den Zwischenebenen des Kristalls auch Reflexion in einem begrenzten Winkelbereich um den entsprechenden Bragg-Winkel stattfinden [10]. Dies bedeutet, dass auch Winkel, welche leicht vom Bragg-Winkel abweichen, zulässig sind.

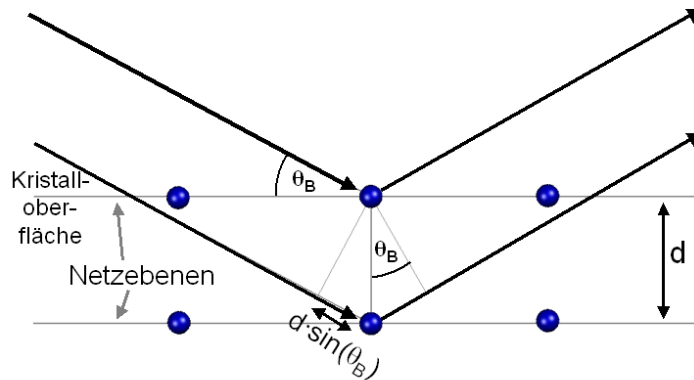


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung der Bragg-Reflexion von Röntgenstrahlen an benachbarten Netzebenen. Der Gangunterschied bei Reflexion von Strahlung muss für konstruktive Interferenz die Bragg-Bedingung  $\Delta s = 2d \sin \theta_B$  erfüllen. Der hier eingezeichnete Einfallswinkel ist der entsprechende Bragg-Winkel.

## 3.2 Typen von Kristallspektrometern

In der Praxis finden diverse Typen von Spektrometern ihre Anwendung.

Dabei ist zunächst zwischen Transmission und Reflexion zu unterscheiden. Bei der Transmission wird die gemäß ihrer Wellenlänge gebrochene Strahlung und bei der Reflexion die zurückrückgestreute Strahlung detektiert.

Beide Geometrien nutzen den proportionalen Zusammenhang von Energie bzw. Wellenlänge und dem Bragg-Winkel aus.

Sind bei der Reflexion z.B. kleine Bragg-Winkel erwünscht (d.h. hohe Energien), so bietet sich je nach Kristalldicke die Laue-Geometrie an. In der Laue-Konfiguration werden die Netzebenen senkrecht zur Kristalloberfläche ausgerichtet. Die Netzebenen, an welchen sie reflektiert werden, liegen im Gegensatz zur Bragg-Geometrie senkrecht zur Kristalloberfläche. Da in dieser Konfiguration niederenergetische Röntgenstrahlung stark absorbiert wird, ist diese besser für hochenergetische Strahlung geeignet.

Es sollen im folgenden Kristallspektrometer diskutiert werden, welche die Reflexion an Kristallen, bei welchen die Netzebenen parallel zur Kristalloberfläche ausgerichtet sind (vgl. Abb. 3.1), ausnutzen.

### 3.2.1 Spektrometer mit ebenen Kristallen

Bei ebenen Kristallen sind die Netzebenen idealerweise parallel zur Kristalloberfläche ausgerichtet. Abhängig von ihren Wellenlängen werden die Röntgenstrahlen gemäß dem Bragg-Gesetz unter verschiedenen Winkeln von dem Kristall reflektiert und von einem Detektorschirm registriert (Abb. 3.2). Durch diese Winkelabhängigkeit ist die Lage der auf den Detektor reflektierten Strahlung von der Wellenlänge abhängig. Aus diesem

Grund muss die Strahlung positionssensitiv detektiert werden. In der Vergangenheit wurden dafür Schlitze verwendet, heute kann man den Aufbau durch den Einsatz von ortsempfindlichen Detektoren wesentlich einfacher gestalten.

Der nachweisbare Energiebereich ist durch Kristall- und Detektorgröße bestimmt.

Bei den Spektrometern mit ebenen Kristallen ist der entsprechende Energiebereich aus geometrischen Gründen relativ gering. Da man bei den meisten Spektrometern auf Referenzlinien zur Energiekalibrierung angewiesen ist, ist man durch den begrenzten Energiebereich auch bei der Wahl der Referenzlinien eingeschränkt. Um den Bereich zu erweitern, wären große Abstände und Detektoren notwendig. Diese Eigenschaften des experimentellen Aufbaus sind meist nicht realisierbar.

### 3.2.2 Von-Hàmos-Geometrie - Vertikale Fokussierung

Bei der sogenannten Von-Hàmos-Geometrie [9] ist der Kristall wie eine Kreiszyylinderfläche gebogen. Dadurch erhält man eine Fokussierung in vertikaler Richtung, d.h. senkrecht zur Kreisebene (Abb. 3.3). Die Netzebenen liegen parallel zur Oberfläche. Fällt ein divergentes Strahlenbündel auf den Kristall und wird es nach dem Bragg'schen Gesetz reflektiert, so ist es zwar in der horizontalen Richtung (d.h. in der Ebene des Kreises) noch immer divergent, aber in der Ebene senkrecht zur Kreisebene konvergent. Röntgenstrahlen, die auf verschiedene Punkte (verschiedene Streuebenen) des Kristalls treffen, werden zu der optischen Achse hin fokussiert, welche gleichzeitig die Symmetrieachse des Kristallzylinderausschnitts ist. Durch die vertikale Fokussierung vergrößert sich der Raumwinkel und ermöglicht so einen Intensitätsgewinn in Vergleich zur ebenen Kristallgeometrie. Die Von-Hàmos-Geometrie eignet sich besonders für Messungen ausgedehnter Quellen, wie z.B. an einer EBIT <sup>1</sup>.

### 3.2.3 Johann-Geometrie - Horizontale Fokussierung

H.H. Johann zeigte als Erster, dass die Fokussierung mit Hilfe eines zylindrisch gekrümmten Kristalls möglich ist, ohne dass ein Spalt dafür notwendig wäre. Wie bei der Håmos-Geometrie ist bei der Johann-Geometrie der Kristall auch gebogen (z.B. zylindrisch, sphärisch). Die Symmetrieachse des Kristalls liegt jedoch in vertikaler Richtung, also in Richtung der dispersiven Achse des Kristalls. Die Spektrallinien liegen dann ebenso in der vertikalen Ebene. In dieser Konfiguration befinden sich Quelle, Kristallbogen und Detektor in einer Ebene (Abb. 3.4). Nachdem die Strahlen reflektiert wurden, konvergieren sie gleichzeitig in horizontaler Ebene, so dass bei entsprechender Positionierung der Quelle Photonen mit gleicher Energie auf einen bestimmten Punkt fokussiert werden. Dieser Punkt liegt immer auf einem Kreis mit dem halben Radius des Krümmungsradius des Kristalls [11]. Diesen Kreis nennt man Rowlandkreis, er ist ein Hilfskreis mit dem Radius  $R_{RC} = \frac{1}{2}R$  ( $R$ : Krümmungsradius des Kristalls). Der ortsempfindliche Detektor und die Röntgenquelle sollten mit einem Abstand von  $R \sin \Theta_B$  vom Kristall auf dem Rowlandkreis positioniert werden.

<sup>1</sup> EBIT: Electron Beam Ion Trap, für Details sei auf die Literatur verwiesen z.B. [33]

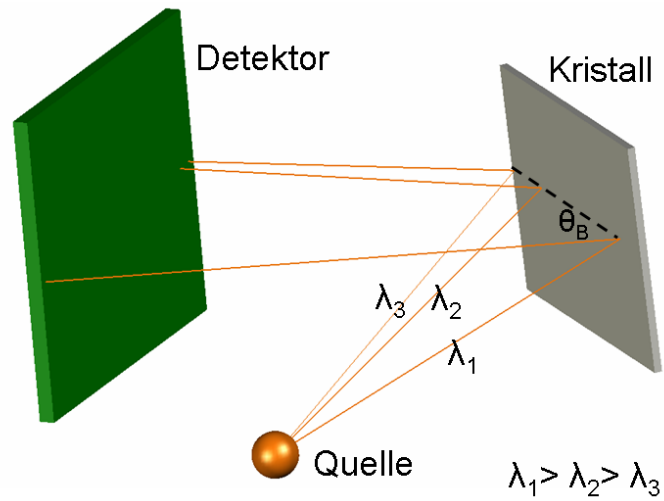


Abbildung 3.2: **Bragg-Reflexion an einem ebenen Kristall.** Strahlung mit unterschiedlicher Wellenlänge wird auf unterschiedliche Positionen des Detektorschirmes reflektiert.

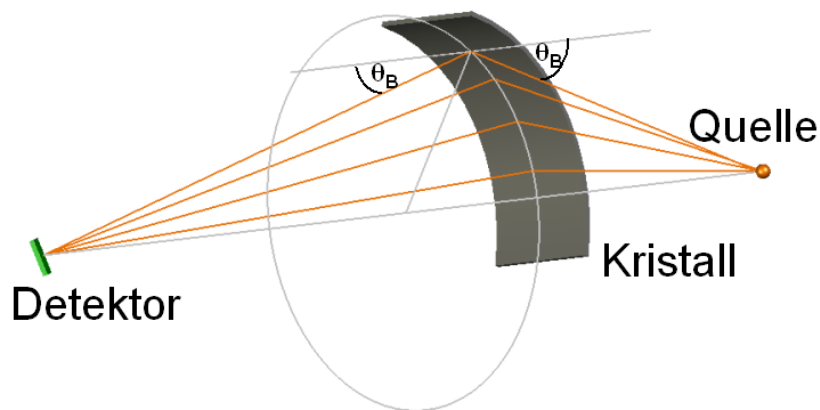


Abbildung 3.3: **Schematische Darstellung der Reflexion an einem zylindrisch gekrümmten Kristall in der Von-Hamos-Geometrie.** Zu sehen sind monochromatische Röntgenstrahlen, welche alle auf einen Punkt hin fokussiert werden. Diese Art der Fokussierung ermöglicht einen Intensitätsgewinn. Strahlung unterschiedlicher Wellenlänge wird durch den unterschiedlichen Bragg-Winkel auf unterschiedliche Punkte hin fokussiert.

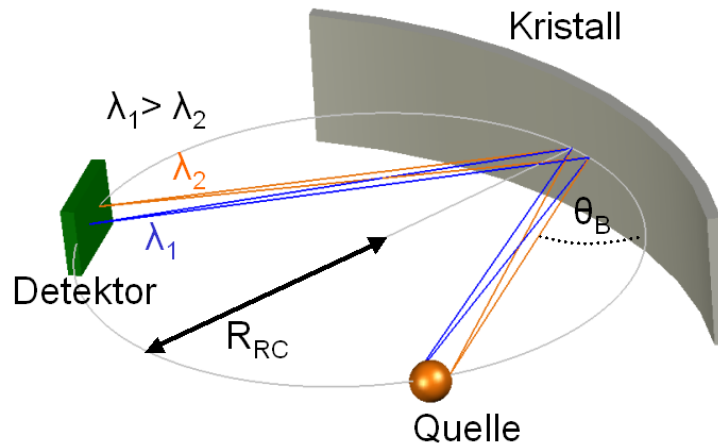


Abbildung 3.4: Reflexion an einem zylindrisch gekrümmten Kristall in der Johann-Geometrie. Detektor, Kristall und Quelle sind in einer Ebene positioniert und idealerweise auf dem Rowlandkreis mit dem Radius  $R_{RC}$  platziert. Strahlung unterschiedlicher Wellenlänge (unterschiedlicher Bragg-Winkel) wird auf unterschiedliche Positionen des Detektorschirmes fokussiert. Im Fall der Johannsson-Geometrie wäre der Radius des Rowlandkreises mit dem des Kristalls identisch.

Bei dieser Anordnung ist die Bragg-Bedingung für den gesamten Kristall erfüllt, so dass im Gegensatz zum ebenen Kristall überall Reflexion stattfinden kann. Dadurch erhöht sich bei gegebener Kristallgröße der Raumwinkel um das Dreifache. Dies steigert das Reflexionsvermögen<sup>2</sup> um ein Vielfaches. Die spektrale Bandbreite ist von der Quellausdehnung abhängig. Bei einer größeren Quelle ist eine größere Anzahl verschiedener Braggwinkel und damit ein breiterer Energiebereich möglich. Dieser liegt meist im Bereich  $< 100$  eV.

Die räumliche Überlappung von Kristall und Rowlandkreis ist durch die unterschiedlichen Radien ( $R$  und  $R_{RC}$ ) nur in einem Punkt erfüllt. Dadurch entstehen Fehler bei der Fokussierung, so dass große Bragg-Winkel kaum möglich sind (vgl. Abschnitt 3.4). Bei der **Johannsson-Geometrie** [12] wird der Kristall zunächst auf einen Radius  $2R_{RC}$  angeschliffen (wie Johann-Geometrie), jedoch im Anschluss elastisch auf  $R_{RC}$  gebogen, so dass die gesamte Kristalloberfläche den Rowlandkreis berührt. Durch die nun ermöglichte exakte Fokussierung sind größere Bragg-Winkel realisierbar und damit eine größere spektrale Auflösung. Jedoch ist die technische Herstellung der Kristalle so schwierig, dass die bessere Auflösung durch die schlechteren Materialeigenschaften (z.B. Kristalldeformationen) wieder ausgeglichen werden.

Das Kristallspektrometer, welches für die Messungen der Arbeit verwendet wurde, ist ein Johann-Spektrometer. Aus diesem Grund wird dieses im folgenden detaillierter diskutiert.

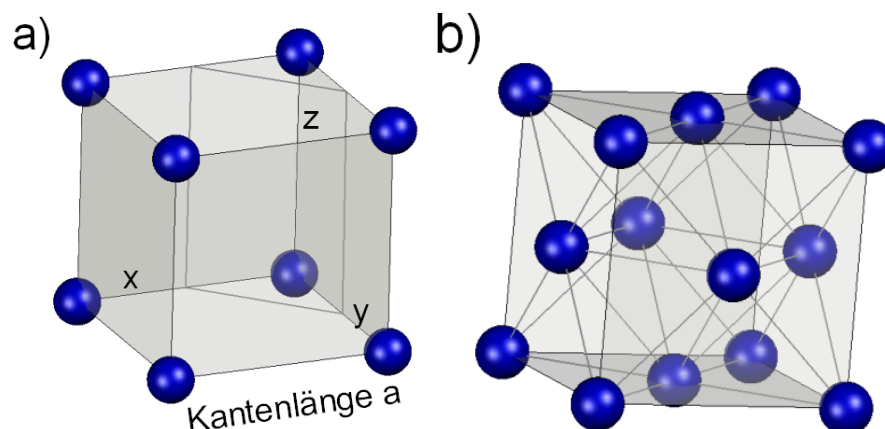


Abbildung 3.5: a) Lage der Netzebenen in einem kubischen Kristall mit den Millerschen Indizes  $h = 2$ ,  $k = 2$ ,  $l = 0$ . b) Struktur einer kubisch flächenzentrierter Elementarzelle. In der Mitte jeder Ebene der Elementarzelle sitzt ein zusätzliches Atom (vgl. kubischen Kristall in a))

### 3.3 Kristallstrukturen und deren Eigenschaften

Festkörper, deren Atome sich periodisch in Form eines dreidimensionalen Gitters anordnen, bezeichnet man als Kristalle. Die Abstände der Atome liegen in der Größenordnung der Röntgenwellenlängen, so dass Interferenzen von Röntgenstrahlen durch Beugung an den Atomnetzebenen des Kristalls möglich sind.

Kristalle lassen sich durch drei Basisvektoren beschreiben, welche die Elementarzelle aufspannen. Die Elementarzelle wird durch Gitterparameter und Symmetrieeigenschaften beschrieben. Durch wiederholte Aneinanderreihung in alle drei Raumrichtungen entsteht der Kristall. Bei dem hier diskutierten Kristallspektrometer wurde ein Germaniumkristall (220) verwendet, dessen Elementarzelle kubisch flächenzentriert aufgebaut ist. Bei diesem Aufbau sitzt an jeder Ecke eines Würfels mit der Kantenlänge  $a$  ein Atom und eines zusätzlich mittig auf jeder Seitenfläche (Abb.3.5). Die Lage der Netzebenen in Bezug auf ein Achsensystem wird durch die Millerschen Indizes  $(hkl)$  beschrieben, welche die Projektion auf den Koordinatenachsen angibt. Diese beschreiben im reziproken Raum die Schnittpunkte  $(a,b,c)$  mit den Koordinatenachsen, so dass für diese gilt:

$$h = \frac{1}{a}, \quad k = \frac{1}{b}, \quad l = \frac{1}{c} \quad (3.3.1)$$

Um einen Kristall zu beschreiben, gibt man die Ausrichtung der Kristalloberfläche an. Diese Ausrichtung wird durch das Zahlentripel, welches in Klammern hinter der betreffenden Kristallsorte steht, beschrieben. Zur Veranschaulichung ist in Abb.3.5 die Lage der Netzebenen bei einem kubischen Kristall mit den Millerschen Indizes  $h = 2$ ,  $k = 2$ ,  $l = 0$  graphisch dargestellt.

Bei dem für das Kristallspektrometer verwendete Germaniumkristall (220) beträgt der Netzebenenabstand  $2d \approx 4 \text{ \AA}$ . Die Reflexionskurve (Abb.3.6) jedes Kristalls besitzt eine intrinsische endliche Breite (auch Darwinbreite genannt). Die sogenannte Rocking-

<sup>2</sup> Verhältnis der einfallenden und reflektierten Strahlung, siehe hierzu auch Abschnitt 3.3



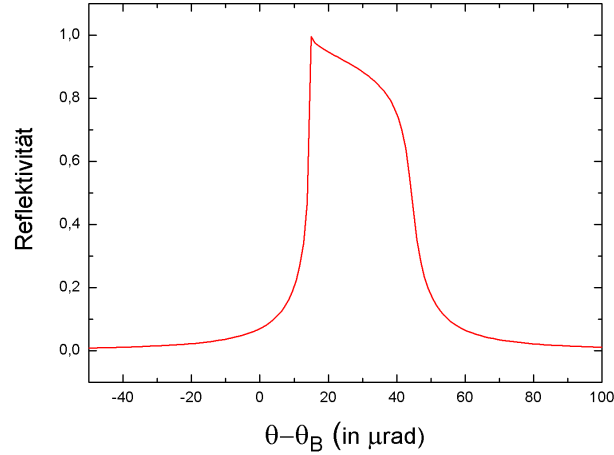


Abbildung 3.6: **Rockingkurve Ge (220) in der Bragg Konfiguration bei einer Photonenenergie von 8047.82 eV in zweiter Reflexionsordnung, simuliert mit dem XOP-Programm ESRF [3].**

bzw. Reflexionskurve eines Reflexes ist die Verteilung der Röntgenstrahlintensität. Der Detektor wird fest auf den Ablenkwinkel  $2\Theta_B$  der betreffenden Reflexion eingestellt und anschließend wird der Kristall durch die Reflexionsposition des Bragg-Winkel  $\Theta_B$  hindurchgedreht.

Die Intensität und Halbwertsbreite der Kurve ist ein Maß für die Gleichmäßigkeit der Netzebenenausrichtung. Durch sie kann die Güte des verwendeten Kristalls getestet werden [13]. Abweichungen von der Rockingkurve eines perfekten Kristalls zeugen von Verzerrungen des Gitters. Die Kohärenz der an verschiedenen Punkten des Kristalls gestreuten Wellen kann beeinträchtigt werden. Dadurch wird die Intensität der gebeugten Strahlung beeinflusst (Extinktionseffekte).

Die Verschiebung oder Verbreiterung von Netzebenen führt wiederum zur Verschiebung und zur Verbreiterungen der Reflexe. Durch diese sogenannten Orientierungseffekte kann man z.B. den Asymmetriewinkel  $\chi$  zwischen den Bragg Reflexionsebenen und der Kristalloberfläche ermitteln. Bei der symmetrischen Bragg Reflexion sollte dieser Asymmetriewinkel idealerweise  $0^\circ$  betragen. Eine Abweichung würde sich in einer breiteren Halbwertsbreite  $\omega_f$  der Rockingkurve widerspiegeln [13, 14, 15].

Eine breitere Halbwertsbreite der Rockingkurve, welche die intrinsische Auflösung des Kristalls angibt, verschlechtert die Energieauflösung des Kristallspektrometers:

$$\frac{\Delta E}{E} = \left| \frac{\Delta \Theta_B}{\tan \Theta_B} \right| = \left| \frac{\omega_f}{\tan \Theta_B} \right| \quad (3.3.2)$$

Bei einer breiteren Rockingkurve ist jedoch auch die integrale Reflektivität (bzw. Reflexionsvermögen) größer (bei derselben Höhe der Reflexionskurve), diese erhält man durch Integrierung über die Rockingkurve. Dies resultiert in einer höheren Effizienz [14, 16].

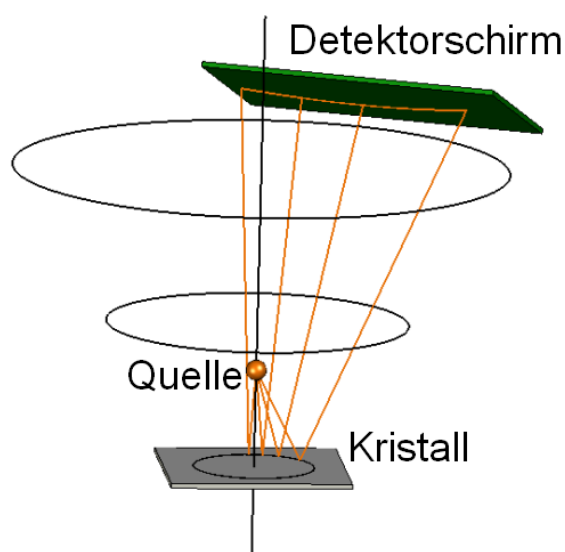


Abbildung 3.7: Schematische Darstellung: Eine Punktquelle, welche monochromatische Röntgenstrahlung aussendet, verursacht eine gekrümmte Linie auf einem ebenen Detektor. Die Stärke dieser Krümmung hängt von dem Abstand Kristall-Quelle bzw. Kristall-Detektor ab

### 3.4 Eigenschaften und Abbildungsfehler der Johann-Geometrie

Die spezielle Geometrie des Spektrometers hat bestimmte Abbildungseigenschaften und Charakteristika zur Folge. Diese sollen hier vereinfacht dargestellt werden.

#### Linienkrümmung auf dem Detektor

Röntgenstrahlen, welche an ebenen Kristallen reflektiert und einem ebenen Detektor aufgenommen werden, verursachen dort eine gerade Linie. Dies stimmt jedoch nur in erster Näherung, denn eine punktförmige Quelle von monochromatischen Röntgenstrahlen verursacht eine gekrümmte Reflexionslinie auf einem ebenen Detektor [17] (vgl. Abb. 3.7). Der Abstand zwischen Kristall und Quelle bestimmt bei ebenen Kristallen die Stärke dieser Krümmung<sup>3</sup>.

Bei gebogenen Kristallen hängt diese nun nicht nur von dem Abstand Kristall-Quelle ab, sondern auch von den Fokussiereigenschaften des Spektrometers.

Die Breite der gekrümmten Linie ist auf dem ganzen Detektorschirm konstant und wird größtenteils durch die Breite der Rockingkurve bestimmt [18].

#### Johann-Verbreiterung

Ein für die Johann-Geometrie typischer Effekt ist die Johann-Verbreiterung [20] der

---

<sup>3</sup> je geringer der Abstand Kristall-Quelle bzw. Kristall-Detektor ist, desto ausgeprägter ist die Krümmung

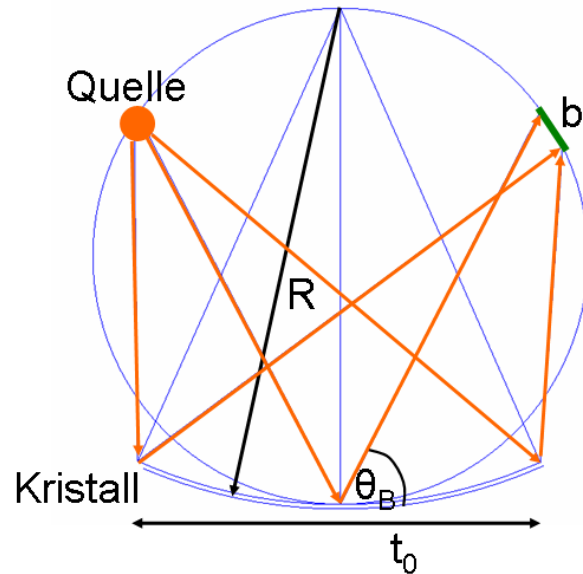


Abbildung 3.8: **Linienbreite  $b$  auf dem Detektor bei einer Kristallbreite  $t_0$  und einem Kristallkrümmungsradius  $R$  in der Johann-Konfiguration.**

Linie auf dem Detektor. Sie wird dadurch verursacht, dass der Kristall nur in einem Punkt den Rowlandkreis berührt.

Die Linienbreite hängt von den Abständen zwischen den Rändern des Kristalls (die horizontale Breite  $t_0$ ) und dem Krümmungsradius  $R$  ab. Röntgenstrahlen, die auf den seitlichen Rändern des Kristalls auftreffen, werden mit einem etwas anderen Winkel reflektiert als diejenigen, welche vom Mittelpunkt des Kristalls reflektiert werden (Abb. 3.8). Sie werden zu kürzeren Wellenlängen hin verschoben [19]. Dadurch wird die Linie breiter und weist eine leichte Asymmetrie auf. Die Asymmetrie verursacht eine Verschiebung vom ursprünglichen Bragg-Winkel und resultiert in einer mittleren Linienverbreiterung  $b$  [20]:

$$b = \frac{t_0^2}{8R} \cot \Theta_B \quad (3.4.1)$$

Die Johann-Aberration ist umso stärker ausgeprägt je größer die effektiv beschienene Kristallbreite ist.

Die Linienasymmetrie hat eine Verschiebung des Schwerpunktes des Profils zur Folge. Bei kleinen Bragg-Winkeln ist sie also stärker ausgeprägt.

### Eindringtiefe/Penetrationstiefe

Bei gekrümmten Kristallen spielt die Änderung der mittleren Eindringtiefe der Röntgenstrahlen bei Variation des Einfallswinkels eine Rolle. Bei flachen Kristallen tritt dieser Effekt nicht auf, kann aber schon bei leicht gekrümmten Kristallen bedeutend sein. In erster Näherung wird dies durch die Veränderung des mittleren Einfallswinkels an der Kristalloberfläche, verglichen mit dem ursprünglichen Bragg-Winkel an den Beugungsebenen, verursacht. Daraus resultiert eine Verschiebung des Bragg-Winkels [21]. Bei dem hier betrachteten Spektrometer spielt dieser Effekt jedoch eine vernachlässigbare Rolle.



# Kapitel 4

## Bragg Spektrometer - $K\alpha_1$ , $K\alpha_2$ Emissionsspektrum von Kupfer

In dieser Arbeit werden zwei experimentelle Aufbauten des Bragg Kristallspektrometers mit festem Winkel präsentiert.

Es wurde zunächst das  $K\alpha_1$ ,  $K\alpha_2$ -Emissionsspektrum von Zink aufgenommen. Dies wurde während einer Strahlzeit im August 2007 am Gastarget im ESR-Speicherring der GSI aufgenommen (Kapitel 5 und 6) und diente als Referenzmessung bzw. Test des ganzen experimentellen Aufbaus.

Das Spektrometer für die Kupfermessung wurde separat im Labor aufgebaut.

Bei beiden Messungen wurde eine Röntgenröhre verwendet, welche entweder ein Zink- oder Kupferfestkörpertarget bestrahlte. Die durch die Anregung entstandenen Röntgenstrahlen sind unter einem festen Winkel auf einen Germaniumkristall gefallen und die reflektierte Strahlung wurde mit einer ortsempfindlichen CCD-Kamera registriert. Experimenteller Aufbau und Analyse wird im folgenden von der Kupfermessung diskutiert, Daten und Ergebnisse zur Zinkmessung befinden sich weitgehend im Anhang. Zunächst werden für die Analyse der Kupfer- und Zinklinien relevante physikalische Hintergründe diskutiert.

### 4.1 Satellitenübergänge

Kupfer (Ordnungszahl 29) und Zink (Ordnungszahl 30) sind im Periodensystem bei den Übergangsmetallen zu finden. Die Übergangsmetalle sind durch die Zunahme von Elektronen in der d-Schale gekennzeichnet. Bei den meisten Übergangselementen befinden sich zwei Elektronen im äusseren s-Orbital, bei Kupfer jedoch befindet sich lediglich ein Elektron im äusseren s-Orbital. Zink spielt durch sein vollbesetztes d-Orbital und den zwei Elektronen im äusseren s-Orbital eine Sonderrolle (siehe Abb. 4.1).

Für Emission von  $K\alpha_1$ ,  $K\alpha_2$ -Linien ist ein Loch (eine Vakanz) in der K-Schale notwendig (vgl. Abschnitt 2.2.1). Diese kann z.B. durch Photoionisation entstehen. Bei Anregung mit Röntgenstrahlen kann es jedoch noch zu weiteren Prozessen kommen. Beim Auger-Prozess zerfällt ein angeregter Zustand eines einfach ionisierten Atoms strahlungsfrei unter Emission eines Elektrons aus einer äusseren Schale.

Bei dem sogenannten „shake-up“-Prozess gibt das emittierte Photoelektron einen Teil seiner Energie an ein verbleibendes Elektron und hebt es in einen unbesetzten gebundenen Zustand. Bei dem sogenannten „shake-off“ werden die zusätzlich angeregten

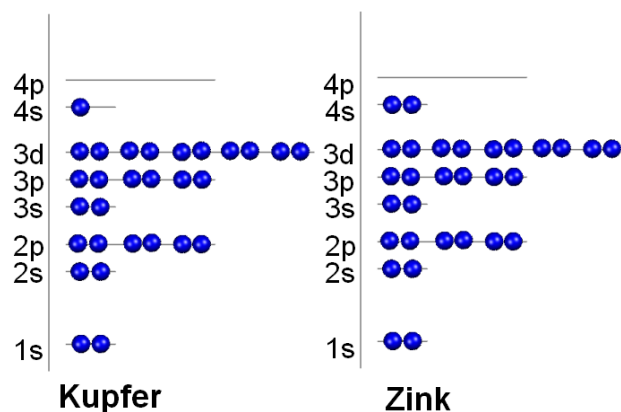


Abbildung 4.1: Elektronenkonfiguration von Kupfer und Zink im Grundzustand.

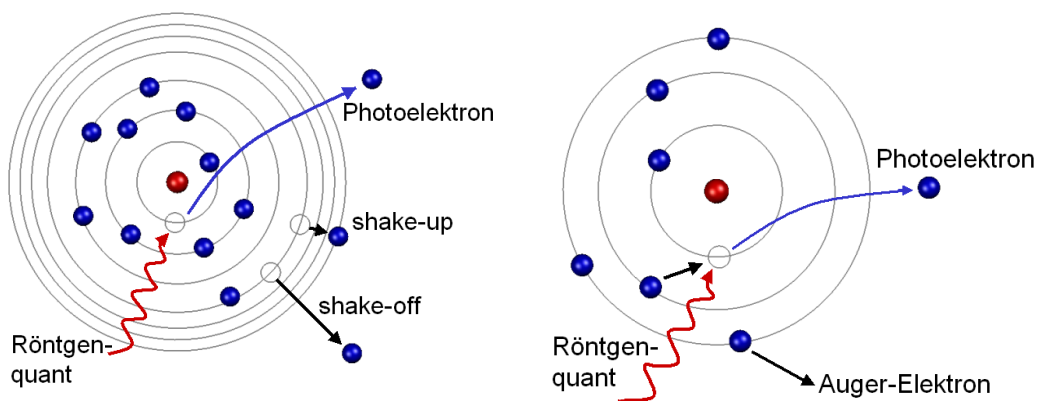


Abbildung 4.2: Abb. rechts: Der Auger Prozess schematisch: Das Atom wird durch das einfallende Röntgenquant ionisiert, anschließend zerfällt der angeregte Zustand strahlungsfrei unter Emission eines äusseren Elektrons; Abb. links: Der shake-up- und der shake-off-Prozess schematisch: Das Photoelektron gibt Energie an ein gebundenes Elektron, so dass es in einen unbesetzten gebundenen oder ungebundenen Zustand gehoben werden kann.

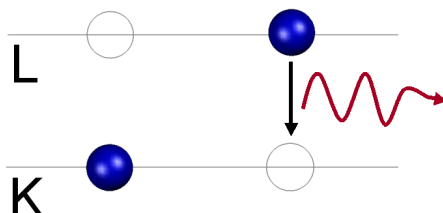


Abbildung 4.3: Elektronenkonfiguration bei einem Satellitenübergang schematisch. Neben der notwendigen Vakanz in der K-Schale befindet sich z.B. eine zusätzliche Vakanz in der L-Schale.

Elektronen in einen ungebundenen Zustand gehoben und können unter Umständen zu einer Asymmetrie einer energetisch nahe liegenden Übergangslinie führen (Abb. 4.2). Durch Prozesse, bei denen durch Photoionisation mehr als ein Elektron seinen Platz gewechselt hat, entstehen sogenannte Satellitenlinien. Ist z.B. eine Vakanz in der L- und in der K-Schale vorhanden, entstehen durch den Übergang von der L- in die K-Schale Satellitenlinien, bei welchen die Vakanz als sogenannte „Spectator“ agieren (Abb. 4.3). Beim Fehlen von diesen Vakanz wird die Diagrammlinie (z.B. die  $K\alpha_1$ -Linie) emittiert. Aus einer zusätzlichen Vakanz resultiert ein leicht geändertes Potential, dadurch verschieben sich die Energieniveaus gering.

Meist liegen die Satelliten durch ein stärker bindenes Potential auf der hochenergetischen Seite und den Diagrammlinien energetisch so nahe, dass sie bei der konventionellen Röntgenspektroskopie kaum aufzulösen sind. Bei kristallspektroskopischen Untersuchungen des 3d-Übergangselementes Kupfer sind diese als Asymmetrie auf der niederenergetischen Seite der  $K\alpha_1$ ,  $K\alpha_2$ -Linien erkennbar [22].

## 4.2 Referenzlinien im Röntgenbereich

Um die Wellenlänge einer unbekanntes Röntgenlinie zu bestimmen, werden häufig geeignete Referenzlinien verwendet. Die Energie der unbekanntes Linie kann dann durch Relativmessung bestimmt werden. Des weiteren können sie zur Vermessung von Kristallparametern verwendet werden und sind so für die Kristallographie von Bedeutung. Als Referenzlinien (sogenannte Wellenlängenstandards) dienen meist die  $K\alpha$ -Übergänge in Metallen, überwiegend Übergangsmetalle. Zu den wichtigsten Referenzlinien im Röntgenbereich gehören die  $K\alpha_1$ -Übergänge in Wolfram, Molybdän und Kupfer. Diese konnten mit einer Genauigkeit von  $\sim 1$  ppm mit hochauflösenden kristallspektroskopischen Methoden vermessen werden [23]. Aber auch andere Übergänge sind mit einer Genauigkeit von 1 ppm bekannt und dienen als Referenzlinien [24].

Trotz der hohen Genauigkeit dieser Werte gibt es dennoch Schwierigkeiten bei ihrer Verwendung. Wie bereits erwähnt, verursachen z.B. Satellitenübergänge Asymmetrien in der Linienform der  $K\alpha$ -Übergänge. Es kommt so zu einer Verschiebung des Schwerpunktes des Linienprofil. Hieraus kann ein vom Literaturwert abweichender Energiewert resultieren. Das Linienprofil des  $K\alpha$ -Dublett von Kupfer war u.a. deswegen Gegenstand ausführlicher Studien [22, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30].

Um das hier verwendete Kristallspektrometer zu charakterisieren und dessen Funktion zu demonstrieren, wurden die  $K\alpha_1$ ,  $K\alpha_2$  Emissionslinien von Kupfer mit dem neu konstruierten Bragg-Kristallspektrometer aufgenommen. Des weiteren wurden die aufgenommenen Daten mittels der MINUIT-Routine<sup>1</sup> gemäß der Methode der kleinsten Quadrate [32] analysiert, dabei wurden auch mögliche Satellitenübergänge diskutiert. Als Vergleich dienten die Resultate von *M. Deutsch* [22], die mit zu den genauesten Daten zählen.

Des weiteren wurden die  $K\alpha_1$ ,  $K\alpha_2$  Emissionslinien von Zink auf ähnliche Weise untersucht, jedoch sind für diese keine solch ausführlichen Studien bekannt.

<sup>1</sup> Programmpaket zur numerischen Minimierung [31]

## 4.3 Experimenteller Aufbau des Kristallspektrometers

Das Spektrometer ist mit einem Vakuumpumpstand ausgerüstet. Alle Komponenten des Spektrometers sind für Druck bis  $< 10^{-7}$  mbar ausgelegt. An diesem Vakuumstand ist das Kupfertarget mit Manipulator, das Fenster für die Röntgenröhre und ein Verlängerungsrohr für den Winkelblock angebracht. An dem Winkelblock wird der Kristall unter einem Winkel von  $50.5^\circ$  angebracht. Eine ortsempfindliche CCD-Kamera ist durch ein weiteres Verlängerungsrohr mit dem Winkelblock verbunden (siehe Abb. 4.4). Der Abstand vom Kristall zur Kamera beträgt  $616.33 \pm 0.8$  mm, während der Abstand von der Quelle zum Kristall  $498.33 \pm 0.9$  mm beträgt. Damit Abbildungsfehler vermieden werden, sollte der Abstand vom Kristall zum Detektor so gewählt werden, dass der Detektor möglichst genau auf dem Rowlandkreis positioniert ist (vgl. Abschnitt 3.2.3). Bei einem Bragg-Winkel von  $50.5^\circ$  und einem Kristallkrümmungsradius von 800 mm beträgt der Kristall-Detektor-Abstand  $\cos(90 - \Theta_B) \cdot 800$  mm = 617.33 mm. Der reale Abstand weicht vom idealen Abstand um einen Versatz von ca. 1.0 mm ab. Der Abstand Kristall-Quelle besitzt einen Versatz von  $s = 119$  mm. Letzteres hat keine Auswirkungen auf die Qualität der Abbildung. Der durch die Quellposition veränderte Raumwinkel hat lediglich eine veränderte Effizienz zur Folge. Ob die Effizienz größer oder kleiner wird, hängt von der Spektrometereometrie sowie von der Quellgröße ab. Bei Messungen an einer EBIT<sup>2</sup> versucht man z.B. sehr weit innerhalb des Rowlandkreises zu gehen, um so die Effizienz zu steigern.

### 4.3.1 Der Kristall

Die Auflösung und Effizienz des Spektrometers ist u.a. von Fehlern im Kristall, der Johann-Verbreiterung und der Rockingkurve des Kristalls abhängig (vgl. Abschnitt 3.3). In dem Spektrometer befindet sich ein Ge (220)-Kristall mit einem Krümmungsradius  $R$  von 0.8 m. Dieser Kristall ist 50 mm breit und 25 mm hoch. Der Netzebenenabstand  $2d$  beträgt in der (220)-Konfiguration  $4.0003505$  Å.

In Abb. 3.6 wurde die Reflexionskurve mit dem XOP-Programm von ESRF<sup>3</sup> simuliert. Mit den obigen Kristalldaten wurde bei einer Photonenergie von 8047.82 eV ( $K\alpha_1$ -Übergangsenergie, *NIST-database*) in zweiter Reflexionsordnung ein Bragg-Winkel von  $50.38^\circ$  berechnet. Das relative Auflösungsvermögen gemäß Formel 3.3.2) liegt im Bereich von  $10^{-4}$ .

Bei dem Kristall ist zu berücksichtigen, dass sich durch die Kantenmaske die effektiv reflektierende Oberfläche des Kristalls verringert. Die effektive Kristallgröße beträgt  $15.33 \times 25$  mm<sup>2</sup>

<sup>2</sup> EBIT: Electron Beam Ion Trap, für Details sei auf die Literatur verwiesen z.B. [33]

<sup>3</sup> „X-Rax oriented Programs“; dient u.a. zur Analyse von optischen Elementen. Mit Hilfe dieses Programms können z.B. die Reflexionskurven und spezifischen Parameter, z.B. Bragg-Winkel, für verschiedene Röntgenenergien und verschiedene Kristalle simuliert und ermittelt werden; für Details siehe [34] oder die ESRF-Homepage [3]



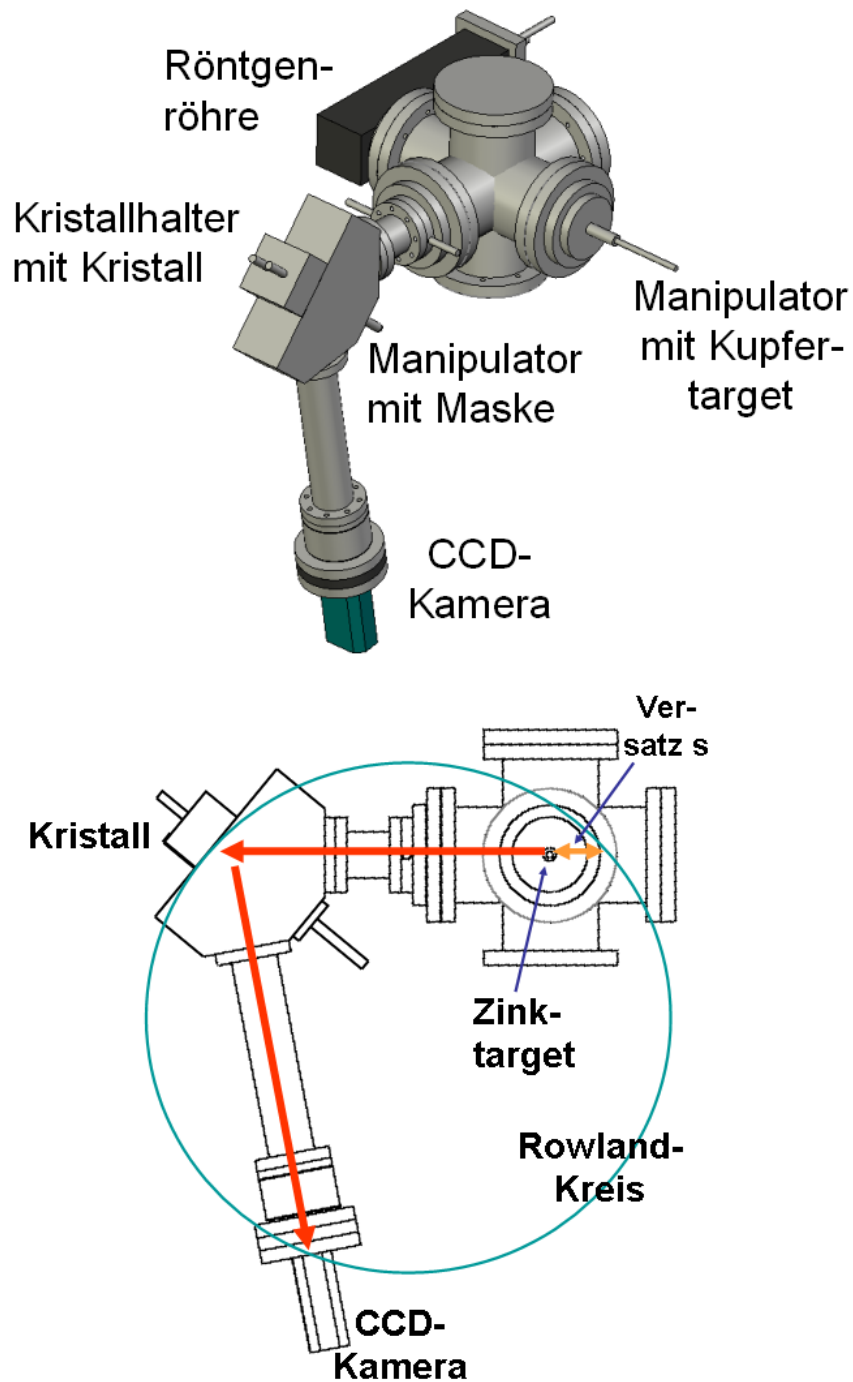


Abbildung 4.4: Aufbau des in dieser Arbeit verwendeten Kristallspektrometers. In der unteren Graphik ist u.a. der Abstand  $s$  vom Rowland-Kreis gekennzeichnet.

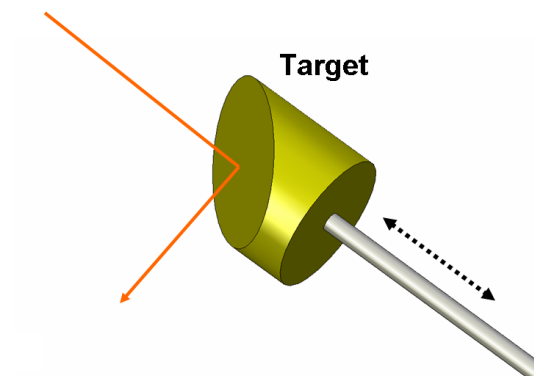


Abbildung 4.5: Horizontal bewegbares Kupfertarget.

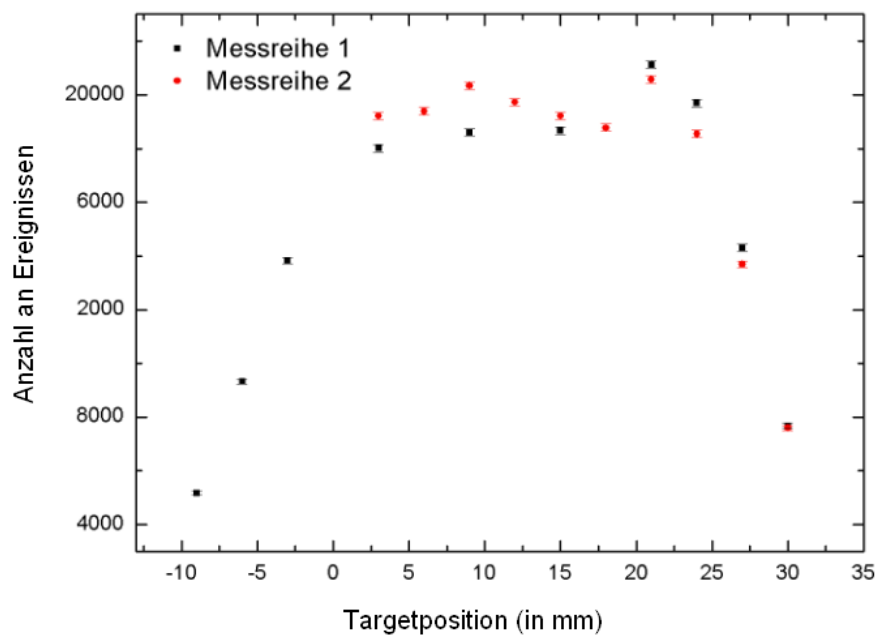


Abbildung 4.6: Zwei Messreihen des Targetscans; die Anzahl der Ereignisse in der CCD ist gegen die Targetposition aufgetragen.

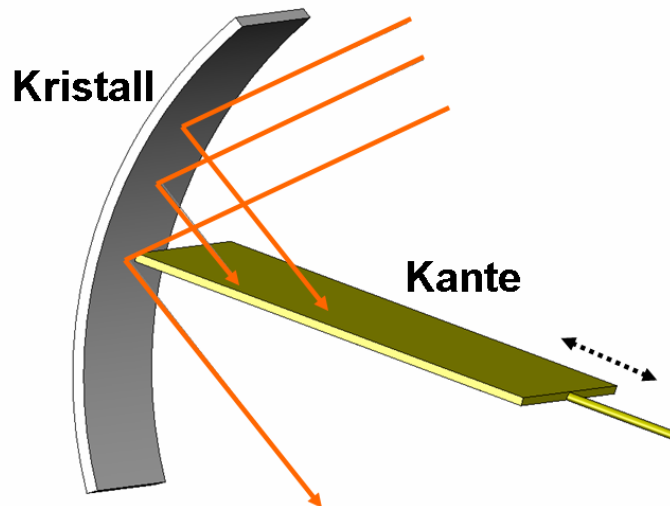


Abbildung 4.7: Reduzierung der effektiven Kristalloberfläche mittels der Kantenmaske.

### 4.3.2 Röntgenröhre und Target

Als Röntgenquelle dient ein bewegliches Kupfertarget, welches von einer Röntgenröhre zur Emission der charakteristischen Strahlung angeregt wird. Die wassergekühlte Röntgenröhre (*ITALIS STRUCTURES*) besitzt eine Molybdänanode und wurde hier bei einer Betriebsspannung von 30 keV und einem Anodenstrom von 12 mA betrieben. Das Kupfertarget ist in einem  $45^\circ$ -Winkel zur Röhre ausgerichtet. Das Target hat eine ellipsenförmige Fläche (30 mm breit und 42 mm lang), so dass die effektiv bestrahlte Fläche so groß wie ein Kreis mit einem Durchmesser von 30 mm ist. Dies definiert auch die Quellgröße (siehe Abb. 4.5).

Um die optimale Position für das Target zu ermitteln, wird ein Scan durchgeführt. Dabei wird mit dem Targetmanipulator von aussen die horizontale Position relativ zum Kristall verändert und die Anzahl der Ereignisse aufgezeichnet.

### 4.3.3 Maske

Die Johann-Verbreiterung (vgl. Abschnitt 3.4) leistet einen großen Beitrag zur Linienbreite und kann deswegen die Auflösung des Spektrometers beeinflussen.

Die Johann-Verbreiterung ist bei schmalen Kristallen weniger stark ausgeprägt (vgl. Abb. 4.8). Um diesen Effekt zu minimieren wird die effektiv beschienene Kristalloberfläche verringert. Dazu befindet sich senkrecht zum Kristall eine bewegbare Kantenmaske, welche die eintreffenden Röntgenstrahlen stoppen kann. Die optimale Position für die Messung wurde durch einen weiteren Scan ermittelt. Dabei wurde die Maske schrittweise verschoben und die Anzahl der Ereignisse und Halbwertsbreite zu den dazugehörigen Abständen ermittelt (siehe Abb. 4.9). Ziel war es, eine hohe Auflösung, d.h. eine geringe Halbwertsbreite bei gleichzeitig ausreichender Anzahl an Ereignissen, zu erreichen. Daraufhin wurde die Maske 9.3 mm vom Kristall fixiert.

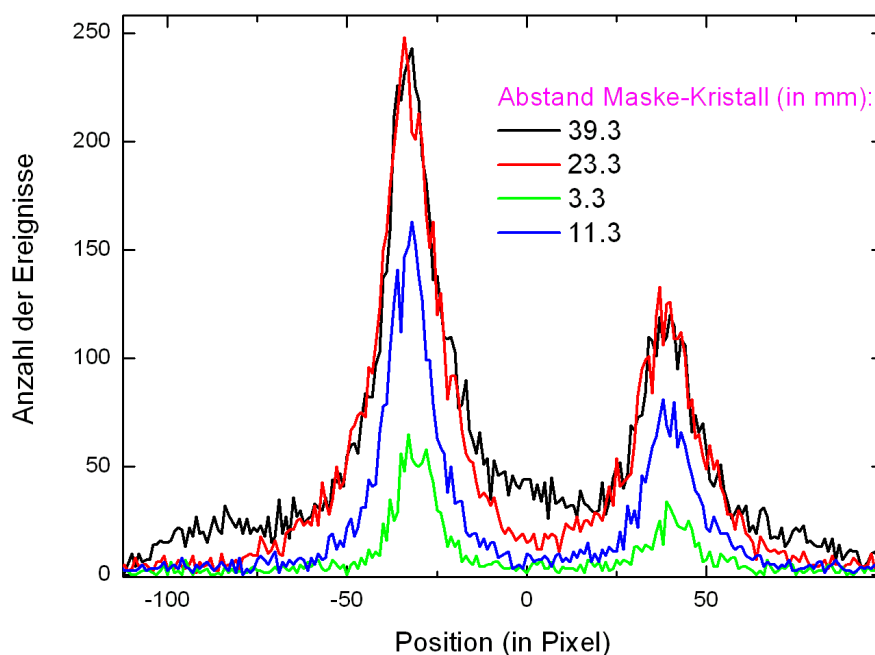


Abbildung 4.8: Das Emissionsspektrum bei verschiedenen Maskenabständen; deutlich zu erkennen ist die Abstandsabhängigkeit der Linienbreite.

In Abb. 4.9 erkennt man, dass die Anzahl der Ereignisse proportional zur Kristallgröße ist. Dies ist durch die Vergrößerung des Raumwinkels zu erklären (durch die größere Kristallfläche wird ein größerer Anteil der Strahlung reflektiert). Ab einem bestimmten Abstand der Maske zum Kristall (ca. 30 mm) trägt der gesamte Kristall zur Reflexion bei und die Ereignisanzahl bleibt konstant.

Die Halbwertsbreite des  $K\alpha_1$ -Linienprofils steigt zunächst nur leicht an. Ab einem Abstand (Kristall-Maske) von ca. 18 mm vergrößert sich die Halbwertsbreite überproportional. Dies kann neben der Johann-Verbreiterung (welche bei breiten Kristallen stärker ausgeprägt ist) daran liegen, dass die Ränder des gekrümmten Kristalls nicht mehr perfekt sind. Durch Deformation des Kristalls könnten dort Mosaikeffekte auftreten, als wäre der Kristall aus vielen kleinen Teilkristallen aufgebaut, welche alle etwas unterschiedlich orientiert sind. Die sonst sehr scharfe Braggbedingung ist aus diesem Grund häufiger erfüllt und die reflektierte Intensität ist gegenüber einem Idealkristall erhöht. Bei Mosaikkristallen ist die Halbwertsbreite der Reflexionskurve größer [16]. Diese Vergrößerung ist in dem aufgenommenen Linienprofil sichtbar (vgl. Abb. 4.8)

#### 4.3.4 CCD-Kamera

##### Funktionsweise und Aufbau

Aufgrund der wellenlängendispersiven Selektion des Kristalls wird in unserem Fall eine ortsempfindliche Röntgen-CCD-Kamera für den Nachweis der Röntgenstrahlung verwendet.

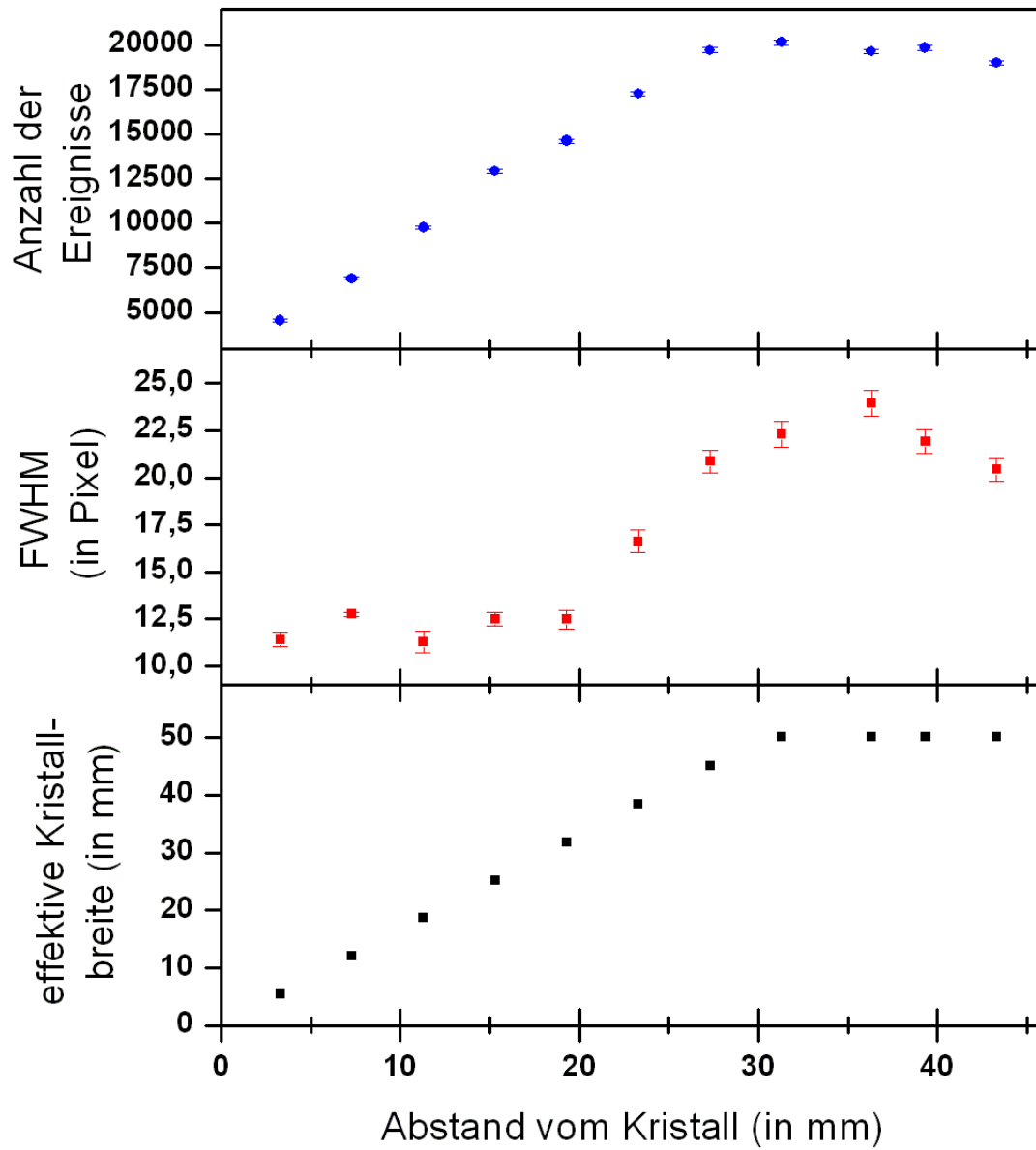


Abbildung 4.9: Die Anzahl der Ereignisse in der gesamten Röntgen-CCD, die FWHM der  $K\alpha_1$ -Emissionlinie sowie die effektive Kristallgröße gegen den Abstand der Kantenmaske-Kristall aufgetragen

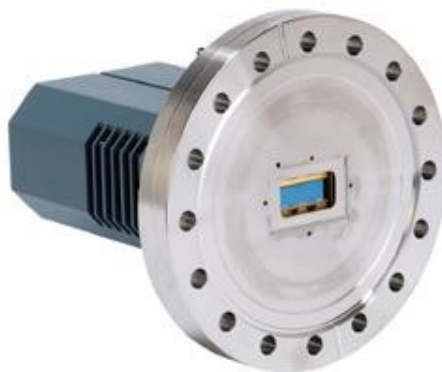


Abbildung 4.10: **DO420 BR-DD Röntgen CCD-Kamera; Andor Technology.**

CCD-Bildsensoren (Charge Coupled Device) finden eine breite Anwendung in der Grundlagenforschung, Medizin und Industrie. Verschiedene Arten der CCD-Kamera werden u.a. in der Astronomie oder für die Röntgenspektroskopie verwendet. Sie bieten gegenüber anderen digitalen Kameras den Vorteil einer hohen Lichtausbeute (Quanteneffizienz) und eines großen Spektralbereichs [35].

Die Funktionsweise einer CCD-Kamera ist im Grunde mit der eines klassischen Halbleiterdetektors identisch.

Der hier verwendete CCD-Typ (DO420 BR-DD; *Andor Technology*) ist eine back-illuminated Full-Frame CCD. Diese ist energie- wie auch ortsauflösend. Der Spektralbereich liegt zwischen 1-10 keV. Sie wird offen direkt an die Spektrometerkammer gekoppelt.

Der Bildsensor besteht aus einer 2D-Matrix mit  $1024 \times 255$  Pixel, welche jeweils  $26 \mu\text{m} \times 26 \mu\text{m}$  groß sind. Die Pixel des aus Silizium bestehenden Sensors sind lichtempfindliche Photodioden. Auf dem Sensor ist eine elektrisch isolierende Schicht aufgebracht, auf welcher wiederum Elektroden aufgebracht sind. Wird an diese eine Spannung angebracht, bildet sich an der Oberfläche des Leiters unterhalb der Isolierschicht eine Verarmungszone (Depletion Region), in welcher die Konzentration der Ladungsträger geringer ist. Bei Absorption von Röntgenstrahlen kommt es in der Verarmungszone zum Inneren Photoeffekt, d.h. im Halbleiter werden Elektronen vom Valenz- ins Leitungsband gehoben. Das Elektron hinterlässt im dann positiv geladenen Atom ein Loch. Ist die Photonenergie geringer als die Lücke zwischen Leitungs- und Valenzband, so entsteht kein Elektron-Loch-Paar.

Die Elektronen werden zunächst (während der Integrationszeit) in einem Ladungspool gesammelt. Das Ladungspaket wird dann später mit Hilfe von Schieberegistern über den Chip zu einem Verstärker transportiert und danach ausgelesen.

Bei den meisten CCD-Chips wird die Vorderseite beleuchtet. Bei der hier verwendeten Kamera (Back-Illuminated CCD) findet eine rückseitige Belichtung statt, indem die lichtempfindliche Rückseite des Siliziumplättchens nach aussen eingebaut wird. Dies bietet den Vorteil einer deutlich höheren Quanteneffizienz, da sich keine lichtabsorbierenden Strukturen vor dem Chip befinden. Die höhere Effizienz der back-illuminated CCD ist in der Quanten-Effizienz-Kurve erkennbar (siehe Abb. 4.11), welche die Wahrscheinlichkeit angibt, mit der ein Photon einer bestimmten Wellenlänge detektiert wird. Für weitere Eigenschaften und Details von CCD-Kameras sei auf die Literatur oder die Hersteller verwiesen [35, 36, 37, 38]

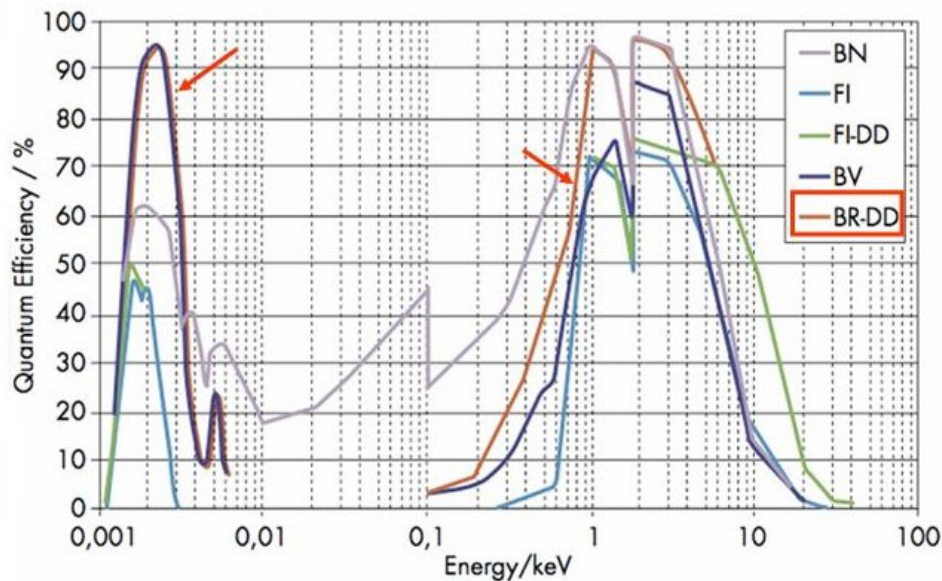


Abbildung 4.11: **Quanten-Effizienz-Kurve von verschiedenen Typen von CCD-Kameras; die markierte Kurve gehört zu DO420 CCD, FI bedeutet Front-Illuminated [35].**

### Rauschen

Bei der Signalverarbeitung erweist sich elektronisches Rauschen als ein unvermeidbarer Störfaktor. Wahre Ereignisse, d.h. Signale von einfallenden Photonen, können nicht nachgewiesen werden, wenn diese kleiner sind als das Rauschen. Des Weiteren führt der durch das Rauschen verursachte „Pile-up-Effekt“ zu einer Energieverschmierung und bestimmt somit auch die Energieauflösung. Bei diesem Effekt setzt sich das Signal aus einem wahren Ereignis und dem Untergrundrauschen zusammen und verfälscht so das Signal.

Das Rauschen hat verschiedene Ursprünge. Dieses wird durch folgende Prozesse verursacht [35, 38]:

- Rauschen der Ausseelektronik, welches durch die Verstärkung und die Umwandlung von Photoelektronen in ein Spannungssignal verursacht wird.
- Rauschen, welches durch statistische Schwankungen der Zahl der ins Leitungsband gehobenen Signalelektronen hervorgerufen wird.
- Thermisches Rauschen:  
Elektronen im Siliziummaterial können durch Wärmebewegung genügend Energie erhalten, um in das Leitungsband des Halbleiters gehoben zu werden und es fließt ein Strom (Dunkelstrom), so dass ein „falsches“ Signal hervorgerufen wird. Die Intensität des Thermischen Rauschens hängt von der Temperatur und von der Aufnahmezeit bzw. der Integrationszeit ab. Letztere gibt an, wie lange die Ladung akkumuliert wird, bevor sie zum Verstärker geschoben und weiter verarbeitet wird.

### Kühlung und Vakuum

Um das Rauschen zu unterdrücken, wird die CCD-Kamera bis auf eine Temperatur von  $-65^\circ\text{C}$  heruntergekühlt. Dazu ist zunächst ein Druck von ca.  $10^{-6}$  mbar notwendig, da bei höherem Druck Wasser oder Restgasmoleküle aus der Spektrometerkammer auf dem CCD-Chip kondensieren und vereisen könnten. Dies würde den Chip ernsthaft beschädigen. Die Kühlung erfolgt über ein Peltier-Element, wobei die Wärme über einen externen Wasserkühler und einem eingebauten Lüfter abgeführt wird.

Zum Auspumpen des Spektrometers werden zwei Vakuumpumpen verwendet. Für das Vorvakuum wird eine ölfreie Scroll-Pumpe (*BOC EDWARDS XDS10* [39]) verwendet. Nachdem die Vorpumpe aus der Vakuumkammer einen großen Teil der Partikel und kondensierenden Dämpfe entfernt hat, wird eine Turbomolekularpumpe (*EBA-R A CORPORATION* [40]) zugeschaltet. Für den notwendigen Enddruck ist kein zusätzliches Ausheizen der Spektrometerkammer notwendig.

### 4.3.5 Clusteranalyse

Die Ladung, welche von Röntgenstrahlen erzeugt wird und bis zur Verarmungszone (Depletion region) der Röntgen-CCD durchdringt, wird abhängig von ihrer Energie von einem oder mehreren Pixeln aufgenommen.

Ladungsträger, welche in der feldfreien Zone erzeugt werden, neigen dazu, in benachbarte Pixel zu diffundieren, im Silizium des CCD-Chips wird die Ladung aufgeteilt (Charge Splitting). Deswegen entstehen durch Photonen, welche tiefer als bis zur Verarmungszone dringen, Ladungscluster, welche über mehrere Pixel verteilt sind. Die Clusteranalyse ist ein Analyseverfahren zur Ermittlung von Gruppen, in diesem Fall von Clustern.

Röntgenphotonen im Energiebereich von 8 keV verursachen typischerweise Cluster, welche sich über 5 bis 15 Pixel erstrecken können, während 3-4 keV Photonen lediglich ein bis maximal zwei Pixel anregen. Durch die Ladungsteilung entstehen viele Untergrundereignisse, welche über der Rauschgrenze liegen. Um die wahren Röntgenereignisse von diesen zu trennen, werden die abgespeicherten Rohdaten nach der Datenaufnahme mit dem Programm CSM [42] analysiert, welches eine Clusteranalyse durchführt. Der Algorithmus arbeitet folgendermaßen: Die Pixel werden reihenweise auf Ladung hin abgesucht. Übersteigt diese eine bestimmte Grenze, wird die Position und die Ladung des Pixels gespeichert und der Pixel erhält im Zwischenspeicher den Ladungswert Null. Anschließend werden die nächsten vier direkt benachbarten Pixel auf Ladungen hin kontrolliert. Dabei werden die ausgelassen, welche bereits markiert sind. Dies wiederholt sich rekursiv bis keine Ladungen in benachbarten Pixel mehr vorhanden sind (vgl. Abb. 4.12). Die Gesamtladung des Clusters wird aus der Summe der Ladungen der einzelnen Pixel berechnet. Im Anschluss wird das Cluster als Einzelereignis gespeichert. Die Position dieses Ereignisses wird durch den gewichteten Mittelwert des Clusters angegeben [43].



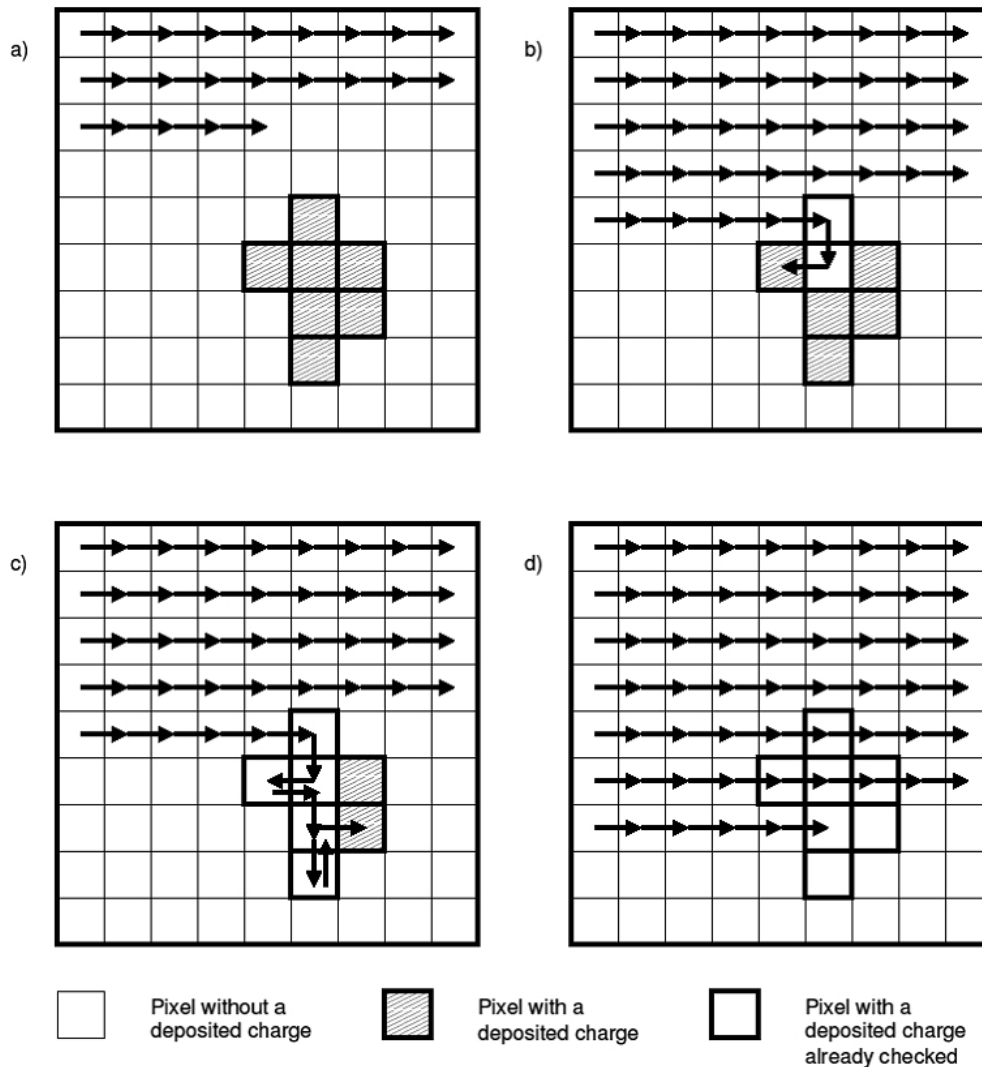


Abbildung 4.12: Schematische Abb. der Clusteranalyse: a) Die Pixel werden reihenweise auf Ladungen hin abgesucht. b) Bei einer gefundenen Ladung, setzt das Programm den Ladungswert des betroffenen Pixels auf Null und es werden die nächsten vier direkt benachbarten Pixel auf Ladungen hin untersucht. c) Alle weiteren benachbarten Pixel werden untersucht, bis keine weitere Ladung gefunden wird. d) Das Programm fährt mit dem Algorithmus fort und ignoriert die Pixel, welche bereits auf Null zurückgesetzt wurden.

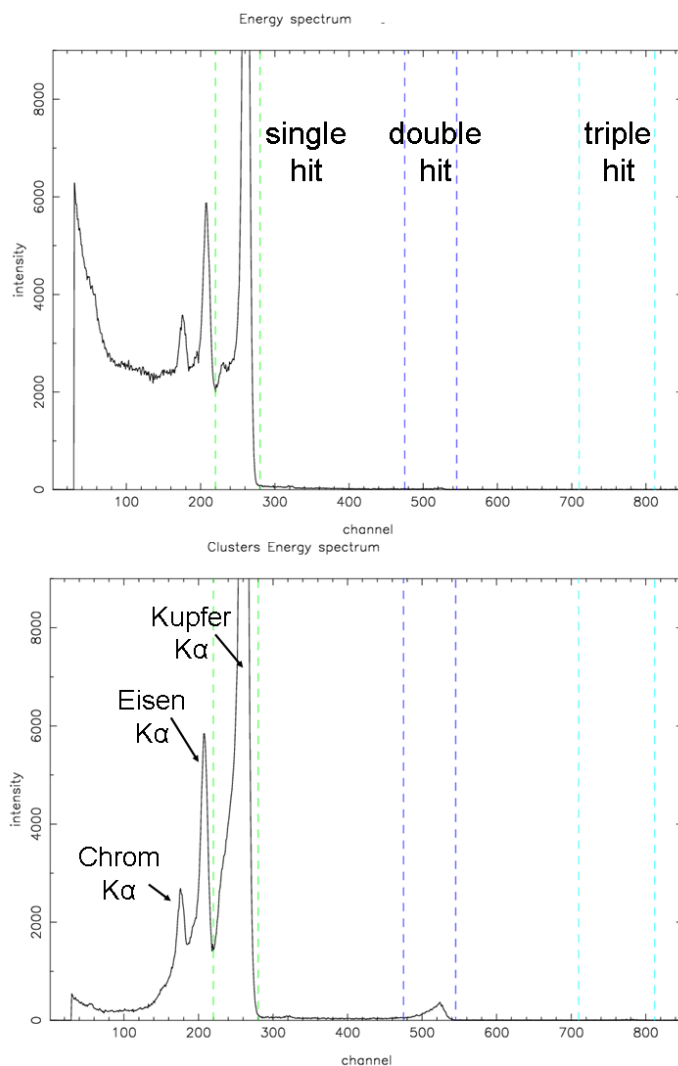


Abbildung 4.13: Energiespektrum aufgenommen mit der CCD-Kamera mit (Abb. unten) und ohne (Abb. oben) Clusteranalyse.

## 4.4 Experimentelle Ergebnisse und Analyse

### 4.4.1 Clusteranalyse und Energiefenster (Energy Cuts)

Im Energiespektrum (Abb. 4.13) von Kupfer ist vor der Clusteranalyse (vgl. Abschnitt 4.3.5) ein hoher Untergrund im Bereich der wirklichen Ereignisse zu sehen. Dieser entsteht durch die Ladungsaufteilung (Charge Splitting) in die benachbarten Pixel.

In der Verteilung der Clustergröße (Abb. 4.14) ist zu erkennen, dass sich nur wenige Cluster über 13 Pixel erstrecken. In der Clusteranalyse wurde daher die maximale Clustergröße auf elf Pixel festgesetzt. Der Untergrund wurde dadurch stark reduziert. Nachdem die Clusteranalyse auf die Rohdaten angewendet wurde, sind Energiepeaks und ein deutlich reduzierter Untergrund zu erkennen. Im Spektrum ist neben den  $K\alpha$ -Peak von Kupfer bei  $\approx 8.4$  keV auch die  $K\alpha$ -Linien von Chrom ( $\approx 5.41$  keV) und Eisen ( $\approx 6.4$  keV) zu erkennen. Ausserdem sind bei der doppelten Energie bzw. Kanalzahl doppelte Treffer (double hits) erkennbar. Hier wurde während einer Aufnahme

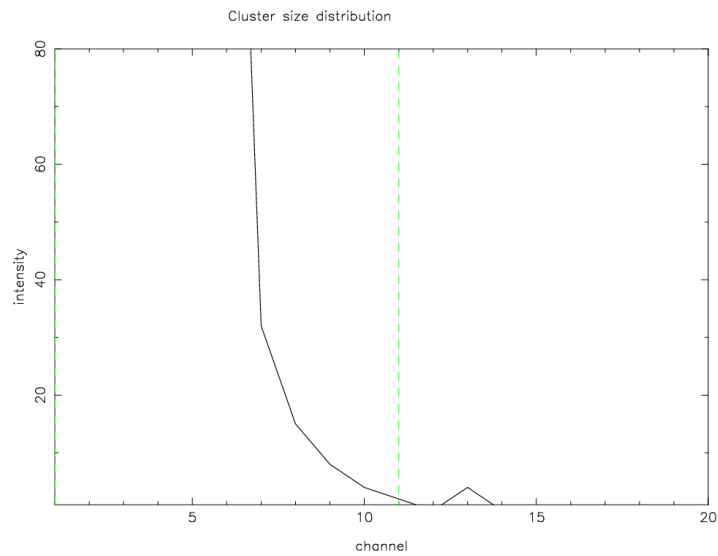


Abbildung 4.14: Graphische Darstellung der Verteilung der Clustergröße. Die Intensität ist gegen die Pixelanzahl (channel) aufgetragen.

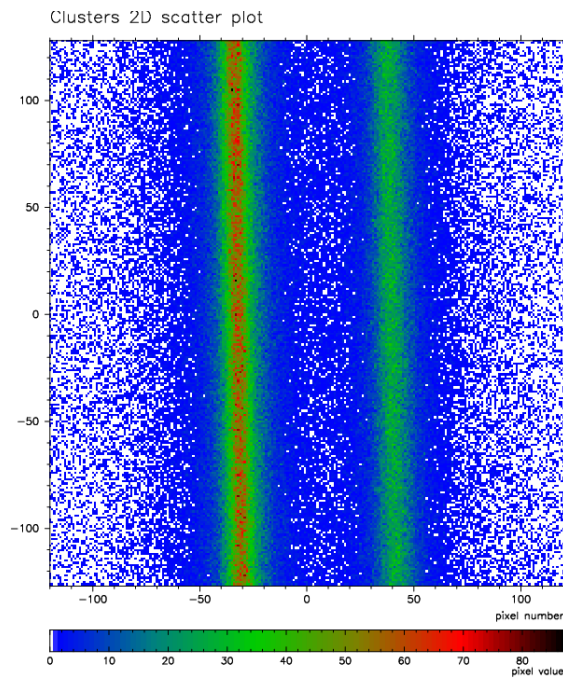


Abbildung 4.15: Zweidimensionales Ortsspektrum, welches von der CCD-Kamera aufgenommen wurde.

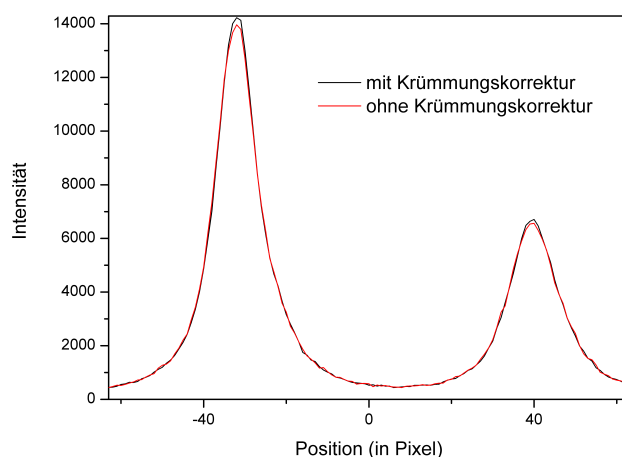


Abbildung 4.16: **Projektion der Daten mit und ohne Krümmungskorrektur auf die x-Achse. Der Unterschied zwischen den beiden Verteilungen ist sehr gering.**

der Pixel zweimal von einem Röntgenphoton getroffen. Da die dort gespeicherte Ladung proportional zur Energie ist, tauchen diese im Energiespektrum bei der doppelten Energie auf. Der Anteil von dreifachen Treffern (Triple Hits) ist sehr gering.

Um nun ein Spektrum aus dem Ortsbild der Pixelmatrix generieren zu können, müssen Energiebedingungen gesetzt werden. Es werden Energiefenster auf den gewünschten  $K\alpha$ -Peak von Kupfer und auf die doppelten und dreifachen Treffer gesetzt, damit alle wahren Kupfer-Ereignisse für das Ortsspektrum selektiert werden.

Nachdem die Energiebedingungen gesetzt wurden, sind die beiden Emissionslinien deutlich im zweidimensionalen Ortsbild zu erkennen (Abb. 4.13).

#### 4.4.2 Krümmungskorrektur

Wie bereits in Abschnitt 3.4 erwähnt, kann bei der Reflexion an Kristallen eine gekrümmte Linie auf dem Detektorschirm entstehen. Aus diesem Grund wird eine Krümmungskorrektur durchgeführt. Dazu werden die Parameter der Krümmung, in der Annahme, dass es sich um eine parabolische Verteilung handelt, mit einem linearen Fit berechnet [42, 83]:

$$x = a + by + cy^2 \quad (4.4.1)$$

Nun wird die x-Koordinate für jeden einzelnen Pixel korrigiert:

$$x \rightarrow x' = x - by - cy^2 \quad (4.4.2)$$

Die Umverteilungsprozedur lässt Pixel mit dem Wert  $y = 0$  unverändert.

Bei den aufgenommenen Daten ist die Krümmung so gering und der quadratische Term  $c$  so klein, dass eine Korrektur einer linearen Verteilung ausreichend wäre.

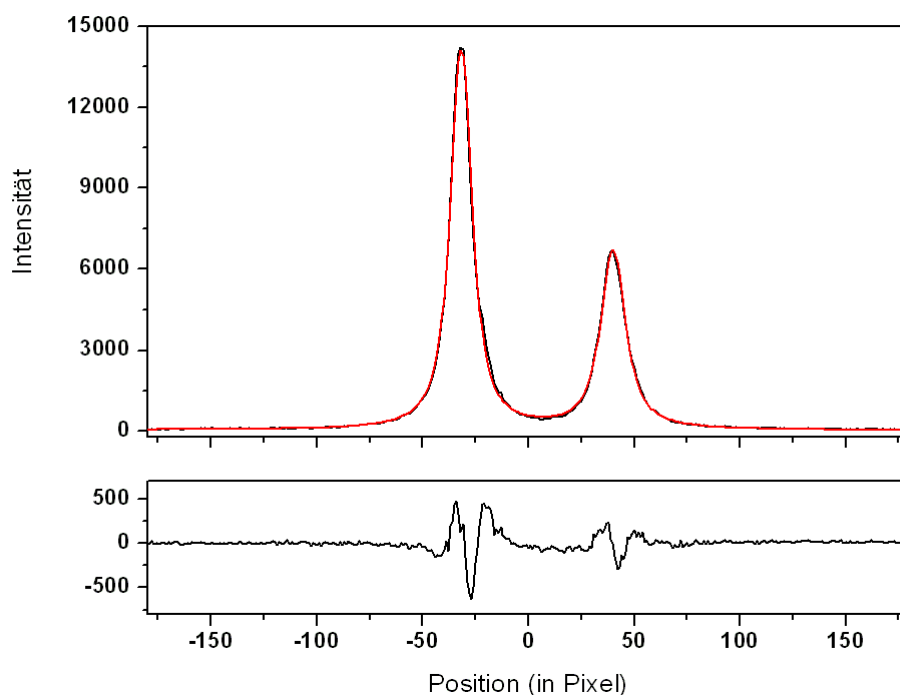


Abbildung 4.17: **Abb. oben: Fit der experimentellen Daten (schwarze Striche) mit insgesamt drei Voigtverteilungen und linearem Untergrund (rote Linie). Abb. unten: Abweichung der theoretischen Verteilung von den experimentellen Daten (Residuum).**

Fit	a	b	c
Parabolisch	-30,554766	-0,136363E-01	0,151084E-04
Linear	-30,480337	0,136182E-01	0

Nachdem jedes Pixel in der Matrix korrigiert wurde, sind Asymmetrien der Projektion auf die X-Achse nicht länger durch die Linienkrümmung bedingt. Deformationen der Projektion können durch die Johann-Verbreiterung und durch Kristallfehler hervorgerufen werden.

#### 4.4.3 Analyse der $K\alpha_1$ , $K\alpha_2$ -Linien

Für die weitere Analyse der Daten wurde ein Fit-Programm mit dem Programmpaket MINUIT [31] erstellt. Das Programm arbeitet mit der  $\chi^2$ -Minimierung. Bei diesem Anpassungstest wird geprüft, wie gut die gemessenen Daten einer bestimmten Verteilung genügen [32]. In diesem Fall wird die Verteilung durch eine Voigtfunktion dargestellt. Die Voigtfunktion ist die Faltung einer Gauss- mit einer Lorentzfunktion:

$$g_v(\nu) = g_L \otimes g_G = \int_{-\infty}^{\infty} g_L(\nu - \nu') g_G(\nu) d\nu' \quad (4.4.3)$$

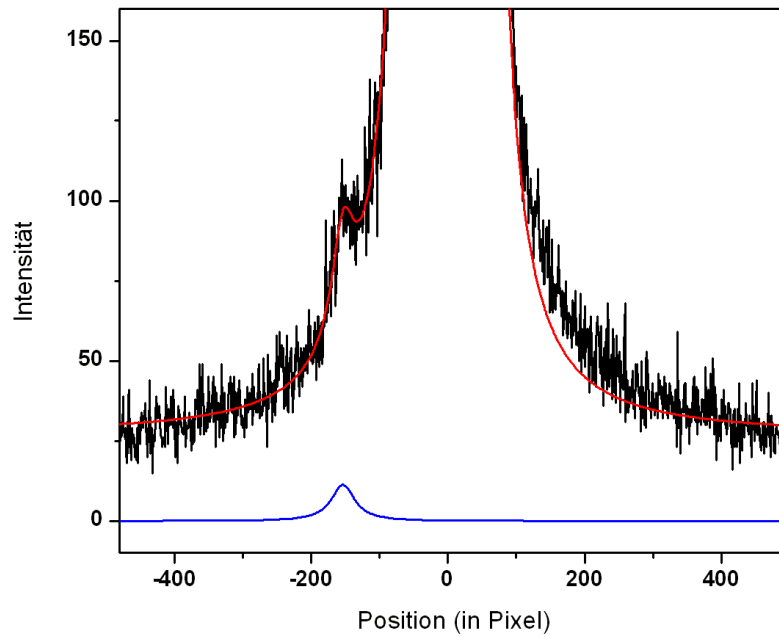


Abbildung 4.18: Neben dem gesamten Fit (rote Linie, bestehend aus drei Voigtverteilungen und linearem Untergrund) der experimentellen Daten (schwarze Striche) ist die Verteilung für den Fit der Satellitenlinie eingezeichnet (blaue Linie).

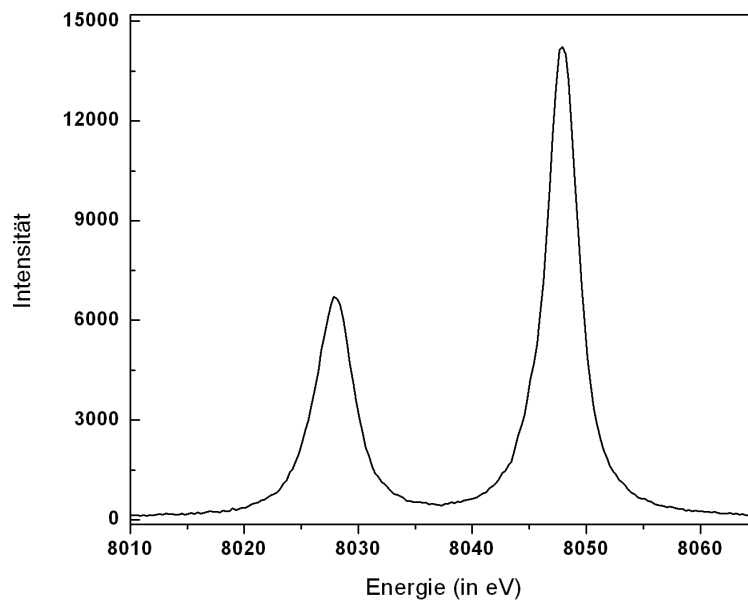


Abbildung 4.19: Kalibriertes Energiespektrum der Kupfer  $K\alpha$ -Linien.

Die natürliche Linienform des Übergangs wird durch die Lorentzfunktion  $g_L$  beschrieben.  $g_G$  ist die Gaussfunktion, welche den Einfluß der der Spektrometerauflösung auf das gemessene Spektrum beschreibt. Es ist sinnvoll, die Voigtfunktion wie folgt zu formulieren:

$$g_v = \frac{\sqrt{\ln 2/\pi}}{\gamma_G} K(x, y) \quad (4.4.4)$$

mit

$$K(x, y) = \frac{y}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{(x-t)^2 + y^2} dt \quad (4.4.5)$$

Die dimensionslosen Variablen  $x$  und  $y$  beinhalten die Position des Schwerpunktes  $\nu_0$  der Verteilung und die Gauss- und Lorentz Halbwertsbreite  $\gamma_G$  und  $\gamma_L$  wie folgt:

$$x = \sqrt{\ln 2} \frac{\nu - \nu_0}{\gamma_G} \quad \text{und} \quad y = \sqrt{\ln 2} \frac{\gamma_L}{\gamma_G} \quad (4.4.6)$$

Da sich die Voigtfunktion nicht analytisch darstellen lässt, ist man auf numerische oder analytische Approximationen angewiesen.

In dem verwendeten Programm wurde das obige Integral (Formel 4.4.5) mit Hilfe der summierten Simpsonregel angenähert. Hierbei wird der Integrand stückweise durch ganzrationale Funktionen 2. Grades approximiert [46].

In Abb. 4.17 und 4.18 sind die Ergebnisse der Analyse zu sehen. Die Daten wurden mit drei Voigtverteilungen und linearem Untergrund angepasst. Neben der  $K\alpha_1$ - und  $K\alpha_2$ -Linie (Abb. 4.17) wurde auf der hochenergetischen Seite der  $K\alpha_1$ -Linie eine Spektrallinie geringer Intensität (vgl. Abb. 4.18) bei der Analyse berücksichtigt.

In Abb. 4.17 ist die Abweichung der theoretischen Verteilung von den experimentellen Daten eingezeichnet (Residuum). Diese Abweichungen sind im Bereich der Spektrallinien ausgeprägter, jedoch in einem akzeptablen Bereich. Ein Grund für die verstärkte Abweichung ist die Asymmetrie der Linienform. Es ist sehr wahrscheinlich, dass Satellitenlinien (vgl. Abschnitt 4.1), welche den eigentlichen Diagrammlinien energetisch so nahe liegen, mit diesen überlappen. Für Kupfer haben *M. Deutsch et al.* [22] mittels hochauflösende Kristallspektrometrie sowie theoretischen Rechnungen [22] die Satellitenlinien neben den  $K\alpha$ -Diagrammlinien extrahiert und auf ihren Ursprung hin untersucht. Neben der eigentlichen Diagrammlinie stellte sich ein Satellitenübergang mit einer Vakanz in der 3d-Schale als die Wahrscheinlichste heraus. Da die durch die Lebensdauer bedingte Linienbreite ( $K\alpha_2$  2.17eV;  $K\alpha_1$  2.11eV [47]) größer als der Linieneabstand ist, erhält man ein glattes Linienprofil aus sich überlappenden Verteilungen. Da die unter der Verteilung liegenden Satellitenlinien bei der Analyse nicht berücksichtigt werden können, kann dies zu einer größeren Abweichung der theoretischen Verteilung von den gemessenen Daten führen.

Die in Abb. 4.18 sichtbare Spektrallinie wird höchstwahrscheinlich durch einen Satellitenübergang hervorgerufen. Durch die Kalibration des Spektrums mit Hilfe der Literaturwerte [22] für das  $K\alpha$ -Dublett von Kupfer kann die energetische Lage dieser Spektrallinie bestimmt werden ( $\approx 8082$  eV). Dies bestätigt die Annahme, dass die Spektrallinie zu einem Satellitenübergang gehört. Wie in der Referenz [22, 44, 45] beschrieben, kann dieser Übergang durch einen Shake-Off-Effekt (Vakanz in der 2p-Schale, vgl.

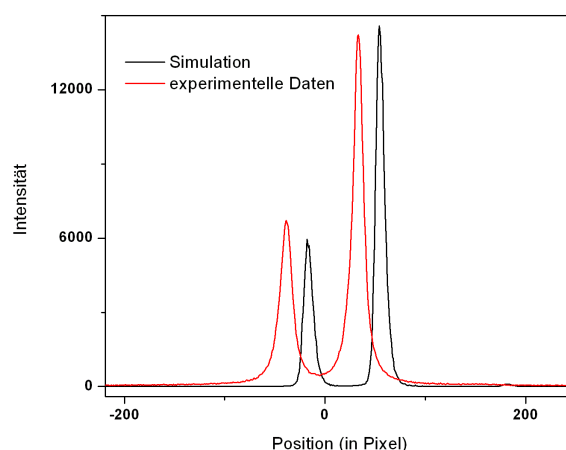


Abbildung 4.20: Vergleich der Simulation (MacRay [93]) mit den gemessenen Daten.

hierzu Abschnitt 4.1) bei gleichzeitiger Ionisation der 1s-Schale ermöglicht werden. Die dazugehörige Energie liegt dabei je nach Anregungsenergie im Bereich von  $\approx 8080$  eV (für Details vergleiche hierzu [44, 45]).

Im Zinkspektrum (vgl. Kapitel 6 und Anhang), welches separat aufgenommen wurde, ist eine vergleichbare Spektrallinie auf der hochenergetischen Seite des  $K\alpha$ -Spektrums sichtbar (bei  $\approx 8672$  eV). Es ist sehr wahrscheinlich, dass bei Zink ein zu Kupfer vergleichbarer Prozess stattfindet (vgl. Abb. 4 im Anhang).

In Abb. 4.20 sind die gemessenen Daten und die Ergebnisse einer Simulation mit dem Programm MacRay [93] zu erkennen. Die Eingabe-Parameter der Simulation wurden so gewählt, dass sie die experimentellen Bedingungen so gut wie möglich wiedergeben. Die Simulation beschreibt die experimentellen Daten relativ gut. Die Abweichung in der Position der Linien kann durch die nicht genau bekannte Lage und Ausrichtung der CCD-Kamera beim experimentellen Aufbau erklärt werden. Schon geringe Abweichungen in der geometrischen Ausrichtung können eine auf der CCD-Kamera unterschiedliche Position der reflektierten Röntgenlinien hervorrufen.

Zum Abschluß sind in Tabelle 4.1 die Ergebnisse der Anpassung zusammengefasst. Die Daten der Analyse des Zinkspektrums befinden sich im Anhang.

Übergang	Energie [eV]	FWHM [eV]	1/ $K\alpha_1$ -Ratio
$K\alpha_1$	$8047.829 \pm 0.005$	$2.756 \pm 0.007$	1.000
$K\alpha_2$	$8027.849 \pm 0.007$	$3.328 \pm 0.009$	0.547
Satellit	$8081.532 \pm 0.373$	$11.316 \pm 0.554$	0.009

Tabelle 4.1: Ergebnisse der Fit-Analyse mit MINUIT. Neben der Position ist das FWHM und das Verhältnis der integrierten Intensität der jeweiligen Linie zu der der  $K\alpha_1$ -Linie angegeben.



# Kapitel 5

## Der $n=2$ ${}^3P_2 \rightarrow {}^3S_1$ Innerschalenübergang in He-ähnlichen Uran

Im folgenden Kapitel werden der physikalische Hintergrund und die Theorie der quantenelektrodynamischen Effekte in hochgeladenen Ionen kurz dargestellt.

### 5.1 Theorie

Ernest Rutherford führte 1911 seinen berühmten Streuversuch durch, welcher es ermöglichte, einen grundlegenden Einblick in die Struktur der Atome zu erhalten. Daraufhin entstand unter anderem das Modell der den Atomkern umkreisenden Elektronen. Da beschleunigte Ladungen, wie z.B. Elektronen, laut der klassischen Elektrodynamik Energie abstrahlen, wäre ein solches System instabil und das Elektron müsste in den Atomkern fallen.

Niels Bohr fand als erster (1913) ein Modell, welches erklärte, warum das Atom stabil ist. Die Elektronen bewegen sich nun auf stabilen diskreten Bahnen.

Wie bereits in Abschnitt 2.2.1 beschrieben, gibt das Bohr-Modell die Bindungsenergie eines Eielektronensystems durch folgende Formel an:

$$E_n = -Ry \frac{Z^2}{n^2} \quad \text{mit der Rydbergkonstante } Ry = \frac{\mu e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \quad (5.1.1)$$

Diese Formel beschreibt jedoch nur unvollständig Viel-Elektronen-Atome und ihre Spektren, da sie nicht die Feinstrukturaufspaltung (vgl. Abschnitt 2.2.2) erklären kann. Die klassische Quantenmechanik enthält nämlich keine relativistischen Effekte wie z.B. die Eigenschaften des Elektrons, welches einen Eigendrehimpuls (den Spin  $s = \frac{1}{2}\hbar$ ) besitzt. Der Spin des Elektrons ist jedoch in der relativistisch korrekten Formulierung der Quantenmechanik, der Dirac Theorie (1928), enthalten. Für die Energieniveaus des Wasserstoffatoms lautet die zeitabhängige Dirac-Gleichung:

$$E\psi(\mathbf{r}) = (V(r) + \beta m + \vec{\alpha} \cdot \mathbf{p})\psi(\mathbf{r}) \quad (5.1.2)$$

Sie ist das relativistische Analogon zur Schrödingergleichung und ist invariant unter Lorentztransformationen. Der Impuls ist gegeben durch  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla_r$  und  $m$  ist die

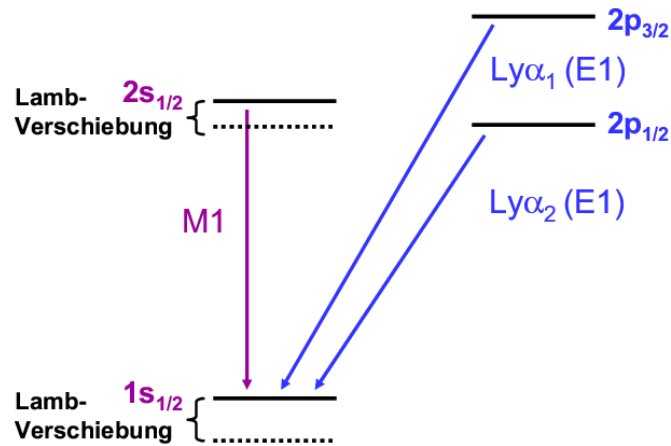


Abbildung 5.1: Termschema von H-artigen Systemen mit eingezeichneter Lamb-Verschiebung; punktierte Linien zeigen die Abweichung von der Dirac-Theorie

Ruhemasse des Elektrons.  $V(r)$  gibt das Coulombpotential für den als punktförmig angenommenen Kern an.

Der Energieeigenwert gibt die Gesamtenergie für ein gebundenes Elektron in einem Ein-Elektron-System an (vgl. hierzu auch Abb. 5.1):

$$E_{nj} = mc^2 / \sqrt{1 + \left\{ \frac{Z\alpha}{n - |j + 1/2| + \sqrt{(j + 1/2)^2 - (Z\alpha)^2}} \right\}^2} \quad (5.1.3)$$

$c$  ist die Lichtgeschwindigkeit und  $\alpha \approx 1/137$  die Sommerfeldsche Feinstrukturaufkonstante. Der Drehimpuls  $l$  koppelt zusammen mit dem Spin  $s$  des Elektrons zum Gesamtdrehimpuls mit der Quantenzahl  $j = l \pm 1/2$ .

Durch Entwicklung obiger Relation erhält man in erster Näherung die bekannte Feinstrukturaufspaltung mit dem nichtrelativistischen Anteil  $E_n$ :

$$E_{nj} = E_n \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left( \frac{n}{j + 1/2} - \frac{3}{4} \right) \quad (5.1.4)$$

Die Bindungsenergie  $E_B$  eines Niveaus lässt sich wie folgt berechnen:

$$E_B = E_{nj} - mc^2 \quad (5.1.5)$$

## 5.2 Lamb Verschiebung - QED Effekte

Nach der Diracgleichung sind alle Energiezustände derselben Hauptquantenzahl  $n$  mit demselben Gesamtdrehimpuls  $j$  energetisch entartet (vgl. Formel 5.1.4).

1947 jedoch entdeckten Lamb und Retherford bei hochfrequenzspektroskopischen Untersuchungen an Wasserstoffatomen eine Abweichung von der Übergangsenergie, welche

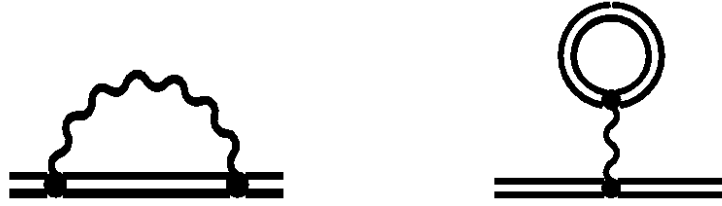


Abbildung 5.2: Feynman-Diagramme der Selbstenergie (links) und der Vakuumpolarisation (rechts). Selbstenergie: Das Photon (gewellte Linie) wird an einem Vertex von dem Elektron (durchgezogene Linie) emittiert und an dem zweiten Vertex von demselben Elektron absorbiert. Es ist keine Zeitrichtung durch einen Pfeil angegeben. Vakuumpolarisation: Das virtuelle Elektron-Positron-Paar (Kreislinie) wechselwirkt über eine Photon (gewellte Linie) mit einem Elektron (durchgezogene Linie).

die Dirac-Gleichung liefert. Dabei wurden Wasserstoffatome durch Elektronenbeschuss in einen metastabilen Zustand angeregt und flogen anschließend durch einen Resonator. Dort wurde der  $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$ -Übergang induziert, die dazugehörige Energiedifferenz liegt im Mikrowellenbereich. Dabei wurde festgestellt, dass das  $2s_{1/2}$ - und das  $2p_{1/2}$ -Niveau nicht wie laut Dirac erwartet, energetisch entartet sind, obwohl beide denselben Gesamtdrehimpuls besitzen. Diese Energiedifferenz wird als „klassische“ Lambverschiebung bezeichnet.

Diese Niveauverschiebung legte den Grundstein zur Entwicklung der Quantenelektrodynamik, also die quantenfeldtheoretische Beschreibung des Elektromagnetismus. Feynman, Schwinger und Tomonaga [49] sind die Pioniere dieser Theorie. Sie erhielten dafür 1965 den Nobelpreis. Heute gilt sie als eine der bestgeprüften grundlegenden physikalischen Theorien. Bei der korrekten theoretischen Beschreibung eines Atoms müssen QED-Effekte berücksichtigt werden, welche durch die Entstehung und Vernichtung von Teilchen und ihren Feldern entstehen. Diese Effekte verursachen u.a. eine Verschiebung der Energieniveaus und werden dann als Korrekturterme zur Lösung der Diracgleichung beigefügt<sup>1</sup>. QED-Korrekturen (der ersten Entwicklungsordnung) sind die *Vakuumpolarisation* und die *Selbstenergie*. Zur Lamb-Verschiebung gehören sowohl die oben genannten QED-Beiträge als auch die *Kerneffekte*.

<sup>1</sup> Die elektromagnetische Wechselwirkung wird in der QED durch den Austausch von Photonen mit geladenen Teilchen beschrieben. Durch die elektromagnetische Kopplungskonstante, die Feinstrukturkonstante  $\alpha$ , kann die Stärke der Kraft zwischen zwei Ladungen bestimmt werden. Jede Photonwechselwirkung entspricht einer Ordnung in der Kopplungskonstante  $\alpha$ . Um die Korrekturterme zu erhalten, werden störungstheoretische Rechnungen durchgeführt, welche nach der Feinstrukturkonstanten  $\alpha$  und  $Z\alpha$  entwickelt werden. Dabei werden häufig nur die niedrigsten Ordnungen berücksichtigt.

### 5.2.1 Selbstenergie

Die Wechselwirkung eines Elektrons mit seinem eigenen Strahlungsfeld bezeichnet man als Selbstenergie. Ein Elektron, welches sich im Coulombfeld eines Atomkerns befindet, kann ein oder mehrere „virtuelle“ Photonen emittieren und reabsorbieren. Nach der Heisenbergschen Unschärferelation ist dies ein erlaubter Prozess, welcher nicht die Energieerhaltung verletzt. Die veränderte Wechselwirkung mit dem Atomkern und die Wechselwirkung mit dem virtuellen Photon führt zu einer Energieverschiebung [5].

### 5.2.2 Vakuumpolarisation

Die Vakuumpolarisation beschreibt, wie durch das starke Feld des Kerns kurzzeitig virtuelle Elektronen-Positronen-Paare erzeugt und wieder vernichtet werden. Diese verhalten sich wie ein polarisierbares Medium. Dieser Effekt führt zu einer stärkeren Bindung des Elektrons, im Gegensatz zur klassischen Physik, nach der man eine Lockerung der Bindungsenergie erwarten würde.

Abb. 5.2 zeigt die Feynman-Diagramme<sup>2</sup> der Selbstenergie und der Vakuumpolarisation, beide Effekte zählt man zu den Strahlungskorrekturen.

### 5.2.3 Kerneffekte

Bei zunehmend schweren Atomkernen kontrahiert die Wellenfunktion durch relativistische Effekte (über die  $1/Z$ -Skalierung von Bohr hinaus), so dass für die stärksten gebundenen Elektronen die Masse, Struktur und endliche Ausdehnung des Kerns eine zunehmende Rolle spielen und bei der Berechnung der Bindungsenergie berücksichtigt werden müssen.

U.a. muss in der Diracgleichung (Formel 5.1.2) das Potential des punktförmigen unendlich schweren Kerns durch das eines ausgedehnten Kerns ersetzt werden, welcher eine endliche Masse besitzt.

Des weiteren stellt sich die Verteilung der Kernladung und die Abweichung der Verteilung des magnetischen Moments des Kerns von dem eines Punktteilchens (Bohr-Weisskopf-Effekt [50]) als ein Problem in den Berechnungen dar.

---

<sup>2</sup> Ein Feynman-Diagramm ist die graphische Darstellung von Wechselwirkungsprozessen in der Quantenfeldtheorie. Mit dieser können die Wechselwirkungen übersichtlich dargestellt und für theoretische Berechnungen verwendet werden. In diesen Raum-Zeit-Diagrammen werden ein- und auslaufende Teilchen (z.B. Elektronen und Photonen) sowie kurzzeitig erzeugte und wieder vernichtete virtuelle Teilchen (z.B. Elektron-Positron-Paare), durch Linien symbolisiert. Die Elektronen werden mit durchgezogenen Linien (bzw. Pfeilen) und die Photonen mit gewellten Linien dargestellt (siehe hierzu Abb. 5.2 und 5.4). Die Raumpunkte, an welchen Teilchen erzeugt oder vernichtet werden, werden als Vertizes bezeichnet. Linien, welche auf beiden Seiten durch Vertizes begrenzt sind, charakterisieren virtuelle Teilchen, welche nach aussen nicht in Erscheinung treten (intermediäre Prozesse). Die Anzahl der Vertizes kennzeichnet die Ordnung, welche in der Entwicklung einer störungstheoretischen Rechnung berücksichtigt wird. So stellen Graphen mit zwei Vertizes Entwicklungsterme erster Ordnung dar, Graphen mit vier Vertizes Entwicklungsterme zweiter Ordnung usw. ; für weitere Details sei auf die Literatur verwiesen, z.B. [51, 52].

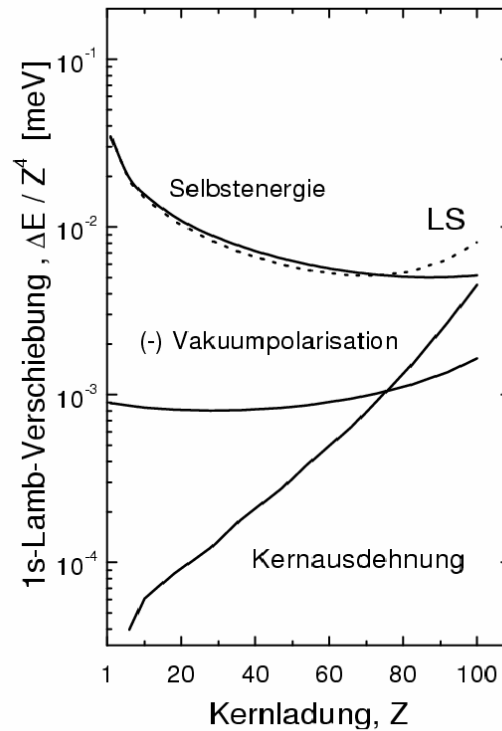


Abbildung 5.3: Die einzelnen Beträge der 1s-Lamb-Verschiebung in H-artigen Systemen gegen die Kernladungszahl  $Z$  aufgetragen [53]. Die Lamb-Verschiebung skaliert mit  $Z^4$  und wurde aus diesem Grunde durch diesen Term normiert. Bei wachsender Kernladungszahl  $Z$  spielt die Ausdehnung des Kerns eine zunehmend größere Rolle. Der Beitrag der Vakuumpolarisation nimmt ebenso zu.

Die Bedeutung der einzelnen QED-Beiträge ist für kernnahe Elektronen wesentlich größer als für Zustände mit höherem Drehimpuls. Ausserdem ist die Stärke der einzelnen Beiträge von der Kernladungszahl  $Z$  abhängig. In leichten Systemen (kleines  $Z$ ) ist die Selbstenergie die wichtigste Korrektur. Die Vakuumpolarisation spielt in schweren Systemen eine größere Rolle als in leichten. Die Kernausdehnung leistet erst bei hohem  $Z$  einen immer größer werdenden Beitrag.

Um die Korrekturen zusammenzufassen, wird die Lamb-Verschiebung für das 1s-Niveau in H-artigen Ionen angegeben [53]:

$$\Delta E_{Lamb} = \frac{\alpha (\alpha Z)^4}{\pi n^3} F(\alpha Z) m_0 c^2 \quad (5.2.1)$$

$F(\alpha Z)$  ist eine dimensionslose Funktion, welche die quantenelektrodynamische Effekte (Vakuumpolarisation, Selbstenergie u.a.) umfasst. Vereinfacht skalieren die QED-Beiträge mit  $Z^4/n^3$ .

In Abb. 5.3 sind die Größenanteile der einzelnen Beiträge bei verschiedenen Kernladungen dargestellt. Schwere hochgeladene Ionen eignen sich offensichtlich besonders gut um QED-Effekte wie die Lamb-Verschiebung zu studieren. In H-artigen Uran ( $U^{91+}$ ) z.B.

liegen die QED-Korrekturen bei  $\Delta E_{QED} \approx 500$  eV [54], während diese in Wasserstoff lediglich  $\Delta E_{QED} \approx 10^{-6}$  eV [55, 56] ausmachen.

## 5.2.4 Mehrelektronensysteme - He-artige Systeme

Bis hierher wurden ausschließlich wasserstoffähnliche Systeme betrachtet. Diese sind durch ihre einfache Struktur durchaus hervorragende Testsysteme. Andererseits sind Mehrteilchensysteme besonders interessant, um Vielkörpereffekte zu studieren. He-artige Systeme eignen sich dafür besonders gut. Jedoch ist die theoretische Beschreibung schwieriger als dies bei dem Ein-Elektronensystemen der Fall ist. Die Diracgleichung liefert keine analytisch lösbare Beschreibung atomarer Zustände von Mehr-Elektronensystemen. Für den nichtrelativistischen Fall muß die stationäre Schrödingergleichung gelöst werden, welche die statische Elektron-Elektron-Wechselwirkung explizit enthält:

$$H\psi = E\psi \quad (5.2.2)$$

Dabei bezeichnet  $\psi$  die Zweielektronenwellenfunktion und  $H$  den Hamiltonoperator:

$$H = h_s(1) + h_s(2) - \frac{Ze}{r_1} - \frac{Ze}{r_2} + \frac{e}{|r_1 - r_2|} \quad (5.2.3)$$

$r_1$  und  $r_2$  sind die Elektronenkoordinaten.  $h_s(1)$  und  $h_s(2)$  sind die separaten Hamiltonoperatoren für freie, nichtkorrelierte Elektronen.  $-\frac{Ze}{r_1}$  und  $-\frac{Ze}{r_2}$  sind die Kernpotentialterme und  $\frac{e}{|r_1 - r_2|}$  gibt die Elektron-Elektron-Wechselwirkung an.

In einer verbesserten Beschreibung von schweren He-artigen Ionen können zudem relativistische Korrekturen niedrigster Ordnung, wie die *Breit-Wechselwirkung*<sup>3</sup>, berücksichtigt werden. Diese Systeme eignen sich also für das Studium von relativistischen Effekten.

Auch wenn die Theorie für die QED-Korrekturen in Zweielektronensystemen wesentlich komplizierter als in Ein-Elektronensystemen ist und man Elektronen-Korrelation, QED und relativistische Effekte nicht vollständig voneinander trennen kann, wurden basierend auf verschiedenen theoretischen Methoden, wie z.B. RMBPT (Relativistic Many-Body Perturbation Techniques) oder MCDF (Multi-Configuration Dirac-Fock), große Fortschritte gemacht [57, 58, 59, 60, 61, 62, 63].

Abb. 5.4 zeigt die graphische Darstellung (Feynman-Diagramme) der Zwei-Elektron-QED-Effekte. Dazu gehören strahlende Beiträge, wie Selbstenergieabschirmung und Vakuumpolarisation, und nicht-strahlende Beiträge, zu diesen zählt der Zwei-Photonen-Austausch. Die dargestellten Diagramme zeigen Beiträge der zweiten Entwicklungsordnung von  $\alpha$ , d.h. vier Wechselwirkungsvertices sind enthalten. Die einfachste Elektron-Elektron-Wechselwirkung ist in Abb. 5.4 oben dargestellt. Diese beinhaltet den Ein-Photonen-Austausch von zwei Elektronen, welcher in der ersten Entwicklungsordnung von  $\alpha$  beinhaltet ist.

---

<sup>3</sup> durch den endlichen Wert der Lichtgeschwindigkeit kommt es zu einer endlichen Zeitdauer der Signalausbreitung bei der Coulombwechselwirkung. Dieser Retardierungseffekt wird in der Breit-Wechselwirkung berücksichtigt. Darüber hinaus beinhaltet sie die magnetische Wechselwirkungen (Strom-Strom-Wechselwirkungen) zwischen zwei bewegten elektrischen Ladungen.

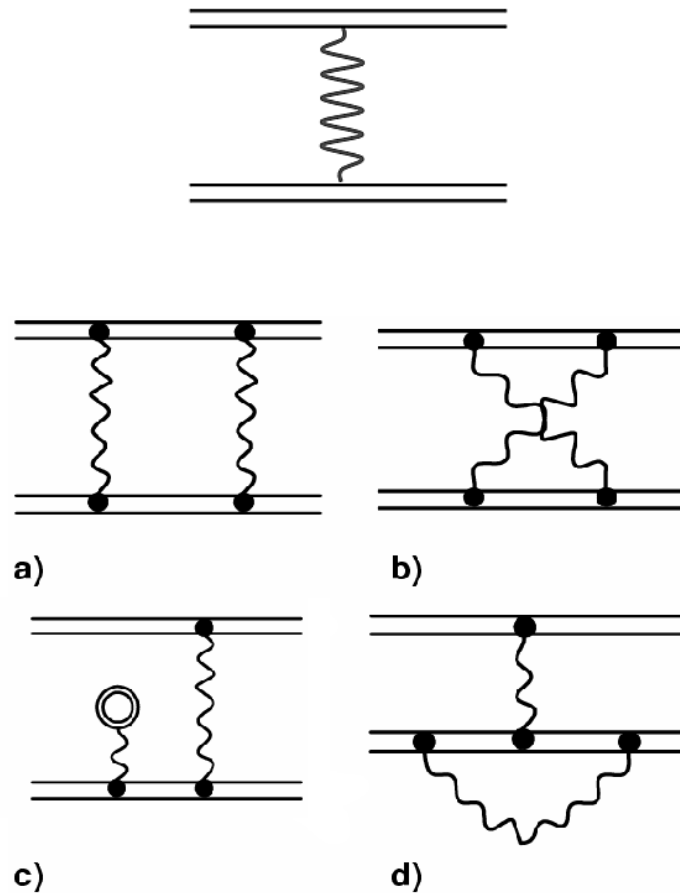


Abbildung 5.4: **Abb. oben:** Beispiel für Feynman-Diagramm des Ein-Photon-Austausches (gewellte Linie) zwischen zwei Elektronen (durchgezogene Linie).

**Abb. unten:** a) und b) nicht-strahlende (nicht-radiativ) Beiträge: Zwei-Photonenaustausch; strahlende (radiative) Beiträge: c) Vakuumpolarisation und d) Abschirmung der Selbstenergie.

Für verschieden schwere He-artige Systeme konnte der Zwei-Elektron-Beitrag zu der Grundzustandsenergie gemessen werden [64]. Die letzte Messung fand an dem Elektronenkühler (vgl. Abschnitt 6.1.1) der GSI statt, bei welcher der vollständige Zwei-Elektronenbeitrag zur Grundzustandsenergie in He-artigen Uran bestimmt werden konnte [65].

### 5.2.5 Innerschalenübergänge

Bis jetzt wurden Korrekturen für den Grundzustand betrachtet. Die Diskussion von angeregten Zuständen in He-artigen Systemen ist komplizierter. Dies liegt u.a. daran, dass für Ionen mit hoher Kernladungszahl  $Z$  die Zustände mit demselben Gesamtdrehimpuls  $J$  (z.B.  $2^3P_1$  und  $2^1P_1$ ) quasi entartet sind (Konfigurationsmischung; besitzen

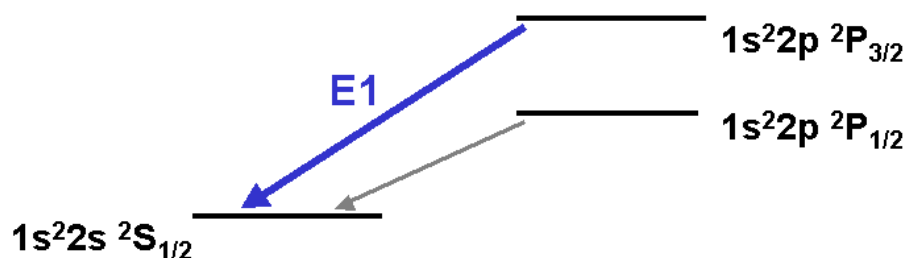


Abbildung 5.5: Termschema von Li-artigen Uran. Eingezeichnet sind mögliche Übergänge innerhalb des  $n=2$ -Niveaus. Im Fall einer vollbesetzten  $1s$ -Schale ist kein Übergang in den Grundzustand möglich. Gekennzeichnet ist der für diese Arbeit relevante Dipolübergang (E1) von der  $2p_{3/2}$ -Schale in den  $2s_{1/2}$ -Zustand.

dieselbe Parität und den gleichen Drehimpuls). Trotzdem wurden auch zu diesem Thema viele theoretische Arbeiten durchgeführt, welche die QED-Effekte der höheren Ordnungen berücksichtigen [57, 66, 67].

## 5.2.6 Li-artige Systeme

Das Termschema von Li-artigen Ionen (Kern mit 3 Elektronen) mit einer vollbesetzten K-Schale (siehe Abb. 5.5) ist dem von H-artigen Ionen sehr ähnlich. Hierbei ist jedoch zu beachten, dass auf Grund der Elektron-Elektron-Wechselwirkung das  $2p_{3/2}$ -Niveau höher als das  $2s_{1/2}$ -Niveau liegt. In diesem Fall sind durch die abgeschlossene K-Schale keine Übergänge in den Zustand  $n=1$  möglich. Übergänge können nur noch in die  $2s_{1/2}$ -Schale stattfinden.

Li-artige Systeme wurden ausführlich studiert, da sie im Gegensatz zu He-artigen Systemen besser theoretisch zu beschreiben sind (es liegt z.B. keine Quasi-Entartung vor). Besonders im Fall einer voll besetzten  $1s$ -Schale ähneln sie den H-artigen Systemen.

Die für diese Arbeit als Referenz dienende wichtige Übergangsenergie ist die des  $1s^2 2p^2 P_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 S_{1/2}$ -Übergangs in Li-artigen Uran. Diese wurde bereits an der Super-EBIT am LLNL (Lawrence Livermore National Laboratory) sehr genau vermessen [68, 69]:  $4459.37 \pm 0.21$  eV.

In der vorliegenden Arbeit wird die erste Messung des  $1s 2p^3 P_2 \rightarrow 1s 2s^3 S_1$ -Übergangs in He-artigen Uran diskutiert. Da zu den Energieniveaus der  $n=2$ -Schale in hochgeladenen Ionen kaum experimentelle Daten existieren, ist eine Messung des oben genannten Übergangs äußerst wichtig. Sie bietet die einzigartige Möglichkeit, die Theorie zu überprüfen, denn angeregte Zustände in schweren He-artigen Systemen sind durch die quasi-entarteten Zustände theoretisch schwerer zu beschreiben als der Grundzustand. Des weiteren können QED- und relativistische Effekte bei starken Feldern studiert werden, diese sind in hochgeladenen Ionen gravierender als in leichten Systemen. Im Fall von He-artigen Uran ist es zusätzlich möglich, die Elektron-Elektron-Wechselwirkung



durch Vergleich mit H-ähnlichen Ionen zu studieren. In der folgenden Tabelle sind die theoretischen Werte (mit den einzelnen Korrekturbeiträgen) für den Innerschalenübergang angegeben.

Beitrag	Wert [eV]
$E_{Dirac}$	4527.97
$E_{int}$	+22.00
$E_{QED}^{1e^-}$	- 40.64
$E_{QED}^{2e^-}$	+0.76
$E_{rel}$	- 0.09
$E_{Total}$	4510.03

Tabelle 5.1: **Einzelne Energiebeiträge für den  $1s2p^3P_2 \rightarrow 1s2s^3S_1$ -Übergang in He-artigem Uran [66]. Ganz oben wird die Energie nach Dirac angegeben, jedoch wurde hierbei die endliche Kernaussdehnung berücksichtigt.  $E_{int}$  berücksichtigt die Elektron-Elektron-WW, welche man aus der Breit-Gleichung gewinnt. Die nächsten beiden Terme geben die Ein- und Zwei-Elektron QED-Korrekturen an und  $E_{rel}$  ist der relativistische Rückstoss-Korrekturterm (relativistische Betrachtung der unterschiedlichen Massen von Elektron und Kern). In der letzten Spalte ist die zu erwartende totale Übergangsenergie angegeben.**

### 5.2.7 $1s2p^3P_2 \rightarrow 1s2s^3S_1$ -Übergang in He-artigen Uran

In Abb. 5.6 ist das Termschema mit den möglichen Übergängen von He-artigen Uran dargestellt. In schweren He-artigen Ionen ist die Spin-Bahn-Kopplung für das einzelne Elektron größer als die Wechselwirkung der verschiedenen Elektronen untereinander. Aus diesem Grunde werden sie durch die j-j-Kopplung beschrieben. In diesen schweren Ionen sind nun Übergänge möglich, welche nach den Dipolregeln verboten sind [70]. Deswegen konkurriert der hier relevante Dipolübergang E1 ( $1s2p^3P_2 \rightarrow 1s2s^3S_1$ ) mit dem Grundzustandsübergang M2 (magnetischer Quadrupol  $1s2p^3P_2 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ ). Es gibt also zwei Zerfallsmöglichkeiten, nach welchen das  $1s2p^3P_2$ -Niveau durch direkten Elektroneneinfang oder nach einem Kaskadenübergang<sup>4</sup> durch ein Elektron besetzt wurde. Abb. 5.7 zeigt das Verhältnis des E1-Innerschalenübergangs zu dem M2-Übergang in den Grundzustand als Funktion der Kernladungszahl. In He-artigen Uran ( $Z=92$ ) zerfällt der  $1s2p^3P_2$ -Zustand mit einer Wahrscheinlichkeit von 30% über dem elektrischen Dipolübergang [71].

<sup>4</sup> Bei dem Elektroneneinfang in den Grundzustand können auch Elektronen in höhere Niveaus eingefangen werden. Diese zerfallen über Zwischenzustände, bei jedem Übergang wird dabei ein Photon emittiert.

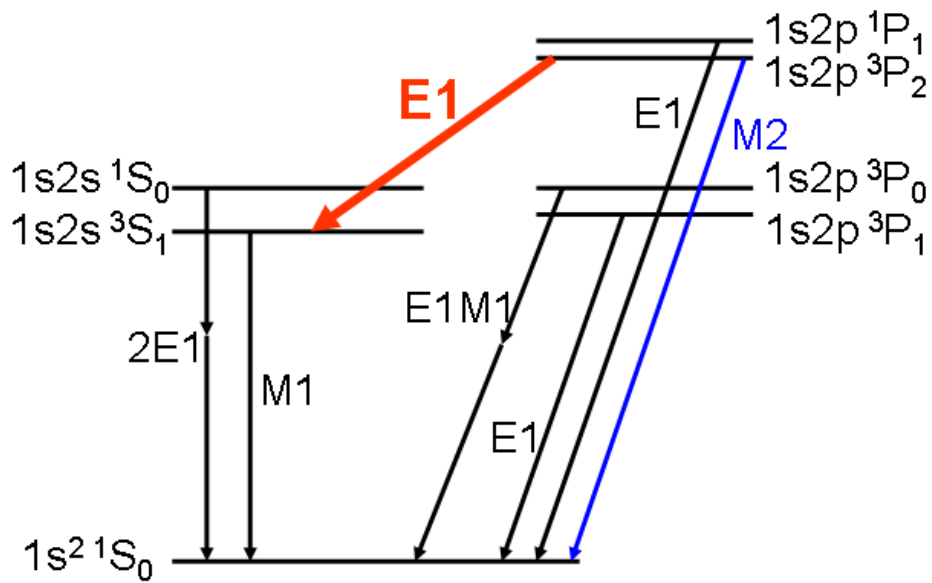


Abbildung 5.6: Termschema von He-artigem Uran. Eingezeichnet sind die möglichen Übergänge. Hervorgehoben (dicker roter Pfeil) ist der hier relevante Dipolübergang.

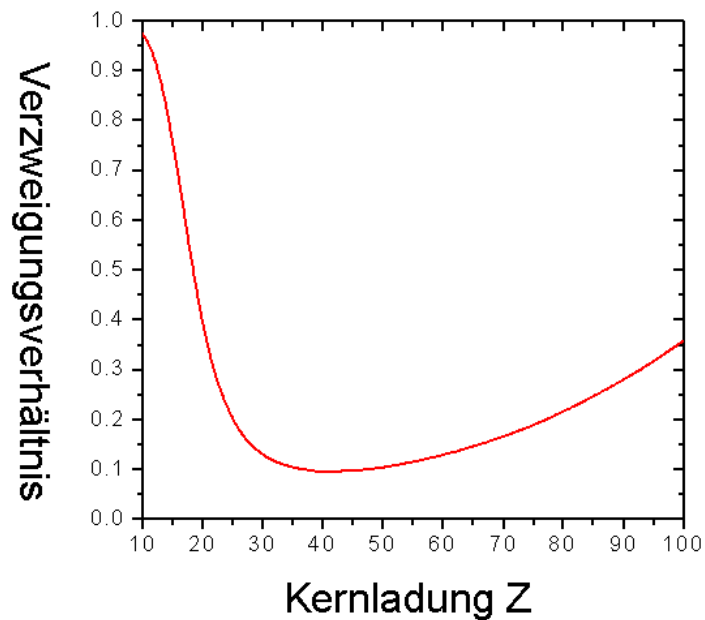


Abbildung 5.7: Verzweigungsverhältnis für den  $1s2p^3P_2 \rightarrow 1s2s^3S_1$ -Übergang in He-artigen Ionen als Funktion der Kernladungszahl [71].

# Kapitel 6

## Messung des $n = 2$

## $^3P_2 \rightarrow ^3S_1$ -Übergangs in He-ähnlichen Uran

Im folgenden Kapitel wird der experimentelle Aufbau der Messung mit dem Kristallspektrometer am ESR der GSI beschrieben. Der Beschleunigerkomplex wird mit den für das Experiment wichtigen Komponenten beschrieben. Des weiteren werden noch die physikalische Besonderheiten von Untersuchungen an sich schnell bewegenden Ionen erläutert. Im Anschluss werden die Ergebnisse des Experiments diskutiert und mit den Theorien verglichen.

### 6.1 Experimenteller Aufbau und Durchführung

Die Messung des  $1s2p^3P_2 \rightarrow 1s2s^3S_1$  Übergangs in He-artigen Uran wurde am Schwereionenspeicherring der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) durchgeführt. Hier hat man die einzigartige Möglichkeit, Ionen bis hin zu nacktem Uran ( $U^{92+}$ ) zu erzeugen und zu speichern. Man hat hier aus diesem Grund u.a. die Möglichkeit, über die Messung von Bindungsenergien, QED in starken Feldern zu studieren.

#### 6.1.1 Der GSI Beschleunigerkomplex

Die Hauptkomponenten der Beschleunigeranlage der GSI (Abb. 6.1) sind der Linearbeschleuniger UNILAC (UNiversal Linear ACcelerator), das Schwerionensynchrotron SIS und der Experimentierspeicherring ESR (Abb. 6.2).

##### UNILAC

Niedrig geladene Ionen werden aus den Ionenquellen (Penning- oder MEVVA-Quellen [33]) extrahiert. Die Ionen werden im UNILAC beschleunigt und bei einer Zwischenenergie von 1.4 MeV mittels Stripping<sup>1</sup> weiter ionisiert und so in einen höheren La-

<sup>1</sup> Stoß mit einem Target (Gas oder Festkörperfolie), bei welchem Elektronen aus der Atomhülle herausgeschlagen werden. Hierbei muss mindestens die für den gewünschten Ladungszustand nötige Ionisationsenergie als Stossenergie bereitgestellt werden.

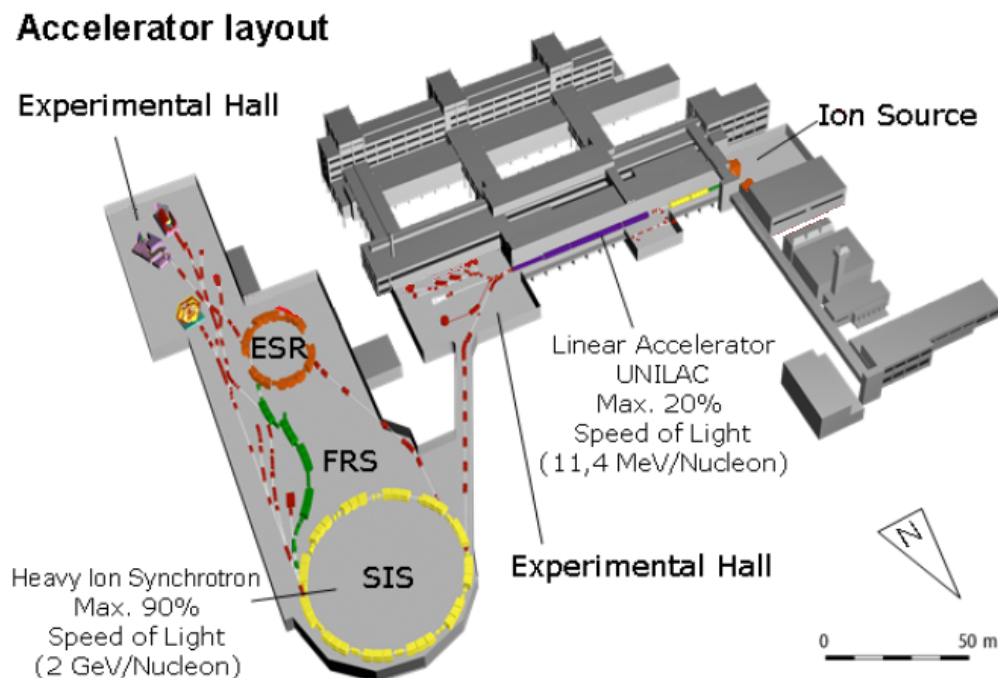


Abbildung 6.1: Die GSI-Beschleunigeranlage, bestehend aus UNILAC, SIS und ESR.

dungszustand gebracht (für Uran typischerweise  $28+$ ). Die Ionen werden dann im Alvarez weiterbeschleunigt und können anschliessend durch ein zweites Strippertarget höher ionisiert werden, bevor sie in das SIS eingeschossen werden. Für Uranionen liegt die Einschussenergie bei  $11.4 \text{ MeV/u}$  und der intensivste Ladungszustand bei  $73+$  [72, 73].

### SIS

Im SIS können die Ionen abhängig von ihrer Masse und ihrem Ladungszustand weiterbeschleunigt (Neon bis auf  $2 \text{ GeV/u}$  und Uran bis auf  $1 \text{ GeV/u}$ ) und in die verschiedenen Experimentierbereiche geleitet oder in den ESR-Speicherring eingeschossen werden. Durch den Fragmentseparator (FRS) besteht zusätzlich die Möglichkeit, die projektilähnlichen Fragmente des Ionenstrahls nach einer Reaktion in einem Target nach Massen- oder Ladungszustand zu selektieren. In der Transferlinie zwischen SIS und ESR kann ab einer Energie von  $\approx 300 \text{ MeV/u}$  (60% der Lichtgeschwindigkeit) mittels einer weiteren Stripperfolie ein Strahl vollständig ionisierter Uranionen erzeugt werden.

### ESR

Der vom SIS transferierte Ionenstrahl kann im ESR für Experimente gespeichert verwendet oder alternativ gekühlt zu Experimentierplätzen außerhalb des ESR transferiert werden.

Der ESR ist dafür ausgelegt, hochgeladene Ionen zu kühlen und für Experimente zu speichern. Er besitzt eine Umfang von  $108 \text{ m}$  (die Hälfte des SIS-Umfangs) und die Ringdipolmagnete eine magnetische Steifigkeit von  $B\rho = 10 \text{ Tm}$ . Dies ermöglicht, nack-

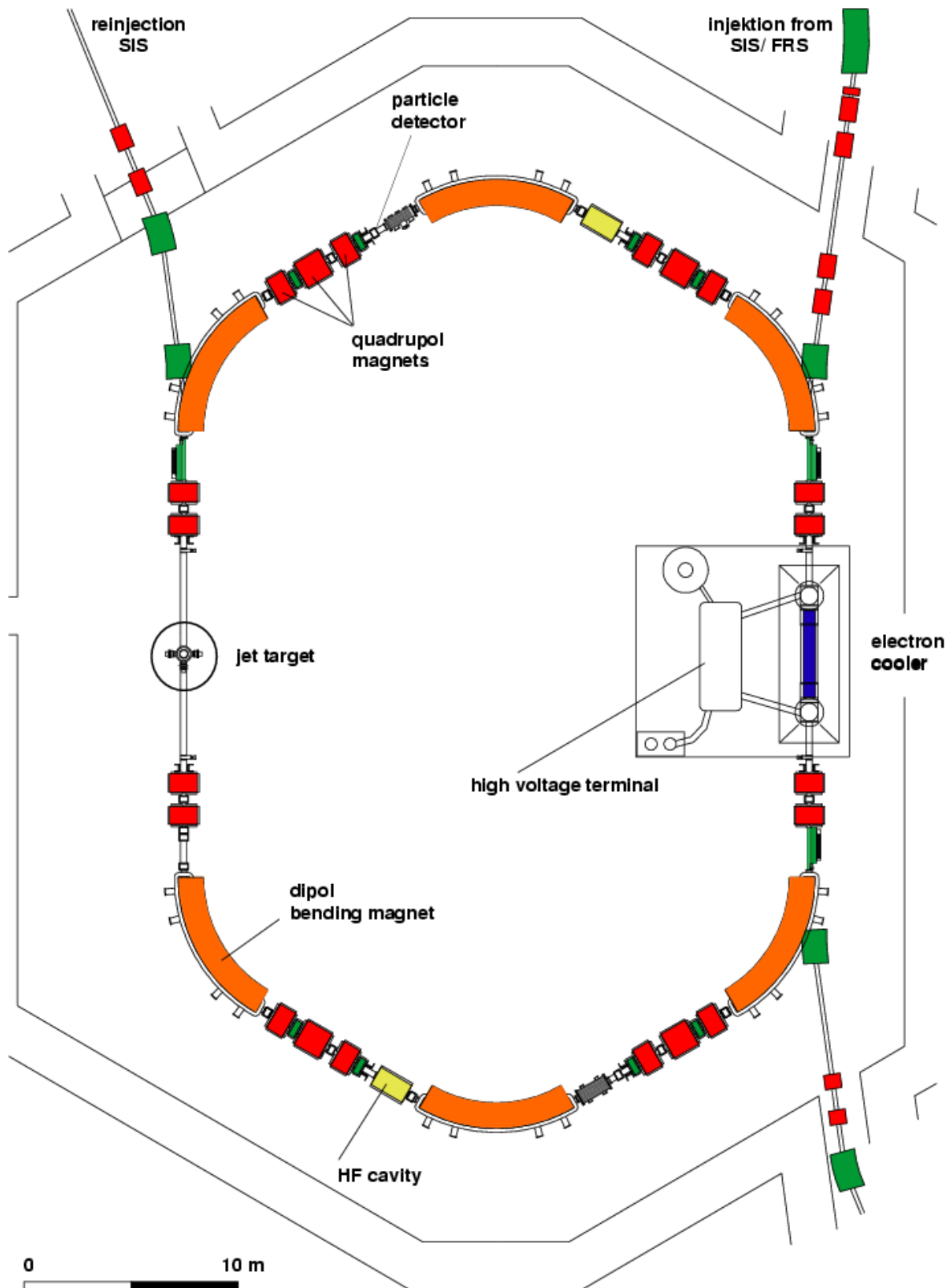


Abbildung 6.2: Schematischer Aufbau des ESR, mit dem internen Gastarget und dem Elektronenkühler.

tes Uran bis zu einer maximalen Energie von  $\approx 560$  MeV zu speichern. Diese Ionen können bei einem Vakuum von  $2 \cdot 10^{-11}$  mbar über mehrere Stunden gespeichert werden.

Die gewünschte Strahlenergie kann durch gezieltes Abbremsen und Beschleunigen des Strahls in Hochfrequenzkavitäten eingestellt werden. Trotz Strahlintensitätsverlusten durch Restgasstreuung können bei niedrigen Energien z.B. für Uran bei 50 MeV/u, Teilchenzahlen von rund  $10^8$  im Speicherring erreicht werden. Bei niedrigeren Teilchenzahlen können auch Energien bis runter auf 5 MeV erreicht werden [74].

Das Abbremsen des Ionenstrahls dient dazu, Störeffekte bei spektroskopischen Untersuchungen an schnell bewegten Systemen, wie z.B. der Dopplereffekt, zu minimieren. Die Ausprägung des dabei zu erwarteten Fehlers ist von der Projektilgeschwindigkeit und von dem Beobachtungswinkel abhängig (vgl. Abschnitt 6.1.2).

### Elektronenkühler

Der Ionenstrahl muss nach der Injektion in den ESR zunächst gekühlt werden, um eine scharfe Geschwindigkeitsverteilung der Ionen zu erhalten und die Lebensdauer zu verlängern. Kühlen bedeutet, die Geschwindigkeitsverteilung der Ionen und den Durchmesser des Ionenstrahls zu verringern.

Der „heiße Strahl“, der vom SIS transferiert wird, besitzt zunächst eine große Impulsunschärfe und ein breites Strahlprofil (gemäß der Maxwell'schen Temperaturverteilung). Die hohe Anzahl von Stößen mit dem Restgas würde bei  $10^6$  Umläufen in der Sekunde unkompensiert schnell zu einer weiteren Aufweitung und einer Reduzierung der Lebensdauer des Strahls führen. Deswegen ist es notwendig, den Ionenstrahl kontinuierlich zu kühlen. Der im Ring umlaufende Ionenstrahl wird auf einer 2.5 m langen Strecke des Elektronenkühlers mit einem nahezu monoenergetischen Elektronenstrahl überlagert (Abb. 6.3). Der Elektronenstrahl kann sowohl in transversale als auch in longitudinale Richtung auf sehr niedrige Temperaturen eingestellt werden und hat ein sehr viel schmaleres Impulsprofil als der ursprüngliche Ionenstrahl. Durch die Coulombwechselwirkung übertragen die Ionen ihren Impuls bei den Stößen auf die Elektronen. Die Ionen werden dadurch ausgerichtet und abgekühlt. Das Volumen des Phasenraumes der Ionen wird bei der Kühlung reduziert und die Geschwindigkeitsverteilung schmaler.

Wird der Strahl im ESR weiter abgebremst, muß er auch bei der neu eingestellten Energie gekühlt werden.

Die Energie der Ionen stimmt nach dem Kühlprozess mit der des Elektronenstrahls überein. Durch geringe Variation der Kühlerspannung kann die Ionenstrahlenergie mit einer relativen Genauigkeit von  $10^{-6}$  gesteuert werden [75].

Die Umlauffrequenz der Ionen lässt sich mittels der **Schottky-Analyse** messen.

Nicht alle Teilchen im Ring besitzen denselben Impuls und damit dieselbe Frequenz. Der Ionenstrahl besteht aus kontinuierlichen Ladungsträgern, deren Impuls statistisch um den Mittelwert schwanken und deswegen keinen kontinuierlichen Strom darstellen. Die Ladungsträger induzieren Bildladungen auf kapazitiven Strahlsonden. Aus diesem Schottky-Signal lässt sich durch Fouriertransformation ein Frequenzspektrum ermitteln, welches wiederum proportional zur Impulsverteilung der Ionen ist (vgl. Abb. 6.4).

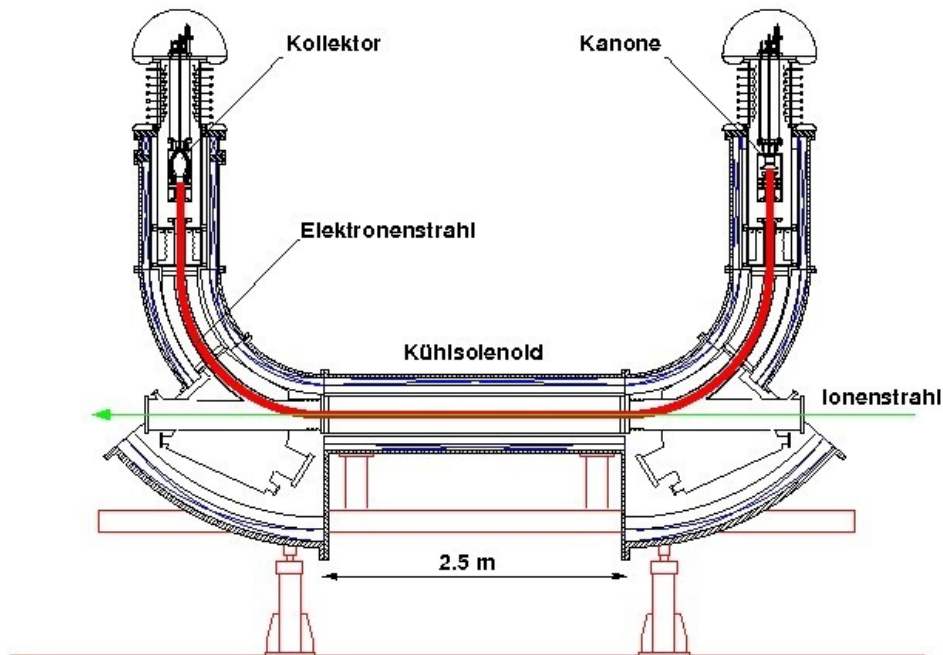


Abbildung 6.3: Der Elektronenkühler im ESR.

Die Schottky-Analyse kann somit als Diagnose für die aktuelle Impulsverteilung eines Strahls und so als Monitor für den Kühlvorgang verwendet werden [76, 77].

### Das interne Gastarget

Das Experiment wurde am internen Gas-Target im ESR durchgeführt. Für optimale Experimentierbedingungen ist im gesamten Ring einschließlich der Targetvakuumkammer ein Ultrahochvakuum ( $\approx 10^{-11}$  mbar) notwendig. Das Überschalltarget, dessen Strahl unter Umständen aus vielen wohldefinierten kleinen Clustern aufgebaut ist, besteht aus einem hochkollimierten Überschallgasstrahl hoher Dichte [78, 79]. Es können verschiedene Gase als Target verwendet werden ( $\text{H}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{CH}_4$ , Ar, Kr und Xe). Je nach chemischen Eigenschaften und Temperaturen der Gase können verschiedene Teilchendichten erreicht werden. Bei dem Experiment wurde als Targetgas Stickstoff mit einer durchschnittlichen Teilchendichte von  $10^{12}$  Teilchen/ $\text{cm}^3$  verwendet. Die Breite des Jetstrahls ist durch die Skimmergeometrie festgelegt und beträgt 5 mm.

### 6.1.2 Relativistische Korrekturen aufgrund bewegter Strahlungsquellen

Da sich die Ionen mit einer hohen Geschwindigkeit (hier z.B.  $\approx 30\%$  der Lichtgeschwindigkeit) bewegen, müssen Dopplerkorrekturen bei der Berechnung von Übergängen im Projektil vorgenommen werden.

Durch den relativistischen Dopplereffekt ist die von schnell bewegenden Ionen emittierte Strahlung im System des Beobachters (Laborsystem) zu veränderten Energien verschoben. Die Übergangsenergie im Emittersystem kann durch folgende Transforma-

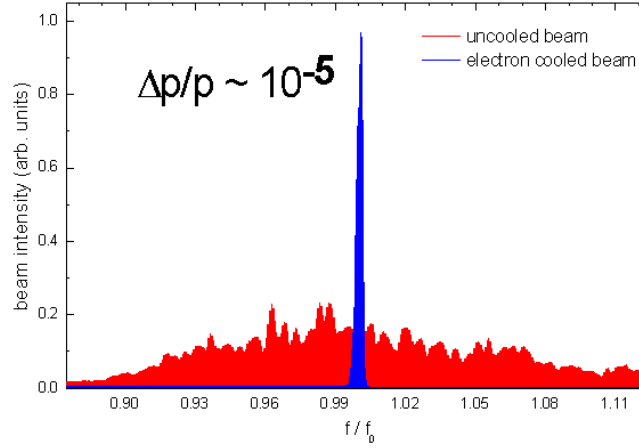


Abbildung 6.4: **Schottky-Frequenzspektrum des ungekühlten (rot) und gekühlten Strahls (blau), nach der Kühlung beträgt die relative Impulsverteilung  $\Delta p/p \approx 10^{-5}$  bei typischen Intensitäten von  $10^8$  Ionen.**

tion berechnet werden:

$$E_{proj} = E_{lab} \cdot \gamma (1 - \beta \cos \Theta_{lab}) \quad (6.1.1)$$

Dabei bezeichnet  $E_{proj}$  die Energie im Emittersystem,  $E_{lab}$  Energie im Laborsystem und  $\Theta_{lab}$  ist der Beobachtungswinkel,  $\gamma = 1/\sqrt{1 - \beta^2}$  ist der Lorentzfaktor mit  $\beta = v/c$ . Durch die Wahl der Geschwindigkeit der Ionen kann man sich den relativistischen Dopplereffekt zu Nutze machen, um die Energie im Laborsystem in den für das Spektrometer messbaren Energiebereich zu verschieben. Des weiteren hat man so den grossen Vorteil, Referenzlinien, welche auch von Ionen emittiert werden, in die Nähe der unbekanntem Linie schieben zu können oder diese sogar zum Überlapp zu bringen. Da die Ionengeschwindigkeit mit Hilfe der Kühlerspannung (vgl. Formel 6.3.2 in Abschnitt 6.3.2) sehr genau bestimmt werden kann, ist die relative Unsicherheit bei der Energiebestimmung durch diese Methode sehr gering. Fehler bei der genauen Energiebestimmung können durch Messungenauigkeiten des Beobachtungswinkels und der Ionengeschwindigkeit entstehen.

Aus der Gausschen Fehlerfortpflanzung erhält man die Dopplerverbreiterung der Energielinie:

$$\left[ \frac{\Delta E_{proj}}{E_{proj}} \right] = \left[ \frac{\beta \sin \Theta_{lab}}{1 - \beta \cos \Theta_{lab}} \Theta_{lab} \right]^2 + \left[ \left( \beta \gamma^2 - \frac{\cos \Theta_{lab}}{1 - \cos \Theta_{lab}} \right) \Delta \beta \right]^2 + \left[ \frac{\Delta E_{lab}}{E_{lab}} \right]^2 \quad (6.1.2)$$

Aus der obigen Formel lässt sich erkennen, dass aus niedrigen Strahlenergien eine geringere relative Unsicherheit resultiert. Es ist deswegen sinnvoll, den Ionenstrahl auf niedrige Energien abzubremesen [33, 80].

Eine schnell bewegte Röntgenquelle hat nicht nur eine Dopplerverschiebung der Energie zur Folge. Wie bereits in Abschnitt 3.4 diskutiert, spielt bei gekrümmten Kristallen neben der Johannverbreiterung auch eine Linienkrümmung auf dem Detektor eine Rolle.



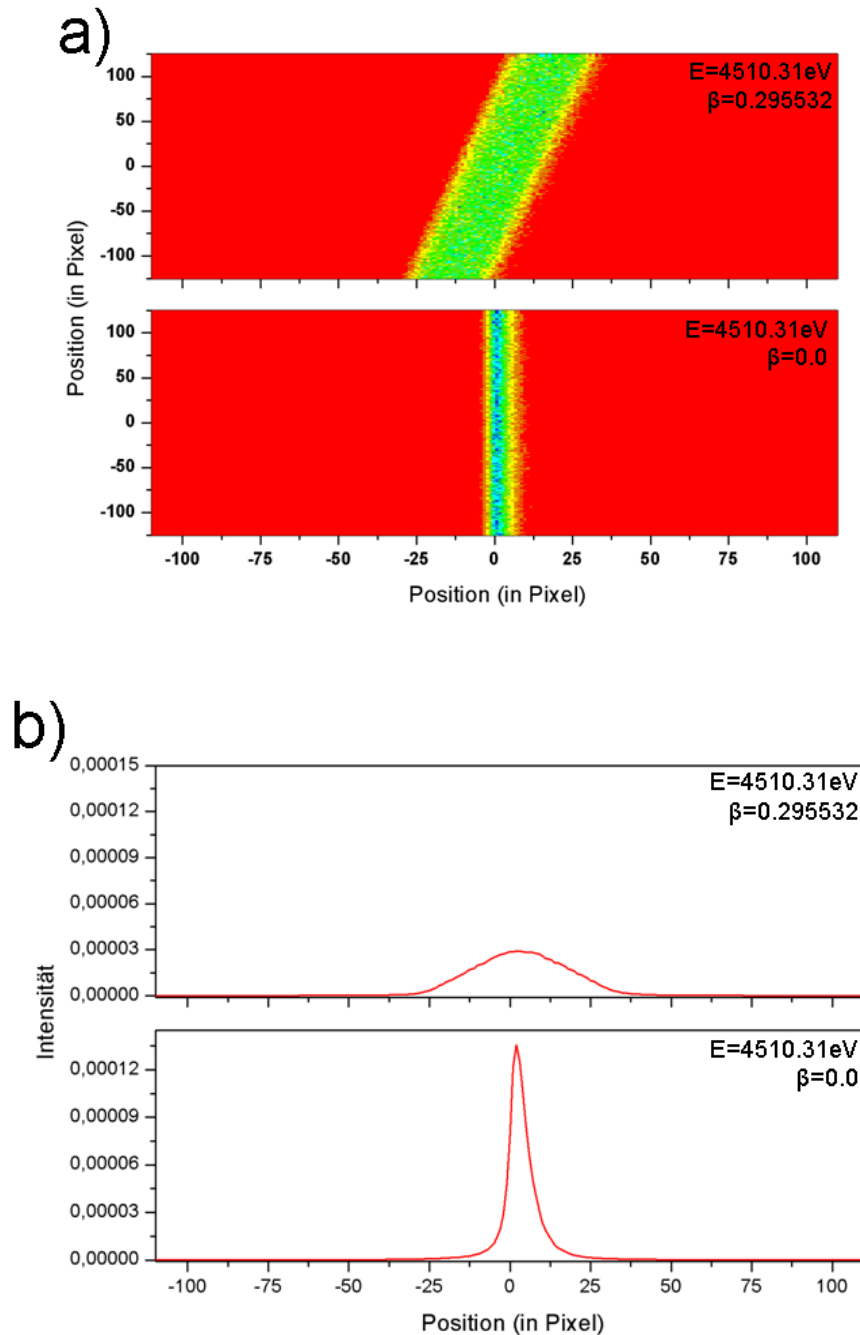


Abbildung 6.5: a) Simulation (MacRay [93]) der von der CCD-Kamera registrierten Röntgenphotonen bei einer bewegten Quelle (oben) und einer stationären Quelle (unten);  
b) Projektion des Zweidimensionalen Ortsbildes von a) auf die x-Achse. Eingabe-Parameter wurden den Bedingungen des Experiments angepasst.

Wird die Ebene des Rowlandkreises (vgl. Abschnitt 3.2.3) des Spektrometers senkrecht zur Bewegungsrichtung einer schnell bewegten Röntgenquelle platziert, so verursacht diese, verglichen mit stationären Quellen, eine schräge Linie auf dem Detektor (siehe Abb. 6.5). Die Steigung der Linie ist proportional zu der Geschwindigkeit der Ionen bzw. der Röntgenquelle. Die schräge Linie wird durch die Wellenlängenänderung, bedingt durch den Dopplereffekt, bei veränderten Beobachtungswinkel  $\Theta_{lab}$  verursacht [81, 82, 83]:

$$\lambda_{lab} = \lambda_{proj} \cdot \gamma (1 - \beta \cos \Theta_{lab}) \quad (6.1.3)$$

## 6.2 Aufbau und Messung

Im Folgenden wird der experimentelle Aufbau zur Messung des besprochenen Inner-schalenübergangs beschrieben.

Die zu erwartende Energie des Röntgenübergangs  $1s2p^3P_2 \rightarrow 1s2s^3S_1$  in He-artigen Uran liegt bei 4.5 keV. Bis jetzt wurde dieser Übergang in He-artigen Uran noch nicht eindeutig nachgewiesen. Es existieren Daten zu leichteren He-artigen Systemen (bis  $Z=54$  [84]) und indirekte Messungen durch Lebensdauermessungen [85]. An der Super-EBIT in Livermore wurde zuerst ein Experiment zur Messung des  $1s2p^3P_2 \rightarrow 1s2s^1S_1$ -Übergangs durchgeführt, jedoch konnte dieser Übergang in den Messdaten nicht eindeutig identifiziert werden [86].

Um den  $1s2p^3P_2 \rightarrow 1s2s^3S_1$ -Übergang zu messen, muss zunächst das  $1s2p^3P_2$ -Niveau effizient bevölkert werden. Dazu werden H-artige Uranionen ( $U^{91+}$ ) auf ein Stickstoffgas-target geschossen. Durch direkten Elektroneneinfang oder durch das Einfangen in hohe Rydbergniveaus und darauf folgende Kaskadenübergänge erhält man den gewünschten Ladungszustand in der gewollten Konfiguration [87].

Für eine Referenzmessung in Li-artigen Uran ( $U^{89+}$ ) (siehe Abschnitt 5.2.6) wurde He-artiges Uran auf das Target geschossen.

In jedem Messzyklus werden rund  $10^8$  Ionen gespeichert, gekühlt und auf die gewünschte Energie abgebremst. Der Ionenstrahl hat eine transversale Ausdehnung von  $\approx 2$  mm und wird auf das molekulare Gasjettarget ( $N_2$ ) geschossen, welches einen Durchmesser von  $\approx 5$  mm besitzt.

Am internen Gastarget besteht die Möglichkeit, unter verschiedenen Beobachtungswinkeln Röntgendetektoren anzubringen. Bei dem Experiment im August 2007 wurden mehrere Halbleiterröntgendetektoren, eine CCD-Kamera und das Kristallspektrometer aufgebaut (Abb. 6.6). Für die Messung relevant sind das Kristallspektrometer und ein Standard Ge(i)-Halbleiterdetektor, welcher für die Normierung unter einem Beobachtungswinkel von  $35^\circ$  installiert wurde. Der Halbleiterdetektor besitzt zwar eine wesentlich schlechtere Energieauflösung, aber dafür einen größeren Spektralbereich (bei diesem Versuchsaufbau  $\sim 28$  keV) als das Spektrometer (in der hier verwendeten Konfiguration  $\sim 80$  eV). Aus diesem Grund kann das mit dem Detektor aufgenommene Spektrum ([88, 89]) in Kombination mit dem des Spektrometers als eindeutiger Beleg für die Messung des gewünschten Übergangs verwendet werden.

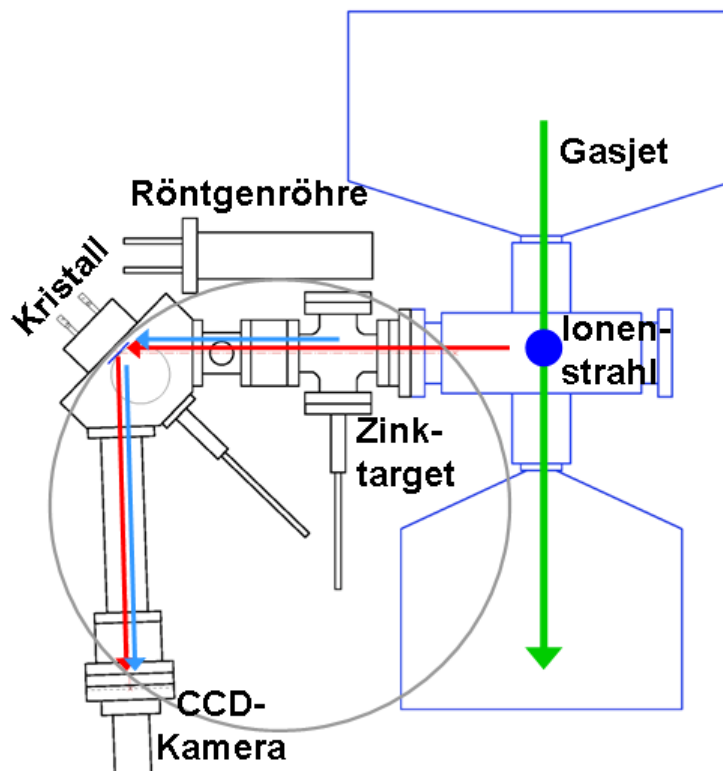
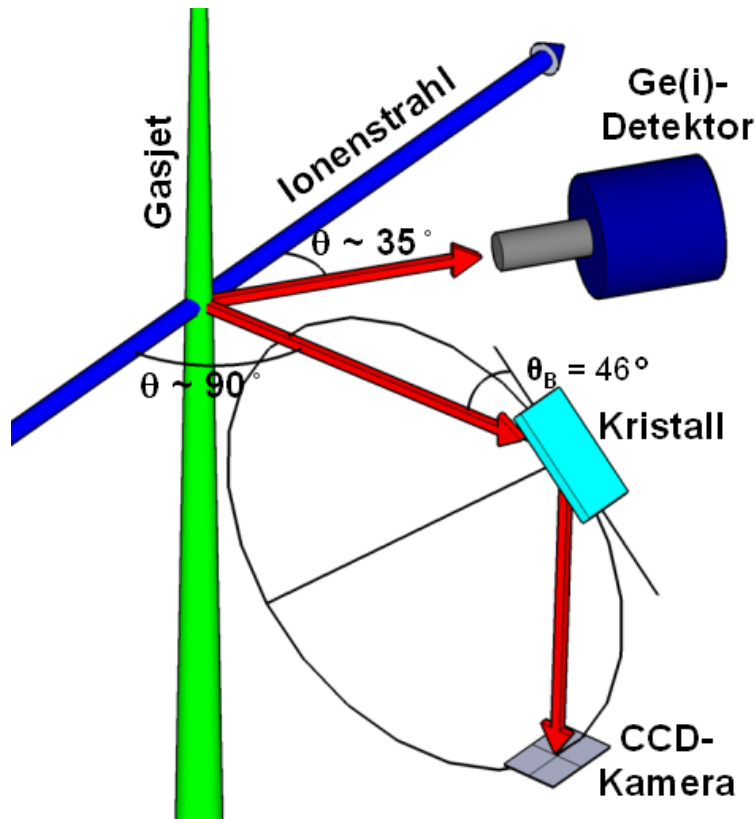


Abbildung 6.6: Experimenteller Aufbau: Oben: Das Kristallspektrometer ist unter einem Beobachtungswinkel von  $90^\circ$  und der Ge(i)-Detektor unter einem Winkel von ca.  $35^\circ$  aufgebaut.

Unten: Die Wechselwirkungszone von Ionenstrahl mit Gastarget liegt ausserhalb des Rowlandkreises, während die Quelle (Röntgenröhre und Zinktarget) der Zink- $K\alpha$ -Linien innerhalb des Rowlandkreises liegen.

Kristallspektrometer und Detektor sind durch ein  $100\ \mu\text{m}$  dickes Berylliumfenster vom Vakuum der Ultrahochvakuum-Wechselwirkungskammer (Restgasdruck  $\approx 10^{-11}$  mbar) getrennt. Im Spektrometer herrscht ein Basisdruck von  $10^{-5}$  mbar. Das Bragg-Spektrometer wurde unter einem Beobachtungswinkel von  $90^\circ$  installiert. Die Ebene des Rowlandkreises ( $\varnothing = 800$  mm) wurde senkrecht zum Ionenstrahl ausgerichtet (siehe Abb. 6.6), um eine fast identische Auflösung wie bei stationären Quellen zu gewährleisten. Der Spektrometeraufbau ist dem Aufbau, welcher bei der Aufnahme der  $K\alpha_{1,2}$ -Emissionslinien verwendet wurde (vgl. Abschnitt 4.3.1 bis 4.3.4), sehr ähnlich. Jedoch wurde in Hinsicht auf die zu messende Energie der Winkelblock auf den Bragg-Winkel von  $46^\circ$  angepasst. Es wurde ein zylindrisch gekrümmter Germaniumkristall (220) (vgl. Abschnitt 4.3.1), mit einer Fläche von  $25 \times 50\ \text{mm}^2$  verwendet. Die Wechselwirkungszone von Ionenstrahl und Gasjet ist  $785.05 \pm 0.46$  mm vom Kristall entfernt, liegt also über  $185$  mm ausserhalb des Rowlandkreises (vgl. Abb. 6.6). Zwischen Wechselwirkungszone und Kristall wurde noch eine Röntgenröhre und ein Zinktarget  $424.05$  mm vom Kristall entfernt installiert. Die CCD-Kamera ist  $575.75 \pm 0.65$  mm vom Kristall entfernt.

Die durch Photoionisation der Röntgenröhre angeregten  $K\alpha_1$ - und  $K\alpha_2$ -Emissionslinien von Zink ( $8638.91\ \text{eV}$ ,  $8615.82\ \text{eV}$  [4]) werden in zweiter Reflexionsordnung gebrochen und auf die CCD-Kamera fokussiert und dienen als stationäre Referenzquelle.

Wie bereits ausführlich diskutiert, besitzt das Spektrometer einen eingeschränkten Spektralbereich. Aus diesem Grunde ist es notwendig, die zu messende Innerschalenübergangsenergie in einen für das Spektrometer sichtbaren Energiebereich zu schieben. Hierzu macht man sich den Dopplereffekt zunutze. Die Beziehung zwischen Energie im Emitter und Laborsystem vereinfacht sich bei einem Beobachtungswinkel  $\Theta_{lab} = 90^\circ$  zu:

$$E_{proj} = E_{lab} \cdot \gamma \quad (6.2.1)$$

Um die Übergangsenergie von  $4.510\ \text{keV}$  auf  $4.309\ \text{keV}$  zu schieben, ist unter  $90^\circ$  eine Strahlenergie von  $43.57\ \text{MeV/u}$  notwendig (entspricht  $\gamma = 1.04677$ ). Röntgenphotonen dieser Energie werden in erster Reflexionsordnung gebrochen und treffen an fast derselben Stelle wie das Zinkfluoreszenzlicht die CCD-Kamera.

Da jedoch die stationäre Quelle über  $360$  mm von der Ionen-Gas-Wechselwirkungszone entfernt ist und diese nur mit einer Unsicherheit von  $\pm 0.04^\circ$  im Beobachtungswinkel angegeben werden kann, ist es sinnvoller, eine andere Referenz für die relative Energiemessung zu verwenden. Aus diesem Grunde wurde eine zweite Messung an Li-artigen Uran durchgeführt. Es wurde der  $1s^2 2p^2 P_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 S_{1/2}$ -Übergang verwendet, um auch mit einer bewegten Quelle kalibrieren zu können. Da in dieser Konfiguration der Quellort der Referenzlinie und der des gesuchten Übergangs übereinstimmen, entfallen Fehler, welche durch den Quellort oder dem Beobachtungswinkel bedingt sind. Zur passenden Dopplerverschiebung ist eine Strahlenergie von  $32.62\ \text{MeV/u}$  ( $\gamma = 1.03503$ ) notwendig.

Unter diesen Bedingungen wurden, über ca. 4 Tage verteilt, Daten aufgenommen. Zusätzlich wurde täglich ein Kalibrationsspektrum mit Röntgenröhre und Zinktarget aufgenommen, um die Stabilität des Spektrometers zu dokumentieren.

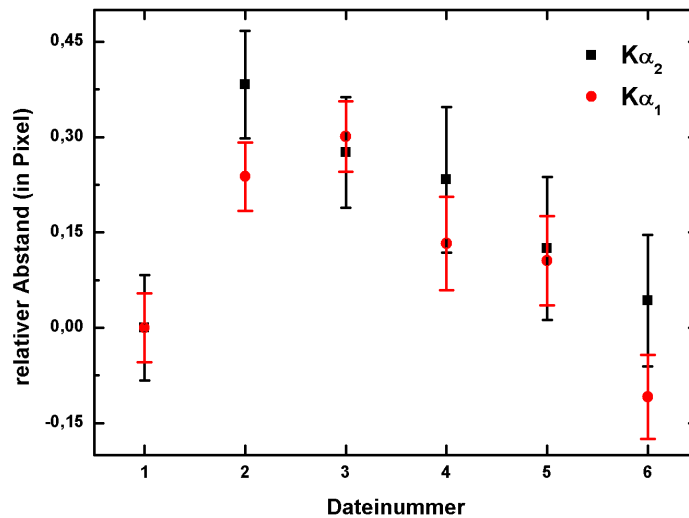


Abbildung 6.7: **Dokumentation der Stabilität des Spektrometers während der Strahlzeit.** Es sind die relativen Abstände der  $K\alpha_1$ - und  $K\alpha_2$ -Linien der chronologisch geordneten Dateinummern aufgetragen.

## 6.3 Datenanalyse

Im folgenden Abschnitt wird die Analyse der Daten diskutiert und die hieraus folgenden Ergebnisse dargestellt. Die Datenanalyse ist größtenteils von dem Hauptverantwortlichen des Experiments, Martino Trassinelli, durchgeführt worden. Des weiteren werden die systematischen Fehler bei der Durchführung und Analyse untersucht und quantifiziert. Zum Abschluss werden die Resultate mit der Theorie verglichen.

### 6.3.1 Zinkspektrum

Wie bereits erläutert, wurde jeden Tag mittels Röntgenröhre und Zinktarget das  $K\alpha$ -Emissionsspektrum von Zink als Referenz und Stabilitätskontrolle aufgezeichnet.

Bei den mit der CCD-Kamera aufgenommenen Rohdaten wurden zunächst eine Clusteranalyse (vgl. hierzu Abschnitt 4.3.5) durchgeführt und geeignete Energiebedingungen gesetzt. Im Anschluss musste eine Krümmungskorrektur durchgeführt werden (vgl. hierzu Abschnitt 4.4.1 und 4.4.2). In Abb. 6.8 ist das zweidimensionale Spektrum von Li- und He-artigem Uran und dessen Projektion auf die x-Achse ersichtlich. Die Effizienz des Spektrometers in der Konfiguration für die Zinkanalyse beträgt  $8 \times 10^{-7}$  und die Auflösung  $\sim 2$  eV.

Um die Wellenlängenstabilität des Spektrometers während der gesamten Strahlzeit zu überprüfen, wurde für die Daten der einzelnen Tage jeweils die Position des Schwerpunktes der einzelnen Emissionslinien ermittelt und miteinander verglichen (Abb. 6.7).

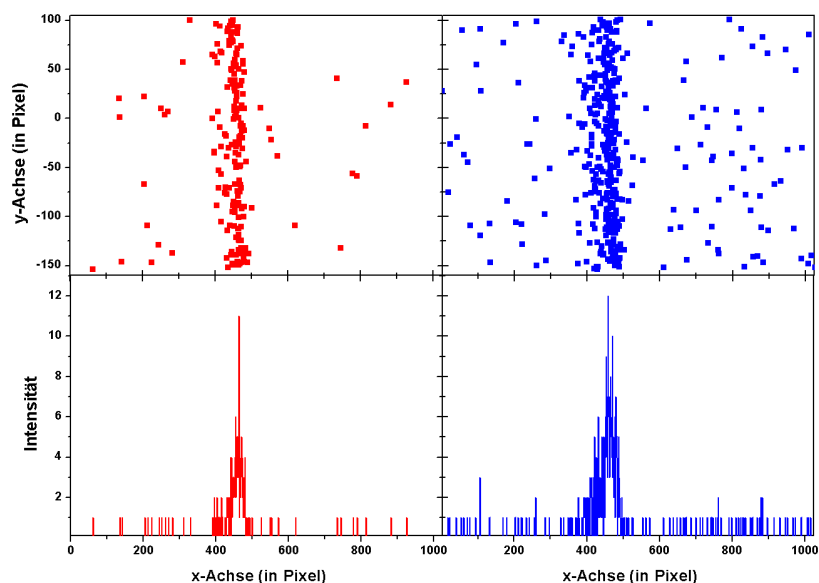


Abbildung 6.8: Unkalibrierte Daten (2D-Plot und Projektion auf die x-Achse) von Li-artigem (links) und He-artigem Uran (rechts).

Würde sich der Spektrometere Aufbau verändern, z.B durch eine effektive Änderung der Winkel, so würde dies durch die veränderte Position des Linienschwerpunktes sichtbar. Während der gesamten Datenaufnahme war der Aufbau sehr stabil. Die Positionen der Zinkreflexionslinien weichen um maximal 0.4 Pixel voneinander ab, was lediglich einem Abstand von  $10.4 \mu\text{m}$  auf der CCD-Kamera (vgl. Abb. 6.7) und damit einer Energie von 0.1 eV entspricht.

### 6.3.2 Helium- und Li-artiges Uran

Im zweidimensionalen Ortsbild Abb. 6.8 konnte eine Steigung der Linie, welche bei einem Bragg-Spektrometer mit der Ebene des Rowlandkreises senkrecht zur Bewegungsrichtung der Röntgenquelle durch den Dopplereffekt hervorgerufen werden kann, durch die geringe statistische Signifikanz (328 Datenpunkte bei He-artigen und 167 bei Li-artigen Uran) nur mit einer großen Unsicherheit bestimmt werden. Aus diesem Grund wurde der theoretische Wert der Steigung aus der Simulation für die Korrektur verwendet (vgl. hierzu Abschnitt 6.1.2).

Um die unbekannte Energie des Übergangs in He-ähnlichen Uran zu ermitteln, wurde zunächst die Position der jeweiligen Schwerpunkte der beiden Linien ermittelt. Da wenige Datenpunkte vorlagen und diese unsymmetrisch verteilt waren, können diese nicht mit einer einfachen Verteilung (z.B Gauss, Voigt) wie bei den Zinkdaten gefittet werden. Statt dessen wurde der Schwerpunkt der Verteilung durch eine rekursive Ite-

ration ermittelt<sup>2</sup>.

Verwendet man eine Zinklinie  $E_{Zn}$  als Energiereferenz, kann durch folgende Relation die gesuchte Energie  $E_{He}$  im Emittersystem berechnet werden (Herleitung im Anhang):

$$E_{He} = \gamma_{He}(1 - \beta_{He} \cos \Theta_{lab}) \left( 1 + \frac{\Delta x}{\tan \Theta_{BD}} \right) \frac{E_{Zn}}{2} \quad (6.3.1)$$

Dabei ist  $\Theta_{lab}$  der Beobachtungswinkel bezüglich der Ionenstrahlachse unter welchem das Spektrometer aufgebaut ist,  $\Theta_B$  der Bragg-Winkel,  $D$  der Abstand vom Kristall zum Detektor,  $E_{Zn}$  die Energie der betreffenden Zinkreflexion und  $\Delta x$  der Abstand der jeweiligen Linienschwerpunkte. Der durch die Dopplerkorrektur bedingte Lorentzfaktor  $\gamma_{He}$  kann durch die am Elektronenkühler (vgl. Abschnitt 6.1.1) angelegte Spannung  $U_{cooler}$ <sup>3</sup> ermittelt werden:

$$E_{kin} = U_{cooler} \cdot q = (\gamma - 1)m_e c^2 \quad (6.3.2)$$

$\beta = v/c$  für den Strahl lässt sich mit Hilfe der Beziehung

$$\beta = \sqrt{1 - \frac{1}{\gamma^2}} \quad (6.3.3)$$

berechnen.

Wie bereits erwähnt, ist es sinnvoller als Referenz eine Übergangslinie zu verwenden, welche von demselben Ort wie die gesuchte Linie, emittiert wird. Im Weiteren wird bei Benutzung des  $1s^2 2p^2 P_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 S_{1/2}$ -Übergangs in Li-artigen Uran auch eine bewegte Quelle als Referenz verwendet. Dies reduziert den systematischen Fehler.

Verwendet man den bereits präzise vermessenen Übergang in Li-artigen Uran  $E_{Li}$  als Referenzlinie, so kann mit folgender Beziehung die unbekannte  $1s 2p^3 P_2 \rightarrow 1s 2s^3 S_1$ -Übergangsenergie in  $U^{90+}$   $E_{He}$  ermittelt werden (Herleitung siehe Anhang):

$$E_{He} = \frac{\gamma_{He}(1 - \beta_{He} \cos \Theta_{lab})}{\gamma_{Li}(1 - \beta_{Li} \cos \Theta_{lab})} \left( 1 + \frac{\Delta x}{\tan \Theta_{BD}} \right) E_{Li} \quad (6.3.4)$$

Der Beobachtungswinkel im Laborsystem wurde zu  $\Theta_{lab} = 90 \pm 0.04^\circ$  bestimmt, dadurch vereinfacht sich obige Formel zu:

$$E_{He} = \frac{\gamma_{He}}{\gamma_{Li}} \left( 1 + \frac{\Delta x}{\tan \Theta_{BD}} \right) E_{Li} \quad (6.3.5)$$

$\gamma_{He} = 1.046771 \pm 0.000018$  bzw.  $\gamma_{Li} = 1.035026 \pm 0.000019$  ist der Lorentzfaktor der jeweiligen Strahlenergien und lässt sich genau wie die zugehörigen  $\beta_{Li} = 0.25794 \pm 0.00026$

<sup>2</sup> Der Mittelwert der Verteilung der Datenpunkte wurde berechnet, indem jeweils die Daten einer Zone um den Mittelwert der Verteilung selektiert wurden.  $[\bar{x} - l \cdot \sigma, \bar{x} + l \cdot \sigma]$  gibt die Intervallgrenzen dieser Zone im  $i$ -ten Schritt der Iteration an. Dabei ist  $\bar{x}$  der Mittelwert der Verteilung der Datenpunkte und  $\sigma$  der Mittelwert nach dem  $(i-1)$ -ten Schritt.  $l$  ist der Wert, welcher durch die Konvergenz der Rechnung und durch die Größe der Pixelmatrix bestimmt wird (liegt zwischen 2.5 und 4.5). Für verschiedene Werte von  $l$  erhält man einen Wert  $\bar{x}_l$ . Der Mittelwert aller  $\bar{x}_l$  gibt die gesuchte Position der Linienschwerpunkte  $x_{He}$  und  $x_{Li}$  an.

<sup>3</sup> die Strahlenergie ist durch die kinetische Energie der Kühlelektronen definiert.

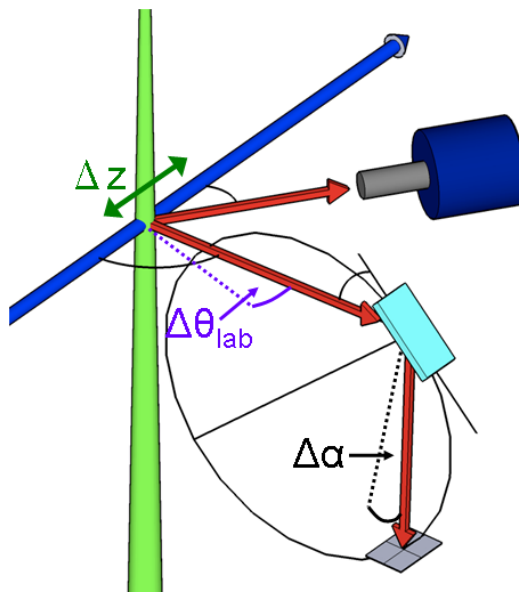


Abbildung 6.9: Schematische Abb. der möglichen durch den Aufbau bedingten systematischen Fehler. Die Wechselwirkungszone des Ionenstrahls mit dem Target kann nicht ganz genau bestimmt werden ( $\Delta z$ ). Daraus resultiert eine Unsicherheit im Beobachtungswinkel ( $\Delta\theta_{\text{lab}}$ ). Es kann zu einer Abweichung aus der Ebene des Rowlandkreises kommen ( $\Delta\alpha$ ).

und  $\beta_{\text{He}} = 0.29558 \pm 0.00019$  über die Kühlerspannung gemäß Gleichung 6.1.3 und 6.1.4 bestimmen.  $D = 575.75 \pm 0.65$  mm ist der Abstand vom Kristall zum Detektorschirm und  $\Delta x = 45 \pm 57 \mu\text{m}$  (weitere experimentelle Daten im Anhang).

$E_{Li} = 4459.37 \pm 0.21$  eV ist die besagte Referenzenergie [68]. Mit diesen Daten kann man nun die gesuchte Energie berechnen:  $E_{\text{He}} = 4510.31$  eV

### 6.3.3 Fehleranalyse

Fehler	Wert [eV]
Referenzlinie	0.212
Lorentzfaktor (Kühlerspannung) $\Delta\gamma$	0.010
Beobachtungswinkel $\Delta\theta_{\text{lab}}$ ,	0.108
Reflexionsebenenposition und Spektrometerausrichtung	0.008
Totaler systematischer Fehler	0.238
Totaler statistischer Fehler	0.434
Totaler Fehler	0.495

Tabelle 6.1: Übersicht der einzelnen möglichen Beiträge zum systematischen Fehler und der statistische Fehler



### Statistische Fehler

Da die Effizienz des Kristallspektrometers verglichen mit den Halbleiterdetektoren relativ gering ist ( $\approx 8 \times 10^{-7}$ ), ist die statistische Unsicherheit vergleichsweise groß. Da bei der Messung an Li-artigen Uran deutlich weniger Zeit zur Verfügung (ca. 1/2 Tag) stand als bei der Messung an He-artigen Uran (ca. 3.5 Tage), ist die totale statistische Signifikanz (Zählrate) hier noch geringer. Darüber hinaus war auch die Gastargetdichte bei dieser Messung deutlich geringer.

### Systematische Fehler

Zu den systematischen Fehlern gehören neben Unsicherheiten in der Analyse diejenigen, welche durch den Spektrometeraufbau verursacht werden. Der größte Teil der Fehler wird jedoch durch die Referenzlinie verursacht.

Folgende Punkte sind mit Unsicherheiten verbunden (vgl. Abb. 6.9):

- Aus der Unsicherheit der genauen Position des Gasjets  $\Delta z = 0.48$  mm resultiert eine Abweichung vom Beobachtungswinkel  $\Delta\Theta_{lab}$ . Es können immer Röntgenstrahlen unter einem leicht geänderten Winkel auf den Kristall treffen. Hierdurch resultiert wiederum eine durch den Dopplereffekt hervorgerufene Energieänderung und eine Neigung der Reflexionslinie auf dem Detektor (vgl. Abschnitt 6.1.2).
- Abweichungen von der Ausrichtung vom Kristall zur CCD-Kamera bedingt durch  $\Delta\alpha = 1^\circ$  (vgl. hierzu Abb. 6.9) und der Kristallposition, verursachen u.a. eine Verschiebung der Reflexionsebenenposition auf der CCD-Kamera
- Der Lorentzfaktor  $\gamma$  bei der Steuerung der Elektronen- und damit Ionengeschwindigkeit ( $\Delta\gamma = 0.010$  eV)
- Die zur Kalibration dienende Referenzlinie

Die systematischen Fehler sind verglichen mit dem Fehler der Referenzlinie fast zu vernachlässigen. In Tabelle 6.1 sind die Fehler quantitativ erfasst.

## 6.4 Vergleich Experiment - Theorie

Experiment	$4510.31 \pm 0.50$
MCDF calculation [90]	4510.30
Kozhedub 2008 [91]	$4509.85 \pm 0.07$
Artemyev 2005[66]	$4510.03 \pm 0.24$
Plante 1994[57]	4510.46
Chen 1993[67]	4510.65
Drake 1988 [58]	4510.01

Tabelle 6.2: Vergleich der gemessenen Übergangsenergie mit theoretischen Werten (in eV) [66, 57, 67, 58, 91, 90].

	$E_{Breit}$	$E_{2el.}^{QED}$	Total
Experiment			$50.94 \pm 0.45$
Theorie [91]	51.48	-1.18	$50.30 \pm 0.03$

Tabelle 6.3: **Experimentelle und theoretische Energiedifferenz zwischen  $1s^2 2p^2 P_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 S_{1/2}$  -Übergang in  $U^{89+}$   $1s 2p^3 P_2 \rightarrow 1s 2s^3 S_1$  Übergang in  $U^{90+}$ .**

Für den  $1s 2p^3 P_2 \rightarrow 1s 2s^3 S_1$  Übergang in He-artigen Uran wurde eine Energie von  $4510.31 \pm 0.50$  eV gemessen. Die Übergangsenergie konnte also mit einer relativen Genauigkeit von  $\Delta E/E \approx 10^{-4}$  bestimmt werden.

Aus Tabelle 6.2 ist zu erkennen, dass der gemessene Wert im Rahmen der experimentellen Unsicherheiten gut mit den theoretischen Vorhersagen übereinstimmt.

Abb. 6.12 stellt den Unterschied zwischen der Theorie von Artemyev *et al.* [66] und experimentellen Werten bei verschiedenen Kernladungszahlen dar. Sie stellt nicht nur die hohe Übereinstimmung dar, sondern zeigt auch, dass diese Messung die erste dieser Art bei hohen Kernladungszahlen ist und somit einen wichtigen Beitrag für die Überprüfung und zur Untersuchung von He-artigen Systemen liefert.

Als interessant stellt sich der Vergleich des  $1s^2 2p^2 P_{3/2} \rightarrow 1s^2 2s^2 S_{1/2}$  -Übergangs in Li-artigem Uran mit dem  $1s 2p^3 P_2 \rightarrow 1s 2s^3 S_1$  Übergang in He-artigem Uran heraus. Da sich Li-artiges Uran durch die abgeschlossene K-Schale fast wie ein Ein-Elektronen-System verhält, heben sich hier die quantenelektrodynamischen Zwei-Elektronen-Wechselwirkungsterme  $E_{2el.}^{QED}$  praktisch auf. Zu diesen Termen gehören die strahlenden Beiträge (Vakuumpolarisation und Abschirmung durch Selbstenergie; siehe c) und d) Abb 5.4) und die nichtstrahlenden Beiträge durch den Zwei-Photonen-Austausch (siehe a) und b) Abb. 5.4).

Tabelle 6.3 zeigt die Differenz zwischen den Werten der Übergänge in He- und Li-artigen Uran bei Theorie [91] und Experiment. Neben dem quantenelektrodynamischen Beitrag ist der relativistische Beitrag durch die Breit-Wechselwirkung aufgeführt (vgl. Abschnitt 5.2.4). Es stellt sich heraus, dass der quantenelektrodynamische Beitrag  $E_{2el.}^{QED}$  größer als die Ungenauigkeit des experimentellen Wertes ist. Die experimentellen Methoden sind somit empfindlich genug, um diese zu überprüfen und zu testen. Es zeigt sich darüber hinaus die Notwendigkeit, in den verschiedenen theoretischen Ansätzen diese Beiträge explizit zu berücksichtigen, um zuverlässige Vorhersagen zu liefern.

In Abb. 6.10 ist das vom Spektrometer aufgenommene kalibrierte Energiespektrum (im Laborsystem betrachtet) zu sehen. Ergänzend zu diesem ist in Abb. 6.11 das Spektrum, welches mit dem Ge(i)-Detektor aufgenommen wurde [88, 89], dargestellt. Es deckt einen deutlich größeren Energiebereich ab und liefert den Beweis, dass in dem für das Spektrometer sichtbaren Energieintervall ( $\sim 80$  eV) keine weiteren Übergänge liegen.

In dem Spektrum von He-artigem Uran ist jedoch eine deutliche Asymmetrie im Liniensprofil zu erkennen. Es ist unklar, ob diese Asymmetrie durch die geringe Zählstatistik bedingt ist und eine höhere Statistik eine Doppelpeakstruktur sichtbar machen würde. Bisher wurden mögliche Satellitenübergänge oder andere Übergänge bei der betreffenden Energie weitgehend ausgeschlossen [42, 88, 89, 92]. Um diesen Sachverhalt zu überprüfen, ist jedoch ein zeitauflösender Detektor notwendig, welcher eine Koinzidenz-

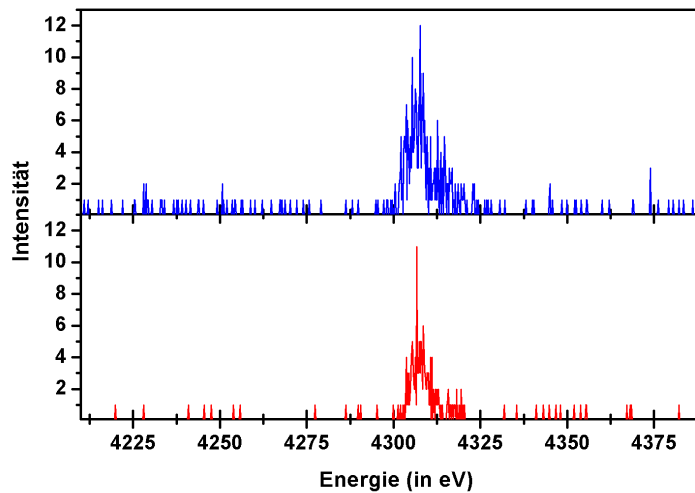


Abbildung 6.10: Kalibrierte Spektren von Li- und He-artigen Uran im Laborsystem.

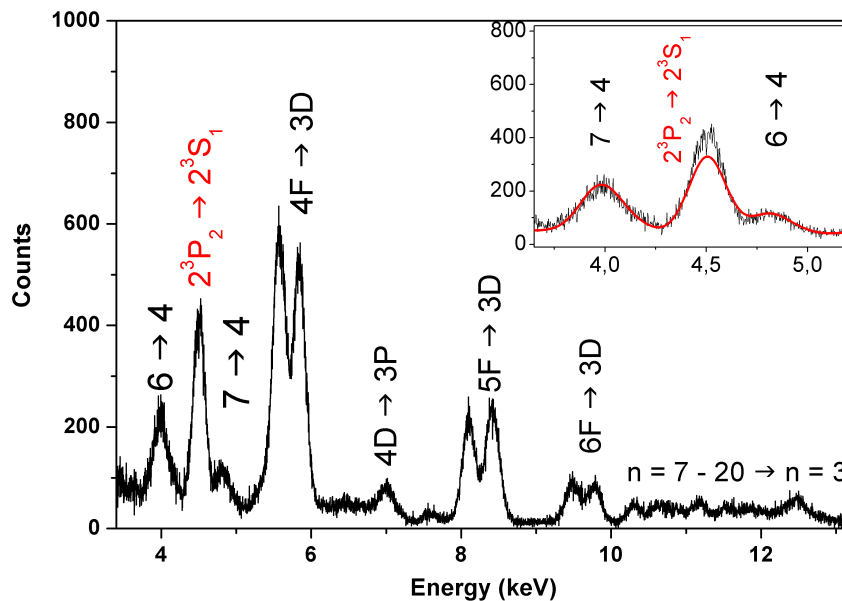


Abbildung 6.11: Spektrum von heliumähnlichen Uran im Laborsystem, aufgenommen mit einem Ge(i)-Detektor. Zu sehen sind die Übergangsserien für Linien mit Übergängen von  $n=4, 5, 6, 7$  zur Schale mit der Hauptquantenzahl  $n=3$  und  $n=4$ . Dazwischen, bei ca. 4.3 keV, ist der  $1s2p^3P_2 \rightarrow 1s2s^3S_1$  Übergang deutlich zu erkennen. Oben ist eine Simulation [88, 89, 92] der möglichen Übergänge an die Daten angepasst.

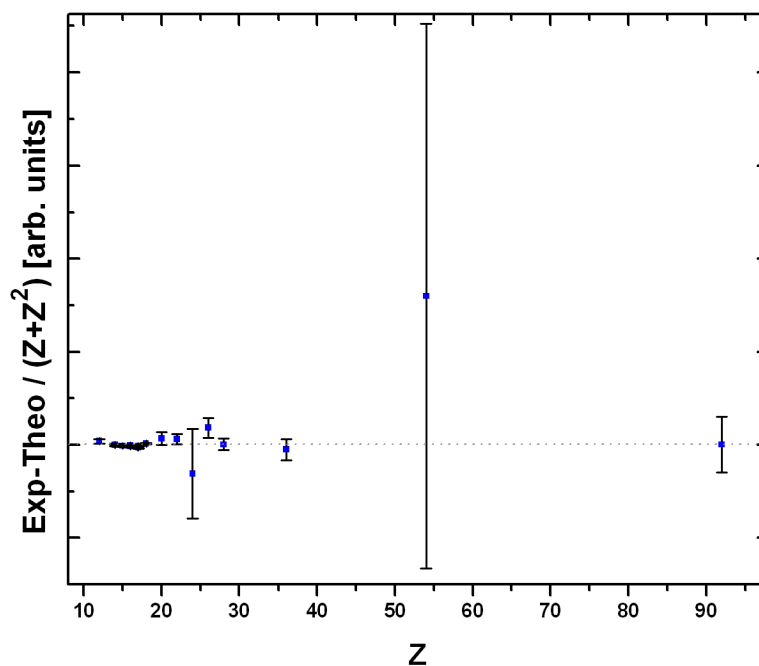


Abbildung 6.12: Differenz zwischen Experiment [84, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100, 101, 102, 103, 104, 105, 106, 107] und Theorie [66] normiert durch  $(Z + Z^2)$  (berücksichtigt die Elektron-Elektron-Wechselwirkung und die Feinstrukturaufspaltung) und gegen die Kernladungszahl  $Z$  aufgetragen.

messung mit den umgeladenen Ionen ermöglicht.

Des weiteren wurde die Asymmetrie als mögliche Folge des Aufbaus des Spektrometers diskutiert. Jedoch konnten durchgeführte Simulationen [42, 93] diese Art der Asymmetrie des Linienprofils nicht bestätigen.

Um weitere Aussagen treffen zu können, ist somit eine weitere längere Messung mit sehr viel besserer Statistik nötig.

# Kapitel 7

## Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit konnte mit Hilfe eines Bragg-Kristallspektrometers der Innerschalenübergang  $1s2p^3P_2 \rightarrow 1s2s^3S_1$  in He-artigen Uran erstmals direkt gemessen werden. Diese Messung ist von großem Interesse, da sie zur Überprüfung der Quantenelektrodynamik in Mehr-Elektronen-Systemen unter Einfluss sehr starker Coulombfelder und der Studie von relativistischen Effekten einen großen Beitrag leistet.

Die erfolgreiche Messung wurde zum Anlass genommen, das Kristallspektrometer separat im Labor aufzubauen und es mittels einer Testmessung der  $K\alpha_{1,2}$ -Emissionslinien von Kupfer ausführlich zu beschreiben und zu charakterisieren. Diese dient u.a. dazu, genaue Kenntnis über die Eigenschaften des Spektrometers zu erhalten und zukünftige Messungen besser planen zu können.

Es konnte eine erste Identifikation und direkte Messung des Innerschalenübergangs  $\Delta n = 0$   $2^3P_2 \rightarrow 2^3S_1$  in He-artigen Uran durchgeführt werden. Bis zu diesem Zeitpunkt existierten keine experimentellen Daten zu schweren He-artigen Ionen jenseits der Kernladungszahl  $Z=54$ . Die Messung fand am internen Gastarget des Experimentierspeicherrings (ESR) der Beschleunigeranlage der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) statt. Zur Messung der Übergangsenergie wurde an dem Gastarget ein Kristallspektrometer unter einem Beobachtungswinkel von  $90^\circ$  relativ zur Strahlachse aufgebaut. Die hochauflösenden Eigenschaften des Spektrometers ermöglichten es, die  $2^3P_2 \rightarrow 2^3S_1$ -Übergangsenergie in  $U^{90+}$  mit hoher Präzision zu bestimmen. Zur eindeutigen Identifikation wurde ein planarer Germaniumdetektor verwendet, welcher unter einem Beobachtungswinkel von  $35^\circ$  installiert wurde. Der Detektor ergänzte das Kristallspektrometer, welches eine hohe Energieauflösung besitzt, durch einen breiteren Energiebereich und diente zur eindeutigen Identifikation des Übergangs.

Das Resultat von  $4510.31 \pm 0.50$  eV stimmt sehr gut mit den theoretischen Vorhersagen überein. Darüberhinaus ist die Messung durch die geringe Ungenauigkeit im Vergleich zu den vergangenen Experimenten eine der genauesten für He-artigen Ionen.

Durch den Vergleich der Innerschalenübergangsenergie von Li- und He-artigem Uran kann der Beitrag der Zwei-Elektronen-QED zum ersten Mal experimentell überprüft werden. Die Differenz der Übergangsenergien beträgt  $50.94 \pm 0.45$  eV. Diese experimentelle Empfindlichkeit ermöglicht somit die Überprüfung des Zwei-Elektronen-QED-Beitrags, welcher bei den theoretischen Werten von Kozhedub *et al.* 1.18 eV beträgt.

Trotz der guten Übereinstimmung mit der Theorie gibt es bei der Messung noch ungeklärte Fragen. Zu diesen gehört die beobachtete Asymmetrie in der Linienform. Es ist nicht vollständig klar, ob diese in Abbildungsfehlern des Kristallspektrometers oder in einem energetisch nah liegenden Übergang ihren Ursprung hat. Dieser könnte aber

nur durch Mehrfach-Einfang erzeugt worden sein. Die Wahrscheinlichkeit dafür ist sehr niedrig. Eine Möglichkeit, dies bei einer Folgemessung zu überprüfen, wäre ein Detektor mit Zeitauflösung. Er würde eine Koinzidenzmessung mit umgeladenen Ionen ermöglichen.

Für den Einsatz eines Bragg-Kristallspektrometers ist eine genaue Kenntnis der Eigenschaften und des Abbildungsverhaltens unabdingbar. Zur Studie dieser wurde das Kristallspektrometer für eine Testmessung zur Charakterisierung im Labor aufgebaut. Hier wurde mit Hilfe einer Röntgenröhre das  $K\alpha_{1,2}$ -Emissionsspektrum von Kupfer aufgenommen und analysiert. Das  $K\alpha_{1,2}$ -Emissionsspektrum von Zink, welches während der Messung des Innerschalenübergang als zweite Referenz und zur Überprüfung der Stabilität diente, wurde zusätzlich analysiert.

Innerhalb dieser Arbeit wurden die Abbildungseigenschaften und Charakteristika, welche bei Bragg-Kristallspektrometern in der Johann-Geometrie relevant sind, beschrieben und dargestellt. Es wurden die notwendigen Messungen, welche für den genauen geometrischen Aufbau notwendig sind, vorgenommen. Im Anschluss konnte das  $K\alpha_{1,2}$ -Emissionsspektrum erfolgreich aufgenommen werden und mit Hilfe des MINUIT-Programmpaketes analysiert werden. Dabei wurde neben der  $K\alpha_1$ - und  $K\alpha_2$ -Linie ein möglicher Satellitenübergang auf der hochenergetischen Seite des Spektrums bei der Fitting-Routine berücksichtigt. Die dafür gefundene Übergangsenergie stimmt gut mit der eines Satellitenübergangs überein, welcher bereits von Deutsch *et al.* untersucht wurde. Bei dem Zinkspektrum konnte auf der hochenergetischen Seite ebenfalls ein möglicher Satellitenübergang identifiziert werden. Da im Fall von Zink kaum experimentelle Daten existieren, konnte der ermittelte Energiewert nicht mit weiteren Literaturwerten verglichen werden.

Zum besseren Verständnis des Spektrometers wurden u.a. Simulationen mit MacRay durchgeführt, welche den geometrischen Aufbau als Eingabeparameter beinhalteten. Des Weiteren konnte mit MacRay der Unterschied zwischen stationären und bewegten Röntgenquellen untersucht werden. Die bei sich schnell bewegenden Röntgenquellen entstehenden Effekte können dabei durch Korrekturen in der Analyse berücksichtigt werden.

Nach dem erfolgreichen Einsatz des Bragg-Kristallspektrometers im Labor, wie auch während des Experiments, soll dieses auch zukünftig seine Anwendung finden.

Es wird u.a. eine Wiederholung der  $\Delta n = 0$ -Messung diskutiert. Bei dieser könnte durch eine gesteigerte Zählrate der Ursprung der Asymmetrie in der gemessenen Linienform untersucht werden und darüberhinaus besteht die Möglichkeit durch eine gesteigerte Statistik eine noch höhere Genauigkeit zu erhalten. Diese Messung in Kombination mit einem *Mikrokalorimeter*, dessen Auflösung im Bereich des Kristallspektrometers liegt, wäre eine interessante spektroskopische Methode.

Eine andere interessante Messung wäre die Untersuchung des gleichen Übergangs in He-ähnlichem Dysprosium ( $Z=66$ ). Da zu He-ähnlichen Ionen mit einer Kernladungszahl  $Z$  größer als 54 und kleiner 92 keine experimentellen Daten existieren, würde sich eine solche Messung als besonders wichtig herausstellen.

Zur hochpräzisen Vermessung der Lamb-Verschiebung in H-ähnlichen schweren Ionen soll voraussichtlich in 2010 das FOCAL-Experiment stattfinden. Mit Hilfe eines Laue-Kristallspektrometers, welches mit zwei 2D-Germaniumdetektoren ausgestattet ist, soll

---

eine Genauigkeit von 1 eV erreicht werden. Die Konstruktion des Spektrometers stellt eine große Herausforderung dar. Erfolgreiche Testmessungen mit dem Spektrometer wurden bereits durchgeführt. Nun gilt es, die systematischen Fehlerquellen durch weitere Entwicklungen im Bereich der Ausleseelektronik und der Spektrometerbauteile zu reduzieren.

Alle oben genannten Experimente liefern wichtige experimentelle Daten für das Verständnis der Quantenelektrodynamik und der relativistischen Effekte in starken Coulombfeldern bei schweren Ionen. In He-ähnlichen Systemen kann zudem der Einfluss der Elektron-Elektron-Wechselwirkung studiert werden. Für die Entwicklung und Überprüfung des theoretischen Vorgehens sind diese Resultate essentiell und die Theorie ist auf diese angewiesen.





# Kapitel 8

## Anhang

**Herleitung** Das Bragg-Gesetz

$$E = C \frac{1}{\sin \Theta}$$

mit  $C = \frac{n \cdot hc}{2d}$  lautet in abgeleiteter Form:

$$\frac{\Delta E}{\Delta \Theta} = -C \left( \frac{\cos \Theta}{\sin \Theta} \right) \frac{1}{\sin \Theta} = -C \cot \Theta \frac{1}{\sin \Theta}$$

Setzt man das Bragg-Gesetz hier ein, erhält man eine Dispersionsformel, welche für kleine Werte von  $\Delta \Theta$  gültig ist:

$$\Delta E = -E \cdot \cot \Theta \Delta \Theta$$

Bei einer geeigneten Referenzenergie  $E_{Ref}$  kann man die unbekannte Energie  $E_{unbekannt}$  über folgende Relation erhalten:

$$E_{unbekannt} = E_{Ref} - \Delta E_{Ref} = E_{Ref} + E_{Ref} \cot \Theta \Delta \Theta = E_{Ref} + E_{Ref} \frac{\Delta \Theta}{\tan \Theta}$$

Bei kleinen Winkel  $\Delta \Theta$  kann für  $\tan \Delta \Theta = \Delta x / D$  die Näherung  $\Delta \Theta \approx \Delta x / D$  verwendet werden:

$$E_{unbekannt} \approx E_{Ref} + E_{Ref} \frac{\Delta x}{D \tan \Theta}$$

Da die Energie im Laborsystem dopplerverschoben ist, muss die obige Formel gemäß  $E_{proj} = E_{lab} \gamma (1 - \beta \cos \Theta_{lab})$  transformiert werden: Bei der Verwendung des Übergangs in Li-artigen Uran werden für die Referenzwerte  $(E_{Ref}, \gamma_{Ref}, \beta_{Ref})$  die jeweiligen Lithiumwerte eingesetzt, der Beobachtungswinkel  $\Theta_{lab}$  ist der gleiche wie bei der Messung der unbekanntes Energie  $E_{He}$ .

$$E_{He} \approx \frac{\gamma_{He}(1 - \beta_{He} \cos \Theta_{lab})}{\gamma_{Li}(1 - \beta_{Li} \cos \Theta_{lab})} \left( 1 + \frac{\Delta x}{D \tan \Theta_B} \right) \cdot E_{Li}$$

Bei der Verwendung einer Zinkemissionslinie als Referenz entfällt die Dopplerkorrektur (stationäre Quelle). Jedoch muss die Reflexion in zweiter Ordnung berücksichtigt werden, also muss zur Referenzenergie ein Faktor  $1/2$  hinzugefügt werden:

$$E_{He} = \gamma_{He}(1 - \beta_{He} \cos \Theta_{lab}) \left( 1 + \frac{\Delta x}{D \tan \Theta_B} \right) \cdot \frac{E_{Zn}}{2}$$

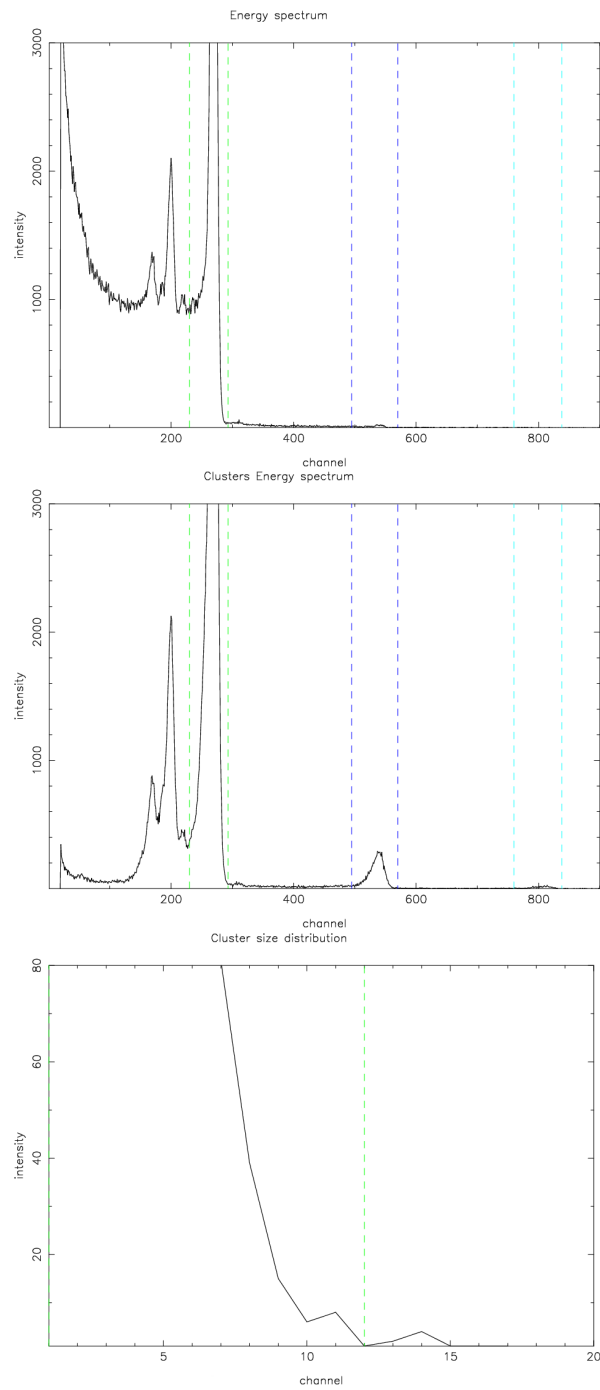


Abbildung .1: **Abb. oben und Mitte: Energiespektrum aufgenommen mit der CCD-Kamera mit (Abb. unten) und ohne (Abb. oben) Clusteranalyse**  
**Abb. unten: Graphische Darstellung der Verteilung der Clustergröße. Die Intensität ist gegen die Pixelanzahl (channel) aufgetragen.**

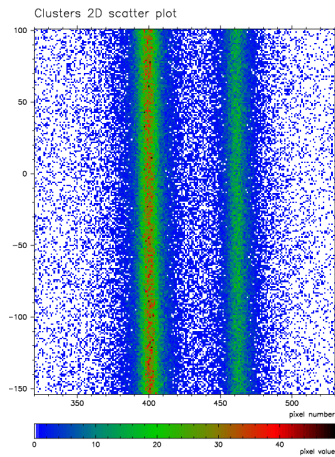


Abbildung .2: Zweidimensionales Ortsbild der Reflexion der  $K\alpha$ -Linien auf der CCD-Kamera.

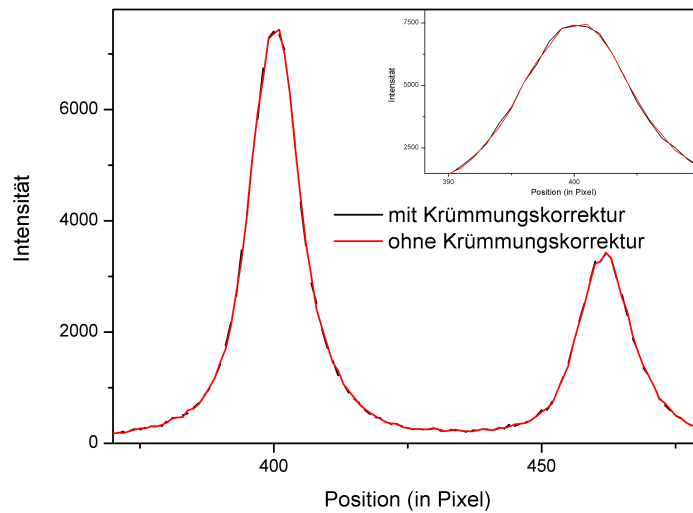


Abbildung .3: Vergleich der Projektion der Daten auf die x-Achse mit und ohne Krümmungskorrektur.

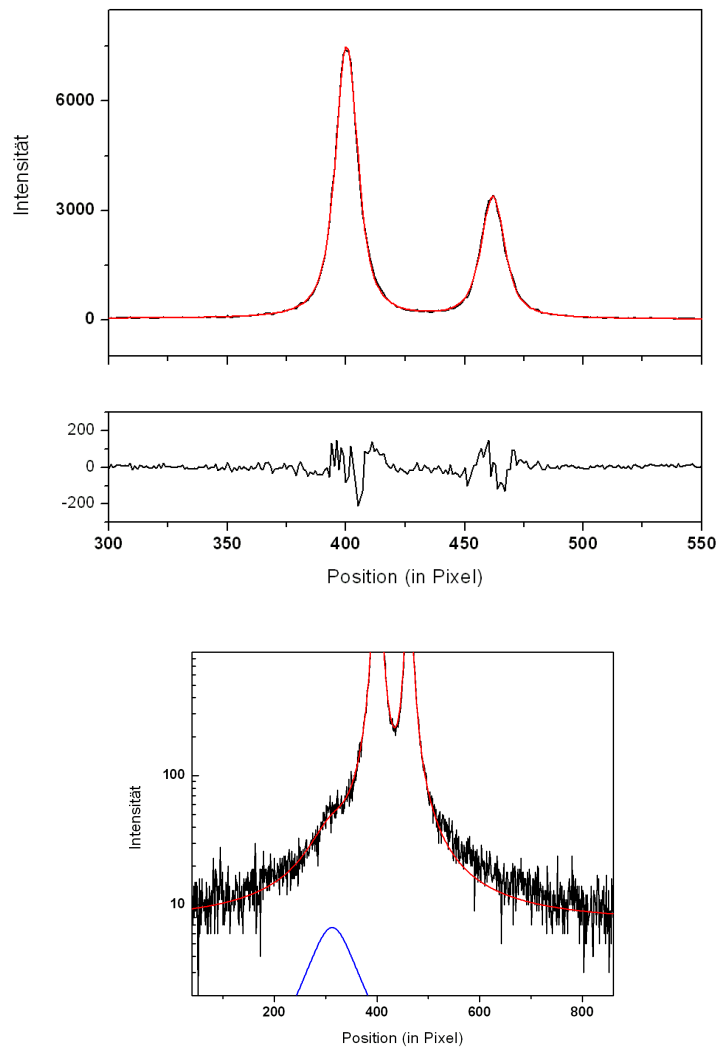


Abbildung .4: **Abb. oben:** Fit der experimentellen Daten (schwarze Striche) mit insgesamt drei Voigtverteilungen und linearem Untergrund (rote Linie); **Unten:** Abweichung der theoretischen Verteilung von den experimentellen Daten (Residuum)

**Abb. unten:** Neben dem gesamten Fit (rote Linie, bestehend aus drei Voigtverteilungen und linearem Untergrund) der experimentellen Daten (schwarze Striche) ist die Verteilung für den Fit der Satellitenlinie eingezeichnet (blaue Linie).

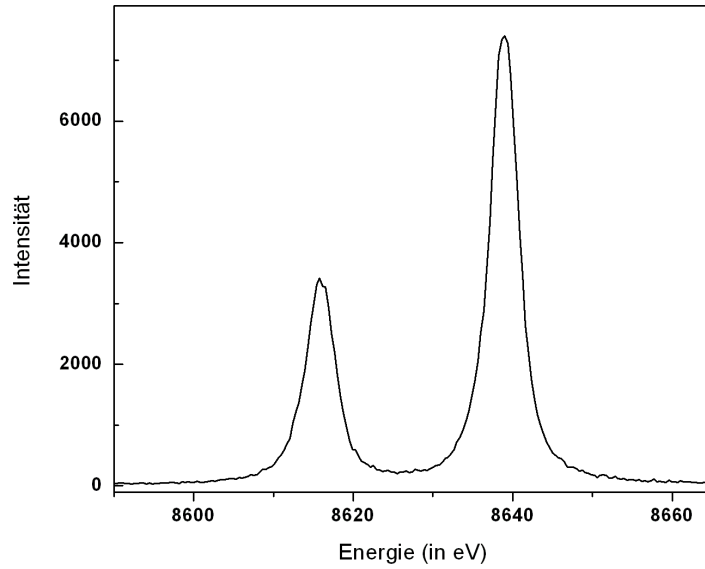


Abbildung .5: **Kalibriertes Zinkspektrum**

Übergang	Position [Pixel]	Energie [eV]	FWHM [eV]	1/ $K\alpha_1$ -Ratio
$K\alpha_1$	$400.253 \pm 0.021$	$8638.906 \pm 0.007$	$2.886 \pm 0.021$	1
$K\alpha_2$	$461.920 \pm 0.032$	$8615.823 \pm 0.012$	$3.144 \pm 0.016$	0.473
Satellit	$312.721 \pm 1.180$	$8671.671 \pm 1.180$	$33.833 \pm 2.579$	0.025

Tabelle .1: **Ergebnisse der Fit-Analyse mit MINUIT. Neben der Position ist das FWHM und das Verhältnis der integrierten Intensität zu der integrierten Intensität der  $K\alpha_1$ -Linie angegeben.**



# Literaturverzeichnis

- [1] H. Haken und H.C. Wolf, *Atom- und Quantenphysik*, Berlin : Springer
- [2] W. Finkelburg, *Einführung in die Atomphysik*, Berlin : Springer
- [3] <http://www.esrf.eu/computing/scientific/xop2.1/>
- [4] NIST Physical Reference Data, X-Ray and Gamma-Ray Data, Fundamental Physical Constants
- [5] W. Demtröder, *Atoms, Molecules and Photons*, Berlin : Springer
- [6] D.H. Bilderback, P. Elleaume and E. Weckert, *Review of third and next generation synchrotron light sources*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **38**, 773-797 (2005)
- [7] B. Kirk, *Synchrotron Light Sources*, Beam Line - A Periodical of Particle Physics **32**, No.1 (2002)
- [8] R. Donaldson and B. Kirk, *SPECIAL ISSUE-100 Years of X-Rays*, Beam Line - A Periodical of Particle Physics **25**, No.12 (1995)
- [9] L.v. Håmos, *Naturwissenschaften* **20**, 705, (1932)
- [10] B.E. Warren, *X-Ray Diffraction*, First edition, Addison-Westley Publishing Company, London (1969)
- [11] H.H. Johann: *ZS f. Phys.* **69**, 185 (1931)
- [12] T. Johannsson, *Über ein neuartiges, genau fokussierendes Röntgenspektrometer*, *ZS der Physik* **82**, 507 (1933)
- [13] W. Kleber, *Einführung in die Kristallographie*, VEB Verlag Technik Berlin Toubner Verlag
- [14] Lothar Spieß, *Moderene Röntgenbeugung, Röntgendiffraktometrie für Materialwissenschaftler, Physiker und Chemiker*, Toubner Verlag
- [15] I. Fankuchen, *A Condensing Monochromator for X-Rays*, *Nature* **30**, 193-194 (1937)
- [16] I. Uschmann, E. Förster, K. Gäbel and G. Hölzer, *X-ray Reflection Properties of Elastically Bent Perfect Crystals in Bragg Geometry*, *J. Appl. Cryst.* **26**, 405-412 (1993)
- [17] R.W. James, *The Principles of the Diffraction of the X-Rays*, London, G.Bell and Sons (1967)

- [18] H.F. Beyer and Dieter Liesen, *Ray Tracing of Curved-Crystal X-Ray Optics for Spectroscopy on Fast Ions Beams*, Nucl. Instr. Meth. **A 272**, 895-905 (1988)
- [19] J. Eggs und K. Ulmer, *Röntgenspektroskopie mit Sphärisch Gekrümmten Kristallen*, Zf. angew. Phys. **20**, 118-128 (1965)
- [20] H.H. Johann, *Die Erzeugung lichtstarker Röntgenspektren mit Hilfe von Konkavkristallen*, Zeitschrift für Physik **69**, 185 (1931)
- [21] C.T. Chantler and R.D. Deslattes, *Systematic Corrections in Bragg X-Ray Diffraction of Flat and Curved Crystals*, Review of Scientific Instruments **66**, 11 (1995)
- [22] M. Deutsch, E. Förster, G. Hölzer, J. Härtwig, K. Hämäläinen, C.-C. Kao, S. Huotari and R. Diamant, *X-Spectrometry of Copper: New Results on an Old Subject*, J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol. **109**, 75-98 (2004)
- [23] P.J. Mohr and B.N. Taylor, *CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2002*, Rev. of Mod. Phys. **77**, No.1 (2005)
- [24] J.A. Bearden, *Selection of  $W K\alpha_1$  as X-Ray Wavelength Standard*, Phys. Rev. **137**, B455-B461 (1965)
- [25] N. Maskil and M. Deutsch, *Structure and wavelength of  $Cu K\alpha_2$  x-ray emission line*, Phys. Rev. A **37**, 2947 (1988)
- [26] J.A. Bearden, *The Wave-Lengths of Silver, Molybdenum, Copper, Iron and Chromium  $K\alpha_1$  Lines*, Phys. Rev. **43**, 94 (1933)
- [27] H. Berger, *Study of the  $K\alpha$  Emission Spectrum of Copper*, X-RAY SPECTROMETRY **15**, 241-243 (1986)
- [28] J. Härtwig, *Remeasurement of the Profile of the Characteristic  $Cu K\alpha$  Emission Line High Precision and Accuracy*, J. Appl. Cryst. **26**, 539-548 (1993)
- [29] J. Hölzer, M. Fritsch, M. Deutsch, J. Härtwig and E. Förster,  *$K\alpha_{1,2}$  and  $K\beta_{1,2}$  x-ray emission lines of the 3d transition metals*, Phys. Rev. A **56**, 4554-4568 (1997)
- [30] R.D. Deslattes, E.G. Kessler, W.C. Sauder and A. Henins, *Remeasurement of the  $\gamma$ -Ray Reference Lines*, Ann. Phys. **129**, 378-434 (1980)
- [31] <http://lcgapp.cern.ch/project/cls/work-packages/mathlibs/minuit/index.html>
- [32] P.R. Bevington and D.K. Robinson, *Data Reduction and Error Analysis for Physical Sciences*, McGraw-Hill College
- [33] H.F. Beyer and V.P. Shevelko, *Atomic Physics with Heavy Ions*, Springer Series on Atoms and Plasmas, Berlin
- [34] M. Sánchez del Rio, C. Ferrero and V. Mocella, *Computer simulation of bent perfect crystal diffraction profiles*, European Synchrotron Radiation Facility BP 220, 38043 Grenoble-Cedex France



- 
- [35] Andor Technology, *Scientific Digital Camera Solutions, 2006 Catalog*, Belfast, Northern Ireland
- [36] <http://www.dalsa.com>
- [37] D. Göhring, *Digitalkameratechnologien; Eine vergleichende Betrachtung; CCD kontra CMOS*, Hausarbeit Technische Informatik, HU Berlin (2002)
- [38] K. Krause, *Entwicklung und Erprobung eines neuartigen Zweikameradetektors zur Lebensdauermessung der UV-Laser induzierten nativen Fluoreszenz von biologischen Substanzen in der Kapillarelektrophorese*, Diplomarbeit, Fakultät für Physik Universität Bielefeld (2002)
- [39] <https://www.edwardsvacuum.com/Homepage.aspx>
- [40] <http://www.ebaratech.com>
- [41] M. Trassinelli, *Quantum Electrodynamics Tests and X-rays Standards using Pionic Atoms and Highly Charged Ions*, Dissertation, Laboratoire Kastler-Brossel; Université Pierre et Marie Curie, Paris
- [42] M. Trassinelli, private Kommunikation
- [43] M. Hennebach, *Precision Measurement of Ground State Transition in Pionic Hydrogen*, Dissertation, Universität zu Köln, Köln
- [44] M. Deutsch, O. Gang, K.Hämäläinen and C.C. Kao, *Onset and Near Threshold Evolution of the Cu  $K\alpha$  X-Ray Satellites*, Phys. Rev. Lett. **76**,14, 2424-2427 (1996)
- [45] M. Fritsch, C.C. Kao, K.Hämäläinen, O. Gang, E. Förster and M. Deutsch , *Evolution of the Cu  $K\alpha_{3,4}$  from threshold to saturation*, Phys. Rev. A **57**,3, 1686-1697 (1998)
- [46] Matthias Bollhöfer und Volker Mehrmann, *Numerische Mathematik*, Vieweg Verlag
- [47] M.O. Krause and J.H. Oliver, J. Phys. Chem. Ref. Data **8**, 329 (1979)
- [48] S.I. Salem and P.L. Lee, Atomic Data and Nuclear Data Tables **18**, 233 (1976)
- [49] Silvan Schweber, *QED and the men who made it*, Princeton University Press, 1. edition (1994)
- [50] A. Bohr and V.F. Weisskopf, *The influence of the Nuclear Structure on the Hyperfine Structure of Heavy Elements*, Phys Rev. A **77**, 1, 94 (1950)
- [51] W. Greiner und J. Reinhardt, *Theoretische Physik Band 7A, Feldquantisierung*, Verlag Harri Deutsch
- [52] E. Rehbhan, *Theoretische Physik II, Quantenmechanik, Quantenfeldtheorie, Elementarteilchentheorie, Thermodynamik und Statistik*, Spektrum Akademischer Verlag
- [53] W.R. Johnson and G. Soff, At. Data Nuc. Data Tab. **33**, 405 (1985)

- [54] A. Gumberidze, Th. Stöhlker, D. Banaś, K. Beckert, P. Beller, H.F. Beyer, F. Bosch, S. Hagmann, C. Kozhuharov, D. Liesen, F. Nolden, X. Ma, P.H. Mokler, M. Steck, D. Sierpowski and S. Tashenov, *Quantum Electrodynamics in Strong Electric Fields: The Ground-State Lamb Shift in Hydrogenlike Uranium* Phys. Rev. Lett. **94**, 223001 (2005)
- [55] M. Fischer, N. Kolachevsky, M. Zimmermann, R. Holzwarth, Th. Udem, T.W. Hänsch, M. Abgrall, J. Grünert, I. Maksimovic, S. Bize, H. Marion, F. Pereira Dos Santos, P. Lemonde, G. Santarelli, P. Laurent, A. Clairon, C. Salomon, M. Haas, U.D. Jentschura and C.H. Keitel, *New Limits on the Drift of Fundamental Constants from Laboratory Measurements* Phys. Rev. Lett. **92**, 230802 (2004)
- [56] T.W. Hänsch, Rev. Modern Phys. **78**, 1297 (2006)
- [57] D.R. Plante, W.R. Johnson, and J. Sapirstein, *Relativistic all-order many-body calculations of the  $n=1$  and  $n=2$  states of heliumlike ions*, Phys. Rev. A **49**, 3519 (1994)
- [58] G.W.F. Drake, Can. J. Phys. **66**, 586 (1988)
- [59] P. Indelicato, Phys. Rev. A **51**, 1132-1145 (1995)
- [60] I. Lindgren, H. Persson, S. Salomonson and L. Labzowsky, Phys. Rev. A **51**, 1167 (1995)
- [61] H. Persson, S. Salomonson, P. Sunnergren and I. Lindgren, Phys. Rev. Lett. **76**, 204 (1996)
- [62] A.N. Artemyev, V.M. Shabaev and V. Yerokhin, Phys. Rev. A **56**, 3529 (1997)
- [63] V.A. Yerokhin, A.N. Artemyev and V.M. Shabaev, Phys. Lett. A **234**, 361 (1997)
- [64] R.E. Marrs, S.R. Elliot and Th. Stöhlker, Phys. Rev. A **52**, 3577 (1995)
- [65] A. Gumberidze, Th. Stöhlker, D. Banaś, K. Beckert, P. Beller, H.F. Beyer, F. Bosch, X. Cai, S. Hagmann, C. Kozhuharov, D. Liesen, F. Nolden, X. Ma, P.H. Mokler, A. Oršić Muthig, M. Steck, D. Sierpowski, S. Tashenov, A. Warczak and Y. Zou, *Electron-Electron Interaction in Strong Electromagnetic Fields: The Two-Electron Contribution to the Ground-State Energy in He-like Uranium*, Phys. Rev. Lett. **92**, 203004 (2004)
- [66] A.N. Artemyev, V.M. Shabaev, V.A. Yerokhin, G. Plunien and G. Soff, *QED calculation of the  $n=1$  and  $n=2$  energy levels in He-like ions*, Phys. Rev. A **71**, 062104 (2005)
- [67] M.H. Chen and K.T. Cheng, *Relativistic configuration-interaction calculations of  $n=2$  triplet states of heliumlike ions*, Phys. Rev. A **47**, 3692 (1993)
- [68] P. Beiersdorfer, D. Knapp, R.E. Marrs, S.R. Elliott and M.H. Chen, *Structure and Lamb shift of  $2s_{1/2} - 2p_{3/2}$  levels in lithiumlike  $U^{89+}$  through neonlike  $U^{82+}$* , Phys. Rev. Lett. **71**, 3939 (1993)

- [69] P. Beiersdorfer, Nucl. Instrum. Meth. B **99**, 114 (1995)
- [70] H.F. Beyer and V.P. Shevelko, *Introduction to the Physics of Highly Charged Ion*, Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia, 1.edition (2003)
- [71] W.R. Johnson, D.R. Plante and J. Sapiierstein, Adv. At. Mol. Phys. **35**, 255 (1995)
- [72] S. Yaramishev, W. Barth, L. Dahl, L. Groening and S. Richter, *Investigation of the beam matching to the GSI-ALVAREZ DTL under space charge conditions*, LINAC (2004)
- [73] W. Bart, *Commissioning of the 1.4 MeV/u High-Current Heavy-Ion Linac at GSI*, LINAC (2000)
- [74] B. Franzke, *The heavy ion storage and cooler ring project ESR at GSI*, Nucl. Instr. Meth. B **24-25**, 18-25 (1987)
- [75] M. Steck, P. Beller, K. Beckert, B. Franzke and F. Nolden, Nucl. Instr. Meth. A **532**, 357 (2004)
- [76] K. Beckert, S. Cocher, B. Franzke and U. Schaaf, *The ESR Schottky-Diagnosis-System*, 777-779, EPAC 90 (1990)
- [77] U. Schaaf, *Schottky-Diagnose und BTF-Messungen an gekühlten Strahlen im Schwerionenspeicherring ESR*, Dissertation, Universität Frankfurt (1991)
- [78] H. Reich, W. Bourgeois, B. Franzke, A. Kritzer and V. Verentsov, *The ESR internal target*, Nuclear Physics A **626**, 417c (1997)
- [79] A. Krämer, Dissertation, Universität Frankfurt (2000)
- [80] H.F. Beyer, H.-J. Kluge and V.P. Shevelko, *X-Ray Radiation of Highly Charged Ions*, Springer Series on Atoms and Plasmas, Berlin
- [81] H.F. Beyer, *Characterization of transmission-type curved-crystal X-ray optics for fast ion-beam spectroscopy*, Nucl. Instr. Meth. A **400**, 137-148 (1997)
- [82] H.F. Beyer, *FOCAL: X-ray optics for accurate spectroscopy*, Spectrochimica Acta Part B **59**, 1535-1542 (2004)
- [83] M. Trassinelli D. Banas, H.F. Beyer, P. Jagodzinski, A. Kumar, M. Pajek and Th. Stöhlker, *High-accuracy crystal spectroscopy of the  $n = 2$  energy level of helium-like uranium*, Can. J. Phys. 85(5): 441-451 (2007)
- [84] S. Martin, J.P. Buchet, M.C. Buchet-Poulizac, A. Denis, J. Désesquelles, M. Druetta, J.P. Grandin, D. Hennecart, X. Husson and D. Lecler, *Measurements of 2s-2p Transition Wavelengths in Helium- and Lithium-Like Xenon*, EPL (Europhysics Letters) **10**, 645 (1989)
- [85] S. Toleikis, B. Manil, G. Bednarz, E. Berdermann, H.F. Beyer, F. Bosch, A. Bräuning-Demian, A. Gumberidze, P. Indelicato, C. Kozhuharov, D. Liesen, R. Marrus, P.H. Mokler, Z. Stachura, T. Stöhlker and A. Warczak, *Lifetime measurement of the metastable  $2^3P_0$  state in He-like uranium*, Nucl. Instr. Meth. B **235**, 197 (2005)

- [86] P. Beiersdorfer, S.R. Elliott, A. Osterheld, Th. Stöhlker, J. Autrey, G.V. Brown, A.J. Smith and K. Widmann, *Search for  $1s2s3S_11s2p^3P_2$  decay in  $U^{90+}$* , Phys. Rev. A **53**, 4000 (1996)
- [87] J. Rządkiwicz, Th. Stöhlker, D. Banaś, H.F. Beyer, F. Bosch, C. Brandau C. Z. Dong, S. Fritzsche, A. Gojska, A. Gumberidze, S. Hagmann, D.C. Ionescu, C. Kozhuharov, T. Nandi, R. Reuschl, D. Sierpowski, U. Spillmann, A. Surzhykov, S. Tashenov, M. Trassinelli and S. Trotsenko, *Selective population of the  $[1s2s]^1S_0$  and  $[1s2s]^3S_1$  states of He-like uranium* Phys. Rev. A **74**, 012511 (2006)
- [88] R. Reuschl, private Kommunikation
- [89] R. Reuschl, Dissertation, Universität Frankfurt (2008)
- [90] P. Indelicato and J. Desclaux, *MCDFGME, a MultiConfiguration Dirac Fock and General Matrix Elements program* (release 2005), <http://dirac.spectro.jussieu.fr/mcdf>
- [91] Y.S. Kozhedub and V.M. Schabaev, private communication (2008)
- [92] Th. Stöhlker, private Kommunikation
- [93] H.F. Beyer, private Kommunikation
- [94] H.A. Klein, F. Moscatelli, E.G. Myers, E.H. Pinnington, J.D. Silver and E. Trabert, *Beam-foil measurements of the  $1s2s^3S_1 - 1s2p^3P_{2,1,0}$  transitions in helium-like  $F^{7+}$ ,  $Mg^{10+}$  and  $Al^{11+}$* , J. Phys. B. **18**, 1483 (1985)
- [95] D.J.H. Howie, W.A. Hallett, E.G. Myers, D.D. Dietrich and J.D. Silver, *Measurement of  $1s2s^3S_1 - 1s2p^3P_{2,0}$  wavelengths in heliumlike silicon*, Phys. Rev. A. **49**, 4390 (1994)
- [96] D.J.H. Howie and J.D. Silver, *Measurement of  $1s2s^3S_1 - 1s2p^3P_{2,0}$  wavelengths in heliumlike phosphorus*, Phys. Rev. A. **52**, 1761 (1995)
- [97] D.J.H. Howie, J.D. Silver and E.G. Myers, *Measurement of  $1s2s^3S_1 - 1s2p^3P_{2,0}$  wavelengths in helium-like sulphur*, J. Phys. B, 927 (1996)
- [98] H.G. Berry, R. DeSerio and A.E. Livingston, *Lamb Shift and Fine Structure of  $n=2$  in  $^{35}Cl$  XVI*, Phys. Rev. Lett. **41**, 1652 (1978)
- [99] H.G. Berry, R. DeSerio and A.E. Livingston, *Wavelengths and fine structure of  $2s-2p$  transitions in two- and three-electron ions*, Phys. Rev. A. **22**, 998 (1980)
- [100] R. DeSerio, H.G. Berry, R.L. Brooks, J.E. Hardis, A.E. Livingston and S.J. Hinterlong, *The  $2s-2p$  transitions in helium-like ions*, Phys. Rev. A. **24**, 1872-1888 (1981)
- [101] K.W. Kukla, A.E. Livingston, J. Suleiman, H.G. Berry, R.W. Dunford, D.S. Gemmell, E.P. Kanter, S. Cheng and L.J. Curtis, *Fine-structure energies for the  $1s2s^3S - 1s2p^3P$  transition in heliumlike  $Ar^{16+}$* , Phys. Rev. A. **51**, 1905-1917 (1995)

- 
- [102] S.J. Hinterlong and A.E. Livingston,  $2s^3S_1 - 2p^3P_2$  fine-structure transition in two-electron  $Ca^{18+}$ , Phys. Rev. A. **33**, 4378 (1986)
- [103] E.J. Galvez, A.E. Livingston, A.J. Mazure, H.G. Berry, L. Engström, J.E. Hardis, L.P. Somerville and D. Zei, *Measurement of the  $2^3S_1 - 2^3P_2$  transition wavelength in heliumlike  $Ti^{20+}$* , Phys. Rev. A. **33**, 3667 (1986)
- [104] J.P. Grandin, M. Huet, X. Husson, D. Lecler, D. Touvet, J.P. Buchet, M.C. Buchet-Poulizac, A. Denis, J. Desesquelles and M. Druetta, *Wavelengths and lifetime measurements in He-like Cr XXIII and Li-like Cr XXII* Journal de Physique. **45**, 1423-1428 (1984)
- [105] J.P. Buchet, M.C. Buchet-Poulizac, A. Denis, J. Désesquelles and M.Druetta, *Wavelength measurement of the  $1s2s^3S_1 - 1s2p^3P_2$  transition in heliumlike  $Fe^{24+}$*  Phys. Rev. A. **23**, 3354 (1981)
- [106] A.S. Zacarias, A.E. Livingston, Y.N. Lu and R.F. Ward , H.G. Berry and R.W. Dunford, *Measurements of 2s-2p Transition Energies in Helium-Like and Lithium-Like Nickel*, Nucl. Instrum. Meth. B. **31**, 41-42 (1988)
- [107] S. Martin, A. Denis, M.C. Buchet-Poulizac, J.P. Buchet and J. Désesquelles, *2s-2p transitions in heliumlike and lithiumlike krypton*, Phys. Rev. A. **42**, 6570 (1990)



# Danksagungen

Zum Schluss möchte ich mich bei den Menschen bedanken, welche mir diese Arbeit ermöglicht haben:

Zunächst will ich mich bei meinem Lehrer Herrn Schröder bedanken. Ohne seinen Einfluss wäre ich nie auf die Idee gekommen, ein Physikstudium zu beginnen.

Ein ganz besonderer Dank gilt Thomas Stöhlker. Er konnte mich durch seine Vorlesung und Diskussionen für die Atomphysik begeistern und tut dies auch noch weiterhin.

Ich bedanke mich ganz herzlich bei Martino Trassinelli, welcher mich als mein ehemaliger Betreuer in die Grundlagen der Kristallspektroskopie eingewiesen hat. Trotz der räumlichen Distanz war er stets bemüht, mich zu unterstützen. Grazie!

Bei Ajay Kumar möchte ich mich ganz herzlich für den Arbeitseinsatz und die Hilfe im Labor bedanken. Ohne seine Unterstützung wäre vieles beschwerlicher gewesen.

Ein großes Dankeschön gilt Heinrich Beyer. Er hat sich für jede meiner Fragen Zeit genommen und war stets bemüht, mir die Kristallspektroskopie verständlich zu machen.

Bedanken möchte ich mich auch bei Regina Reuschl, welche mir bei den theoretischen Hintergründen und auch in anderen praktischen Dingen helfen konnte.

Siegbert Hagmann war mir eine große Hilfe bei dem Verfassen meiner Arbeit, dafür möchte ich mich herzlich bedanken.

Ein Dankeschön gilt auch Uwe Spillmann. Er hat mich während meiner Arbeit oft genug unterhalten und mir die Arbeitszeit kurzweiliger gestaltet.

Natürlich danke ich der ganzen Arbeitsgruppe und den Mitgliedern der Atomphysikabteilung. Jeder Einzelne hat mir mehr als nur einmal geholfen und hat zu einer interessanten Arbeit und auch zu nettem Arbeitsklima beigetragen.

Nicht vergessen möchte ich Prof. Reinhard Dörner, welcher mich schon früher während des Studiums beraten hatte und mir bei der Organisation meiner Diplomarbeit an der GSI geholfen hat.

Ganz besonders möchte ich mich bei Günter für die moralische und seelische Unterstützung bedanken. Er hat mir über jeden Tiefpunkt hinweggeholfen und mich immer wieder neu motiviert.

Den größten Dank schulde ich meinen Eltern. Sie haben wahre Wunder vollbracht, indem sie mich immer selbstlos unterstützt haben und es immer noch tun. Ohne sie wäre diese ganze Arbeit nicht möglich gewesen.

Sollte ich einige Personen an dieser Stelle vergessen habe, so möge man es mir nachsehen. Die Liste der oben genannten Personen ist bestimmt nicht vollständig und ich bedanke mich natürlich auch bei den nicht aufgeführten Personen, die mir während meines Studiums eine Hilfe gewesen sind.



Erklärung:

Ich versichere hiermit, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig verfasst, keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel verwendet und sämtliche Stellen, die benutzten Werken im Wortlaut oder dem Sinne nach entnommen sind, mit Quellen- bzw. Herkunftsangaben kenntlich gemacht habe.

Frankfurt am Main, den .....

.....  
Unterschrift