

# Fakultät für Physik und Astronomie

Ruprecht-Karls-Universität  
Heidelberg

Diplomarbeit  
im Studiengang Physik  
vorgelegt von  
Zhong Yin  
aus Yangzhou  
2011



# Aufbau eines Kristallspektrometers zur Spektroskopie der Kalpha-Strahlung von hochionisiertem Argon

Die Diplomarbeit wurde von Zhong Yin ausgeführt am  
Physikalischen Institut für Physik und der Gesellschaft für  
Schwerionenforschung

unter der Betreuung von  
Herr Prof. Dr. Thomas Stöhlker



## **Aufbau eines Kristallspektrometers zur Spektroskopie der $K\alpha$ -Strahlung von hochionisiertem Argon**

Die Quantenelektrodynamik (QED) beschreibt sehr präzise die Wechselwirkung von geladenen Teilchen mit Materie. Unter dem Einfluss starker Felder, wie sie in hochgeladenen Ionen herrschen, sowie für Vielteilchenprobleme ist die Überprüfung der QED noch unzureichend. Die in dynamischen Prozessen wie z.B. Elektron-Materie- und Photon-Materie-Wechselwirkung produzierten Röntgenstrahlen liefern wertvolle Informationen über das untersuchte System. Unter anderem können die Eigenschaften der Materie unter extremen Bedingungen untersucht werden, wie wir in Plasmen, planetaren Gaswolken oder Sonneneruptionen finden. Im Rahmen dieser Diplomarbeit wurde ein hochauflösendes Kristallspektrometer in Johann-Geometrie geplant und gebaut, um die  $K\alpha$ -Übergänge von hochgeladenem Argon zu untersuchen. Im Labor wurde eine Testversion aufgebaut, um das Spektrometer anhand von Referenzlinien zu charakterisieren. Als Referenzlinien wurden von Cadmium in erster und von Terbium in zweiter Ordnung verwendet. Mittels einer Röntgenröhre wurden diese Targematerialien mit Bremsstrahlung zur Fluoreszenz angeregt. Das Kristallspektrometer wurde auf verschiedene Einflüsse wie die Distanz von Kristall zur Quelle, Position des Targetmaterials und Änderung der Winkel untersucht. Anschließend wurde das Kristallspektrometer an der SPARC-EBIT eingesetzt, um die Anregungsprozesse wie sie in Elektron-Ion-Stößen vorkommen, zu untersuchen. Die ersten Resultate von Testmessungen werden dargestellt.

## **Designing of a crystal-spectromter for spectroscopy of the $K\alpha$ -radiation in highly charged argon**

The Quantum-electrodynamic describes very precisely the interaction of charged particles with matter. The prediction for hydrogen and the experimental data are in excellent agreement. But for strong fields and for many body particles the theory has not been tested sufficiently. In dynamical processes like electron-matter or photon-matter-interactions the production of x-rays comprehend important informations about the system. The research of matter in extreme conditions like in plasmas, solar flares or in planetary nebulas can be studied. During this diploma thesis a crystal spectrometer in Johann-geometry was planned and constructed to investigate the  $K\alpha$ -transitions of helium-like argon. First a prototyp was build up and characterized by using reference lines of cadmium in first order and lines of terbium in second order. The characterization included tests of angles, distances between target and crystal and the target position. Afterwards the crystal spectrometer was attached to an ion source, the SPARC-EBIT, where the research of electron-ion-collision was accomplished. The results of the first measurements are presented.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2. Physikalischer Hintergrund</b>	<b>5</b>
2.1. Atomare Struktur . . . . .	5
2.1.1. Elektronenkonfiguration, Übergänge . . . . .	5
2.1.2. Feinstruktur . . . . .	7
2.1.3. QED-Korrekturen erster Ordnung . . . . .	8
2.1.4. Korrekturen eines heliumartigen Systems . . . . .	11
2.1.5. Linienbreite und Linienform . . . . .	13
2.2. Elektronenstoßprozesse . . . . .	16
2.2.1. Ionisation . . . . .	16
2.2.2. Anregung . . . . .	19
2.2.3. Radiative Rekombination und Dielektronische Rekombination . . . . .	20
2.3. Röntgenstrahlung . . . . .	22
2.4. Wechselwirkung Photonen mit Materie . . . . .	24
2.4.1. Photoeffekt . . . . .	24
2.4.2. Comptonstreuung . . . . .	26
2.4.3. Elastische Streuung von Röntgenstrahlung . . . . .	28
2.4.3.1. Thomson-Streuung . . . . .	28
2.4.3.2. Rayleigh-Streuung . . . . .	29
2.4.3.3. Bragg-Streuung in Kristallen . . . . .	30
<b>3. Bragg-Spektroskopie</b>	<b>33</b>
3.1. Kristallspektrometer . . . . .	33
3.1.1. Van-Hamos-Geometrie . . . . .	35
3.1.2. Johann-Geometrie . . . . .	35
3.1.3. Johannsson-Geometrie . . . . .	36
3.2. Charakterisierung von Kristallen . . . . .	37
3.3. Eigenschaften des Johann-Spektrometers . . . . .	39
3.3.1. Einflüsse auf das Auflösungsvermögen . . . . .	40

## Inhaltsverzeichnis

3.3.2.	Abberationen und Korrekturen des Spektrometers . . .	41
3.3.2.1.	Brechung im Kristall . . . . .	41
3.3.2.2.	Johann-Verbreiterung . . . . .	42
3.3.2.3.	Eindringtiefe . . . . .	42
3.3.2.4.	Korrektur durch Biegung des Kristalls . . . .	43
3.4.	Röntgenröhre . . . . .	44
3.5.	CCD-Kamera . . . . .	44
3.5.1.	Rauschen . . . . .	47
3.5.2.	Vakuum und Kühlung . . . . .	47
3.6.	Referenzlinien . . . . .	48
<b>4.</b>	<b>Charakterisierung des Spektrometers</b>	<b>51</b>
4.1.	Röntgenreferenz von Terbium und Cadmium . . . . .	51
4.2.	Analyseprogramme . . . . .	53
4.2.1.	Clusteranalyse . . . . .	53
4.2.2.	Fitprogramm . . . . .	54
4.3.	Experimenteller Aufbau . . . . .	55
4.4.	Messergebnisse und Auswertung . . . . .	56
4.4.1.	Intensität bei verschiedenen Abständen, Strömen und Spannungen . . . . .	56
4.4.2.	Maske . . . . .	56
4.4.3.	Cluster-Analyse und experimentelle Ergebnisse . . . .	59
4.4.4.	Krümmungskorrektur . . . . .	60
4.4.5.	Eigenschaften des Spektrometers . . . . .	60
4.4.6.	Analyse der $L\alpha_1$ und $L\alpha_2$ Linien von Cadmium . . . .	67
<b>5.</b>	<b>Einsatz an der SPARC-EBIT</b>	<b>71</b>
5.1.	Beschreibung und Funktion der SPARC-EBIT . . . . .	71
5.2.	Aufbau und Durchführung des Experiments . . . . .	76
5.3.	Untersuchung des $1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ Übergangs in He-artigem Argon . . . . .	80
<b>6.</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>87</b>
<b>A.</b>	<b>Anhang</b>	<b>91</b>
A.1.	Herleitung der Dispersionsformel . . . . .	91
A.2.	Terbium . . . . .	92
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>101</b>



# 1. Einleitung

Mit der Entdeckung neuartiger elektromagnetischer Strahlung durch C. Röntgen im Jahre 1895, die ihm zu Ehren „Röntgenstrahlung“ getauft wurde, wurde der Grundstein für eine neue Art von Diagnostik gelegt. Die Röntgenspektroskopie ist ein wichtiges Analysemittel, um den Aufbau der Elemente und ihre Wechselwirkung miteinander zu verstehen. Elastische und inelastische Stöße dienen nicht nur in der Mechanik, um die Dynamik von Körpern zu beschreiben. Die Analyse von  $K\alpha$  Strahlung im He-artigen Argon, die in dynamischen Prozessen produziert wird, geben Auskunft über die Eigenschaften ihres Ursprungs. Beobachtete Übergänge in Sonneneruptionen, Plasmen und in planetaren Gaswolken, wie die Aurora des Jupiters, konnten anhand der Analyse der He-artigen Übergänge, Kenntnisse über dessen Beschaffenheit und zeitlichen Zustandsverlauf geliefert werden. Die theoretische Beschreibung der Produktion von Röntgenstrahlen basieren auf die Quantenelektrodynamik. Die Quantenelektrodynamik (QED) ist die quantenfeldtheoretische Beschreibung der elektromagnetischen Wechselwirkung von geladenen Teilchen mit Materie. Anhand von dopplerefreier Laserspektroskopie am atomaren Wasserstoff konnten quantenelektrodynamische Voraussagen von Wasserstoffniveaus mit einer Genauigkeit von bis zu 14 Nachkommastellen verifiziert werden. Eine so hohe Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment wurde von keiner anderen Quantenfeldtheorie erzielt. Wasserstoff-artige Systeme oder quasiwasserstoff-ähnliche Systeme mit einer abgeschlossenen Schale sind als zwei Körper Probleme anzusehen und somit analytisch lösbar. Aber bei komplexeren Systemen und im Bereich starker Feldern, ist die Untersuchung der QED noch unzureichend. Für Systeme mit hoher Kernladungszahl  $Z$  treten die QED Korrekturen aufgrund einer Abhängigkeit von  $\sim Z^4$  stärker auf, wohingegen die Übergangsenergien mit  $Z^2$  skalieren. Die Lamb-Verschiebung für Wasserstoff liegt bei  $3,5 \cdot 10^{-5} \text{eV}$ , hingegen beträgt die Lamb-Verschiebung für wasserstoffartige Uran  $460 \text{ eV}$ . Für Vielteilchen-Systeme mit mehr als einem Elektron existieren ebenfalls keine analytisch exakten Beschreibungen des Systems. Das heliumartige Ion ist das einfachste Vielkörpersystem und ist das Bindeglied zwischen relativ einfachen Systemen zur Vielteilchenphysik. Das zusätzliche Elektron schirmt das Coloumbpotential des Kerns ab. Zusätzlich lässt sich an solchen Konfigurationen die Elektron-Elektron-Wechselwirkung

## 1. Einleitung

studieren. Letztgenannte ist auch die Hürde dabei eine theoretisch präzise Analyse aufzustellen. In den letzten Jahren wurden Fortschritte erzielt, für Vielteilchensysteme eine approximative Beschreibung der relativistischen sowie der QED-Korrekturen anzugeben. Hier sei vor allem auf aktuelle theoretische Behandlungen von Zwei-Elektronen-Systemen im hohen Feldbereich verwiesen [1]. Des Weiteren lassen die beobachteten Übergänge Rückschlüsse auf die dynamischen atomaren Prozesse zu. Insbesondere stellt sich die Frage, ob Unterschiede in Anregungsprozessen existieren, die durch Elektronenstoß induziert werden. Das Ergebnis dieser Prozesse ist auch wichtig für andere Gebiete der Physik, wie für die Plasmaphysik, Fusionsphysik, Astrophysik, Kernphysik oder Beschleunigerphysik, um nur einige zu nennen. Durch das Vergleichen der Intensität ihrer Übergänge erlauben die Ergebnisse für He-artigen Argon einen Rückschluss auf die herrschende Temperatur im Inneren. Dementsprechend ist es wichtig zu wissen, welcher Ansatz die Beschreibung des Vielteilchensystems am geeignetsten wiedergibt. Die Ergebnisse der verschiedenen theoretischen Ansätze unterscheiden sich in einer Größenordnung von  $10^{-5}$  eV. Bei starken Feldern, wie wir sie in hochgeladenen Ionen vorfinden, ist die Analyse mittels Laserspektroskopie wegen der zu hohen Anregungsenergien nicht möglich. Eine Alternative stellen Ionenquellen dar. Die Felder für wasserstoffartige Systeme im Grundzustand steigen von Wasserstoff mit  $10^{10}$  V/cm auf über  $10^{16}$  V/cm für Uran an. Ein Anstieg um sechs Größenordnung beim Übergang von leichten zu schweren hochgeladenen Systemen. Eine technische Realisierung von Ionenquellen sind neben der Electron-Ion-Beam-Trap (EBIT) oder Electron-Cyclotron-Resonance-Ion-Trap (ECRIT) auch die Beschleunigungsanlagen der GSI. Der Experimentierseicherring (ESR) an der Forschungsanlage der GSI ist in der Lage mittels Vorbeschleunigern selbst das schwerste stabile Element (Uran) vollständig zu ionisieren und Experimenten zur Verfügung zu stellen.

Um die Röntgenübergänge untersuchen zu können, sind Röntgendetektoren nötig. Eine Möglichkeit wäre der Einsatz von Mikrokalorimetern. Dieser relativ neue Detektortyp basiert auf dem Prinzip, dass statt einer Energiemessung, die Temperaturänderung, hervorgerufen durch die Absorption des Photons im Festkörper, gemessen wird. Ein mit einem Wärmebad thermisch verbundener Absorber wird durch Röntgenstrahlen aufgeheizt und leitet diese Wärme an das, knapp über dem Nullpunkt gekühlte, Wärmebad ab. Die Temperaturänderung im Wärmebad ist proportional zur eingetroffenen Energie. Das Mikrokalorimeter vereint eine hohe Auflösung und hohe Effizienz mit einem relativ großen Energiebereich. Ein großer Nachteil ist neben seiner Größe (der Kryostat zur Kühlung, Absorber) die lange Zeitspanne bis sich ein thermisches Gleichgewicht nach einem Event zwischen Wärmebad und Absorber einstellt. Erste erfolgreiche Testmessungen am ESR konnten aber

bereits durchgeführt werden. Eine andere momentan verfügbare Möglichkeit zur Detektion von Röntgenstrahlen sind Halbleiterdetektoren. Dabei werden Elektronen nach einem Event durch Photon–Materie Wechselwirkung vom Valenzband ins Leitungsband gehoben und ein Signal ausgelesen. Die Photonenenergie ist proportional zu den produzierten Elektronenladungen. Diese Detektoren verfügen über eine Orts– sowie eine Energieauflösung. Der Nachteil ist das geringe Auflösungsvermögen dieser Detektortypen. Die letzte Möglichkeit zur Detektion von Röntgenstrahlung ist mittels Kristallspektrometern. Die Grundlagen zu diesem Detektortyp wurden Anfang des 20. Jahrhunderts durch M.v. Laue und Kollegen gelegt. Sie beobachteten, dass sich bei Bestrahlung mit Röntgenphotonen auf Materien mit kristallinen Strukturen Beugungsmuster ergeben. 1915 konnten W.H. Bragg und W.L. Bragg die Bedingungen für konstruktive Interferenz von Beugung von Röntgenstrahlen an Kristallen in der nach ihnen benannte Gleichung zusammenfassen. Seitdem ist die Detektion von Röntgenstrahlen durch Kristallspektrometer für hochpräzise Messungen an spektralen Atomübergängen nicht mehr wegzudenken. Dank seines Auflösungsvermögen von 1000–10000, je nachdem welches Kristall verwendet wird, ermöglichen diese Spektrometer das genaue Studium von Röntgenübergängen in atomaren Systemen. A. Compton konnte seine Entdeckung des Compton–Effektes ohne das Wissen der Wellenlänge der gestreuten Photonen ohne das Auflösungsvermögen des Kristallspektrometers nicht machen. Das Prinzip des Kristallspektrometers wurde im Laufe der Zeit weiterentwickelt und mehrere Typen mit speziellen Geometrien entstanden. Je nach Anwendungsprofil des Experiments wurden entsprechende Spektrometer eingesetzt, sodass immer präzisere Messungen des spektralen Bereiches durchgeführt werden konnten. Die Referenzlinien von Elementen, die von NIST oder anderen Forschungszentren exakt ausgemessen wurden und heute als Standards gelten, wären ohne das Kristallspektrometer nicht möglich gewesen. Aber diese Form des Röntgendetektors hat auch Schwächen. Die Nachteile des Kristallspektrometers liegen in seiner geringen Effizienz, was also eine starke Quelle erfordert und in seinem schmalen Akzeptanzbereich.

Im Rahmen dieser Diplomarbeit wurde ein Kristallspektrometer für die He–ähnlichen  $K\alpha$  Übergänge des Argons geplant und gebaut. Das Kristallspektrometer wurde in der Johann–Geometrie zunächst im Labor aufgebaut. Mittels Fluoreszenz von Cadmium und Terbium wurde das Kristallspektrometer auf seine Eigenschaften hin untersucht. Anschließend wurde das Spektrometer für ein Experiment zu den Umladungsprozessen von hochgeladenen Ionen an der EBIT eingesetzt. Dabei sollten die Elektron–Materie–Wechselwirkung von He-artigen Argon untersucht werden. Anlässlich der positiven Ergebnisse des Experiments an der EBIT, soll das Spektrometer als Messinstrument an dem

## *1. Einleitung*

Petawatt High Energy Laser for Ion Experiments (PHELIX) Experiment mit Argon Tröpfchentargets eingesetzt werden. Das Interesse hierbei liegt darin, dynamische Anregungsprozesse mit wohldefinierten Targets zu studieren.

Diese Arbeit gliedert sich in sechs Kapitel. Im zweiten Kapitel werden die grundlegenden Prozesse im physikalischen Hintergrund beschrieben und erläutert, im Dritten die Eigenschaften der Kristallspektrometrie und deren mögliche Abberationen, im Vierten den Aufbau im Labor und die Eigenschaften des Spektrometers sowie die Ergebnisse der Referenzlinien, im Fünften den Einsatz an der SPARC-EBIT und die ersten Testmessungen am hochionisierten Argon und im Sechsten die Zusammenfassung und Ausblick über Verbesserungen und zukünftige Experimentiermöglichkeiten.

## 2. Physikalischer Hintergrund

Im folgenden werden die physikalischen Grundlagen der vorliegenden Arbeit dargestellt. Dabei erfolgt zunächst eine Beschreibung der Struktur atomarer Systeme sowie die radiativen Übergänge zwischen einzelnen Energieniveaus. Dann werden die dynamischen Prozesse bei Stößen energiereicher Elektronen mit Atomen bzw. Ionen dargestellt. Es folgt eine kurze Erörterung der wichtigsten Prozesse zur Erzeugung von Röntgenstrahlen. Schließlich werden die für den Nachweis von Röntgenstrahlen wichtigen Photon-Materie-Wechselwirkungen vorgestellt.

### 2.1. Atomare Struktur

Die Studien an H- und He-artige Ionen bieten viele Möglichkeiten den Aufbau der Atome und auch die wechselwirkende Kräfte zu verstehen und die dazugehörigen Theorien zu überprüfen. Für wasserstoffartige Systeme existieren nahezu vollständige Lösungen. Sie sind wegen ihrer Einfachheit bestens geeignet die Theorie mit experimentellen Daten zu überprüfen. Hingegen sind He-artige Systeme zwar das einfachste Vielelektronensystem, aber sind analytisch jedoch nicht exakt lösbar. Ein interessanter Aspekt stellt dabei die Untersuchung von Elektron-Elektron-Wechselwirkung dar. Generell gilt für hochgeladenen Ionen, dass die Korrekturen mit der vierten Potenz von  $Z$  skalieren und bei schweren Systemen besonders stark ausgeprägt sind. Im folgenden werden zunächst für das einfachste System, Wasserstoff, die theoretischen Grundlagen für das Verständnis der atomaren Struktur vorgestellt. Zusätzlich wird auf die Elektron-Elektron-Wechselwirkung des He-artigen Systems eingegangen.

#### 2.1.1. Elektronenkonfiguration, Übergänge

Eine erste Näherung zur Beschreibung der Energielevels in Atomen liefert die Schrödinger-Gleichung [2]

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi, \tag{2.1}$$

## 2. Physikalischer Hintergrund

wobei  $H$  der Hamiltonoperator,  $\hbar = h/2\pi$  das Plancksches Wirkungsquantum,  $i$  die imaginäre Einheit und  $\frac{\partial}{\partial t}$  die Zeitableitung ist. Für den dreidimensionalen stationären Fall ergibt sich der Hamiltonoperator

$$H = E_{Kin} + V = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V, \quad (2.2)$$

mit dem Laplace-Operator  $\Delta$  und dem Potential  $V$ . Für den Fall eines Elektrons im Feld eines als punktförmig angenommenen Atomkerns, erhält man das Coulomb-Potential

$$V_C = -\frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)r}. \quad (2.3)$$

Die stationäre Schrödinger-Gleichung ergibt sich dann zu

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\psi = E\psi, \quad (2.4)$$

mit der Elektronenenergie. Bei Verwendung der Polarkoordinaten ist die Lösung der Wellenfunktion

$$\psi_{n,l,m} = R_{n,l}Y_{l,m}, \quad (2.5)$$

wobei  $R_{n,l}$  den radialen Anteil der Wellenfunktion angibt und  $Y_{l,m}$  die Kugelflächenfunktion darstellen. Diese können mit den Laguerre-Polynomen für den radialen Fall und den Legendre-Polynome für die Kugelflächenfunktionen gelöst werden. Die Ordnung der Lösungen stellen die Hauptquantenzahl  $n$ ,  $l$  und  $m$  dar, wobei  $l$  (nimmt natürliche Werte bis  $n - 1$  an) und  $m$  (nimmt ganzzahlige Werte von  $-l$  bis  $+l$  an) die Quantenzahlen für den Bahndrehimpuls bzw. das magnetischen Moment des Elektrons sind. Für den alltäglichen Gebrauch wurden den einzelnen Quantenzahlen Buchstaben zugeordnet. Für die Hauptquantenzahl  $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6$  usw. wurden große Buchstaben wie  $K, L, M, N, O, P$  verwendet, für den Bahndrehimpuls  $l = 1, 2, 3, 4, 5, 6$  entsprechend  $s, p, d, f, g, h$ . Das Energieniveau eines Elektrons in einem wasserstoffartigen System lautet

$$E_n = E_R \frac{Z^2}{n^2}, \quad (2.6)$$

mit  $Z$  die Kernladungszahl,  $n$  die Hauptquantenzahl und  $E_R = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} = 13,605$  eV die Rydberg-Konstante. Für  $Z = n = 1$  befindet sich das Elektron im  $1s$

Zustand, also im untersten möglichen Energieniveau und hat eine Energie von  $E_1 = E_R$ , die der Rydberg-Energie entspricht. Im Orbital-Modell des Atoms geben die Quantenzahlen  $n$  die Schale und  $l$  die Unterschale des Niveaus an. Übergänge zwischen den diskreten Energieniveaus sind durch Emission bzw. Absorption von Photonen möglich. Dabei gelten im nicht-relativistischen Fall die folgenden Auswahlregeln, wie für den Übergang eines Elektron von der L-Schale in die K-Schale  $\Delta l = \pm 1$ ,  $\Delta m = \pm 1$  oder  $\Delta s = 1$ . Da die Übergänge für die Elemente charakteristisch sind, werden sie in Serien zusammengefasst. Übergänge von  $n + 1$  nach  $n$  heißen  $n\alpha$ , von  $n + 2$  nach  $n$  dementsprechend  $n\beta$  usw., sodass der Übergang eines Elektrons von der L zur K  $K\alpha$  heißt, M nach K  $K\beta$ . Eine gute Näherung zur Berechnung der dabei freiwerdenden Energie lautet [3]

$$\Delta E_{i,f} = Ry(Z - K)\left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2}\right), \quad (2.7)$$

dabei ist  $Ry$  die Rydberg-Konstante,  $Z$  die Kernladungszahl,  $K$  ein Faktor für die Abschirmung und  $n_i$  und  $n_f$  der Anfangs- bzw. Endzustand. Obige Herleitung der Energieniveaus gilt nur für Ein-Elektronen-Systeme. Bei mehreren Elektronen wirkt auf das jeweils betrachtete „aktive“ Elektron neben des reinen Kernpotentials auch das Feld der übrigen Elektronen. Dadurch wird das Kernpotential abgeschirmt. Von Slater wurde folgender Ausdruck für die Bindungsenergie vorgeschlagen:

$$E = - \sum_{i=1}^N \left( \frac{Z - S_i}{n_i} \right)^2. \quad (2.8)$$

Dabei stellt  $Z$  die Kernladungszahl,  $S_i$  den Abschirmungsfaktor, die auch von der Drehimpulsquantenzahl abhängt und  $n_i$  die Hauptquantenzahl dar. Der Algorithmus zur Rechnung des effektiven Kernladungszahl und Quantenzahl sowie eine Tabelle von Werten ist bei [4] zu finden.

### 2.1.2. Feinstruktur

Bei der obigen Beschreibung der Energieniveaus wurde die Schrödinger-Gleichung verwendet. Diese enthält jedoch keine relativistischen Effekte sowie die Berücksichtigung des Elektronenspins. Durch Verfeinerungen der experimentellen Apparaturen wurden Entdeckungen gemacht, die so nicht erklärbar waren. Energieniveaus haben sich in mehrere Nebenlinien aufgespalten. Den nächsten großen theoretischen Schritt vollzog Paul Dirac. Von der Schrödinger-Gleichung

## 2. Physikalischer Hintergrund

ausgehend unter Beachtung der relativistischen Energie–Impuls–Beziehung:

$$E^2 = (mc^2)^2 + (pc)^2. \quad (2.9)$$

Mit der Ruhemasse  $mc^2$  und kinetische Energie  $pc$ , kam er auf die nach ihm benannte Dirac–Gleichung für ein geladenes Teilchen im elektromagnetischen Feld[5]:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = c\vec{\alpha}(p - qA) + q\phi + \vec{\beta} mc^2 \Psi, \quad (2.10)$$

wobei das Vektorpotential  $A$  und das Skalarpotential  $\phi$  die Wechselwirkung des Elektrons mit einem elektromagnetischen Feld wiedergibt,  $q$  für die elektrische Ladung des Elektrons steht,  $p$  den Impulsoperator darstellt und  $\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix}$

und  $\vec{\beta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$   $4 \times 4$  Matrizen mit den Pauli Matrizen  $\sigma$  und die Einheitsmatrix als Einträgen sind. Die Lösungen dieser Gleichung sind keine dreidimensionalen Wellenfunktionen, sondern vierdimensionale Spinoren  $\Psi$ . Die Lösungen dieser Gleichung enthalten auch Terme, die das Antiteilchen beschreiben. Diese Gleichung wird im Rahmen der Störungstheorie gelöst. Für den punktförmige Kern lautet die vollständige exakte Lösung der Dirac–Gleichung:

1

$$E_{n,j} = mc^2 \left[ 1 + \frac{(Z\alpha)^2}{\left[ n - j - \frac{1}{2} + \left[ (j + \frac{1}{2})^2 - Z^2\alpha^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right]^2} \right]^{-\frac{1}{2}}. \quad (2.11)$$

Gemäß dieser Formel haben Niveaus mit der gleichen Gesamtdrehimpuls  $J = L + S$  die gleichen Energien. Die Feinstruktur–Aufspaltung erhöht die  $2n^2$ –Aufspaltung, die, wie im nicht–relativistischen Fall, zu mehr Unterniveaus (Notation  $n^{2S+1}L_J$ ) führen.

### 2.1.3. QED–Korrekturen erster Ordnung

1947 entdeckten Retherford und Lamb am Wasserstoff den  $2^2S_{\frac{1}{2}} \rightarrow 2^2P_{\frac{1}{2}}$  Übergang der nicht im Einklang mit den Ergebnissen der Dirac – Gleichung stand. Die Lösungen der Dirac–Gleichung sagt für Unternivaus mit gleichem Gesamt-

<sup>1</sup>Interessanterweise kam Arnold Sommerfeld in seinen theoretischen Arbeiten 1912 zum gleichen Ergebnis, aber ohne die quantenmechanischen Hintergründe zu kennen.



drehimpuls  $j$  eine gleiche Energie voraus und verbietet einen solchen Übergang. Ein Strahl von Wasserstoffatomen kollidiert mit einem Elektronenstrahl und bewirkte eine Bevölkung des  $2^2S_{1/2}$ -Niveaus. Mit Mikrowellen wurde dieser in den  $2^2P_{1/2}$  Zustand angeregt [6]. Eine Erklärung wie diese Energieverschiebung möglich war lieferte dann die Quantenelektrodynamik. In erster Ordnung kann man sie auf drei Effekte zurückführen:

1. Selbstenergie
2. Vakuumpolarisation
3. Kerneffekte

Die Selbstenergie ist die Wechselwirkung des Elektrons mit seinem eigenen elektromagnetischen Feld. Im Einklang mit der Heisenbergschen–Unschärferelation, steht das gebundene Elektron mit den von seinem Feld erzeugten virtuellen Photonen in Wechselwirkung. Diese werden vom Elektron absorbiert und emittiert. Die Folge ist eine Verschmierung der punktförmigen Ladungsverteilung des Elektrons. Dementsprechend führt es zu einer lockeren Bindung zum Atomkern. Die Selbstenergie ist für leichte Elemente dominierend und kann auch als Massendifferenz zwischen einem gebundenen und einem freien Elektron gesehen werden, falls dieser keine Wechselwirkung mit seinem Strahlungsfeld aufweist [7]. Ein weiterer Effekt ist die Vakuumpolarisation. Ähnlich wie bei der Selbstenergie, bilden sich in der Nähe des Kernfeldes Elektron–Positron Paare, die den Einfluss des Kerns auf das Energieniveau des Elektrons erhöhen. Das Elektron ist damit in einem stärkeren gebundenen Zustand. Sie wirkt der Selbstenergie entgegen.



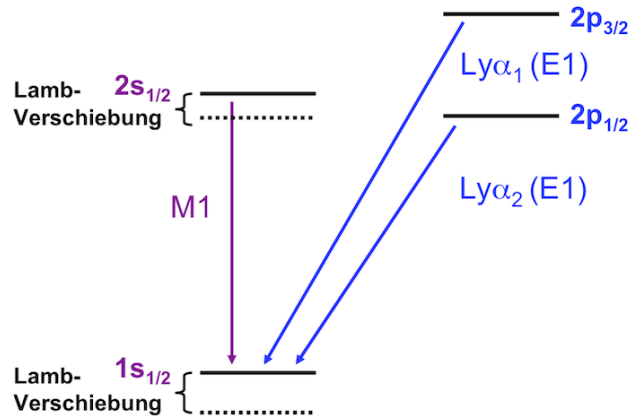
**Abbildung 2.1.:** Feynman–Diagramme für die Selbstenergie (links) und Vakuumpolarisation (rechts) [8]

## 2. Physikalischer Hintergrund

Kerneffekte wiederum beruhen auf der endlichen Ausdehnung des Kerns. Bisher wurde von einem Punktteilchen mit radialsymmetrischen Coulomb-Potential ausgegangen. Bei genauerer Betrachtung hat der Kern, speziell mit hoher Nukleonenzahl eine inhomogene Gestalt. Dadurch verliert das elektromagnetische Feld des Kerns seine radialsymmetrische Form, welche eine unterschiedlich starke Wechselwirkung mit dem Elektron zur Folge hat. Diese drei Effekte zusammen bilden die Lamb-Verschiebung [8]:

$$\Delta E_{LS} = \frac{\alpha (Z\alpha)^4}{\pi n^3} \bullet F(Z\alpha) \bullet mc^2, \quad (2.12)$$

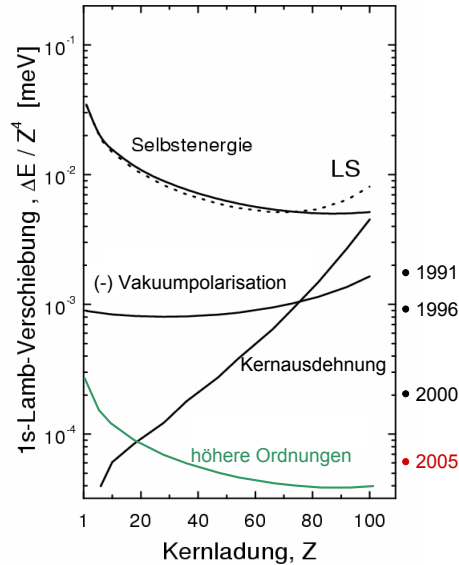
wobei  $F(Z\alpha)$  ein Formfaktor ist, die drei Korrekturen beinhaltet. Näherungsweise skaliert die QED-Beiträge mit  $\frac{(Z\alpha)^4}{n^3}$ . Für den Wasserstoff beträgt die Korrektur  $4,37 \cdot 10^{-6} eV$  und somit ca. 10% der Feinstrukturaufspaltung des  $n=2$  Niveaus [9].



**Abbildung 2.2.:** Lamb-Verschiebung in einem wasserstoff-artigen System

Speziell die Lamb-Verschiebung wurde an der GSI in Experimenten an hochgeladenen Ionen untersucht. Besonders für wasserstoffähnliches Uran, war die Lamb-Verschiebung Gegenstand von Untersuchungen. Uran ist der schwerste stabile Kern. Am Experimentellen-Speicher-Ring (ESR) in Kombination mit dem Elektronenkühler konnte der bis dato der genaueste Wert für die Lamb-Verschiebung an wasserstoffähnlichen Uran gemessen werden [10]. Mit Testmessungen des FOCAL Aufbaus wurde gezeigt, dass die Präzision mittels eines Kristallspektrometers in Laue-Geometrie noch weiter gesteigert werden

kann, sodass es möglich ist, sensitiv auf QED-Korrekturen höherer Ordnung zu werden [11].



**Abbildung 2.3.:** Aufgetragen ist der Wirkungsquerschnitt der einzelnen Komponenten der Lamb-Verschiebung gegen die Kernladungszahl. Da Beiträge mit  $(Z\alpha)^4$  skalieren, wurden sie durch diesen normiert. Die Jahreszahlen geben die erreichte Genauigkeit an [12].

#### 2.1.4. Korrekturen eines heliumartigen Systems

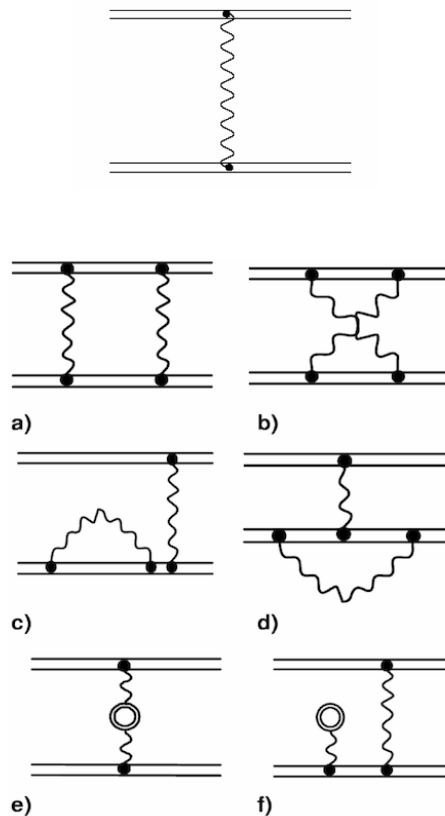
Die Studien an Wasserstoff- und Helium-artige Ionen bieten viele Möglichkeiten den Aufbau der Atome und auch die wechselwirkende Kräfte zu verstehen und die dazugehörigen Theorien zu überprüfen. Für wasserstoffartige Systeme existieren exakte analytische Lösungen. Sie sind wegen ihrer Einfachheit bestens geeignet, die Theorie mit experimentellen Daten zu überprüfen. Hingegen sind He-artige Systeme die einfachsten Vielelektronensysteme. Ein interessanter Aspekt stellt dabei die Untersuchung von Elektron-Elektron-Wechselwirkung dar. Generell gilt für hochgeladenen Ionen, dass die QED-Korrekturen mit der vierten Potenz von  $Z$  skalieren und bei schweren Systemen besonders stark ausgeprägt sind. Es gibt zwar verschiedene theoretische Ansätze die Beiträge der Korrekturen näherungsweise zu berechnen, doch die Ergebnisse weichen teils deutlich voneinander ab (siehe [13, 14, 15]). Der Grund liegt unter anderem in der Elektron-Elektron-Wechselwirkung. Der nicht-relativistische

## 2. Physikalischer Hintergrund

Hamilton Operator für einen punktförmigen Kern mit zwei Elektronen lautet [3]:

$$H = \sum_{i=1}^2 \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{r_i}^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}. \quad (2.13)$$

Der erste Term beschreibt die kinetische Energie der Elektronen, der Zweite die elektrische Anziehung des positiven Kerns  $-Ze$  auf die Elektronen und der dritte Term die gegenseitige Abstoßung der Elektronen untereinander. Die Zentralfeldnäherung ist ein Ansatz, dieses Problem zu vereinfachen. Die Idee ist, die Elektron–Elektron–Wechselwirkung durch ein geeignetes sphärisch radialsymmetrisches Potential  $V_c(r_i)$ , das nur vom Betrag  $r_i$  abhängt und die Abstoßung des anderen Elektrons enthält, zu ersetzen. Auf der Störungstheorie aufbauend sind beispielsweise die Relativistic Many Body Perturbation Theory (RMBPT) oder die Bound–State–QED (BSQED) [1]. Für die He-artigen Ionen mit hoher Kernladungszahl scheint die Störungstheorie besser mit den experimentellen Ergebnissen übereinzustimmen. Hingegen scheinen die auf das Ritzsches–Variationsprinzip aufbauende Methoden wie die All–Order [15] oder die Multikonfigurations–Dirac–Fock–Methode (MCDFM) für leichte Ionen besser beschreiben zu können. Für eine genaue Beschreibung sei auf [9] und die Referenzen darin verwiesen. Die QED–Korrekturen sind durch das Zwei–Elektron–System schwieriger zu beschreiben. Abbildung 2.4 gibt die möglichen QED–Korrekturen eines zwei–Elektronen Systems wieder, die in nicht-strahlende, wie ein und zwei–Photonen–Austausch und in strahlende Beiträge, wie Selbstenergie oder Vakuumpolarisation, unterteilt werden. Den Einfluss der Elektron–Elektron–Wechselwirkung für He-artiges Uran auf den Grundzustand konnte erfolgreich in einem Experiment an der GSI bestimmt werden [16].



**Abbildung 2.4.:** Oben: Der Ein-Photon Austausch zwischen zwei Elektronen. Das Photon wird durch die gewellte Linie und die Elektronen durch die doppelt durchgezogene Linie dargestellt. Unten: a) und b) geben die nicht-strahlende Beiträge wieder und c), d), e) und f) die strahlende Beiträge der zwei Elektronenkorrekturen wieder.

### 2.1.5. Linienbreite und Linienform

Bei allen experimentellen Untersuchungen ist für die Präzision eine untere Grenze durch die Natur vorgegeben: die natürliche Linienbreite. In atomaren Vielelektronen-Systemen können bei Übergängen nicht nur der gewünschte Effekt eintreten, sondern auch andere Prozesse zum Vorschein kommen, aber aufgrund ihrer Intensität nicht ins Gewicht fallen. Oder das Auflösungsvermögen des Detektors ist zu niedrig und wird somit als ein Teil des dominierenden Prozesses untergehen. Mit einem Kristallspektrometer sind wir in der Lage ein so hohes Auflösungsvermögen zu erzielen, dass diese „Nebenprodukte“ sichtbar gemacht werden können, indem wir eine veränderte Linienform be-

## 2. Physikalischer Hintergrund

obachten. Diese beide Punkte werden in diesem Abschnitt behandelt. Gemäß der Heisenbergschen–Unschärferelation kann die Energie  $\Delta E$  eines quantenmechanischen Systems innerhalb einer endlichen Zeit  $\tau$  nicht mit beliebiger Genauigkeit gemessen werden. Daraus folgt, dass ein angeregter Zustand endlich ist, dies wiederum verursacht eine Unschärfe der Emissionslinie. Die Breite des Übergangs hängt von der Lebensdauer  $\tau$  ab:

$$\Delta E = \frac{\hbar}{\tau}. \quad (2.14)$$

Für die Angabe der Unschärfe als Photonwellenlänge ergibt sich:

$$\Delta \lambda = \frac{hc}{\Delta E} = 2\pi c\tau. \quad (2.15)$$

Mittels der Kristallspektroskopie kann eine so hohe Auflösung erzielt, dass die gemessenen Übergangslinien oder deren Breiten sich auf dem Niveau der natürlichen Linienbreite befinden. Die natürliche Linienbreite hat die Form einer Lorentzverteilung

$$f(x, \Gamma) = I \frac{a^2}{a^2 + (x - x_0)^2}, \quad (2.16)$$

wobei  $a$  die Halbswertsbreite,  $I$  die Amplitude und  $x_0$  die Position des Maximums ist. Das Spektrometer selbst hat durch Fehler im Kristall oder den geometrischen Aufbau eine intrinsische Breite, die mit einer Gaussverteilung

$$f(x) = I \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{x - x_0}{\sigma} \right)^2 \right] \quad (2.17)$$

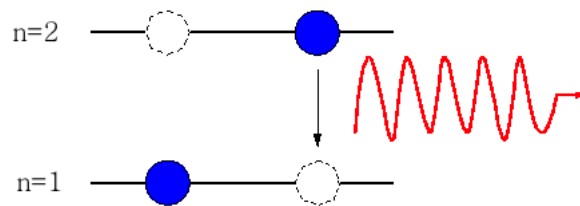
beschrieben werden kann, wobei  $\sigma$  die Standardabweichung darstellt. Die zu erwartenden Spektren können durch eine Verteilung aus einer Faltung der Lorentz– mit der Gausskurve beschrieben werden. Diese wird Voigt–Verteilung genannt, siehe 4.2.2.

Neben der natürlichen Linienbreite können Nebenlinien auftreten, die energetisch sehr nahe an dem Übergang liegen, dass sie aufgrund des begrenzten Auflösungsvermögens des Detektors als Veränderung der Hauptlinie erscheinen. Sie sorgen für eine weitere Verbreiterung bzw. eine Asymmetrie der Emissionslinie. Diese Prozesse sind

1. Satelliten–Linien
2. Shake–Up–bzw. Shake–Off–Effekt

## 3. Auger-Prozess

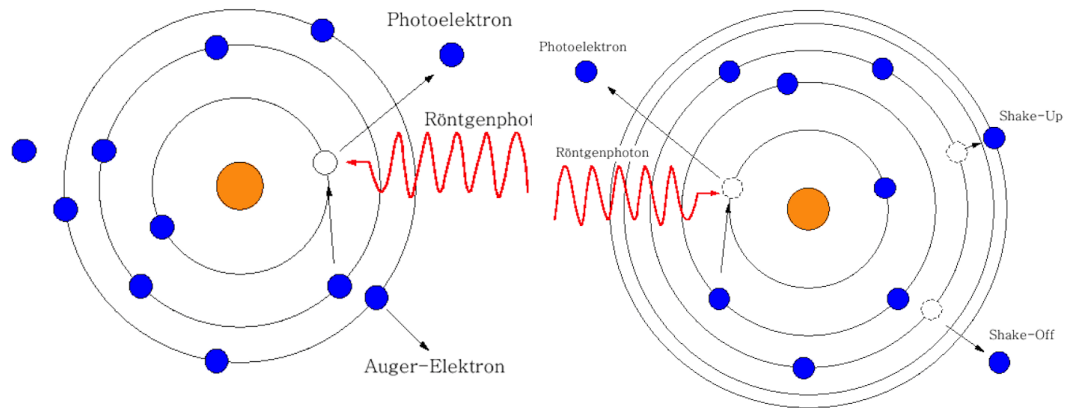
Beim Ionisationsprozess durch Photonen, Elektronen oder Ionen können mehrere Vakanz entstehen, sprich eine Vakanz in der K- und L-Schale. Ein Übergang eines Elektrons von der L-Schale in den Grundzustand wird eine leicht höhere Energie haben als derselbe Übergang ohne die L-Schale Vakanz, da ein Elektron in der selben Schale einen Abschirmungseffekt ausübt und somit das Bindungsenergie leicht verringert. Diese Satellitenlinie übt damit einen Einfluss auf den wahren  $K\alpha$ -Übergang aus und liegt meist auf der höherenergetischen Seite aufgrund einer fehlenden Abschirmung eines Elektrons in der gleichen Schale, siehe Abbildung 2.5 . Bei einer doppelten Vakanz findet ein Hypersatelliten-Übergang statt.



**Abbildung 2.5.:** Eine zusätzliche Vakanz in der L-Schale erhöht die Bindungsenergie wegen der fehlenden Abschirmung und emittiert ein energiereicheres Photon.

Wie groß die Abschirmung ist hängt vom Element und der Lage des Elektrons ab. Eine Annäherung der Energieverschiebung wird durch die Slater-Regel gegeben. Beim Shake-Up-Effekt wird ein Elektron z.B. durch den Photoeffekt aus seinem gebundenen Zustand ionisiert. Das freiwerdende Elektron hebt ein anderes Elektron in einen äußeren gebundenen Zustand. Beim Shake-Off-Effekt hingegen wird das äußere Elektron in das Kontinuum gehoben, siehe Abbildung 2.6. Ein weiterer nicht radiativer Prozess ist der Auger-Prozess. Dabei wird beim Auffüllen einer Vakanz z.B. in der K-Schale aus der L-Schale kein Photon emittiert, sondern die Energie wird genutzt um ein gebundenes Elektron in der äußeren M-Schale anzuheben, dies wird auch als KLM Elektron bezeichnet [17]. Im Spezialfall, dass die Lücke von einem Elektron aus der selben Schale, also aus einer höheren Unterschale aufgefüllt wird, handelt es sich um einen Coster-Kronig Übergang. Tritt der Fall ein, dass das emittierte Auger-Elektron auch aus derselben Schale stammt, wird von einem Super-Coster-Kronig Übergang gesprochen [18]. Alle Prozesse können das Maximum einer Linie verschieben oder zu einer asymmetrischen Form führen. Dementsprechend ist es notwendig, diese Effekte, speziell die Satellitenübergänge, bei der Analyse mit zu beachten.

## 2. Physikalischer Hintergrund



**Abbildung 2.6.:** Links: Eine schematische Darstellung des nicht radiativen Auger-Prozesses. Ein Röntgenphoton erzeugt eine Vakanz in der K-Schale. Diese wird durch ein Elektron aus der L-Schale gefüllt unter Aussendung eines Elektrons aus der M-Schale, es wird auch als KLM-Elektron bezeichnet. Rechts: Beim Shake-Up- und dem Shake-Off-Effekt zerfällt der strahlungsfreie angeregte Zustand unter Emission eines Elektrons. Dieser hebt ein gebundenes Elektron entweder in einem höheren ungebundenen Zustand oder ins Kontinuum.

## 2.2. Elektronenstoßprozesse

Im folgenden Abschnitt werden die Elektronenstoßprozesse einer Electron-Beam-Ion-Trap (EBIT) zur Erzeugung von hochgeladenem Ionen beschrieben. Generell spielt die Ionisation bzw. Anregung atomarer Systeme durch Elektronenstoß bei zahlreichen physikalischen Prozessen eine wichtige Rolle. Zu nennen sind hier unter anderem die Produktion von Bremsstrahlung und charakteristischer Strahlung in Röntgenröhren, die Erzeugung hochgeladener Ionen in Electron-Beam-Ion-Traps (EBITs, siehe Abschnitt 5.1) sowie die komplexe Dynamik in Ion-Atom-Stößen beispielsweise am Gas-Target des ESR, siehe [19].

### 2.2.1. Ionisation

Neben der Photoionisation besteht die Möglichkeit, durch Elektronenstöße ein Atom zu ionisieren. Es wird zwischen direkten und indirekten Ionisationsprozessen unterschieden. Bei direkten Prozessen werden Elektronen durch Elektronenstöße von Atomen oder Ionen emittiert. Bei indirekten Prozessen



führt die Abregung eines angeregten atomaren Zustandes über nicht-radiative Prozesse zur Emission von zuvor gebundenen Elektronen. Zu nennen sind hier Auger-Prozesse, Coster-Kronig sowie der Shake-Off-Effekt, siehe auch 2.1.5. Für die EBIT ist die direkte Einfachionisation durch Elektronenstöße der Hauptprozess zur Produktion von hochgeladenen Ionen (Direct Ionisation, DI). Durch den Stoß von freien Elektronen gegen einen gebundenen Elektron in einem neutralen Atom oder bereits vorhandenen Ion, wird dieses aus der Schale ins Kontinuum gehoben. Der inelastische Stoß lässt sich wie folgt darstellen:



wobei  $X^{q+}$  den Ausdruck für ein Ion mit  $q$  dem Ionisationsgrad,  $e_1^-$  das Elektron-Projektile und  $e_2^-$  das ionisierte Elektron darstellen. Die durch Elektronenstoß übertragene kinetische Energie des Elektrons  $E_{kin}$  muss größer sein als das Ionisationspotential  $I$  des gebundenen Elektrons (Bindungsenergie). Aufgrund der Energieerhaltung gilt:

$$E_{kin} - I = E_{e_1} + E_{e_2}, \quad (2.19)$$

wobei  $E_{e_1}$  und  $E_{e_2}$  die Energien der Elektronen nach dem Stoß sind. H. Bethe fand 1930 heraus, dass der Wirkungsquerschnitt  $\sigma_q$  gemäß

$$\sigma_q \sim \frac{\ln(E_{kin}/I)}{E_{kin} \cdot I} \quad (2.20)$$

logarithmisch von der kinetischen Energie des einfliegenden Elektrons sowie der Ionisationspotentials des gebundenen Elektrons abhängt. Es ergibt sich ein Maximum des Querschnitts für  $E_{kin} \sim I$ , d.h. an der Schwelle. Dies entspricht dem Bohr-Kriterium, demgemäß die Ionisation am effektivsten ist, wenn die Geschwindigkeit des einfliegenden Elektrons gleich der Bohrschen-Bahngeschwindigkeit des gebundenen Elektrons ist. Eine exakte Berechnung des Ionisationsquerschnitts für ein beliebiges atomares System ist in der Regel sehr aufwändig. Von Scofield wurde im Rahmen einer relativistischen Plane Wave Born Approximation (PWBA) in einem großen Energiebereich und für Kernladungszahlen zwischen 18 und 92 die Querschnitte für die Ionisation der K- und L-Schalen von neutralen Atomen berechnet [20]. Des Weiteren existieren für die K-Schalen-Ionisation zahlreiche semi-empirische Näherungsformeln bis in den ultra-relativistischen Energiebereich, siehe [21] und Referenzen darin. Zur Bestimmung der Ionisationsquerschnitte für beliebige, insbesondere auch teilweise ionisierte Systeme, wird dagegen oftmals die ebenfalls semi-empirische

## 2. Physikalischer Hintergrund

Lotz-Formel genutzt [22]:

$$\sigma_{qj}(E_{kin}) = a_{qj} k_{qj} \frac{\ln(E_{kin}/I_{qj})}{E_{kin} \cdot I_{qj}} \cdot [1 - b_{qj} \exp(-c_{qj}(\frac{E_{kin}}{I_{qj}} - 1))], \quad (2.21)$$

wobei  $k_{qj}$  die Besetzungszahl der Unterschale  $j$  eines Ions des Ladungszustandes  $q$  im Grundzustand darstellt,  $I_{qj}$  ist die Bindungsenergie und  $a_{qj}$ ,  $b_{qj}$  und  $c_{qj}$  sind experimentell ermittelte und tabellarisierte Konstanten. Für den Fall des 3s-Zustands im Argon gilt

$$a_{qj} = 3,6 \times 10^{14} \text{cm}^2 \text{eV}^2, b_{qj} = 0,69, c = 0 \quad (2.22)$$

Wird über alle besetzten Unterschalen aufsummiert, ergibt sich der gesamte Wirkungsquerschnitt für die Änderung eines Ladungszustandes zu:

$$\sigma_{q \rightarrow q+1} = \sum_j \sigma_{qj}. \quad (2.23)$$

Wie zu sehen ist, skaliert der Wirkungsquerschnitt mit  $(E_{kin} \cdot I)^{-1}$ . Der Ionisationsvorgang fängt prinzipiell bei Elektronen mit niedriger Bindungsenergie an, gefolgt von der Emission der Elektronen aus niedrigeren Haupt- und Unterschalen, da der Wirkungsquerschnitt für die Ionisation mit  $\frac{1}{I}$  skaliert. Die Lotz-Formel stimmt für Wasserstoff sehr gut mit den experimentellen Ergebnissen überein. Doch für Argon ist sie immer noch Gegenstand von Untersuchungen, da sie bei kleineren Energien abweichen kann. Generell weist die Lotz-Formel für hochgeladene Ionen und hohe Bindungsenergien eine große Abweichung zu gegenwärtigen Ergebnissen auf. Eine detaillierte Auseinandersetzung ist nicht Gegenstand dieser Arbeit und es wird auf die Literatur verwiesen [23, 24, 25, 26].

Eine weitere Möglichkeit ist die Mehrfachionisation durch einen Elektronenstoß. Dabei werden mehrere Elektronen aus einer Schale gehoben. Eine empirische Formel zur Berechnung des Wirkungsquerschnittes lautet [27, 28, 29]

$$\sigma_{q \rightarrow q+2} = \frac{2,6 \times 10^{-14} \text{eV}^2}{E_{kin}(I_q + I_{q+1})} \cdot \ln \frac{E_{kin}}{I_q + I_{q+1}}. \quad (2.24)$$

Auch hier verläuft der Ionisationsprozess über die Reihenfolge der Haupt- und Unterschalen. Aufgrund der Komplexität zur exakten Berechnung der Wirkungsquerschnitte von Mehrfachionisationen konnte sich kein theoretischer Ansatz durchsetzen, vielmehr finden semi-empirische Formeln ihre Anwendung [25]. Neben der direkten Mehrfachionisation besteht die Möglichkeit, durch

Shake-Off oder Coster-Kronig-Effekte ein zweites Elektron zu ionisieren. Es wurde aber angesprochen, dass die dafür benötigte Vakanz in den inneren Schalen eher unwahrscheinlich ist.

### 2.2.2. Anregung

Die Übergänge im He-artigen Argon werden hauptsächlich durch Elektronen-Anregung verursacht. Anders als bei der Elektronen-Ionisation, verfügt das Elektron nicht über genug kinetische Energie, um ein gebundenes Elektron im Atom oder Ion ins Kontinuum zu heben. Ist die Energie größer als die Differenz zweier Bindungsniveaus kann das Elektron in einem angeregten Zustand gehoben werden gemäß

$$X^{q+} + e_1^-(E_{kin}) \rightarrow [X^{(q+1)+}]^* + e_1^-(E_{e_1}). \quad (2.25)$$

Die Energiebilanz lautet dementsprechend:

$$\Delta E = |E_i - E_f| \leq E_{kin} - E_{e_1}. \quad (2.26)$$

$E_i$  bezeichnet den Anfangszustand des Elektrons und  $E_f$  den Endzustand. Das Auffüllen der Vakanz kann prinzipiell durch zwei Prozesse verlaufen. Durch Emission von Photonen gemäß

$$[X^{(q+1)+}]^* \rightarrow [X^{(q+1)+}] + h\nu \quad (2.27)$$

oder durch einen Auger-Prozess. Dabei wird die Vakanz von einem Elektron aus einer höheren Schale gefüllt unter Emission eines Elektrons, siehe auch 2.1.5. Dieser ist im Vergleich zu der spontanen Emission ein unwahrscheinlicher Vorgang. Gemäß dem Einsteinkoeffizienten skaliert die Emission eines Photons mit  $Z^4$  bzw.  $q^4$ , wohingegen beim Auger-Prozess eine schwache  $q$  Abhängigkeit vorliegt. Der Wirkungsquerschnitt für die Elektronen-Anregung, basierend auf den v. Regemorter-Formel [30], kann durch

$$\sigma_{if} = \frac{8\pi^2}{\sqrt{3}} a_0^2 f_{if} \frac{Ry^2}{E_{if} E_{kin}} G \left( \frac{E_{kin}}{E_{if}} \right), \quad (2.28)$$

angenähert werden [31]. Dabei ist  $a_0$  der klassische Elektronenbahnradius und  $Ry = 13,606$  eV die Rydberg-Energie. Für Oszillationsstärke  $f_{if}$  gilt:

$$f_{if} = \frac{\varepsilon_0 m_e (c \cdot h)^3}{2\pi e^2 E_{if}^2} A_{if} \frac{g_i}{g_f}, \quad (2.29)$$

## 2. Physikalischer Hintergrund

mit  $\varepsilon_0$  die Dielektrizitätskonstante,  $m_e$  die Elektronenmasse,  $c$  Lichtgeschwindigkeit im Vakuum,  $A_{if}$  die Emissionsraten des Übergangs und die Konfigurationsgewichte des Anfangs- und Endzustandes  $g_i$  bzw.  $g_f$ .  $G\left(\frac{E_{kin}}{E_{if}}\right)$  ist der Gaunt-Faktor. Dieser enthält relativistische und quantenmechanische Korrekturen für klassische Ausdrücke der kontinuierliche Übergängen und lautet in diesem Fall

$$G\left(\frac{E_{kin}}{E_{if}}\right) = 0,276 \cdot \ln\left(\frac{E_{kin}}{E_{if}}\right) - 0,18 \frac{\ln\left(\frac{E_{kin}}{E_{if}}\right)}{\left(\frac{E_{kin}}{E_{if}}\right)}. \quad (2.30)$$

Ähnlich wie für die Lotz-Formel bei der Elektron-Ionisation sind Diskrepanzen der experimentellen Ergebnisse, speziell bei hochgeladenen Ionen beobachtet worden.

### 2.2.3. Radiative Rekombination und Dielektronische Rekombination

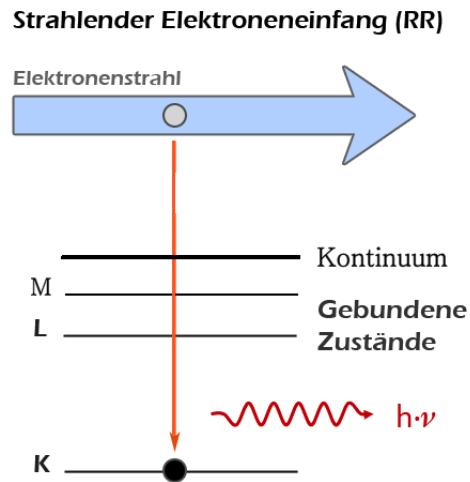
Die Radiative und Dielektronische Rekombination sind zeitinverse Prozesse des Photo- (2.4.1) und Auger-Effekts (2.1.5). Beide spielen bei der Wechselwirkung freier Elektronen mit Ionen eine bedeutende Rolle. Spezielle Kenntnisse über beide Vorgänge erlauben es, Aussagen über die Lebensdauer eines Strahls zu treffen. Sie sind auch die überwiegenden Prozesse in Plasmen, weswegen sie für die Astrophysik eine wichtige Analysemethode für die inneren Vorgänge darstellen. Für diese Arbeit spielen sie eine untergeordnete Rolle, da die gewünschten Übergänge hauptsächlich durch Elektronenanregung induziert werden, sollten aber der Vollständigkeit halber kurz erläutert werden. Für eine tiefere Auseinandersetzung sei auf die Literatur verwiesen [32, 33, 34]. Bei der Radiativen Rekombination wird ein Elektron von einem Ion eingefangen



Dabei wird ein Photon emittiert, das genau der Bindungsenergie  $E_{Bin}$  und der kinetischen Energie des Elektrons  $E_{kin}$  entspricht

$$h\nu = E_{kin} + E_{Bin}. \quad (2.32)$$

Der Wirkungsquerschnitt nimmt für langsamere Elektronen zu. Bei der Dielektronischen Rekombination (Zeitumkehrung des Auger-Prozesses) wird ein Elektron aus dem Kontinuum eingefangen und die Energie wird für die



**Abbildung 2.7.:** Grafische Darstellung der Radiativen Rekombination [27].

Anregung eines Elektrons im Ion aufgewendet:

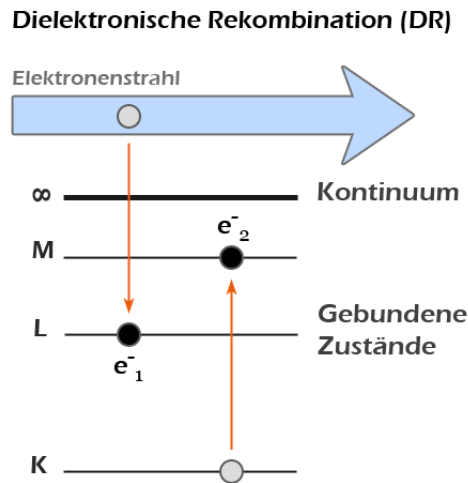


Das Ion wird um eine Ladungseinheit verringert, befindet sich in einem zweifach angeregten Zustand und kann durch weitere radiative wie nicht-radiative Vorgänge in den Grundzustand übergehen. Die freiwerdende Energie  $\Delta E_{DR}$  beim Einfang, wie bei der Radiativen Rekombination die Summe aus kinetischer Energie des eingefangenen Elektrons und der Bindungsenergie muss noch zusätzlich der Differenz des angeregten Elektrons entsprechen:

$$\Delta E_{DR} = E_{kin} + E_{Bin} = E_f - E_i, \quad (2.34)$$

wobei  $E_i$  den Anfangs- und  $E_f$  den angeregten Zustand bezeichnet. Deswegen wird die Dielektronische Rekombination auch als ein resonanter Vorgang bezeichnet und kann nicht bei wasserstoff-artigen Systemen auftreten, da ein zweites Elektron zur Resonanz fehlt. Für hochgeladene Ionen wie wir sie an dem ESR antreffen, sind aber auch die Radiative und Dielektronische Rekombination Gegenstand ausführlicher Untersuchungen [35, 36].

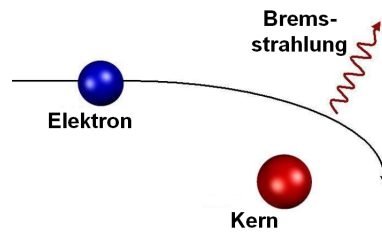
## 2. Physikalischer Hintergrund



**Abbildung 2.8.:** Bei der Dielektronischen Rekombination wird die freigewordene Energie durch Elektroneneinfang zur Anregung eines zweiten Elektrons genutzt [27].

### 2.3. Röntgenstrahlung

Mit der Entdeckung der „Röntgenstrahlung“ durch Conrad Wilhelm Röntgen 1895 wurde ein wichtiger Grundstein für das Verständnis und die weitere Untersuchung der Wechselwirkung von Materie und energiereicher elektromagnetischer Strahlung gelegt. Die Röntgenstrahlung liegt energetisch oberhalb von ultraviolettem Licht und unterhalb von Gammastrahlung. Dies entspricht grob einem Energiebereich von einigen hundert eV bis einige MeV. Der Unterschied zwischen Röntgen- und Gammastrahlung liegt nicht nur in ihrem Energiebereich, sondern auch in ihrem Entstehungsprozess. Beide sind zwar von Natur aus elektromagnetische Wellen, doch während die Röntgenstrahlung ein Resultat der Wechselwirkung energiereicher Elektronen bzw. radiativer atomarer Übergänge ist, wird die Gammastrahlung durch radiative Kernabregung emittiert. Ein Grund für die weite Verbreitung der Entdeckung Röntgens sind deren vielfältige Einsatzmöglichkeiten. Heute findet sie z.B. Anwendung in der Medizin (Computertomographie), Behandlung von Krebs (Strahlentherapie) oder Spektroskopie von Festkörpern, um nur einige zu nennen. Es folgt nun eine Unterscheidung zwischen Bremsstrahlung und charakteristischen Übergängen sowie einige Beispiele für die Produktion von Röntgenstrahlen.



**Abbildung 2.9.:** Produktion von Bremsstrahlung durch Beschleunigungsänderung des Elektrons durch einen positiven Kern

## Bremsstrahlung

Eine starke Beschleunigung oder Abbremsung von Ladungsträgern, insbesondere Elektronen, ruft Bremsstrahlung hervor. Dieser Effekt tritt bei zahlreichen physikalischen Prozessen auf und wird unter anderem in Röntgenröhren zur Produktion energiereicher elektromagnetischer Strahlung verwendet. Dabei werden die Elektronen zunächst beschleunigt und dann auf Metallplatten, wie z.B. Molybdän, geschossen. Im Targetmaterial werden die Elektronen im Coulombfeld der Atome abgelenkt. Gemäß der klassischen Elektrodynamik ruft jeder Beschleunigungsvorgang eine Aussendung von elektromagnetischen Strahlen hervor. Dabei kann maximal die gesamte kinetische Energie des Teilchens in Strahlung umgesetzt werden. Dieses Hochenergieende der Bremsstrahlung wird auch als SWL (short wavelength limit) bezeichnet. Dies bedeutet, dass die gesamte kinetische Energie eines Elektrons komplett abgebremst und durch ein Photon emittiert wird, daher der Name „Bremsstrahlung“.

$$E_{max} = eU = h \frac{1}{\lambda} \quad (2.35)$$

$$\implies \lambda_{min} = \frac{h}{eU} \quad (2.36)$$

d.h. die Grenzwellenlänge  $\lambda$  ist nur von der Beschleunigungsspannung  $U$  abhängig und unabhängig vom Anodenmaterial,  $e$  ist die elektrische Ladung. Werden die Elektronen durch Magnetfelder abgelenkt, beispielweise in Synchrotrons und Speicherringen, so wird die Strahlung Synchrotronstrahlen genannt. Im Falle der Röntgenröhre wird im Targetmaterial neben der kontinuierlichen Bremsstrahlung, auch charakteristische Röntgenübergänge emittiert.

## 2. Physikalischer Hintergrund

### Charakteristische Röntgenstrahlung

Gemäß des Bohrschen–Atommodells, bei der Elektronen den Atomkern in quantisierten Bahnen umkreisen, entsprechen die Sprünge zwischen den Bahnen einen bestimmten Energiebetrag. Charles Barkla konnte in seinen Experimenten zeigen, dass diese Übergänge immer einem bestimmten Element zuzuordnen waren [3]. Gemäß der Formel

$$E_{Anfang} - E_{Endzustand} = \Delta E = h\nu_{Photon} \quad (2.37)$$

$E_{Anfang}$ ,  $E_{Endzustand}$  sind die Energieniveaus beim Anfangs–bzw. Endzustand.  $\Delta E$  gibt die Energie des Röntgenphotons wieder. Dieser Prozess tritt auf, wenn die beschleunigten Elektronen genug Energie haben, um ein Loch in der Elektronenschale zu erzeugen (Ionisation). Das Atom ist dadurch in einem instabilen Zustand. Ein Elektron aus einer höheren Schale füllt das Loch auf und dabei wird ein Photon mit der charakteristischen Energie emittiert. Eine nähere Beschreibung der Elektronenkonfiguration der einfachsten atomaren Systeme wird in Abschnitt 2.1.1 erfolgen.

## 2.4. Wechselwirkung Photonen mit Materie

Die Wechselwirkungen von Photonen mit Materie für weiche Röntgenstrahlung ( $\sim$  keV Bereich) können im Wesentlichen durch zwei Prozesse beschrieben werden:

1. Photoeffekt
2. Streuung von Photonen an Materie (elastische und inelastische)

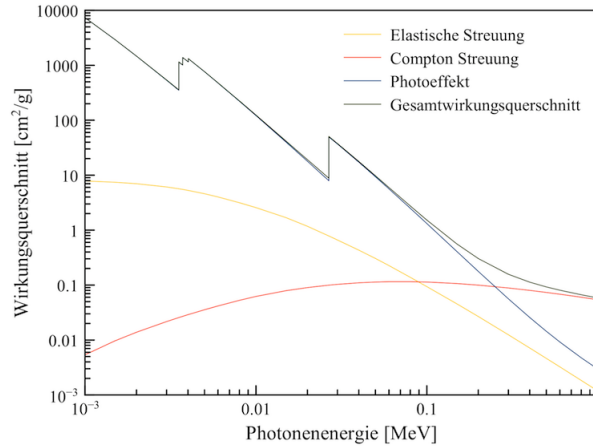
In dieser Arbeit werden Photonen im einstelligen keV Bereich detektiert. Daraus folgt, dass der Prozess der Paarbildung gar nicht zum Vorschein kommt. Aus Gründen der historischen Zusammenhänge wird auf die Comptonstreuung eingegangen, obwohl diese in der vorliegenden Arbeit keine signifikante Rolle einnimmt, siehe Abbildung 2.10.

### 2.4.1. Photoeffekt

Heinrich Hertz und Kollegen haben 1887/88 instantan einen elektrischen Anodenstrom gemessen, als sie eine Photokathode mit einer Lichtquelle bestrahlten. Sie stellten fest, dass erst oberhalb eines Schwellenwertes für die Frequenz des Lichtes ein Strom beobachtbar war. Unterhalb dieser Schwelle konnte selbst bei hoher Lichtintensität kein Stromfluß gemessen werden. Mit



## 2.4. Wechselwirkung Photonen mit Materie



**Abbildung 2.10.:** Wirkungsquerschnitt verschiedener Photonprozesse aufgetragen gegen die Energy in MeV doppellogarithmisch für Cadmium. Es ist deutlich zu erkennen, dass für weiche Röntgenstrahlen ( $10^{-3} - 10^{-2} \text{ MeV}$ ) der Photoelektrische Effekt dominant ist und Paarbildung gar keine Rolle spielt. Erst ab einer Energie von 200keV wird die Compton Streuung dominant [37].

dem Wellenmodell des Lichtes waren diese Ergebnisse nicht zu erklären. Erst 1905 konnte A. Einstein eine zufriedenstellende physikalische Erklärung in einem theoretischen Grundgerüst liefern. Ihm zufolge besteht das Licht aus Teilchen, den Photonen, mit der Energie [38]

$$E_{Ph} = h \frac{1}{\lambda} = h\nu. \quad (2.38)$$

Daraus folgt, dass die Energie des Photons nur von der charakteristischen Wellenlänge  $\lambda$  bzw. Frequenz  $\nu$  und dem Plankschen Wirkungsquantum  $h$  abhängt. Da für das Auslösen von Elektronen aus einem Festkörper eine bestimmte Mindestenergie erforderlich ist, folgt für den Photoeffekt eine entsprechende Mindestwellenlänge der Photonen. Diese Energieschwelle wird als Austrittsarbeit  $W_a$  bezeichnet, während die restliche Energie in die kinetische Energie des Elektrons  $E_{kin}$  geht:

$$E_{Ph} = E_{kin} - W_a. \quad (2.39)$$

Die Austrittsarbeit ist eine elementspezifische Größe und variiert mit den Bindungsenergien. Die Austrittsarbeit sind Werte für äußere Elektronen. Uns

## 2. Physikalischer Hintergrund

interessieren die Übergänge der untersten Schalen, welche im keV Bereich liegen. Der totale Wirkungsquerschnitt für eine Vakanz dort, lässt sich mit der von einer K-Schalen Vakanz approximieren:

$$\sigma_{tot} = \frac{16\sqrt{2}\pi}{3}\alpha^8 Z^5 \left(\frac{mc^2}{hv}\right)^{\frac{7}{2}} \quad (2.40)$$

Der Wirkungsquerschnitt hängt vom Element und der Photonenenergie ab [3]. Man sieht, dass für Kernladungszahl  $Z$  der Wirkungsquerschnitt mit einer Potenz von fünf einher geht und mit der Photonenenergie mit einer Potenz von 3,5 abnimmt. Daraus folgt die Dominanz des Photoeffekts für niedrige Energien bzw. für Elemente mit hoher Kernladungszahl. Für hohe Energien oder Elemente mit niedriger Kernladungszahl sind Streuprozesse, insbesondere die Compton-Streuung, dominant. Diese werden im folgenden Abschnitt dargestellt<sup>2</sup>.

### 2.4.2. Comptonstreuung

Wie im vorherigen Abschnitt erwähnt, hatte sich das Wellenmodell des Lichtes durchgesetzt und erst mit der theoretischen Arbeit Einsteins kam dieses Weltbild ernsthaft ins wanken. Das Wellenbild erklärte mit der sogenannten Thomson Streuung die elastischen Streuprozesse von Licht mit Materie. Doch geht man zu höheren Energien kommen ganz andere Phänomene zum Vorschein, z.B. die Comptonstreuung [39]. Neben dem Photoeffekt ist die Comptonstreuung ein weiteres Beispiel für die Teilchennatur des Lichtes. Diese stellt einen inelastischen Stoß von hochenergetischen Röntgenstrahlen an Materie dar. 1922 beobachtete Arthur Compton beim Beschuss eines Graphit Targets mit Licht der Wellenlänge  $\lambda_0$  unter verschiedenen Beobachtungswinkeln nicht nur Röntgenstrahlung mit der eingestrahnten Energien, sondern auch Photonen mit anderen Wellenlänge  $\lambda_1 > \lambda_0$ . Erstaunlicherweise war die Wellenverschiebung

$$\Delta\lambda = \lambda_1 - \lambda_0 \quad (2.41)$$

unabhängig vom eingestrahnten Licht und Targetmaterial. Klassisch konnten diese Ergebnisse nicht erklärt werden. Erst mit dem Postulat, dass das Licht Teilcheneigenschaft besitzt, war eine vernünftige Interpretation der experimentellen Daten möglich. Demnach handelt es sich um eine inelastische Streuung des Photons an einem Target. Das Photon mit  $\lambda_0$  wird an einem ruhendem

---

<sup>2</sup>Streng genommen kann der Photoeffekt auch als inelastische Streuung aufgefasst werden, bei dem das Photon seine gesamte Energie an das Elektron überträgt.

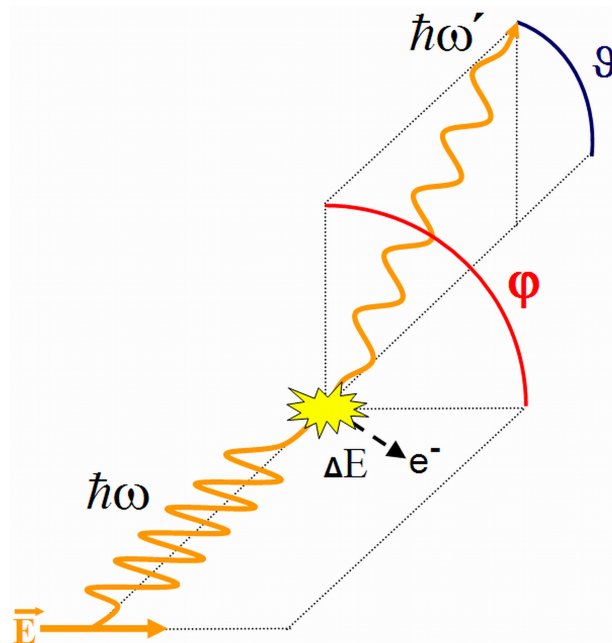


Abbildung 2.11.: Comptonstreuung an einem quasifreien Elektron

Elektron mit der Masse  $m_e$  gestreut. Es findet ein Energieübertrag auf das Elektron statt und gemäß Energie- und Impulserhaltung hat das gestreute Photon eine niedrige Energie und somit eine höhere Wellenlänge  $\lambda_1$ . Die Wellenverschiebung beträgt:

$$\Delta\lambda = \lambda_1 - \lambda_0 = 2\lambda_c \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right), \quad (2.42)$$

wobei  $\lambda_C$  die Comptonwellenlänge des Elektrons darstellt:

$$\lambda_c = \frac{h}{m_e c}. \quad (2.43)$$

Dies erklärt auch, warum die Energieverschiebung unabhängig von  $\lambda_0$  und dem Material ist, da sie lediglich von Konstanten sowie dem Streuwinkel abhängt. Der differentielle Wirkungsquerschnitt wird mit der Klein-Nishina-Formel

## 2. Physikalischer Hintergrund

ausgedrückt:<sup>3</sup>

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2} r_e^2 \left[ \left( \frac{1}{1 + \frac{E}{mc^2}(1 - \cos\theta)} \right) - \left( \frac{1}{1 + \frac{E}{mc^2}(1 - \cos\theta)} \right)^2 \sin^2\theta + \left( \frac{1}{1 + \frac{E}{mc^2}(1 - \cos\theta)} \right)^3 \right] \quad (2.44)$$

[40]. Für kleine Energien geht es in den Spezialfall der Thomson Streuung über.

### 2.4.3. Elastische Streuung von Röntgenstrahlung

Die Streuung von Photonen an Materie ist ein sehr interessantes Gebiet der Physik. Während einige Phänomene der elastische Streuung mittels des Wellenmodells des Lichtes (z.B. Bragg–Streuung, Interferenz) erklärbar waren, konnten einige Prozesse der inelastischen Streuung mit diesem nicht in Einklang gebracht werden. Im Rahmen der klassischen Physik konnten die Thomson– und Rayleigh Streuung noch mit dem Wellenbild des Lichtes erklärt werden, wohingegen die Comptonstreuung im inelastischen Fall die Teilchennatur des Photons offenbart <sup>4</sup>.

Die elastische Streuung von Photonen wird in zwei Prozesse unterschieden: die Thomson– und Rayleigh–Streuung.

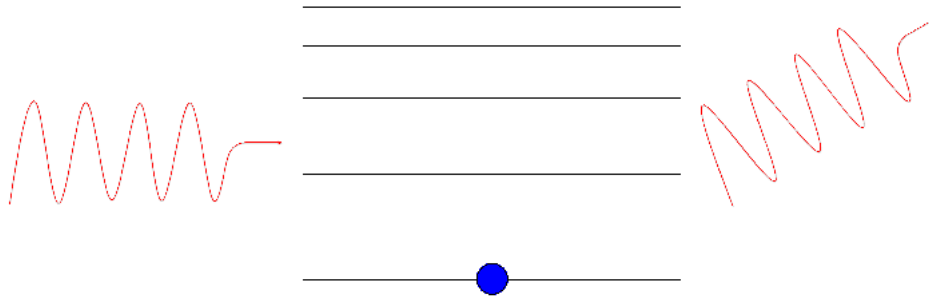
#### 2.4.3.1. Thomson–Streuung

Die Thomson–Streuung beschreibt die Wechselwirkung von Lichtwellen mit geladenen freien bzw. schwach gebundenen Elektronen. Gemäß der klassischen Theorie von J.J. Thomson forciert das oszillierende Feld der Lichtwelle mit der Frequenz  $\nu_{TH}$  das Elektron zur resonanten Vibrationen an. Dabei gibt das Elektron durch die Schwingungen ein elektromagnetische Welle mit derselben Frequenz  $\nu_{TH}$  ab. Für solche Systeme ist die eingestrahelte Wellenlänge  $\lambda_{TS}$  gleich der ausgestrahlten  $\lambda'_{TS}$ , da kein Energieübertrag auf das Elektron stattfindet, siehe Abbildung 2.12. Dies wiederum ist eine Konsequenz des kleineren Atomradius im Vergleich zu der Wellenlänge  $\lambda_{TS}$ . Im vorherigen

---

<sup>3</sup>Die Entdeckung der Comptonstreuung wäre ohne die Entwicklung des Kristallspektrometers nicht möglich gewesen. Zum damaligen Zeitpunkt existierten keine hochauflösende Detektoren, die die Energieänderung messen konnten. Erst mit dem Einsatz von Kristallspektrometern, also nach den bahnbrechenden Arbeiten von M. v. Laue und W. Bragg, konnte ein Nachweis für diesen physikalisch neuen Prozess geführt werden [3].

<sup>4</sup>Ein anderer Fall der inelastischen Streuung ist die Raman Streuung. Da dieser für diese Arbeit keine Rolle spielt, wird nicht näher darauf eingegangen, soll aber der Vollständigkeits halber erwähnt werden.



**Abbildung 2.12.:** Bei der elastischen Streuung werden die Photonen am System ohne Energieverluste gestreut.

Unterabschnitt 2.4.2 wurde erwähnt, dass die Thomson Streuung ein Spezialfall der Comptonstreuung für niederenergetische Photonen darstellt. Der totale Wirkungsquerschnitt lautet daher:

$$\sigma_{tot} = \frac{8\pi}{3} r_e^2, \quad (2.45)$$

wobei  $r_e$  der klassische Elektronenradius ist [3]. Dieses Modell behält seine Gültigkeit solange  $qr \ll 1$  gilt, wobei  $q$  der Impulsübertrag ist und  $r$  für schwach gebundene Elektronen mit mittleren Radien im Bereich des Bohrschen Elektronenbahnradius liegt [41]. Je nach Element kann sie bei einige keV liegen. Anzumerken ist, dass der Wirkungsquerschnitt nicht vom Planckschen Wirkungsquantum  $h$  abhängt und somit seinen klassischen Charakter unterstreicht. Für die Streuung an gebundenen Elektronen, z.B. an Atomen oder Molekülen wo  $qr \geq 1$  gilt, kann die Bindung der Elektronen nicht mehr vernachlässigt werden, so dass das Modell der Rayleigh–Streuung verwendet wird.

### 2.4.3.2. Rayleigh–Streuung

Die Rayleigh–Streuung beschreibt den klassischen Streuvorgang an Atomen und Molekülen, also dort, wo die Bindungsenergie des Elektrons nicht zu vernachlässigen ist. Im Oszillatormodell als Grenzfall niedriger Frequenzen im Vergleich zur Eigenfrequenz lautet der totale Wirkungsquerschnitt  $\sigma_{RS}$  [3]:

$$\sigma_{RS} = \sigma_{tot} \left( \frac{ma}{e^2} \right)^2 \omega^4, \quad (2.46)$$

## 2. Physikalischer Hintergrund

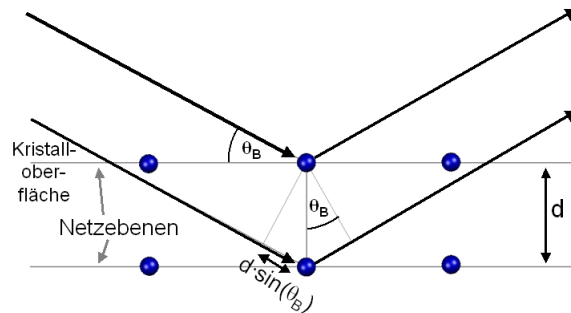
wobei  $e$  die Elementarladung,  $m$  Elektronenmasse,  $a$  die statische Dipolpolarisierbarkeit und  $\omega$  die Kreisfrequenz ist. Auch hier ist die Formel unabhängig vom Planckschen Wirkungsquantum und rückstoßfrei. Aufgrund der Abhängigkeit des totalen Wirkungsquerschnitts von der 4. Potenz der gestreuten Strahlen lässt sich das blaue Farbe des Himmels erklären, da blaues Licht eine höhere Frequenz hat als rotes. Elastische Streuung ist eine Grundvoraussetzung für ein Phänomen im nächsten Abschnitt.

### 2.4.3.3. Bragg–Streuung in Kristallen

Die Entdeckungen u.a. von Arthur Compton wären nicht möglich gewesen, ohne genaue Kenntnisse der spektralen Verteilung von Röntgenstrahlung zu haben. Die Grundlagen dazu lieferten vor allem Williams Henry Bragg und Williams Lawrence Bragg. Um Röntgenstrahlung untersuchen zu können, benötigt man einen Spalt in der Größenordnung der Wellenlängen, um Beugungseffekte beobachten zu können. Dies war mechanisch nicht zu realisieren. Doch Materialien mit kristallinen Strukturen, z.B. Kristalle, haben eine regelmäßige Anordnung der Atome, die sogenannten Gitternetzebenen, deren Abstände sich in dieser Größenordnung bewegen. Bei der Photonen–Kristall Wechselwirkung findet eine elastische Streuung der Photonen an den Netzebenen statt, siehe auch Abschnitt 2.4.3. Die Röntgenstrahlen werden unter dem sogenannten Winkel, Bragg–Winkel  $\theta_{Bragg}$  reflektiert. Die einzelnen Netzebenen wirken dabei wie halbdurchlässige Spiegel. Dabei gilt, wie bei einem Spiegel üblich: Einfallswinkel gleich Ausfallswinkel. Abschätzungen besagen, dass von einer Netzebene ca.  $10^{-3} - 10^{-5}$  der Strahlen reflektiert werden. D.h.  $10^3 - 10^5$  Netzebenen sind in einem perfekten Kristall bei der Reflexion involviert[42]. Um die Bragg–Reflexion zu beschreiben wird Abbildung 2.13 zur Hilfe genommen. Ein Schar von parallelen Netzebenen mit gleicher Abstand zueinander und Röntgenstrahlen die unter dem Winkel  $\theta$  auf dem Kristall auftreffen. Damit konstruktive Interferenz entstehen kann, muss der Wegunterschied ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge  $\lambda$  sein, dh.

$$n\lambda = 2d\sin\theta_{Bragg}, \quad (2.47)$$

wobei  $d$  den Gitterabstand und  $n$  die Beugungsordnung dartsellt. Die Bragg–Gleichung stellt somit eine Beziehung zwischen geometrischen Größen wie Gitterabstand  $d$ , Bragg Winkel  $\theta_{Bragg}$  und der Energie  $E$  bzw. Wellenlänge  $\lambda$  her [39].



**Abbildung 2.13.:** Konstruktive Reflexion an Netzebenen.

Dieses Phänomen lässt sich auch anhand des Wellenbildes beschreiben. Eine einfallende Welle regt das Elektron zu Schwingungen an. Diese stellen eine beschleunigte Bewegung dar und deshalb wird eine elektromagnetische Welle mit derselben Frequenz wie der Primärwelle abgegeben. Gilt dies für ein Schar von Gitterebenen, entsteht unter Einhaltung der Bragg Gleichung konstruktive Interferenz der von den Elektronen ausgesandten Wellen. Für nicht kristalline Materialien sind Reflexionen nicht beobachtbar, da die Wellen sich gegenseitig auslöschen, denn statistisch gibt es ein anderes Atom, dessen emittierte Welle mit der vorherigen um  $\pi$  verschoben ist. Die Intensität der Bragg Reflexion nimmt mit steigender Temperatur ab. Interessanterweise ist die Güte der Linie nicht betroffen sondern nur deren Intensität [43]. Der Grund liegt darin, dass bei steigender Temperatur der Anteil der elastischen Streuung geringer wird und der inelastische Anteil steigt. Formel kann es mit dem Debye–Waller–Faktor beschrieben werden [44].





# 3. Bragg–Spektroskopie

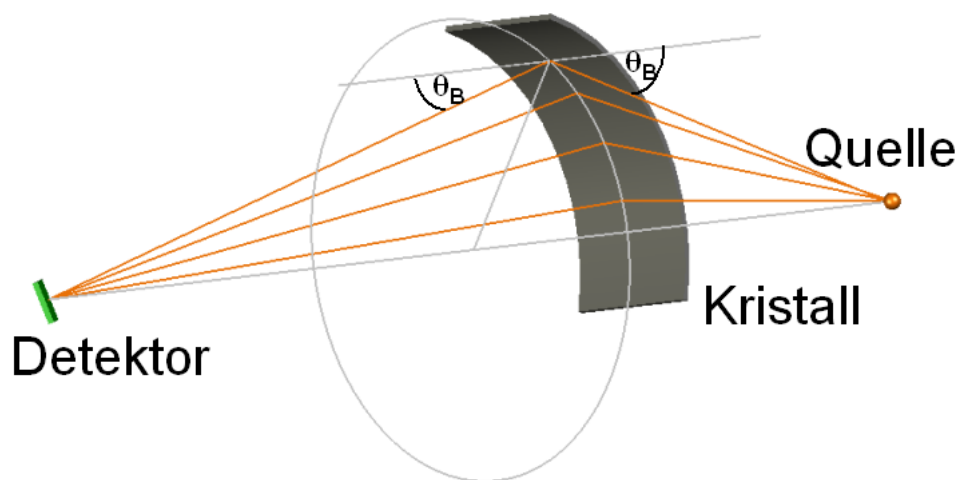
## 3.1. Kristallspektrometer

Den Grundstein zur Kristallspektroskopie legte 1912 Max von Laue durch seine Untersuchungen an Festkörpern mit kristallinen Strukturen. Aufgrund seines hervorragenden spektralen Auflösungsvermögens trug das Kristallspektrometer wesentlich zum Verständnis von atomaren Prozesse bei. Je nach Anwendung wurden verschiedene Spektrometertypen entwickelt. Grundsätzlich unterscheiden sich zwei Arten: bei der einen wird die Reflexion von Röntgenstrahlen detektiert, in der anderen Version die Transmission (Laue Geometrie). Beide beruhen auf der konstruktiven bzw. destruktiven Interferenz der im Kristall gestreuten Photonen, deren Bedingungen durch die Bragg–Gleichung (siehe Gl. 2.47 in Abschnitt 2.4.3.3) gegeben sind. Die Kristallspektroskopie ermöglicht statt einer direkten Energiemessung die Position der Linie zu messen. Diese ist charakteristisch vom Bragg–Winkel  $\theta_B$  abhängig und kann somit eindeutig einer Energie zugeordnet werden. Im Vergleich zu Halbleiter Detektoren, haben die Kristallspektrometer ein deutlich höheres Auflösungsvermögen. Analog zu dem Rayleigh–Kriterium für optische Unterscheidbarkeit von zwei Lichtquellen gelten in der Röntgenspektroskopie zwei Linien als aufgelöst, falls ihre Halbwertsbreiten  $\Delta\lambda$  nicht überlappen [45]. Je nachdem welcher Kristall und welche Geometrie verwendet wird, liegt das Auflösungsvermögen für  $\frac{\lambda}{\Delta\lambda}$  bei 1000 – 10000 (für eine genauere Darstellung siehe Abschnitt 3.2). Der Unterschied der Spektrometer liegt hauptsächlich im gewünschten Energiebereich. Für hohe Energien bietet sich Transmission der Strahlen durch den Kristall an, da so kleine Bragg–Winkel  $\theta_B$  realisiert werden können. Beispielweise wurde das FOCAL Spektrometer zur hochpräzisen Messung der  $1s$  Lamb–Verschiebung in wasserstoffähnlichen Systemen, in der Laue–Geometrie konstruiert, um die harte Röntgenstrahlung zu detektieren [11]. Die Netzebenen im Kristall stehen senkrecht zur Kristalloberfläche, um die Photonen beim Durchdringen abzulenken. Für den Fall der Reflexion existieren mehrere Spektrometertypen.

In allen Spektrometertypen, die die reflektierten Photonen detektieren, sind die Netzebenen parallel zur Kristalloberfläche ausgerichtet. Generell stellt die vergleichsweise geringe Effizienz von Kristallspektrometern eine

### 3. Bragg-Spektroskopie

große experimentelle Herausforderung dar, typische Effizienzen liegen bei  $10^{-7}$ . Um diese zu erhöhen werden gebogene Kristalle eingesetzt, die eine Fokussierung der Strahlen zur Folge haben. Im Vergleich zu ebenen Kristallen liegt die Ausbeute um mehr als das dreifache höher [46]. Je nachdem ob der Kristall eine zylindrische oder sphärische Krümmung aufweist, ist eine Fokussierung in der horizontalen Ebene möglich. Für die sphärische Krümmung erfolgt eine zusätzliche Fokussierung der Strahlen in der vertikalen Ebene. Der Nachteil ist die schwierige Herstellung von gebogenen Kristallen. Des Weiteren führt der Einsatz von diesen zu geometrischen Abberationen. Für die Johann-Geometrie wird in Abschnitt 3.3 die Fehler durch Verwendung gebogener Kristalle beschrieben. Die Breite des abgebildeten Spektralbereichs hängt vom Kristall, der Quelle und der Detektorgröße ab [47].



**Abbildung 3.1.:** Ein Spektrometer in Von-Hamos Anordnung. Die emittierte Photonen werden durch einen gebogenen Kristall vertikal auf einen Detektor fokussiert.

### 3.1.1. Van–Hamos–Geometrie

Abbildung 3.1 zeigt ein Spektrometer in der Von–Hamos–Geometrie. Hierbei kommt ein zylindrisch gebogener Kristall zum Einsatz. Die Krümmung des Kristalls ist in diesem Fall senkrecht zu seiner dispersiven Achse. Die Netzebenen sind parallel zur Oberfläche hin orientiert. Vom Kristall reflektierte Strahlen divergieren zwar in der horizontalen Ebene, konvergieren aber entlang der vertikalen Achse, wo sie vom Detektor registriert werden. Wegen der vertikalen Fokussierung der Strahlen wird der Van Hamos Spektrometer bevorzugt im Falle einer ausgedehnten Quelle eingesetzt [48].

### 3.1.2. Johann–Geometrie

In dieser Arbeit werden weiche Röntgenstrahlen mit einer Energie von ca. 3 keV gemessen. Hier bietet ein Kristallspektrometer in Johann–Geometrie die günstigste Anordnung (siehe Abbildung 3.2). Detektor, Kristall und Quelle liegen in einer Ebene, idealerweise auf dem so genannten Rowlandkreis, dessen Radius

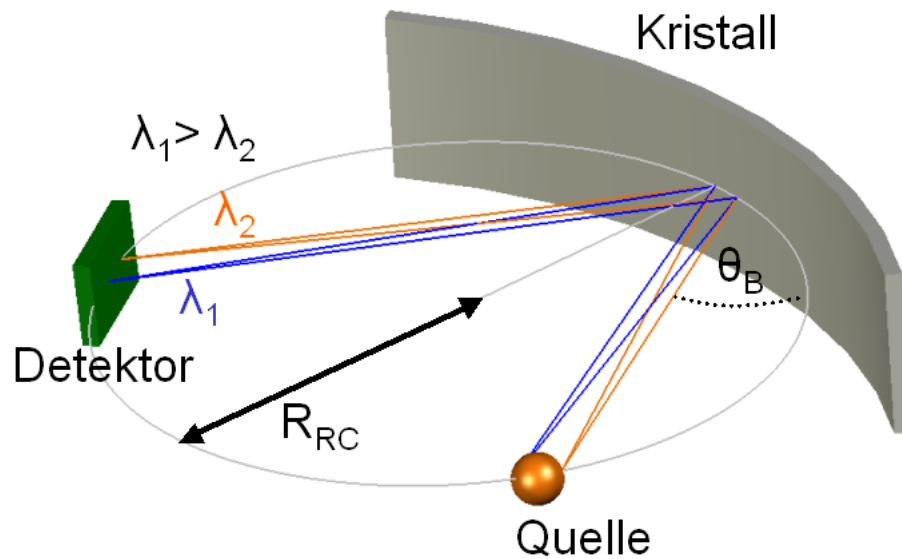
$$r_{RW} = \frac{1}{2}R_{Kristall} \quad (3.1)$$

der Hälfte des Krümmungsradius des Kristalls entspricht. Die Krümmung des Kristalls befindet sich entlang ihrer dispersiven Achse. Durch die Positionierung eines ortsempfindlichen Detektors auf dem Rowlandkreis, konvergieren die unter der Bragg–Bedingung gestreuten Strahlen in der Kristallebene, auf dem Detektor. Die Spektrallinien werden vertikal auf dem Detektor abgebildet. Detektor und Quelle sind idealerweise

$$s = \sin(\theta) \cdot R_{Kristall} \quad (3.2)$$

vom Kristall entfernt [46]. In diesem Fall wird die Bragg–Bedingung für den gesamten Kristall erfüllt und somit die Effizienz gegenüber einem Spektrometer mit einem flachen Kristall um ein Vielfaches erhöht wird. In dieser Anordnung ist der Detektor und die Röntgenquelle in einem fixen Winkel  $\nu$  angeordnet. Wie in Abschnitt 2.4.3.3 erklärt, wird die Bragg Bedingung auch erfüllt, falls der Einfallswinkel gegenüber dem Bragg–Winkel eine leichte Abweichung  $\Delta\theta$  aufweist (siehe Abschnitt 3.2). Für Energie außerhalb dieses Bereiches nicht detektiert. Der Spektrometer ist sehr winkel–und somit auch energieselektiv. Andererseits wird ein hohes Auflösungsvermögen gewährleistet, da der Einfallswinkel außerhalb des Bereiches destruktiv interferieren. Mit einer

### 3. Bragg-Spektroskopie



**Abbildung 3.2.:** Kristallspektrometer in Johann-Geometrie. Die Röntgenstrahlen werden von einem gebogenen Kristall (sphärisch oder zylindrisch) auf einen positionsempfindlichen Detektor hin fokussiert. Der Auftreffort am Detektor ist von der Wellenlänge der Strahlung abhängig. Bei der Johannsson-Geometrie werden noch die Kristallränder an dem Rowlandkreis angeschliffen

größeren Quellausdehnung bestünde die Möglichkeit, den spektralen Bereich zu erweitern. Eine nicht gewollte Konsequenz ist die Abnahme der Effizienz. Eine weitere Möglichkeit wäre, die Quelle innerhalb des Rowlandkreises zu positionieren, also den Abstand von der Quelle zum Kristall zu verkürzen. Durch die Position der Quelle innerhalb des Rowlandkreises erhöht sich der Raumwinkel und überkompensiert die abnehmende Kristalleffizienz. In dem im Rahmen dieser Arbeit realisierten Aufbau, liegt der Winkel des Spektrometers bei  $59,9^\circ$  und der abgedeckte Energiebereich ist ca. 30 eV groß.

#### 3.1.3. Johannsson-Geometrie

Eine Möglichkeit, den spektralen Bereich ohne Verlust sowie die Effizienz zu steigern, ist ein Spektrometer in der Johannsson-Geometrie. Ähnlich wie das Johann-Spektrometer wird der Kristall mit dem doppelten Krümmungsradius des Rowlandkreises  $2R_{RK}$  gebogen. Die Ränder des Kristalls werden an den Rowlandkreis geschliffen, so dass sie auf dem Rowlandkreis liegen [49]. Damit hat das Kristall eine zweifache Krümmung: die Ursprungskrümmung mit  $2R_{RK}$

und die Ränder mit einer Krümmung von  $R_{RK}$  [50]. Beides führt zur einen Akzeptanz eines größeren Bereichs von Streuwinkeln ohne Effizienzverluste und einer Vermeidung der durch die Johann Geometrie verursachten Fehler, wie die Johann-Verbreiterung (siehe Abschnitt 3.3.2.2). Leider sind solche Kristalle sehr schwer herzustellen.

## 3.2. Charakterisierung von Kristallen

Kristalle sind Festkörper, deren Atome in einer periodischen Gitterstruktur angeordnet sind. Die Abstände der Gitter sind sehr klein und eignen sich besonders gut zur Beugung von kurzwelliger Strahlung. Zur Beschreibung solcher Strukturen existieren Elementarzellen. Diese werden durch ihre Basisvektoren  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  aufgespannt, deren Beträge die jeweiligen Gitterkonstanten sind. Eine räumliche Sequenz der Elementarzellen in drei Dimensionen formt dann den Kristall. Die Gesamtheit der Elementarzellen heißt auch Bravais-Gitter. Im dreidimensionalen Raum lassen sich alle Kristallstrukturen mit 14 Bravais-Gittern beschreiben[42]. In unserem Fall des InSb Kristalls, handelt es sich um ein kubisch-flächenzentriertes Gitter. Das bedeutet, dass an jeder Ecke ein Atom sowie ein zusätzliches in der Mitte der Außenflächen angeordnet ist, siehe Abbildung 3.3. Im kubischen Fall haben die Basisvektoren jeweils die gleiche Länge.

Die Ausrichtung der Netzebenen sowie die Gitterkonstante des Kristalls werden mit dem Zahlentripel des Millersche Indizes  $\{hkl\}$  im reziproken Raum beschrieben. Der reziproke Raum wird durch die Basisvektoren  $\vec{d}, \vec{e}, \vec{f}$  aufgespannt und diese bilden den reziproken Gittervektor  $\vec{G}$ . Ein reziproker Gittervektor und ein Gittervektor des Bravais-Gitters  $\vec{K}$  haben die folgende Relation[42]:

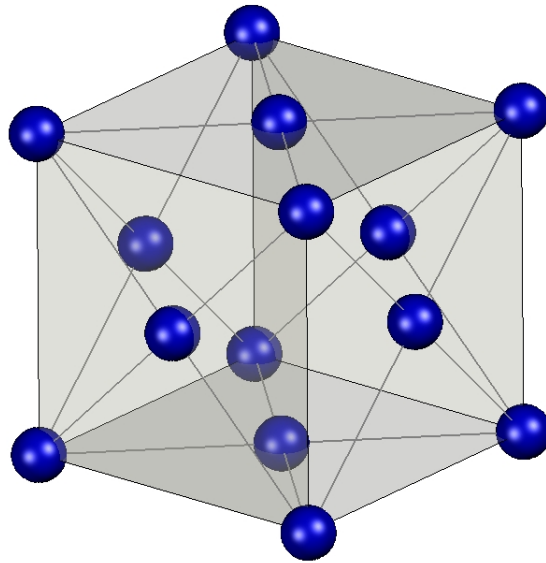
$$e^{i\vec{K}\vec{G}} = 1. \quad (3.3)$$

Daraus folgt, dass die reziproken Vektoren  $\vec{d}, \vec{e}, \vec{f}$  normierte Vektorprodukte der Basisvektoren  $\vec{a}, \vec{b}$  und  $\vec{c}$  sind. Der reziproke Gittervektor  $\vec{G}$  steht senkrecht zur Netzebene und setzt sich zusammen aus dem reziproken Basisvektoren und den Millerschen Indizes [42]:

$$\vec{G} = h\vec{d} + k\vec{e} + l\vec{f}. \quad (3.4)$$

Im allgemeinen Fall ist der Netzebenenabstand  $d(hkl)$  von dem reziproken

### 3. Bragg-Spektroskopie



**Abbildung 3.3.:** Ein Beispiel für ein kubisch flächenzentriertes Kristallsystem. An jeder Ecke sitzt ein Atom sowie zusätzlich eines in der Mitte.

Gittervektor wie folgt abhängig:

$$d(hkl) = \frac{2\pi}{\mathbf{G}},$$

für ein kubisches Kristallsystem vereinfacht sich die Formel zu [42]

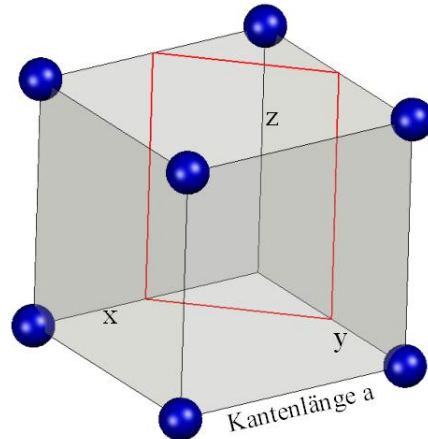
$$d^2 = \frac{\mathbf{a}}{h^2 + k^2 + l^2}, \quad (3.5)$$

wobei  $\mathbf{a}$  die Gitterkonstante der Elementarzelle ist.

Der verwendete Kristall ist ein InSb 220 (Indiumantimonid) und hat einen Netzebenenabstand von  $2d = 4,58092\text{\AA}$  bei einer Temperatur von  $23^\circ\text{C}$ . Abbildung 3.4 gibt die Netzebene des Kristalls grafisch wieder.

Für die Charakterisierung der spektroskopischen Eigenschaften eines Kristalls ist die sogenannte Rocking-Kurve hilfreich. Diese beschreibt die Intensität des Reflexes des Kristalls wieder. Jeder Kristall besteht nicht aus idealen Netzebenen sondern aus kleinen Mosaikblöcken, die zueinander keine perfekte Anordnung haben, sondern leicht verkippt und versetzt sind. Durch diese Aneinanderreihung verschiedener Mosaikblöcke sind die Netzebenen des Kristalls nicht exakt parallel zueinander [51]. Die Rocking-Kurve erlaubt dann Rückschlüsse auf die Güte des Kristalls, sprich die Parallelität der Netzebenen

### 3.3. Eigenschaften des Johann-Spektrometers



**Abbildung 3.4.:** Ansicht der Netzebenen für die Millerschen Indizes  $h = 2$ ,  $k = 2$  und  $l = 0$ .

sowie die Akzeptanz für nicht gemäß dem idealen Bragg-Winkel einfallende Strahlung. Eine Methode diese zu bestimmen, ist ein Detektor unter dem fixen Winkel  $\theta_B$  zu positionieren und die Intensität der Reflexion um den Bragg-Winkel rotierendes Kristall zu beobachten. Die Halbwertsbreite  $\omega_f$  der Rocking-Kurve (auch Darwinbreite genannt) gibt dann wiederum an, wie hoch das relative Auflösungsvermögen des Kristalls und auch wie groß der Toleranzbereich ist.

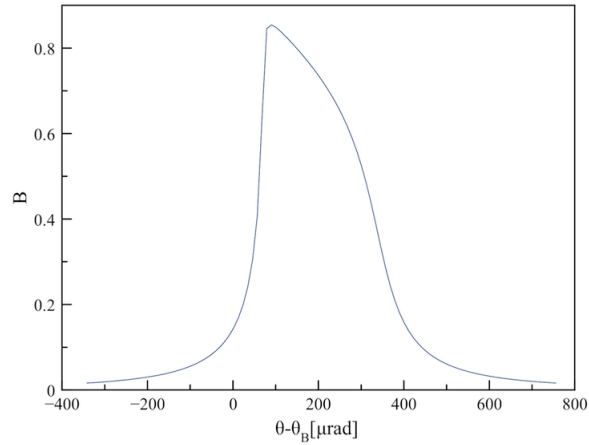
$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{\Delta \theta_B}{\tan \theta_B} = \frac{\omega_f}{\tan \theta_B}. \quad (3.6)$$

Eine breitere Kurve hat ein niedrigeres Auflösungsvermögen zur Folge aber dafür ist die Winkeltoleranz größer. Unser Kristall hat ohne Fehler eine Halbwertsbreite von  $230 \mu\text{rad}$  [52]. In Abbildung 3.5 ist die Rocking-Kurve eines perfekten InSb (220) mit XOP simuliert worden [53].

### 3.3. Eigenschaften des Johann-Spektrometers

In diesem Abschnitt soll auf die allgemeinen Charakteristiken des Johann-Spektrometers eingegangen werden. Im ersten Teil werden Einflüsse auf das Auflösungsvermögen beschrieben und im zweiten die Komponenten der Abberationen der Johann-Geometrie.

### 3. Bragg-Spektroskopie



**Abbildung 3.5.:** Die Rocking-Kurve von InSb (220) bei einer Energie von 3.130 keV, simuliert mit XOP von ESRF[53].

#### 3.3.1. Einflüsse auf das Auflösungsvermögen

Das Auflösungsvermögen des Spektrometers hängt nicht nur von der Güte des Kristalls ab. Im Gegensatz zu einem flachen Kristall haben auch die endliche Größen des Kristalls und der Quelle einen Einfluss darauf. Zusammenfassend ist der Ausdruck für die Auflösung gegeben durch:

$$\frac{\Delta E}{E} = \left(\frac{\Delta E}{E}\right)_{Kri-int} + \left(\frac{\Delta E}{E}\right)_{Kri-Breite} + \left(\frac{\Delta E}{E}\right)_{Kri-Höhe} + \left(\frac{\Delta E}{E}\right)_{Que-Höhe} \quad (3.7)$$

Die einzelnen Terme haben dabei folgende Bedeutung:

$$\left(\frac{\Delta E}{E}\right)_{Kri-int} = \frac{\omega_f}{\tan\theta_B},$$

ist der Term, der nur von der Güte des Kristalls abhängig ist.  $\omega_f$  ist die Halbwertsbreite der Rocking Kurve, siehe Abschnitt 3.2.

$$\left(\frac{\Delta E}{E}\right)_{Kri-Breite} = \frac{b^2}{8R^2} \frac{1}{\tan^2\theta_B},$$

diese Gleichung beschreibt den Einfluss der horizontalen Ausdehnung  $b$  des Kristalls auf die Auflösung. Die Höhe des Kristalls trägt durch folgende Relation



### 3.3. Eigenschaften des Johann-Spektrometers

$$\left(\frac{\Delta E}{E}\right)_{\text{Kri-Höhe}} = \frac{a^4}{64R^4} \frac{1}{\tan^3\theta_B},$$

zur Auflösung bei. Wie zu sehen, ist dieser Betrag für einen großen Krümmungsradius sehr klein. Und der letzte Term hängt von der vertikalen Ausdehnung  $y$  der Quelle ab:

$$\left(\frac{\Delta E}{E}\right)_{\text{Que-Höhe}} = \frac{y^2}{4R^2 \sin 2\theta_B}.$$

### 3.3.2. Abberationen und Korrekturen des Spektrometers

#### 3.3.2.1. Brechung im Kristall

Eine nicht vernachlässigbare Korrektur ist die im Kristall hervorgerufene Brechung. Mit dem Eindringen ins dichtere Material ändert sich auch die Phasengeschwindigkeit der Röntgenstrahlen. Innerhalb des Kristalls findet eine Änderung der Wellenlänge  $\lambda$  zu  $\lambda'$  statt und entsprechend auch eine für den Bragg Winkel  $\theta$  zu  $\theta'$  (siehe Abbildung 3.6). Dementsprechend muss die Bragg-Gleichung modifiziert und der Brechungsindex mitbeachtet werden [54]. Dadurch lautet die Bragg-Gleichung:

$$n\lambda' = 2d \cdot \sin\theta', \quad (3.8)$$

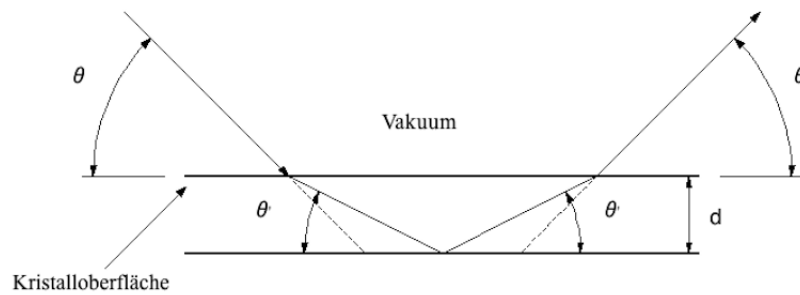
wobei  $\lambda'$  über folgende Relation mit dem Brechungsindex  $n_B$  und  $\lambda$  verbunden ist:

$$n_B = \frac{\lambda}{\lambda'} = \frac{\cos\theta}{\cos\theta'} = 1 - \delta, \quad (3.9)$$

wobei  $\delta$  die Verringerung des Brechungsindexes ist. Für weiche Röntgenstrahlen liegt  $\delta$  in der Größenordnung von  $10^{-6}$  [55]. Durch Einsetzen des neuen Ausdruckes aus dem Brechungsindex  $n_B$  lautet die modifizierte Bragg-Gleichung:

$$n\lambda = 2d \sin\theta \sqrt{1 - \frac{2\delta - \delta^2}{\sin^2\theta}} \quad (3.10)$$

### 3. Bragg-Spektroskopie



**Abbildung 3.6.:** Modifizierter Bragg Winkel. Unter dem Winkel  $\theta$  einfallende Strahlen werden gebrochen und nehmen den neuen Winkel  $\theta'$  ein.

#### 3.3.2.2. Johann-Verbreiterung

Eine typische Fehlerquelle des Johann-Spektrometers ist die Johann-Verbreiterung. Die Ursache liegt darin, dass der Radius des Rowlandkreises den auf einen  $2R$  gebogenen Kristall nur in der Mitte tangiert. Die Ränder liegen nicht auf dem Kreis. D.h. die Strahlen, die nicht in der Mitte reflektiert werden, werden unter einem leicht anderen Winkel reflektiert und zu kürzeren Wellenlänge hin verschoben [56]. Eine Verbreiterung der Linienform ist die Folge. Eine weitere Konsequenz ist eine leichte Asymmetrie der Linienform und eine kleine Änderung der Bragg-Winkel (siehe Abbildung 3.7). Die Johann-Verbreiterung auf dem ortsempfindlichen Detektor  $z$  hängt von der horizontalen Ausdehnung  $b$  des Kristalls und seinem Krümmungsradius  $R$  ab [46]:

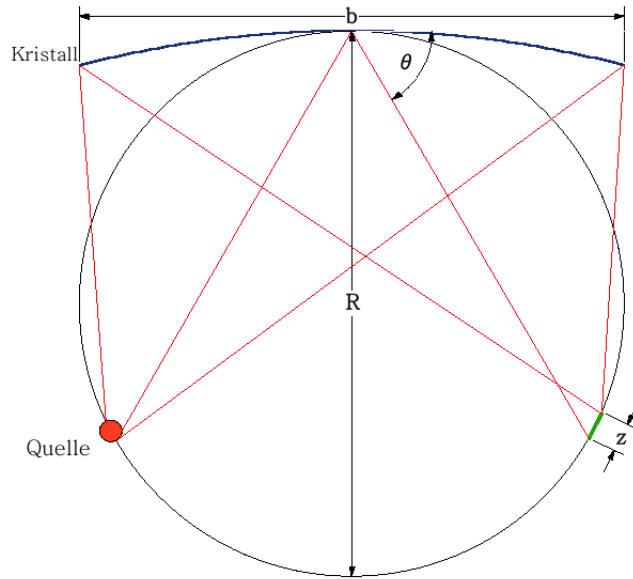
$$z = \frac{b^2}{8R} \cot \theta_B. \quad (3.11)$$

Für diese Arbeit spielt die Johann-Verbreiterung keine signifikante Rolle, da die Kristallbreite sehr klein und der Krümmungsradius vergleichsweise groß ist. Eine Rechnung ergibt für einen Bragg-Winkel von  $59,9^\circ$  eine Verbreiterung von  $\sim 0,023$  mm, also ungefähr einen Pixel.

#### 3.3.2.3. Eindringtiefe

Eine weitere Korrektur ist der mittleren Eindringtiefe der Strahlung im Kristall geschuldet. Der mittlere Einfallswinkel an der Oberfläche ändert sich leicht im Vergleich zum Bragg-Winkel an der Beugungsebene. Die Winkelverschiebung  $\Delta\theta_{ET}$  ist abhängig von der mittleren Penetrationstiefe  $c$ . Die Energie der

### 3.3. Eigenschaften des Johann-Spektrometers



**Abbildung 3.7.:** Die Johann-Verbreiterung in graphischer Darstellung. Die Strahlen werden an den Rändern mit einem leicht anderen Winkel als dem Bragg Winkel  $\theta$  reflektiert. Dies führt neben einer Asymmetrie zu einer Verbreiterung  $z$  der Linie.

Röntgenstrahlen bestimmt wie groß die Eindringtiefe ist [57]:

$$\Delta\theta_{ET} \approx \frac{c(E)}{R} \cot\theta_B. \quad (3.12)$$

Für die vorliegende Messung ist dieser Fehler vernachlässigbar, da in diesem Fall im niedrigen keV Bereich operiert wird und der Kristall einen großen Krümmungsradius aufweist.

#### 3.3.2.4. Korrektur durch Biegung des Kristalls

Die Biegung des Kristalls ruft eine leichte Verformung der Gitterkonstanten  $d$  hervor. Auf der Rückseite des Kristalls erhöht sich dadurch leicht der Abstand zu der Netzebene, in der Mitte bleibt es beim Ursprungszustand und an der Vorderseite nimmt der Abstand leicht ab. Die relative Abweichung beträgt [58]:

$$\frac{\Delta d}{d} = -\frac{2v}{1-v} \frac{z(E) - \xi}{R}, \quad (3.13)$$

### 3. Bragg-Spektroskopie

wobei  $\nu$  das Poisson-Verhältnis des Kristall Materials ist,  $z(E)$  ist die Absorptionslänge bei der Energie,  $\xi$  ist die Abweichung des Netzebenenabstandes von der Ursprungswert und  $R$  der Krümmungsradius. Diese Gleichung gilt für den speziellen Fall eines reinen Materials. Für ein Material mit mehreren Elementen muss ein komplexer Faktor hinzugefügt werden. Für eine detaillierte Erläuterung sei auf die Literatur verwiesen ([55, 58]). Die Winkelverschiebung  $\Delta\theta_{BK}$  beträgt:

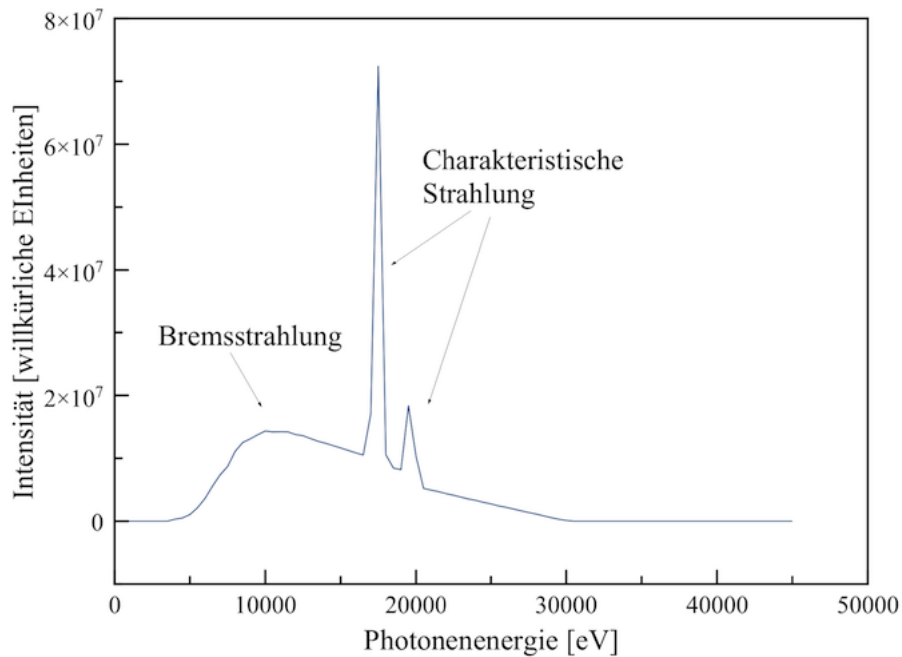
$$\Delta\theta_{BK} = \frac{\Delta d}{d} \tan\theta_B. \quad (3.14)$$

## 3.4. Röntgenröhre

Um die Ortsinformation der Röntgenreflexe auf dem positionsempfindlichen Detektor in Energieinformationen zu übersetzen, wurden zur Kalibration und zum Test des Spektrometernaufbaus gut bekannte Röntgenübergänge als Referenz genutzt. Es wurde eine Röntgenröhre der Firma IS (Ital Structures) eingesetzt, um das Referenzmaterial zur Fluoreszenz anzuregen. Von der Kathode werden durch Aufheizen Elektronen emittiert, die mittels einer angelegten Spannung zur Anode hin beschleunigt werden. Beim Eindringen in das Targetmaterial, in diesem Fall Molybdän (siehe Abbildung 3.8), werden Bremsstrahlung und charakteristische Übergänge erzeugt. Die Röntgenröhre verfügt über einen eigenen Shutter, um die Emission der Röntgenstrahlen manuell zu steuern und ist mit einem Beryllium Fenster vakuumdicht verschlossen. Um einer Überhitzung vorzubeugen wird die Wärme der Röntgenröhre mit einem Wasserkühler abgeführt.

## 3.5. CCD-Kamera

Zur Detektion der reflektierten Röntgenstrahlen wird eine CCD-Kamera (Charged Coupled Device) verwendet. In diesem Fall handelt es sich um eine Kamera der Firma Andor, Typ DO420 BR-DD mit einer back illuminated CCD-Chip und einer Detektionsfläche von 1024 x 255 Pixel aus Silizium mit einer Pixelgröße von 26 x 26  $\mu\text{m}$ . Die Kamera ist für den Vakuumbetrieb ausgelegt und kann über einen CF100-Flansch an einem Hochvakuumaufbau angeschlossen werden. Sie verfügt über Energie- sowie Ortsauflösung. Der detektierbare Energiebereich liegt zwischen 1 und ca. 10 keV. Die rückseitige Belichtung des Chips hat den Vorteil, dass lichtabsorbierende Auslesestrukturen die einfallenden Photonen nicht abschwächen und führen somit zu einer Erhöhung

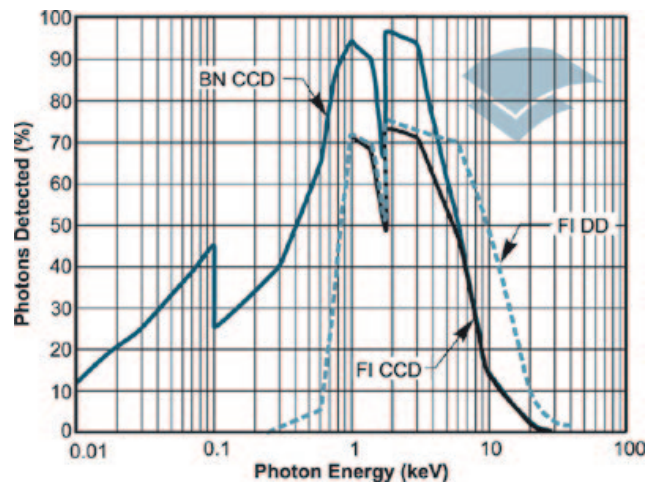


**Abbildung 3.8.:** Ein mit dem Programm XOP von ESRF [53] simuliertes Röntgenspektrum von Molybdän als Anodenmaterial bei einer Beschleunigungsspannung von 30 keV. Die Intensität ist gegen die Photonenergie aufgetragen. Neben der Bremsstrahlung sind die charakteristischen Übergänge zu erkennen.



**Abbildung 3.9.:** CCD-Kamera der Firma Andor, Typ DO420 BR-DD mit einer Matrix von 1024 x 255 Pixel. Die Kamera wird unter Vakuum betrieben und über einen CF100-Flansch angeschlossen [59].

### 3. Bragg-Spektroskopie



**Abbildung 3.10.:** Eine Intensitätskurve über die Quanteneffizienz verschiedener CCD-Kameras der Firma Andor. Wir verwenden die BN CCD. Für weiche Röntgen hat sie die beste Nachweiswahrscheinlichkeit. BD und FI stehen für back illuminated bzw. front illuminated [59].

der Lichtausbeute im Bereich von weicher Röntgenstrahlung (Quanteneffizienz) und einer längeren Lebensdauer, siehe auch Abb. 3.10 [59]. Jeder Pixel auf dem Siliziumchip ist mit einem dünnen elektrischen Isolator beschichtet. Darauf wiederum befinden sich Elektroden. Gemäß dem Bändermodell zur Erklärung elektrischer Leitfähigkeit verhalten sich die Halbleiter wie einzelne Photodioden. Bei Anlegung einer Spannung bildet sich unter dem Isolator eine Verarmungszone (Depletion Region). Daraus folgt eine Minimierung der Elektronenkonzentration im Leitungsband. Die Absorption von Photonen löst in der Verarmungszone einen inneren photoelektrischen Effekt aus, wodurch die Elektronen genug Energie haben, um die Bandlücke zu überspringen und vom Valenzband ins Leitungsband gehoben zu werden. Dadurch bilden sich Elektron-Loch-Paare, die sich im Leitungsband frei bewegen können. Die mittlere Anzahl der Elektronen bzw. positiven Löcher ist proportional zur eingestrahnten Photonenenergie. Für diese CCD-Kamera entspricht ein Elektron ca. 3,65 eV. Vor der Auslese werden die Elektronen innerhalb der Aufnahmezeit in einem Potentialtopf gesammelt. Beim Auslesen werden die Elektronen ähnlich wie eine Eimerkette über einen Schieberegister zu einem Verstärker transportiert und ausgelesen. Bei einer zu langen Belichtungszeit kann eine Sättigung des Ladungspools erreicht werden und überschüssige Elektronen zu ihren Nachbarn diffundieren und zu einer Verschmierung der Energieinformation führen. Um diesem als Blooming bezeichneten Effekt entgegenzuwirken, ist

die verwendete CCD-Kamera im Vergleich zu herkömmlichen Modellen mit einem leistungsfähigeren Potentialtopf ausgestattet.

#### 3.5.1. Rauschen

Neben der statistischen Schwankung der Zahl der von einfallenden Photonen freigesetzten Elektron-Loch-Paare sind davon unabhängige Untergrundergreignisse zu beobachten. Letztere werden unter Rauschen zusammengefasst. Das Untergrundsignal wird hauptsächlich durch die Produktion von freien Ladungsträgern in der Verarmungszone hervorgerufen, ohne dass ein innerer Photoeffekt durch einfallende Röntgenstrahlen verursacht wurde. Die Gründe dafür liegen zum einen beim thermischen Rauschen, dessen Ursprung in der Brownsche Bewegung der Siliziumatome liegt, zum anderen kann auch das Rauschen der Ausleseelektronik ein Signal anzeigen, das durch die Verstärkung der Umwandlung von Photoelektronen in ein Spannungssignal ausgelöst wird [59, 60]. Bei der zweiten genannten Ursache ist nicht immer eine Minimierungsmöglichkeit gegeben. Für den Fall einer schwachen Quelle kann die Auslesezeit vergrößert werden. Dies führt zur einer Mittelung des elektronischen Rauschens. Eine größere Anzahl von Aufnahmen kann daher den Einfluss der statistischen Schwankungen reduzieren. Um das thermische Rauschen zu minimieren ist eine Kühlung der CCD notwendig. Durch die thermische Bewegung der Siliziumatome wird genug Energie aufgebracht, um die Elektronen in das Leitungsband zu heben. Die Folge ist, dass ein Signal ausgelesen wird, der sogenannte Dunkelstrom. Wie groß dieser ist, hängt von der Temperatur der CCD und der Aufnahme- bzw. Integrationszeit ab [61].

#### 3.5.2. Vakuum und Kühlung

Die Kühlung der CCD führt zu einem niedrigeren Dunkelstrom und somit zu einer präziseren Energiebestimmung der aufgenommenen Röntgenstrahlen. Die CCD wird über ein Peltierelement gekühlt. Das Prinzip beruht darauf, dass bei einem Stromdurchfluss von einem Material in ein anderes ein Wärmetransport vonstattengeht. Die Wärme kann entweder über den eigenen Lüfter per Luft abgeführt werden oder über Flüssigkühlung, beispielsweise demineralisiertes Wasser oder flüssiger Stickstoff. Für den Laboraufbau wurde die Wärme über die Luft abtransportiert. Die Kühlung mit Wasser bietet den Vorteil, die Temperatur bis zu 10 % stärker zu reduzieren als mit Luft. Mit flüssigem Stickstoff ist es sogar möglich, die Dunkelrate drastisch zu reduzieren, von 1400 elektronen pro Minute bei  $-60^{\circ}\text{C}$  (Luft- oder Wasser gekühlt) auf unter 5 bei  $-120^{\circ}\text{C}$ . Leider hat die Verwendung von flüssigem Stickstoff einen überpro-

### 3. Bragg-Spektroskopie

portionalen Aufwand zur Folge und ist mit Sicherheitsrisiken verbunden [59]. Der CCD-Chip ist die kälteste Stelle im Aufbau, sodass sich darauf Restgas oder Wasser absetzen und festfrieren kann, was eine Schädigung der CCD zur Folge hätte. Damit das bei der Kühlung nicht passiert, muss der Aufbau unter Hochvakuum stehen. Um dieses zu erreichen, werden zwei Pumpen eingesetzt. Mit der ölfreien Scroll-Pumpe der Firma Edwards ist ein Druck von bis zu  $10^{-3}$  mbar möglich (Typ BOC EDWARDS XDS10 [62]). Nachdem so der Feinvakuumbereich erreicht wurde, wird eine Turbomolekularpumpe der Firma EBARA CORPORATION dazugeschaltet [63]. Der Betriebsdruck des Kristallspektrometers liegt dann bei einem Druck von  $10^{-6}$  mbar.

## 3.6. Referenzlinien

Als Referenz dienen die  $L\alpha_1$  und  $L\alpha_2$  Übergänge von Cadmium ( $\text{Cd}_{48}$ ) in 1. Ordnung und von Terbium ( $\text{Tb}_{65}$ ) in 2. Ordnung, die Energien liegen für Cadmium bei 3133,755 eV und 3126,950 eV bzw. 6272,82 eV und 6238,10 eV [64].

### Cadmium

Cadmium (Cd mit Ordnungszahl 48) gehört zu den Übergangsmetallen. Diese zeichnen sich durch eine Zunahme der Elektronen im d-Orbital aus. Die Elektronenkonfiguration von Cadmium ist  $[\text{Kr}] 4d^{10}5s^2$ , das heißt Cadmium hat eine voll besetzte d-Schale und ähnelt eigentlich den Erdalkalimetallen. Wie Zink hat auch Cadmium ein voll besetztes s-Orbital in der nächsthöheren Schale. Es ist für den Menschen ein sehr giftiges Material und sollte mit großer Vorsicht behandelt werden. Besonders sollte eine zu starke Erhitzung des Metalls vermieden werden, da Cadmiumrauch große Schäden in den Lungen anrichten kann. Die  $L\alpha_{1,2}$  Übergänge von Cadmium liegen in dem Bereich der Helium-ähnlichen Argon und wird als Referenz eingesetzt. Cadmium wird mit Hilfe einer Röntgenröhre zur Fluoreszenz angeregt. Für die Referenz ist eine Vakanz in der L-Schale vonnöten.

### Terbium

Terbium (Tb mit Ordnungszahl 65) gehört zu den Metallen der seltenen Erden. Diese zeichnen sich in Festkörpern durch ein diskretes Energiespektrum auf. Die Elektronenkonfiguration von Terbium ist  $[\text{Xe}] 4f^96s^2$ . Ähnlich wie Cadmium hat Terbium die äußerste Schale mit zwei Elektronen im s-Orbital



Übergang	Energie[eV]	Bragg-Winkel $\theta_B$ [deg]
Cadmium $L\alpha_1$	3133,755	59,74°
Cadmium $L\alpha_2$	3126,950	59,96°
Terbium $L\alpha_1$	6272,82	59,66°
Terbium $L\alpha_2$	6238,10	60,21°

**Tabelle 3.1.:** Die Übergangsenergien korrespondieren zu ihrem Bragg-Winkel für das InSb (220) Kristall mit einer korrigierten Gitterkonstante  $2d = 4,58092\text{Å}$  3.3.2. Die Winkel wurden ab der zweiten Nachkommastelle gerundet. Die Energiewerte wurden aus [64] entnommen.

besetzt, während die vorherige Schale nicht voll besetzt ist, da das höhere Niveau energetisch günstiger liegt. Zwar ist die  $5s^2$  und  $5p^6$  komplett, aber die d und f Schalen sind frei, auch die Schale  $4f^9$  ist nicht ganz voll. Der Grund liegt wahrscheinlich darin, dass die  $4f$  Schale hauptsächlich zu den optischen Übergängen beiträgt. Die  $L\alpha_{1,2}$ -Übergänge von Terbium liegen in der zweiten Ordnung im spektralen Bereich wie die  $K\alpha_{1,2}$ -Übergänge von He-Argon. Für den Übergang ist eine Vakanz in der L-Schale nötig.



## 4. Charakterisierung des Spektrometers

### 4.1. Röntgenreferenz von Terbium und Cadmium

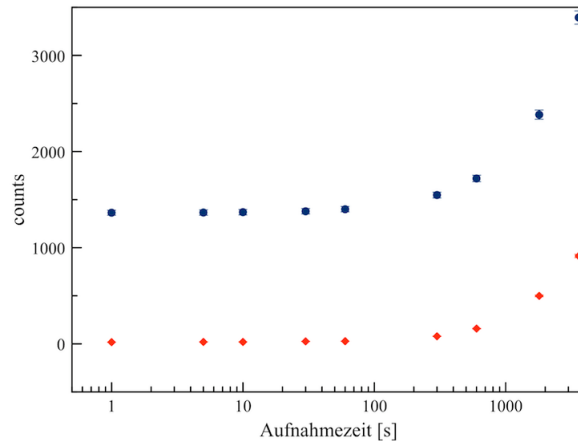
Die als Referenz dienenden Elemente Cadmium und Terbium wurden mit der Bremsstrahlung einer Röntgenröhre zur Fluoreszenz angeregt. Die positionsempfindliche CCD-Kamera detektiert die reflektierten charakteristischen Übergänge unter den jeweiligen Bragg-Winkeln. Die CCD-Kamera verfügt über mehrere Aufnahmemoden:

- Single Scan
- Accumulated Series
- Kinetic Series

Beim Single Scan wird gemäß der Aufnahmezeit die CCD belichtet und ausgelesen. Bei der Accumulated Series gibt es eine Option, die Aufnahmezeit zu verkürzen, indem am Ende die Einzelbilder (frames) aufsummiert werden. Die Kinetic Series erweitert die bisherigen Funktionen um die Option, beliebige Zahl von Einzelbildern aufzunehmen und einzeln auszulesen. Eine Möglichkeit das Rauschen zu korrigieren, ist das sogenannte Dunkelbild aufzunehmen und dieses dann jeweils von den spätere Messungen abzuziehen. Ein Dunkelbild ist eine Messung mit den gleichen Parametern wie beim eigentlichen Experiment, mit dem Unterschied, dass die Quelle nicht zur Fluoreszenz angeregt wird, d.h. die Röntgenröhre nicht angeschaltet wird. Ein weiterer Vorteil besteht darin, dass eventuelle Fehler auf dem CCD-Chip sich egalieren. Für den Aufbau im Labor wurden mehrere Varianten getestet. Während der Messungen wurde festgestellt, dass das Rauschen linear mit einem Faktor  $< 1$  mit der Aufnahmezeit steigt. Sie hat ein unteres Minimum, das von dem Dunkelstrom abhängig ist, siehe Abschnitt 3.5.1

Das bedeutet nicht automatisch, dass eine längere Aufnahmezeit besser ist. Die Verteilung des Rauschens ist gaußförmig. Die Breite nimmt mit höherer

#### 4. Charakterisierung des Spektrometers



**Abbildung 4.1.:** Rauschen aufgetragen gegen die Aufnahmezeit in Sekunden in logarithmischer Skalierung. Die blauen Datenpunkte geben den das Rauschen wieder und die Roten die Verbreiterung des Untergrunds. Die lineare Abhängigkeit ist zu erkennen. Für eine hohe Aufnahmezeit ist die Verschmierung von wahren Events sehr groß.

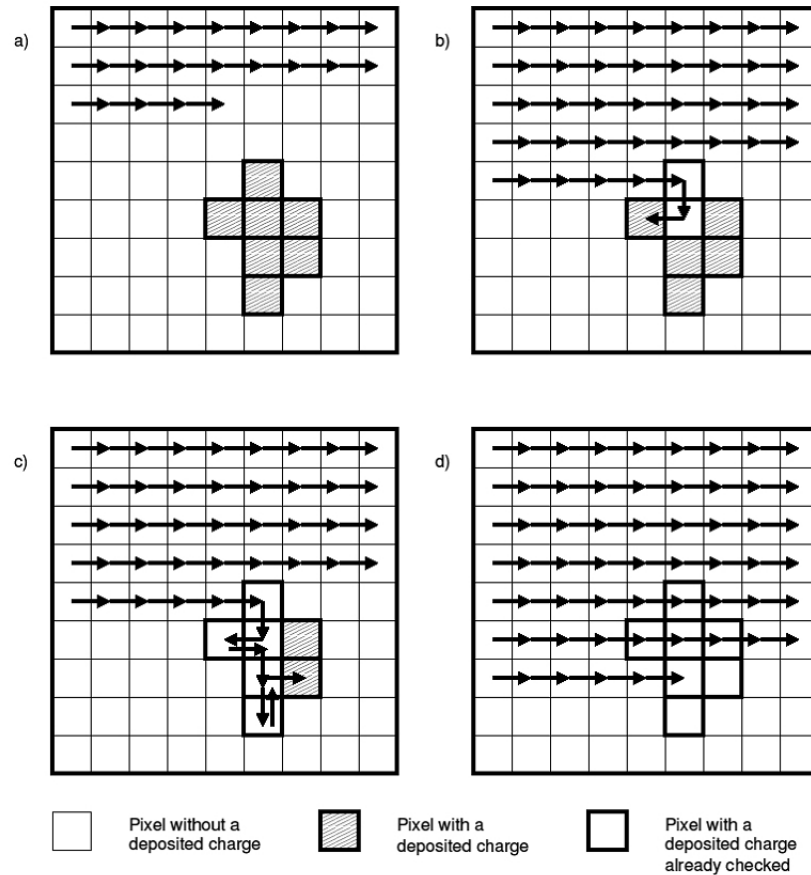
Aufnahmezeit zu (siehe Abbildung 4.1). Für eine schwache Quelle, wie im Falle der SPARC-EBIT, gehen die Signale der detektierten Photonen bei langer Aufnahmezeit im Rauschen unter (siehe Abschnitt 5.3). Für den Aufbau im Labor wurde für die Aufnahme aufgrund einer starken Quelle die Kinetic Series mit einer Aufnahmezeit von 1 Minute gewählt. Ein wichtiger Effekt ist das Hintereinandertreffen von mindestens zwei Photonen in relativ kurzer Zeit auf einem Pixel, der sogenannte Pile-Up-Effekt. Anstatt  $n$  unterschiedliche Events auszulesen, werden diese als ein Ereignis mit der  $n$  fachen Energie gelistet. Das führt zu Verlusten von mehreren Ereignissen. Ein anderer Effekt wird durch Teile der Elektronenwolke, die in benachbarte Pixel hinüberdriften, verursacht, die zu tief in die Verarmungszone reichen und von mehreren Pixeln aufgenommen werden. Dabei findet eine sogenannte Clusterbildung statt. Beide Prozesse wurden in der Analyse berücksichtigt, um fehlerhafte Messungen zu vermeiden und so die Zahl der nachgewiesenen Photonen zu maximieren.

## 4.2. Analyseprogramme

### 4.2.1. Clusteranalyse

Um Cluster zu erkennen, wurde im Analyseprogramm CSM [55] ein Algorithmus verfasst, um diese als einzelne Ereignisse auszulesen. Zunächst wurden mit CSM die vom Dunkelbild korrigierten Rohdaten eingelesen und ausgewertet. Der Algorithmus zur Clustersuche funktioniert wie folgt: im ersten Schritt sucht das Programm reihenweise nach Pixeln mit einer Ladungszahl über einem definierten Grenzwert. Bei einem positiven Treffer wird der Wert auf null gesetzt und Inhalt sowie Position abgespeichert. Die vier direkten Nachbarn werden daraufhin nach Einträgen abgesucht und die vorherige Prozedur rekursiv wiederholt, bis der gesamte Clusterbereich auf null gesetzt wird. Dabei werden bereits auf null gesetzte Pixel übersprungen. Das Programm fasst die Cluster zu jeweils einem Einzelereignis zusammen und die Position auf der zweidimensionalen CCD wird durch den gewichteten Mittelwert angegeben. Zur Vereinfachung wird der eindimensionale Fall betrachtet. Ist der Schwerpunkt für die  $y$ -Achse bei  $y = 2, 4$ , bedeutet dies, dass in 60% der Fälle  $y = 2$  und in 40% der Fälle  $y = 3$  ist (siehe Abbildung 4.2). Die Größe der Cluster hängt von der Energie des Photons ab. Je energiereicher, desto zahlreicher die Pixel bei der Clusterbildung. Für diese Arbeit haben die Röntgenstrahlen ca. 3 keV und es wurde eine maximale Clustergröße von 4–6 Pixel gemessen. Beim Aufbau für Kupfer ( $\sim 8$  keV) und Zink ( $\sim 8,6$  keV) wurden Cluster von bis zu 16 Pixel gemessen [65]. Ein weiterer Vorteil ist, dass die Rekonstruktion der Cluster den für uns relevanten Energiebereich um den Beitrag von höherenergetischen Ereignissen, deren Energie auf mehrere Pixel aufgeteilt wurde, bereinigt. Während der Messungen wurden immer wieder längliche Cluster beobachtet. Anscheinend werden diese durch energiereiche kosmische Teilchen verursacht [66].

#### 4. Charakterisierung des Spektrometers



**Abbildung 4.2.:** Schematische Darstellung der Clusteranalyse. a) Der Algorithmus sucht die Pixel zeilenweise nach Einträgen ab. b) Bei einem positiven Befund wird der Pixel auf null gesetzt, dessen Intensität abgespeichert und die vier benachbarten Pixel abgesucht. c) Schritt b) wird auf die benachbarten Pixel angewendet bis alle Einträge untersucht worden sind. d) Die gespeicherten Einträge werden addiert und als Einzelereignis ausgegeben [55].

#### 4.2.2. Fitprogramm

Die Ergebnisse der Auswertung der Referenzlinien mit CMS wurden mit einem Programm namens GFIT analysiert [67]. Mit Hilfe der Methode der kleinsten Quadrate, werden die Parameter der Kurve so ausgewählt, dass der Quadrat der Differenz zwischen den experimentellen Ergebnissen und der Kurve

minimal wird. Die Resultate werden mittels eines  $\chi^2$ -Tests überprüft, wie gut sie einer bestimmten Verteilung gehorchen. Die Verteilung sollte mit einer Voigt-Funktion beschreibbar sein, siehe Abschnitt 2.1.5. Die Voigt-Verteilung ist eine Faltung der Lorentzverteilung  $L$  mit der Gaußverteilung  $G$ . Bei der Röntgenspektroskopie liegt die hohe Auflösung in der Nähe der natürlichen Linienbreite. Die Lorentzverteilung gibt die natürliche Linienbreite wieder und die Gaußverteilung den Einfluss des Spektrometers auf die Linienform

$$V = G \otimes L = \int_{-\infty}^{\infty} G(x) \cdot L(x - x') \cdot dx'. \quad (4.1)$$

Diese Formel ist analytisch nicht lösbar. In dem Programm wird eine numerische Lösung gemäß dem Marquadt-Verfahren angenähert [68]. Die Halbswertbreite des Voigt-Profiles wird mit der Näherungsformel von Olivero berechnet [69]. Für die Analyse der Übergänge im He-artigen Argon wurde das Programmpaket names MINUIT verwendet [70]. Sie basiert ebenfalls auf dem  $\chi^2$ -Test [55].

### 4.3. Experimenteller Aufbau

Es wurde ein Indiumantimonid (InSb 220) Kristall mit den Maßen  $20 \times 15$  mm mit einer Gitterkonstante von  $2d = 4,58178\text{\AA}$  verwendet. Unter Beachtung der Brechung und Biegung ändert sich der zweifache Abstand der Netzebenen zu  $2d_{cor} = 4,58092\text{\AA}$ . Für den Aufbau des Kristallspektrometers in Johann Geometrie wurde ein Winkelblock von  $54,9^\circ$  mit einem Winkelkeil von  $5^\circ$  verwendet. Auf der CCD-Seite wurde neben einem Verlängerungsrohr auch ein T-Stück verbaut, zusätzlich dazu ein Reduzierungsflansch mit einem Zwischenstück aus Kunststoff um einen Isolator zwischen der CCD und dem Aufbau zu ermöglichen. Auf der Seite der Quelle wurde auch ein Verlängerungsrohr verwendet und ein Doppelkreuzstück. Daran wurde die Quelle mit der Röntgenröhre und die Turbomolekularpumpe angebracht. Im Labor wurden die Abstände  $657,7 \pm 0,1$  mm und  $791,7 \pm 0,1$  mm zwischen Kristall und Quelle getestet. Eine Auswirkung auf die Linienform war nicht zu erwarten. Aufgrund des größeren Raumwinkels beim kürzeren Abstand war jedoch mit mehr Intensität zu rechnen. Der Abstand vom Kristall zur CCD Kamera war konstant. Dieser lag bei  $1105,40 \pm 0,1$  mm, also 2 mm innerhalb des Rowlandkreises. Der Versatz führte zu einer kleinen Verbreiterung von ca. 0,2 Pixel. In Abbildung 4.3 wird der Aufbau im Labor gezeigt und eine Zeichnung mit den Maßen. Als Target dienten Cadmium und Terbium. Die

#### 4. Charakterisierung des Spektrometers

Ergebnisse für Terbium befinden sich im Anhang. Die Targets wurden mittels einer Blende an einem Kupfertarget befestigt. Diese Blende hatte ein Loch mit einem Radius von 18 mm. Das Target wurde unter einem Winkel von  $45^\circ$  seitlich von der Röntgenröhre zur Fluoreszenz angeregt. Die effektive Fläche des Targets war somit  $12,7 \cdot 18$  mm groß.

### 4.4. Messergebnisse und Auswertung

In diesem Abschnitt werden die Eigenschaften des Spektrometers unter verschiedenen Parametern charakterisiert und die Ergebnisse für Cadmium ausgewertet.

#### 4.4.1. Intensität bei verschiedenen Abständen, Strömen und Spannungen

Abbildung 4.4 zeigt die Intensität bei verschiedenen Targetabständen. Bei einer Targetposition von 45 bis 50 mm ist die optimale Stelle erreicht.

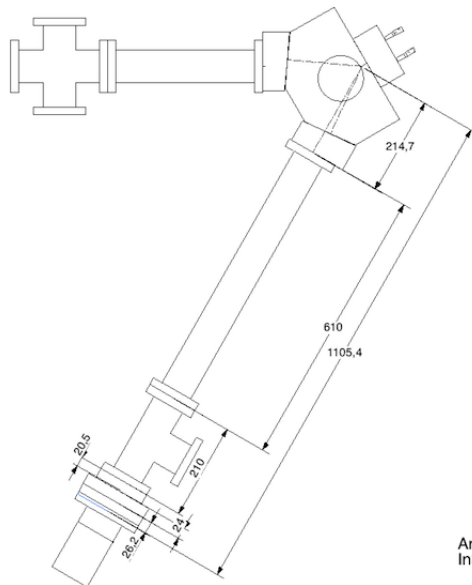
Auf der Abbildung 4.5 wurden die Ereignisse bei verschiedenen Stromstärken und Spannungen der Röntgenröhre gemessen. Wie erwartet, ist eine lineare Beziehung zu erkennen. Bei stärkerem Strom  $I$  wird proportional mehr Bremsstrahlung und somit mehr L-Vakanzen im Target produziert. Bei stärkerer Spannung erhöht sich die Energie der Röntgenphotonen, was ebenfalls zu mehr Vakanzen führt.

#### 4.4.2. Maske

Eine Möglichkeit, die effektive Kristallfläche zu verkleinern besteht darin, eine verschiebbare Maske einzuführen und den Einfluss der Johann-Verbreiterung zu minimieren, siehe Abschnitt 3.7. In Abbildung 4.6 wurde die Messung in verschiedenen Maskenabständen zum Kristall durchgeführt. Alle andere Parameter blieben unverändert. Ein Vergleich der Halbwertsbreiten ließ keine signifikante Verbesserung erkennen. Der Grund liegt in der relativ kleinen Breite des Kristalls im Vergleich zu seinem Krümmungsradius, siehe Abschnitt 3.3.2.2 und Tabelle 4.1.



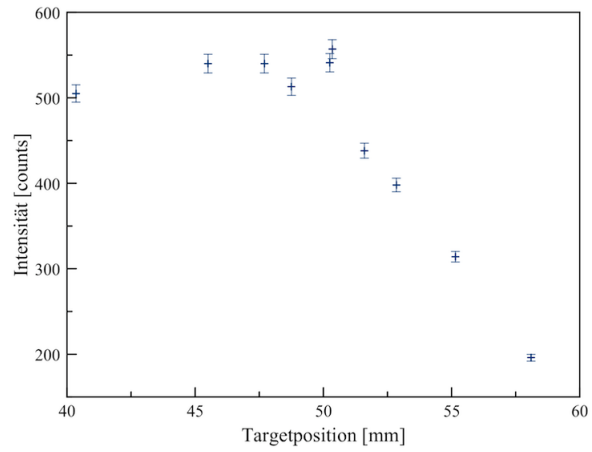
#### 4.4. Messergebnisse und Auswertung



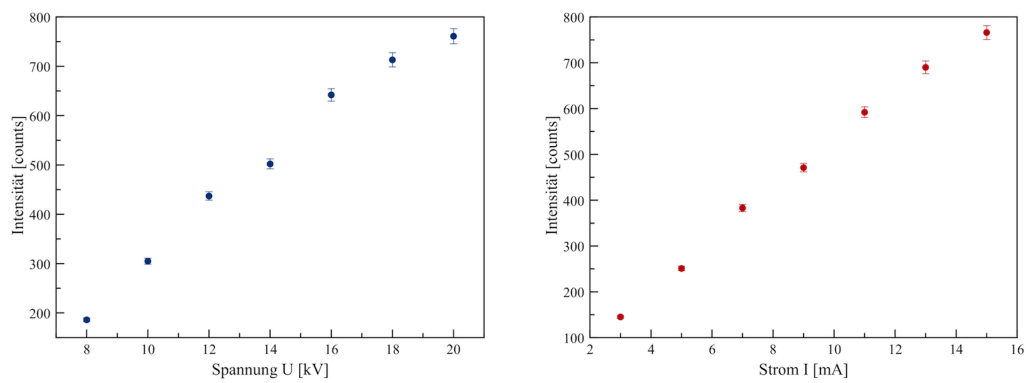
Arg Spektrometer 59,9°  
InSb (220)

**Abbildung 4.3.:** Oben: Der Aufbau im Labor. Auf dem Winkelblock wurde die Vakuummessröhre installiert. Dieser wurde während der Messung ausgeschaltet. Die Turbomolekularpumpe ist auf dem Doppelkreuz befestigt, senkrecht dazu die Röntgenröhre und das Target. Links wurde die CCD von einem schwarzen Tuch umhüllt, um sie vor Licht zu schützen. Unten: Eine Zeichnung des Kristallspektrometers mit den entsprechenden Maßen.

#### 4. Charakterisierung des Spektrometers



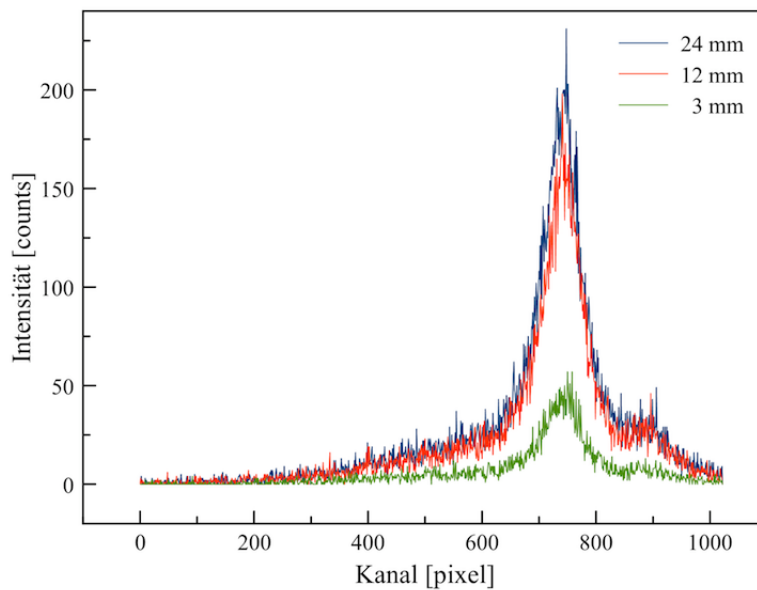
**Abbildung 4.4.:** Intensität aufgetragen gegen die Targetposition. Die Fehler sind hauptsächlich statistischer Natur.



**Abbildung 4.5.:** Die linke Abbildung zeigt die Counts in Abhängigkeit verschiedener Spannungen und die Rechte die Linearität der Counts vom Strom für das Cadmium Target.

Abstand von Maske zum Kristall [mm]	24	12	3
Halbwertsbreite [eV]	$3,29 \pm 0,09$	$3,32 \pm 0,11$	$3,36 \pm 0,16$

**Tabelle 4.1.:** Die Tabelle gibt die Halbwertsbreite in Abhängigkeit des Maskenabstandes wieder. Eine signifikante Verbesserung ist nicht zu erkennen. Der Grund liegt darin, dass der Kristall im Vergleich zu seinem Krümmungsradius eine zu kleine horizontale Ausdehnung  $b$  hat, siehe 3.3.2.2. Die Abweichungen voneinander und die größer werdende Fehler sind hauptsächlich in der unterschiedlichen Bewertung der Satellitenintensitäten begründet. und auf die geringere Intensität zurückzuführen.



**Abbildung 4.6.:** Die Intensität bei geringeren Maskenabständen. Bei geringerer Abstand nimmt die effektive Kristallfläche ab, die zur Reflexion beiträgt und somit die Johann-Verbreiterung minimiert.

#### 4.4.3. Cluster-Analyse und experimentelle Ergebnisse

Im Abschnitt 4.2.1 wurde die Cluster-Analyse vorgestellt. Bei den folgenden Ergebnissen betrug der Abstand von Quelle und Kristall  $657,7 \pm 1,0$  mm. In Abbildung 4.7 ist das Energiespektrum einmal mit Cluster-Analyse und einmal ohne zu sehen. Es ist gut zu erkennen, wie links das Rauschen abnimmt. Dies

#### 4. Charakterisierung des Spektrometers

liegt am Charge-Splitting. Hierbei handelt es sich um einen Effekt, der durch Ladungsproduktion von Röntgenphotonen in mehrere Pixel zustande kommt. Die Ladungswolke ist entsprechend kleiner im Vergleich zu einem Event und wird als Rauschen wiedergegeben. Mit einem dafür verfassten Algorithmus werden solche Cluster als wahre Ereignisse ausgelesen, siehe Abschnitt 4.2.1. Neben dem Charge-Splitting wurde der Pile-up-Effekt beobachtet, siehe Abschnitt 4.2.1. Wie im Energiespektrum zu entnehmen ist, spielen die Triplehits keine signifikante Rolle. Dagegen habe die Doublehits (Pile-Up-Effekt) einen merkbaren Einfluss auf die Intensität der Linie. Über das Energiespektrum werden die Grenzen ausgewählt, um die Projektion auf die x-Achse zu erzeugen. Das Ortsbild enthält nur die Ereignisse, dessen Energie sich in den Energiefenster befindet. Für Cadmium wurde eine maximale Clustergröße von sechs Pixeln ausgemacht, siehe Abbildung 4.8. Für die Auswertung wurden Clustergrößen bis vier beachtet. Das Ortsbild ist in Abbildung 4.10 zu sehen.

##### 4.4.4. Krümmungskorrektur

Eine ausgedehnte Punktquelle kann zu einer gekrümmten Linienform auf dem Detektor führen. Bei Spektrometer mit gebogenen Kristallen hängt sie vom Abstand von der Quelle zum Kristall bzw. vom Kristall zur CCD und den Fokussierungseigenschaften ab. Eine Näherung besagt, dass bei kürzerer Distanz die Krümmung ausgeprägter ist [47]. Unter der Annahme parabolischer Parametern, wird ein quadratischer Fit angewendet [65].

$$x = a + by + cy^2. \quad (4.2)$$

Die x-Koordinaten werden ersetzt durch:

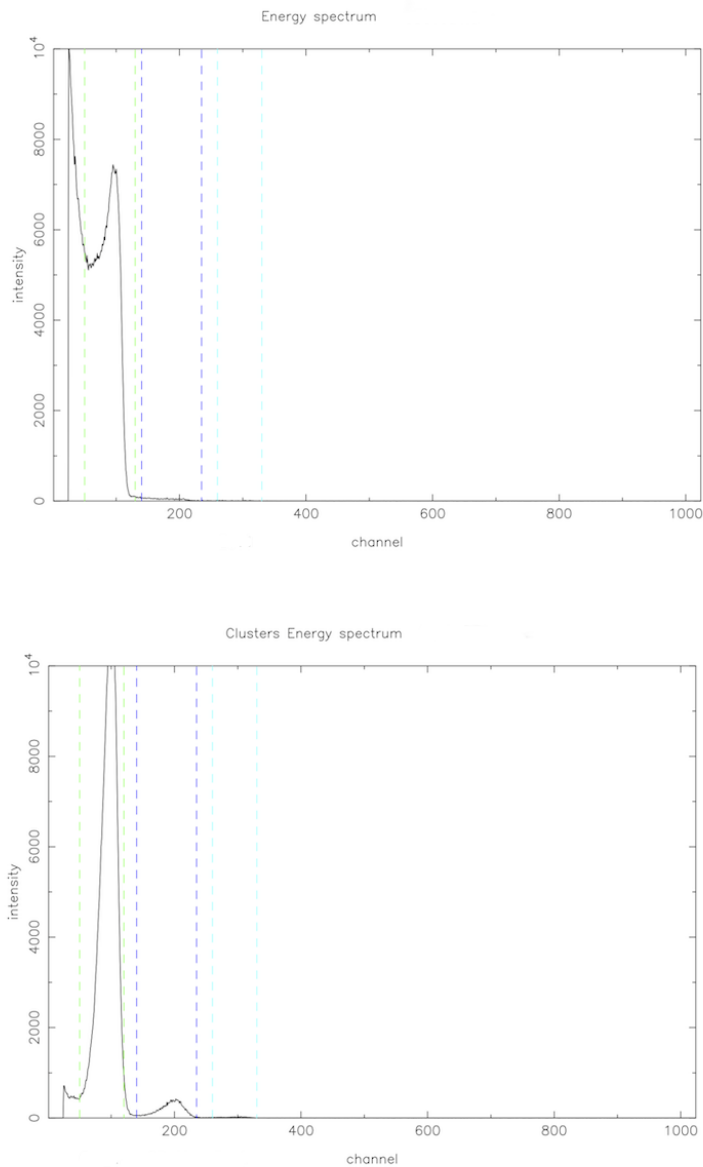
$$x \rightarrow x' = x - by - cy^2. \quad (4.3)$$

Für Werte  $y = 0$  werden sie nicht verändert. Nach dem Fit sind Asymmetrien der Linienform nicht mehr durch eine Punktquelle verursacht. Deformationen der Projektion stammen höchstwahrscheinlich von Kristallfehlern oder radiativen Prozesse wie Satellitenlinien. Die Abbildung 4.10 zeigt, dass die Krümmung aufgrund der Distanz dieses Aufbaus nicht ausgeprägt ist.

##### 4.4.5. Eigenschaften des Spektrometers

Durch den großen Abstand vom Kristall zur CCD und die Verwendung eines Keilstückes ist die Lage der Kamera sehr störungssensibel. Die Konsequenz

#### 4.4. Messergebnisse und Auswertung



**Abbildung 4.7.:** Oben: Energiespektrum ohne die Cluster-Analyse. Unten: Das Energiespektrum mit Cluster-Analyse. Links ist die niederenergetische Seite. Ein Vergleich zeigt, wie die wahren Ereignisse durch Einbeziehung der Cluster um mehr als 50 % zunehmen. Im grünen Bereich sind die Singlehits, im Blauen die Doublehits und ganz leicht im Hellblauen die Triplehits.

#### 4. Charakterisierung des Spektrometers

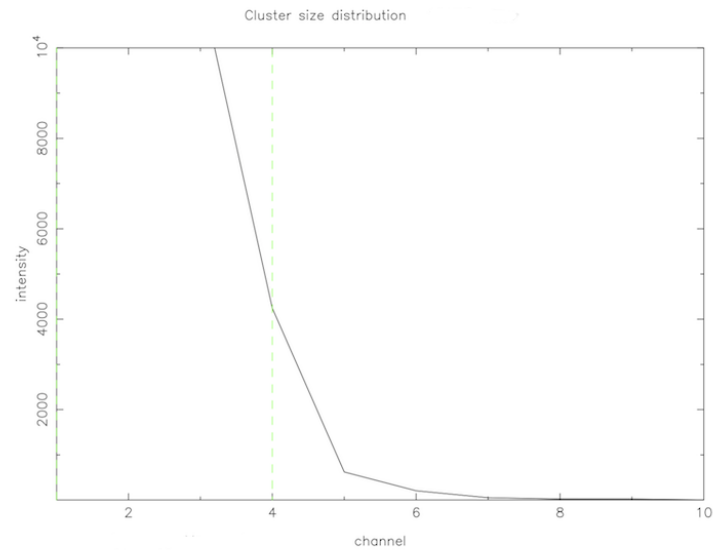


Abbildung 4.8.: Verteilung der Clustergrößen.

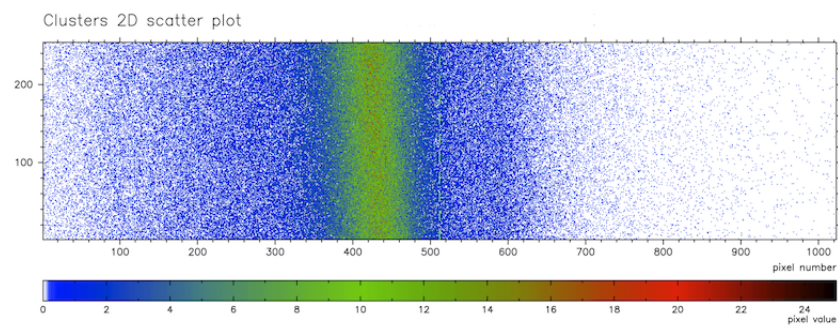
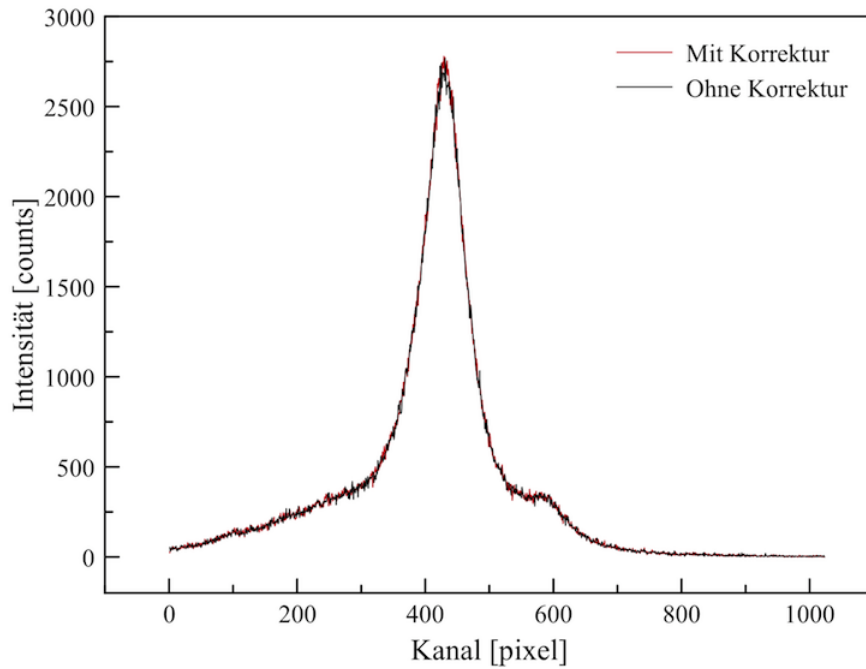


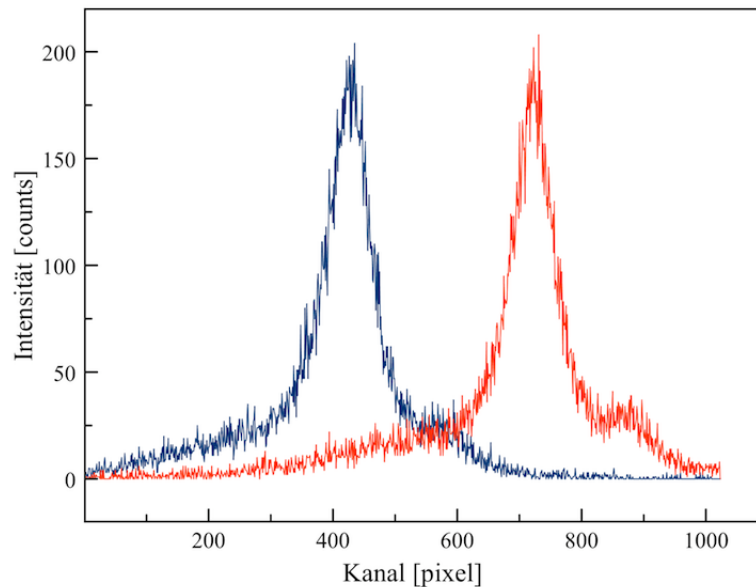
Abbildung 4.9.: Zweidimensionales Ortsspektrum



Fitparameter	a	b	c
Wert	388,5981	0,0260	$0,2025 \cdot 10^{-4}$

**Abbildung 4.10.:** Oben: Das auf der x-Achse projizierte Ortsbild des Cadmium Spektrum mit der Krümmungskorrektur. Ein Abgleich zeigt keine großen Unterschiede. Unten: Die Fitparameter für die Krümmungskorrektur.

#### 4. Charakterisierung des Spektrometers



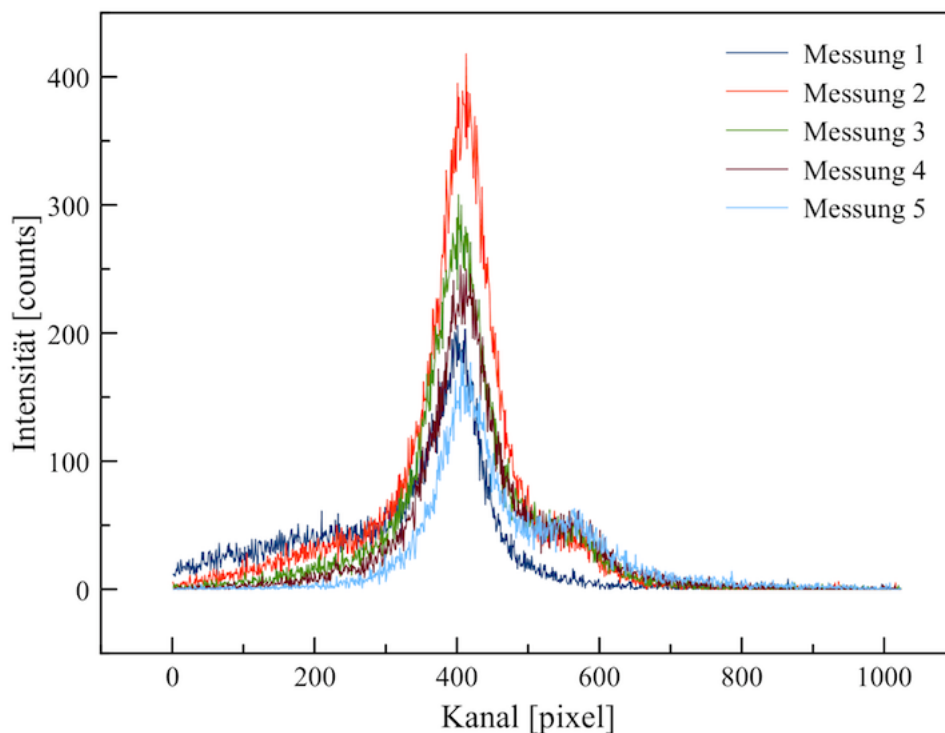
**Abbildung 4.11.:** Die linke Linie ist gegenüber dem Rechten um etwa 300 Channels aufgrund von leichten mechanischen Verschiebungen der CCD-Kamera verschoben. Die Linienform ist davon offensichtlich nicht beeinträchtigt.

kann eine Verschiebung der Linienposition sein. Die Linienform, soweit sie auf der CCD-Kamera abgebildet wird, wird nicht beeinträchtigt, da der Fokus sich nicht ändert. Es ist vielmehr eine Frage der richtigen Ausrichtung des Detektors 4.11. Ein Vergleich mit dem Simulationsprogramm MacRay, welches an der GSI entwickelt wurde, liefert einen guten Hinweis, wo die richtige Position der Referenz Linien liegen sollte [47]. Anderenfalls ist es nicht möglich, den spektralen Abbildungsbereich zu kennen und somit Schlussfolgerungen in Bezug auf die atomaren Prozesse zu ziehen. Bei dem Aufbau in Abbildung 4.11, auf dem die  $L\alpha_1$  Linie weit rechts liegt (rot), wären die Triplett P Linien des He-artigen Argon-Übergangs in den Grundzustand nicht detektierbar gewesen, da sie außerhalb des CCD-Chips lägen. Es ist sehr wichtig, die Stabilität des Spektrometers zu gewährleisten. Die folgende Ergebnisse wurden mit einem Kristallspektrometer erzielt bei dem der Abstand Kristall-Quelle  $792,7 \pm 1,0$  mm betrug. Es wurde ein längeres Verbindungsrohr eingesetzt. Damit befindet sich bei diesem Aufbau die Quelle 314,7 mm innerhalb des Rowlandkreises. Durch den größeren Abstand wirkt mehr Drehmoment an dem Winkelblock bzw. Keilstück. Es scheint zu einer höheren Ungenauigkeit



des Aufbaus zu führen. Durch das erhöhte Drehmoment auf den Winkelblock kann sich der Einfallswinkel der Quelle zum Kristall ändern. In Abbildung 4.11 wurde eine Messreihe bei unterschiedlichen Winkeleinstellungen aufgenommen. Es ist deutlich zu erkennen, wie sich die Projektion auf die  $x$ -Achse verändert und wie sich der Schwanz und die  $L\alpha_{1,2}$  Linien erhöhen und verringern. Ein Vergleich mit der Simulation bei veränderten Winkeln des Aufbaus zeigt, wie sich bei größeren Winkeln als  $60,2^\circ$  das Verhältnis von  $L\alpha_1$  zu  $L\alpha_2$  verringert und bei einer Größe von unter  $59,4^\circ$  vergrößert. Zwischen  $59,6^\circ$  und  $60,1^\circ$  scheint ein Plateau vorhanden zu sein. In der Literatur wird das natürliche Verhältnis mit  $\frac{100}{11}$  angegeben [71]. Bei einem Winkeln von unter  $59,6^\circ$  wird der  $L\alpha_2$  Übergang weniger unter der Bragg-Bedingung gestreut und die Intensität nimmt ab, bis es verschwindet. Wenn der Einfallswinkel größer als  $60,1^\circ$  ist, erhöht sich die Sensibilität für die  $L\alpha_2$  Linie und die Intensität steigt. Im Falle des Linienschwanzes verhält es sich umgekehrt. Bei kleineren Winkel steigt die Intensität und bei größeren Winkeln wird die Bragg-Streuung abgeschwächt, bis sie nicht mehr vom Detektor registriert wird. Dasselbe Phänomen ist bei  $L\alpha_1$  zu beobachten, aber aufgrund der stärkeren Linie ist sie immer beobachtbar. Das Zentrum der Linienform ändert sich minimal. Dies ist wahrscheinlich auf unterschiedliche Bewertung der Satellitenintensitäten beim Fitten zurückzuführen. Die Sensibilität des Linienschwanzes auf den Spektrometerwinkel erlaubt einen starken Hinweis auf die energetische Natur und erhärtet die Vermutung von Satelliten Übergängen.

#### 4. Charakterisierung des Spektrometers

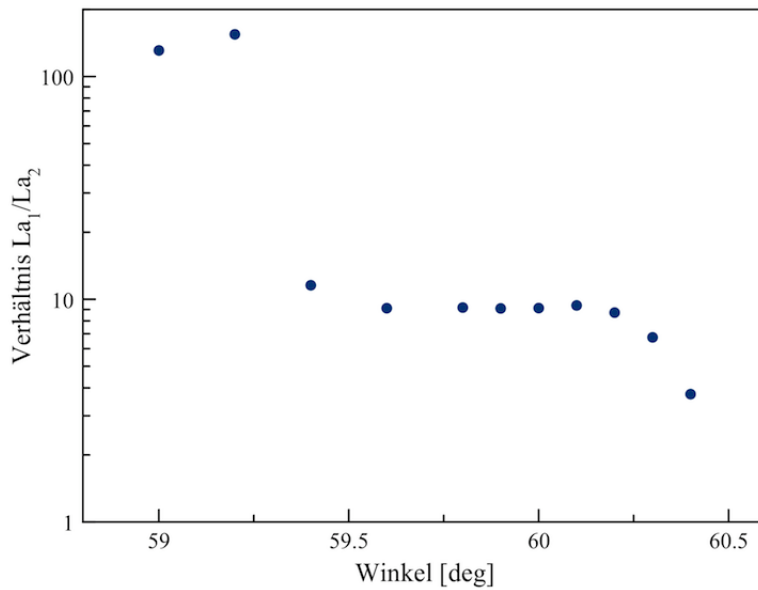


**Abbildung 4.12.:** Das Cadmium Spektrum unter verschiedenen Winkel. Es ist deutlich zu sehen, wie  $L\alpha_{1,2}$  an Intensität zunimmt, wohingegen die Intensität der Satellitenlinien abnimmt. Der Grund ist eine Winkeländerung der Quelle zum Kristall.

Messung	$\frac{L\alpha_1}{L\alpha_2}$
Messung 2	14,73
Messung 3	8,78
Messung 4	6,65
Messung 5	3,28

**Tabelle 4.2.:** Tabelle mit dem  $\frac{L\alpha_1}{L\alpha_2}$  Verhältnis der einzelnen Messung. Für die Messung 1 wurde kein Verhältnis angegeben, da  $L\alpha_2$  nicht detektiert wurde.

Abbildung 4.14 zeigt die x-Achsen Projektion ohne den Linienschwanz. Auch hier spielt die Krümmung durch eine Punktquelle keine signifikante Rolle. Das Verhältnis von  $L\alpha_1$  zu  $L\alpha_2$  von  $\sim 6$  weist auf einen Winkeleinstellung von



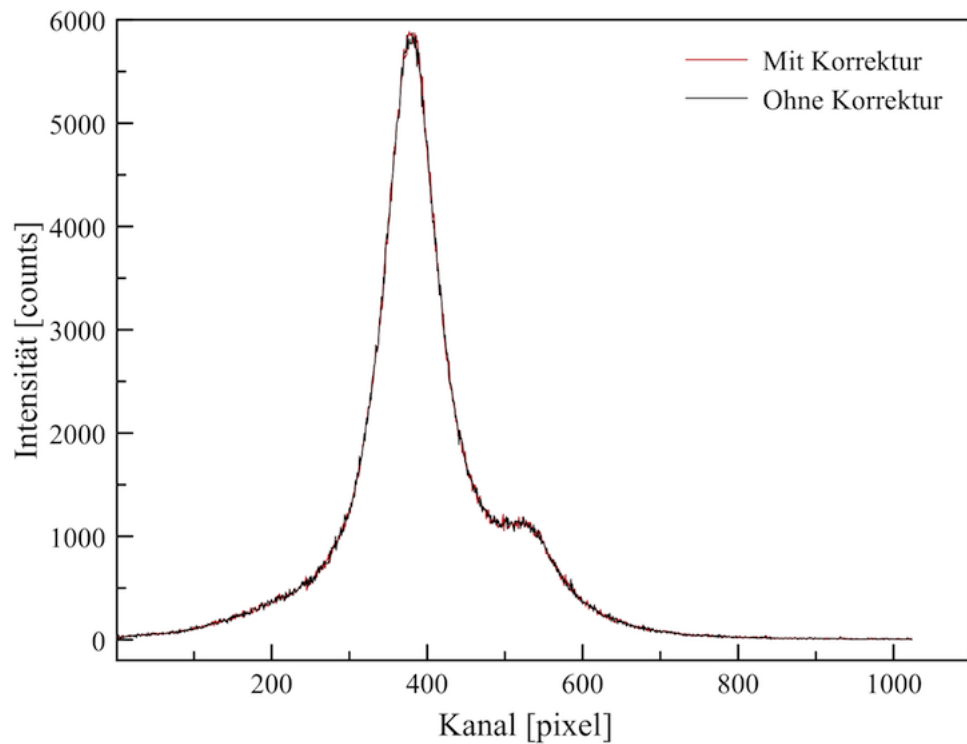
**Abbildung 4.13.:** Eine Simulation mit MacRay über das Verhältnis  $\frac{L\alpha_1}{L\alpha_2}$  bei verschiedenen Winkeln des Spektrometers.

$\sim 60,3^\circ$  hin.

#### 4.4.6. Analyse der $L\alpha_1$ und $L\alpha_2$ Linien von Cadmium

Neben der  $L\alpha_1$  und  $L\alpha_2$  ist auf der höher energetischen Seite ein linear abfallender Schwanz zu sehen. Auf Tabelle 4.3 sind mögliche Satellitenlinien aufgelistet, die auch in anderen Experimenten beobachtet wurden [72, 73, 74]. Neben der Energie der Übergänge sind zusätzlich die dazu gehörigen Bragg-Winkel eingetragen. Aus Abschnitt 4.4.5 wissen wir, dass bei einer zu großen Abweichung der Einfallswinkel vom fixen Winkel, die Linie vom Spektrometer nicht mehr die Bragg-Bedingung erfüllt. Die Linien  $L\alpha_5$  und  $L\alpha_6$  sind energetisch zu weit entfernt, dass sie noch einen merkbaren Einfluss spielen könnten. Aus diesem Grund wurde für den Fit die Satelliten-Übergänge  $L\alpha_2$ ,  $L\alpha_3$  und  $L\alpha_4$  berücksichtigt. Um die Plots zu fitten wurden zwei Versionen getestet. In einem wurde der Schwanz als Untergrund angesehen und im anderen als drei verschiedene Satellitenlinien. Für die Aufnahme mit dem längeren Abstand zwischen Quelle und Kristall wurde diese Methoden nicht angewendet. In beiden Ortsspektren sind die Peaks der  $L\alpha_{1,2}$  zwar gut zu erkennen, aber aufgrund der natürlichen Linienbreite ist eine Überlappung der Linien nicht zu vermeiden, da die experimentelle Halbwertsbreiten größer sind als deren

#### 4. Charakterisierung des Spektrometers



Fitparameter	a	b	c
Wert	383,2235	0,0472	$0,6624 \cdot 10^{-5}$

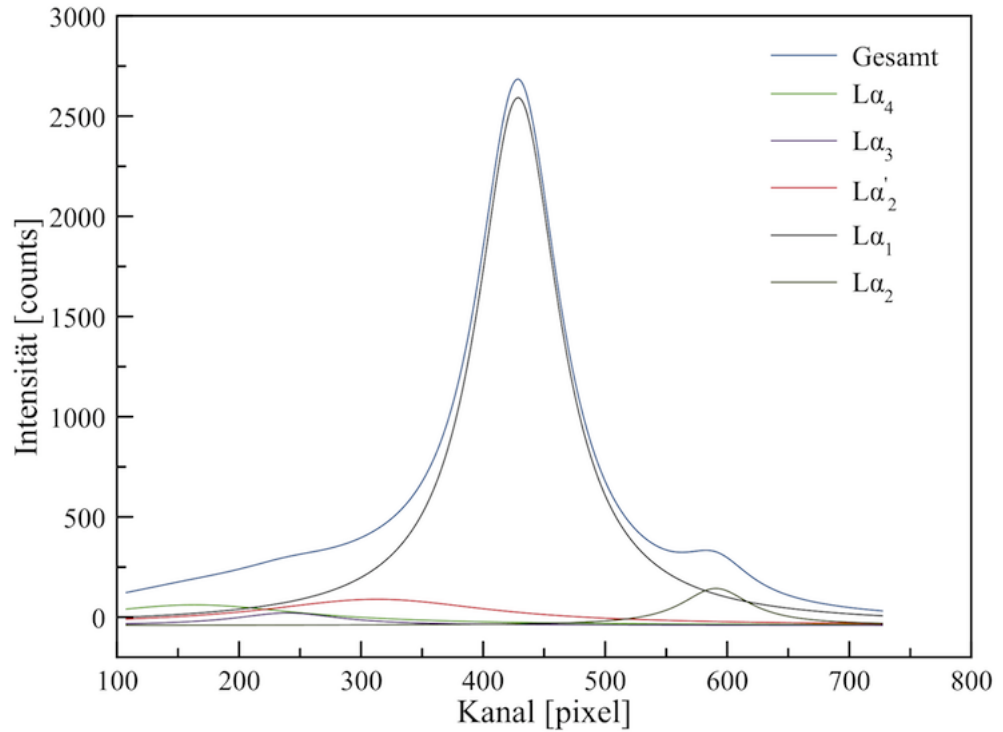
**Abbildung 4.14.:** Oben: Ortsspektrum des Cadmium  $L\alpha_{1,2}$  bei einer Distanz von der Quelle zur CCD von 792,7mm. Unten: Die Parameter zur Krümmungskorrektur.

Linie	Energie [eV]	Bragg-Winkel $\theta_B$ [deg]
$L\alpha_2$	3140,8	59,52
$L\alpha_3$	3142,8	59,46
$L\alpha_4$	3145,5	59,38
$L\alpha_5$	3148,8	59,28
$L\alpha_5$	3151,3	59,20
$L\alpha_6$	3153,9	59,11

**Tabelle 4.3.:** Auflistung der Satellitenlinien auf der höherenergetischen Seite [75].

Energiedifferenz. Ein Vergleich der Halbwertsbreiten von  $L\alpha_{1,2}$  mit der Literatur ( $\Delta L\alpha_1 = 2,43$  eV und  $\Delta L\alpha_2 = 2,40$  eV [76]) zeigt, dass wir für die  $L\alpha_1$  um  $\sim 1$  eV und für  $L\alpha_2$  um  $\sim 0,5$  eV größeren Halbwertsbreiten aufweisen. Dies ist ein Hinweis, dass das Kristall möglicherweise Schäden ausweist. Es ist anzunehmen, dass die Netzebenen nicht exakt parallel zueinander sind und Fehler haben. In Tabelle 4.15 sind die Energien und Halbwertsbreiten aufgelistet. Mittels des Literaturwerts von  $L\alpha_1$  wurde  $L\alpha_2$  bestimmt und andersherum. Die Satellitenlinien wurden mit den Literaturwerten von  $L\alpha_1$  und  $L\alpha_2$  berechnet. Der arithmetischen Mittelwert wurde angegeben. Ein Vergleich zwischen den Ansätzen zeigt, dass die Methode mit drei Satellitenlinien näher an dem Referenzwert liegt als die andere, bei dem der Schwanz als Untergrund mittels eines Polynoms gefittet wurde. Für die Auswertung des Experiments an der EBIT wurde aufgrund der besseren Statistik nur die  $L\alpha_1$  von Cadmium genommen und mit drei Satellitenlinien gefittet. Die Satellitenübergänge könnten durch einen Shake-Off-Effekt entstanden sein, siehe 2.1.5, bei dem eine zusätzliche Vakanz in der M-Schale entsteht. Mit der Auswertung der Cadmium Linien wurde der Einfluss einer genauen Referenzlinie gezeigt. Die angegebenen Fehler resultieren hauptsächlich durch den Referenzfehler. Leichte geometrische Abweichungen tragen nicht so gravierend zum Gesamtfehler bei wie der Fehler des Literaturwertes. Hingegen war der statistische Fehler dominant für die Satellitenlinien. Die Abweichungen der gemessenen Energiewerte sowie Halbwertsbreiten zu den Literaturwerten sind auf etwaige Fehler im Kristall zurückzuführen oder höchstwahrscheinlich ein Resultat des Einflusses der Satellitenübergänge. Eine Möglichkeit der Untersuchung des Kristalls war nicht Gegenstand dieser Arbeit, kann jedoch mit der in Abschnitt 3.2 beschriebene Methode untersucht werden. Die Ergebnisse der Analyse der Terbium Übergänge in zweiter Ordnung sind im Anhang ausgewiesen worden. Anders als bei Cadmium ist, wie erwartet, kein abfallender Schwanz zu erkennen. Ein Hinweis auf die materialabhängige Natur der Linie. Leichte Asymmetrien in dem Terbium Spektrum sind wahrscheinlich auch Ergebnisse mögliche durch Shake-Off-Effekt verursachte Vakanzen in der M-Schale.

#### 4. Charakterisierung des Spektrometers



Linie	Energie [eV]	Fehler [eV]	FWHM	Fehler [eV]
$L\alpha_1$	3133,841	0,076	3,504	0,085
$L\alpha_2$	3126,789	0,055	2,918	0,085
$L\alpha_2'$	3138,750	2,316	9,913	2,173
$L\alpha_3$	3141,873	1,163	4,553	1,119
$L\alpha_4$	3144,800	1,335	9,404	1,307

Linie	Energie [eV]	Fehler [eV]	FWHM	Fehler [eV]
$L\alpha_1$	3133,882	0,076	3,515	0,085
$L\alpha_2$	3126,747	0,055	3,264	0,085

**Abbildung 4.15.:** Oben: Ein Fit der experimentellen Daten mit insgesamt fünf Voigt-Kurven. Die Satellitenlinien sind  $L\alpha_2'$ ,  $L\alpha_3$  und  $L\alpha_4$ . Mitte: Ergebnis der Fit-Anpassung mit drei Satelliten. Unten: Die Auswertung, wobei der Schwanz mit einem Polynom dritten Grades als Untergrund gefittet wurde.

## 5. Einsatz an der SPARC–EBIT

Das Kristallspektrometer wurde für eine erste Testmessung an der SPARC-EBIT eingesetzt. Dafür musste das Spektrometer zunächst an die dortigen experimentellen Gegebenheiten angepasst werden. Ziel war es die  $1s2p\ ^1P_1$ ,  $1s2p\ ^3P_1$  und  $1s2p\ ^3P_1$  Grundzustandsübergänge in heliumartigem Argon zu detektieren. Im Vordergrund stand dabei, zunächst die Machbarkeit dieser Messung zu demonstrieren sowie für zukünftige Messungen Erfahrungen bezüglich Intensität, Stabilität und allgemein den experimentellen Bedingungen zu sammeln. Darüber hinaus kann die relative Intensität der Linien Rückschlüsse bezüglich des Bevölkerungsprozesses ermöglichen. Es wird mit der Beschreibung des experimentellen Aufbaus begonnen und am Ende des Abschnitts werden die Ergebnisse dieser Messung mit dem Kristallspektrometer an hochgeladenem Argon präsentiert.

### 5.1. Beschreibung und Funktion der SPARC–EBIT

Für die SPARC–Kollaboration (Stored Particle Atomic Research Collaboration) wurde eine kommerzielle Ionen–Quelle der Firma Dreebit GmbH erworben, die insbesondere für den Test der HITRAP–Anlage [77] genutzt werden soll. Dabei handelt es sich um eine EBIT, die im Gegensatz zu den weitverbreiteten ECR–Quellen erlaubt, die hochgeladene Ionen sowohl zu produzieren als auch zu speichern. Ursprünglich wurde die EBIT in Livermore als eine kompakte Ionenquelle konzipiert [78]. Wegen ihrer relativ geringen Anschaffungs– und Betriebskosten, im Vergleich zu Beschleunigungsanlagen, existieren heutzutage in China, Japan, Europa und USA Super–EBITs, die sogar hochgeladene Elemente erzeugen können. In Abhängigkeit von der maximalen Elektronenenergie sowie der erreichbaren Stromdichte können in EBITs hochgeladene Ionen bis hin zu wasserstoffähnlichem und vielleicht sogar nacktem Uran erzeugt werden [79]. Aufgrund der hohen technischen Anforderungen und der

## 5. Einsatz an der SPARC-EBIT

damit verbundenen Kosten erlauben die meisten EBITs jedoch nur für leichte und mittelschwere Elemente das Erreichen höchster Ladungszustände. Die Grenzen werden durch die Produktion und Speicherung von Ionen sowie die Erreichbarkeit von einzelnen Ladungszuständen gesetzt. Im Vergleich zum Beschleunigerkomplex der GSI ist es in einer EBIT jedoch nicht möglich nur einen wohldefinierten Ladungszustand zu erzeugen, sondern man erhält immer eine Ladungsverteilung. Dennoch ist aufgrund der vergleichsweise niedrigen Kosten die EBIT eine beliebtes Instrument für Experimente mit hochgeladenen Ionen, Studien der verschiedenen elementaren Elektron-Materie-Wechselwirkungen und Studien der Materie unter extremen Bedingungen. Die wichtigsten Prozesse in dieser SPARC-EBIT wurden in Abschnitt 2.2 behandelt. Im folgenden wird der Aufbau und die Funktion der SPARC-EBIT kurz vorgestellt.

Generell werden in einer EBIT hochgeladene Ionen mittels Elektronenstoßionisation erzeugt. Dabei werden injizierte Atome/Ionen sukzessiv ionisiert. Ist eine ausreichende Menge der gewünschten Ionenspezies vorhanden, können Messungen entweder in der EBIT selbst vorgenommen werden oder die Ionen werden extrahiert und zu einem weiteren Messplatz weitergeleitet. Die Elektronen werden von einer aus Iridium ( $Z = 77$ ) und Cer ( $Z = 58$ ) bestehenden Elektronenkanone bei einer Temperatur von 1800 K bis 2000 K über einen Heizstrom  $I_H$  erzeugt. Durch einen kleinen Öffnungsdurchmesser von 0,5 mm wird der späteren magnetische Kompression des Strahls Vorschub geleistet. Eine weitere Vorrichtung für die Strahlfokussierung der freien Elektronen ist der Pierce-Rand [80]. Dieser wirkt dem Auseinanderdriften der Elektronen durch die Raumladung entgegen. In Abbildung 5.1 ist der Aufbau der EBIT sowie die Potentialkonfiguration ihrer verschiedenen Elektroden schematisch dargestellt. Die Driftröhre besteht aus drei Teilen an denen je ein unterschiedliches Potential  $U_{1,2,3}$  angelegt werden kann. Die chrom- und eisenhaltigen Edelstahlteile bilden die eigentliche 2 cm lange Falle, in der das Argongas injiziert wird und Ionen erzeugt werden. Die Beschleunigungsspannung für den Elektronenstrahl besteht zwischen dem Potential an der Kathode  $U_K$  und der mittleren Driftröhre  $U_2$ . Im Falle der SPARC-EBIT beträgt die maximale Potentialdifferenz 15 kV. Die Energie des Elektronenstrahls  $E_{ES}$  beträgt

$$E_{ES} = e \cdot [|U_K| + |U_2| + V_e(r)], \quad (5.1)$$

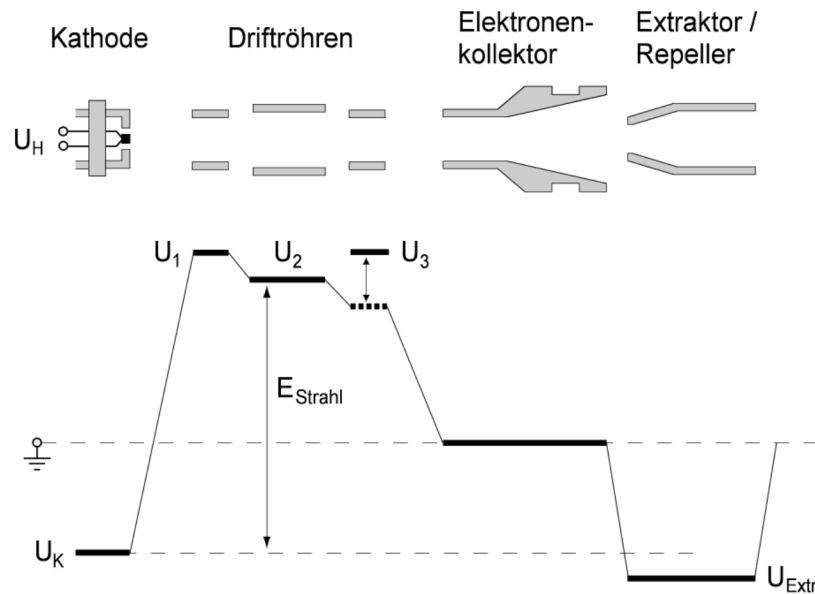
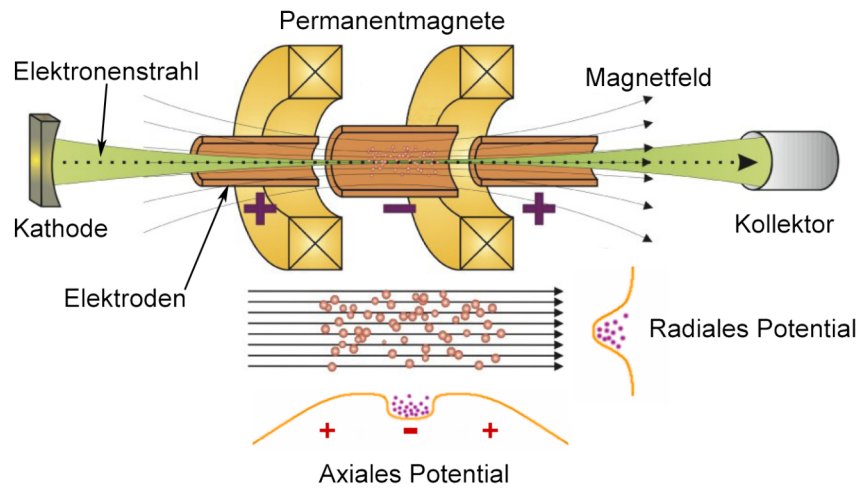
wobei  $V_e(r)$  das negative radiale Fallenpotential ist. Dieses wird durch die Raumladung der Elektronen erzeugt. Innerhalb der Driftröhren wird die Falle in axialer Richtung durch die Potentiale  $U_1$  und  $U_3$  gebildet. An diesen liegt eine um 100 V höhere Spannung an als im mittleren Bereich, wo die Gase eingelassen und ionisiert werden. Damit wird eine Potentialmulde ge-



## 5.1. Beschreibung und Funktion der SPARC-EBIT

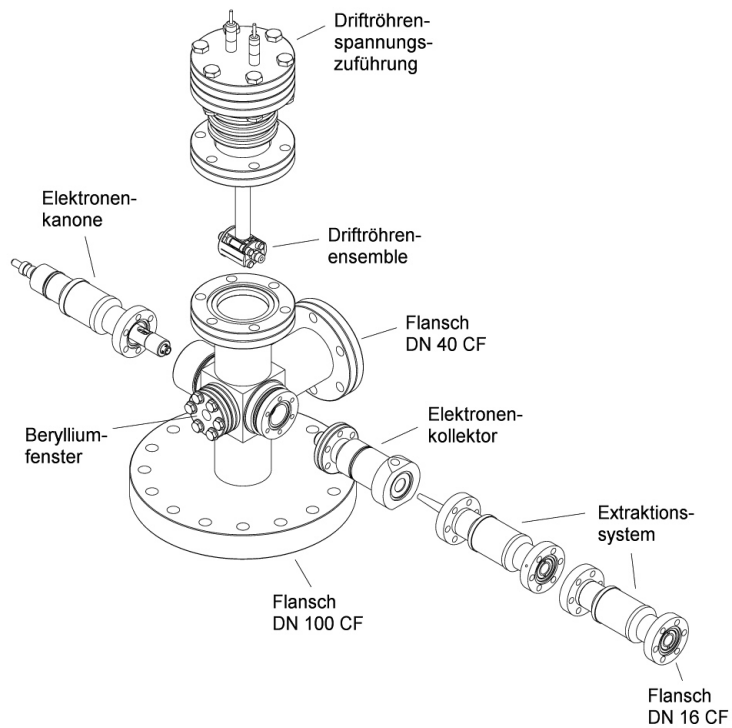
schaffen, um die Diffusion der Ionen in axialer Richtung zu verhindern. Der Elektronenstrahl kann ungehindert durchdringen und erfährt noch eine Beschleunigung. Ein Vorteil dieser Anordnung ist, dass der Elektronenstrahl nicht nur die Rolle des Ionisationsmediums übernimmt, sondern aufgrund seiner negativen Raumladung selbst ein Teil der Falle ist. Es gibt eine Potentialdifferenz zwischen der Mitte des Elektronenstrahls und seinem Rand, welche ein Raumpotential erzeugt, um die Ionen radial einzufangen. Mittels zweier Sm-Co-Permanentmagnetringen in Helmholtzanordnung wird die nötige Elektronendichte in der Driftröhre gewährleistet, die für die Bildung des Raumpotentials nötig ist. Das Magnetfeld der Helmholtzspulen ist an den Außenbereichen radialsymmetrisch, aber in der Mitte, also in der Fallensektion, homogen. Es komprimiert den Elektronenstrahl auf die für die Erzeugung der Ionen benötigte Stromdichte. Zusätzliche Teile aus Weicheisen gewährleisten einen optimal homogenen Magnetfeldverlauf in der Fallenmitte und sorgen für eine magnetische Abschirmung an der Kathode und am Extraktionsbereich. Mittels einer Änderung des Potentials  $U_3$  kann man die Ionen aus der Falle in Richtung der Extraktionselektrode hin entweichen lassen. Darüber hinaus verbreitert sich der Elektronenstrahl im Extraktionsbereich und erleichtert so zusätzlich das Entweichen der Ionen aus der Falle. Von den Extraktionselektroden werden die Ionen sowohl fokussiert als auch aus der EBIT zu weiteren Experimentstationen hin beschleunigt. Der Elektronenstrahl erfährt dagegen eine weitere Expansion und aufgrund des niedrigeren Potentials eine Rückreflexion. Vom Kollektor wird der Elektronenstrahl letztlich abgeleitet. Um die Menge an Restgas so gering wie möglich zu halten, herrscht in der SPARC-EBIT Ultravochvakuum (UHV). D.h. es liegt ein Druck von  $10^{-11}$  mbar vor. Damit ist eine niedrige Rekombinationsrate zwischen den Restgasatomen/-ionen und den zu speichernden Ionenspezies und somit eine hohe Lebensdauer der gespeicherten Ionen gewährleistet. Die EBIT verfügt über zwei CF-40 Fenster, die  $90^\circ$  zur Elektronenstrahlrichtung und einander gegenüber liegen. Ein Fenster wurde optisch und vakuumdicht mittels einer Berylliumfolie mit einer Stärke von  $50 \mu\text{m}$  abgeschlossen. Auf der gegenüberliegenden Seite, wurde das Fenster mit einem Glasfenster abgeschlossen, siehe Abbildung 5.2. Beide Seiten stehen für die Detektion von charakteristischer Röntgenstrahlung zur Verfügung. Für diese Arbeit wurde das Spektrometer am Berylliumfenster angeschlossen, um die lichtempfindliche CCD-Kamera vor optischen Photonen zu schützen. Für eine detaillierte Darstellung der SPARC-EBIT sei auf die Diplomarbeit von S. Geyer verwiesen [27]. Der experimentelle Aufbau des Kristallspektrometers wird im folgenden Abschnitt beschrieben.

5. Einsatz an der SPARC-EBIT



**Abbildung 5.1.:** Oben: Die Bestandteile des Aufbaus der SPARC-EBIT. Mitte: Die Komponenten der Elektronenstrahlführung und die Driftröhre, die die Falle darstellt. Unten: Die Potentialkonfiguration des Aufbaus. Die Spannungsdifferenz zwischen  $U_K$  und  $U_2$  bilden die Beschleunigungsspannung des Elektronenstrahls.  $U_1$  und  $U_3$  bilden die Potentialwand.

## 5.1. Beschreibung und Funktion der SPARC-EBIT



**Abbildung 5.2.:** Oben: Ein Bild der EBIT von der Firma Dreebit GmbH. Vorne ist der CF 40 Flansch mit Beryllium Fenster zu sehen. Unten: Eine technische Zeichnung der EBIT.

## 5. Einsatz an der SPARC-EBIT

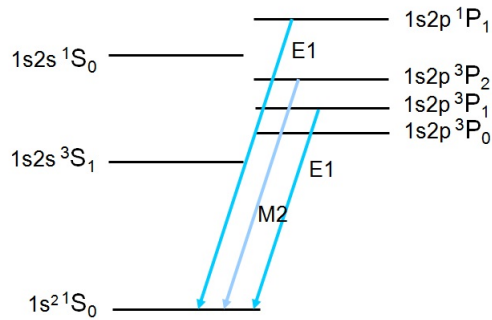
Parameter	Dresden EBIT
Fallenlänge	2 cm
Gewicht	10 kg
Gesamtlänge	25 cm
Magnetische Induktion (auf der Achse)	250 mT
Basisdruck	$10^{-10}$ mbar
Kathodendurchmesser	0,5 mm
max. Elektronenstrom	50 mA
Elektronenstromdichte	$\leq 250 \text{ A/cm}^2$
Elektronenenergie	$\leq 15 \text{ keV}$
Ionisationsfaktor	$2 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$

**Tabelle 5.1.:** Parameter der SPARC-EBIT von der Firma Dreebit GmbH [81].

## 5.2. Aufbau und Durchführung des Experiments

Nachdem Anfang 2011 eine neue Kathode in die SPARC-EBIT eingebaut wurde, wurde das Kristallspektrometer an der EBIT montiert und an die experimentelle Umgebung angepasst. Ziel war in heliumartigen Argon die Übergänge von  $1s2p \ ^1P_1$ ,  $1s2p \ ^3P_1$  und  $1s2p \ ^3P_1$  in den Grundzustand zu detektieren. Diese Übergänge sind von Interesse, da anhand der relativen Intensitäten Rückschlüssen auf die Bevölkerung der angeregten Zustände sowohl durch Elektronstoßanregung als auch aufgrund der Rekombination möglich sind. Des Weiteren sind heliumartige Systeme generell für die Untersuchung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung und QED-Beiträgen von großer Bedeutung, siehe Abschnitt 2.1.4.

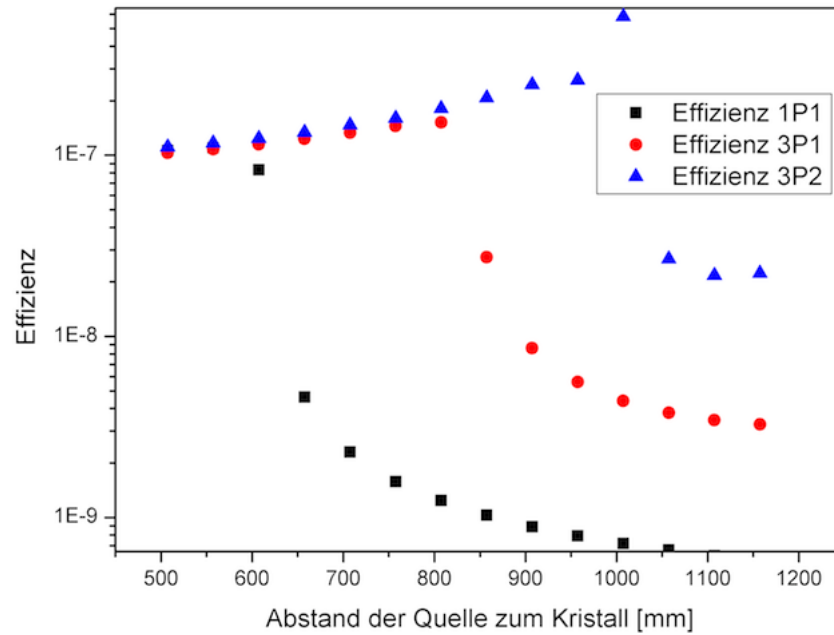
## 5.2. Aufbau und Durchführung des Experiments



**Abbildung 5.3.:** Der  $1s2p\ ^1P_1$  Übergang und die  $1s2p\ ^3P_1$  und  $1s2p\ ^3P_1$  Übergänge im He-artigen Argon

Aufgrund der bei zunehmendem Abstand vom Kristall zur Quelle rapide abfallende Effizienz, wurde das Kristallspektrometer modifiziert. In der Abbildung 5.4 ist zu erkennen, dass der Abstand des Kristalls zur Quelle maximal 570 mm betragen darf. Im Vergleich zum Laboraufbau wurde der Winkelblock direkt an einem CF-63 Doppelkreuzstück befestigt (siehe Abschnitt 4.1). Dadurch konnte der Abstand der Quelle in der EBIT zum Kristall auf 496,7 mm reduziert werden. Das Cadmium-Target war 319,70 mm vom Kristall entfernt. Der Abstand zwischen dem CCD-Chip und dem Kristall ist unverändert geblieben und betrug 1105,40 mm. Der Rowlandkreis steht senkrecht zur horizontalen Ausdehnung der in der EBIT gespeicherten Ionenwolke. Mit dieser Anordnung konnte eine schmale Quelle realisiert werden, die näherungsweise punktförmig ist [47]. Das Cadmium-Target wurde auf dem oberen CF-63 Flansch montiert und wird über eine 30 cm lange Stange vertikal eingeführt, ohne das Vakuum zu zerstören. Links daneben sitzt die Turbomolekularpumpe und gegenüber davon die Röntgenröhre (siehe auch Abbildung 5.5). Die CCD-Kamera ist über der EBIT aufgebaut worden. Da eine Ausrichtung des Spektrometers mit optische Hilfsmittel wie Teleskop oder Laser nicht möglich war, wurde ein zusätzliches Teil für den Eingang der Strahlen aus der EBIT angefertigt. Es handelt sich um ein 60 mm langes Rohr, das vorne am Spektrometer mittig verschraubt wurde. Der Eingang war ein mittig gelegener Durchgang mit einem Durchmesser von 15 mm. Um dies vakuumdicht zu verschließen, wurde eine Hostaphan-Folie mit einer Dicke von  $6\ \mu\text{m}$  verwendet. Diese lag genau mittig auf dem Ausgang der EBIT, dem Berylliumfenster. Es liegt ca. 10 mm hinter dem Ausgang des CF-40 Flansches. Das Kristallspektrometer wurde in diesen Flansch hineingeschoben und mit einer Genauigkeit von  $\pm 0,057^\circ$  horizontal ausgerichtet. Um den CCD-Chip vor Licht zu schützen, wurde der Aufbau lichtdicht geschlossen. Während der Messungen wurde die Hochvakuumröhre,

## 5. Einsatz an der SPARC-EBIT



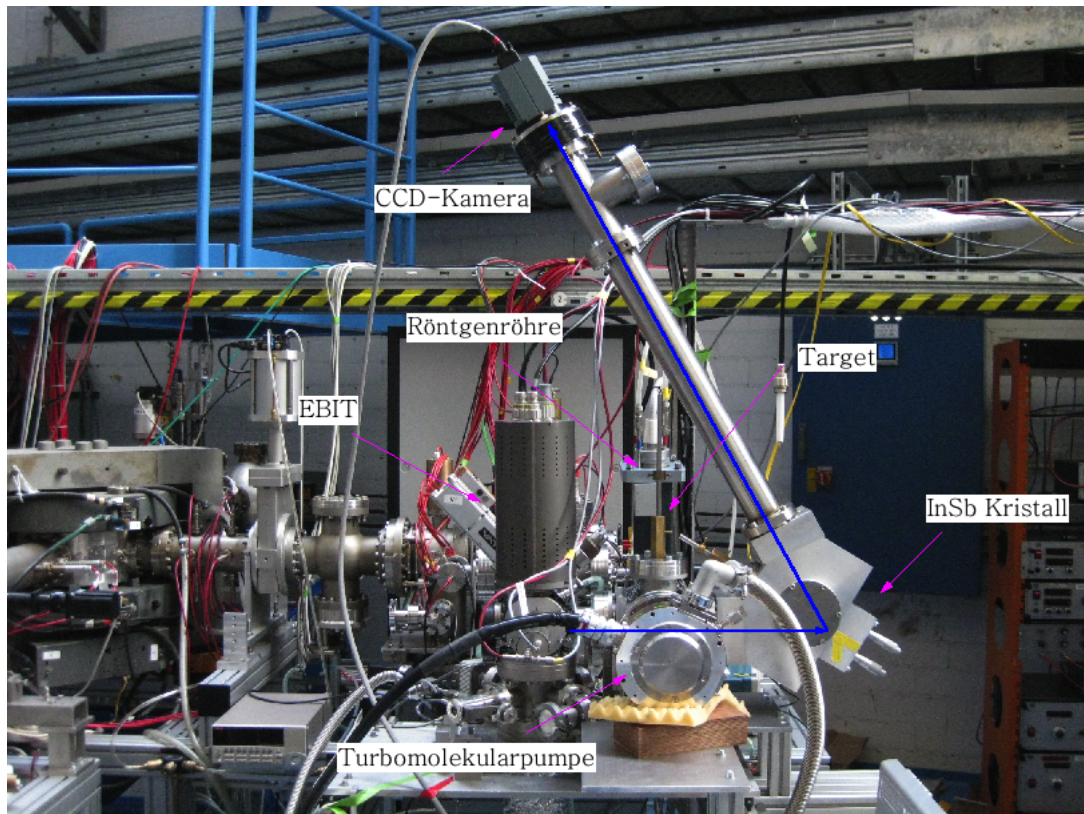
**Abbildung 5.4.:** Simulation der Effizienz des Spektrometers für die He-ähnlichen Übergänge mit MacRay [47] für den SPARC-EBIT. Für die Simulation wurden die Werte von Drake verwendet [82].

wie im Labor ausgeschaltet. Kurz hinter der EBIT befindet sich ein Flugzeit-spektrometer in einer Vakuumkammer. Damit wurden die Einstellungen für die EBIT für He-artiges Argon optimiert. Beim Flugzeitspektrum werden Ionen durch eine konstante Beschleunigungsspannung  $U_b$  über eine Driftstrecke der Länge  $l$  auf einem Detektor hin beschleunigt. Die Zeit  $t$  zum Erreichen des Detektors lautet

$$t = l \sqrt{\frac{m}{2q \cdot U_b}}. \quad (5.2)$$

Damit kann die Driftzeit einem Ladung/Masse-Verhältnis zugeordnet werden.

5.3. Untersuchung des  $1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  Übergangs in He-artigem Argon



**Abbildung 5.5.:** Aufbau des Kristallspektrometers an der SPARC-EBIT. Das Target ist vertikal veränderbar, links davon die Turbomolekularpumpe, gegenüber die Röntgenröhre und vorne der Winkelblock mit dem InSb Kristall. Die CCD-Kamera befindet sich über dem EBIT.

Parameter	Wert
Heizstrom	1,7 A
Kathodenspannung	3,01 kV
U <sub>1</sub>	4,840 kV
U <sub>2</sub>	4,832 kV
U <sub>3</sub>	4,863 kV
Brutzeit	2 s

**Tabelle 5.2.:** Die Einstellung der EBIT während der Messung.

## 5. Einsatz an der SPARC-EBIT

Aufnahme	Schwerpunkt [pixel]
1. Tag	414,098
10. Tag	413,513
17. Tag	413,100
17. Tag	412,567
42. Tag	413,089

**Tabelle 5.3.:** Der Schwerpunkt der verschiedenen Referenzmessung des Cadmium-Übergangs.

Übergang von $\rightarrow 1s^2 \ ^1S$	Energie [eV]	Bragg-Winkel $\theta_B$ [deg]
$1s2 \ ^3P_1$	3123,526	60,05
$1s2 \ ^3P_2$	3126,280	59,97
$1s2 \ ^1P_1$	3139,573	59,55

**Tabelle 5.4.:** Eine Auflistung der Übergänge vom  $Argon^{16+}$  von der L- in die K-Schale, mit den Werten von [82] und einem Wert für die korrigierte Gitterkonstante von  $2d = 4,58092\text{Å}$ .

### 5.3. Untersuchung des $1s2p \ ^1P_1 \rightarrow 1s^2 \ ^1S_0$ Übergangs in He-artigem Argon

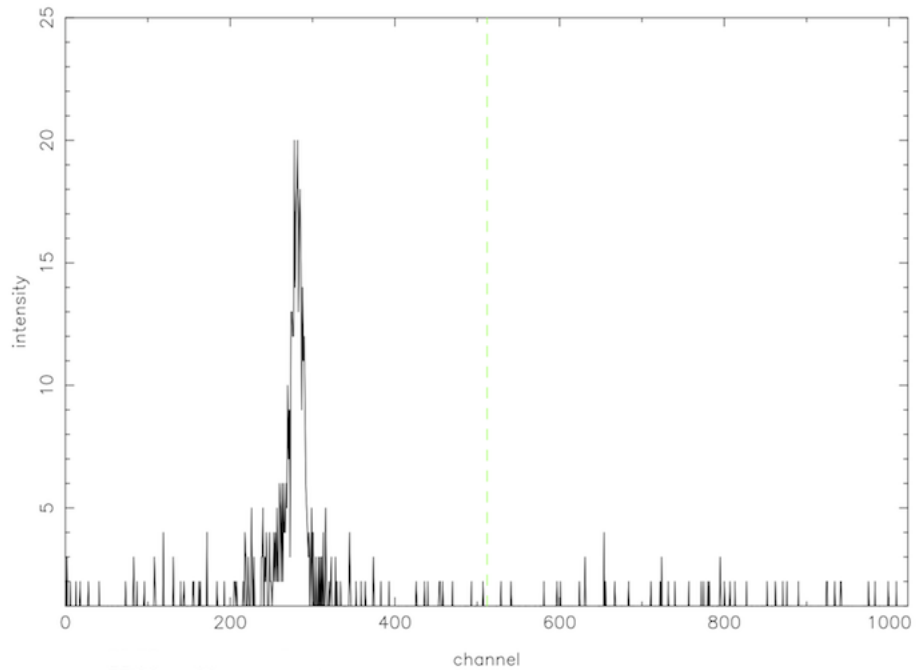
Im Vergleich zu der Röntgenreferenz ist die Quelle in der EBIT, aufgrund der geringen Zahl von gespeicherten Ionen, relativ schwach. In Abschnitt 4.1 wurde erwähnt, dass für lange Aufnahmezeiten die Breite des Rauschens zunimmt. Für eine schwache Quelle, wie wir sie hier vorfinden, empfiehlt es sich, die Aufnahmezeit zu verringern, um den Untergrund zu minimieren. Laut Literatur liegen die  $K\alpha_{1,2}$ -Übergänge von Argon bei  $\sim 3$  keV, siehe Tabelle 5.4. Im Abschnitt 3.5 wurde vermerkt, dass ein freigesetztes Elektron-Loch-Paar aus der CCD einer Energie von 3,65 eV entspricht. Bei einem Photon des gewünschten Übergangs werden somit  $\sim 850$  Elektronen aus dem Valenz- in das Leitungsband gehoben und ausgelesen. Wie in der Abbildung 4.1 gezeigt, nimmt die Breite mit der Aufnahmezeit zu. Bei einer zu langen Aufnahmezeit ( $\sim 3000s$ ) gehen die wahren Events im Rauschen unter, da nicht mehr zwischen Untergrund und wahrem Ereignis unterschieden werden kann. Der ausgewählte Aufnahmemodus ergab mehrere Vorteile. Eine kurze Aufnahmezeit reduzierte nicht nur das Rauschen, sondern sie lag auch auf dem Niveau der Brütungszeit. Der Start der Aufnahme wurde mit dem EBIT-Signal für die Brutszeit extern getriggert. Diese lag bei zwei Sekunden. Dies hat



### 5.3. Untersuchung des $1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ Übergangs in He-artigem Argon

sich für die SPARC-EBIT als optimale Zeit zur Produktion von He-artigem Argon herausgestellt. Im Abschnitt 2.2.1 wurde erwähnt, dass die äußeren Elektronen zuerst ionisiert werden und die stärker gebundenen Elektronen in den inneren Schalen nachfolgen. Um den Untergrund durch niedrig geladenes Argon zu minimieren, wurde die Aufnahme erst 0,5 s nach dem Start des Brutvorgangs gestartet. Ab da fing die Produktion von He-artigem Argon an. Dies führte zu einer effektiven Aufnahme von 1,5 s. Im Abschnitt 3.5.1 wurde erwähnt, dass Rauschen aus mehreren Komponenten besteht. Durch eine längere Auslesezeit konnte in diesem Fall das elektronische Rauschen minimiert werden. Eine Messung lief typischerweise zwei Tage, bevor ein deutlicher Peak auf der CCD zu erkennen war. In dieser Zeit konnte nur eine externe Kühlung durch Wasser die Stabilität der CCD-Temperatur gewährleisten. Für die Messung der He-artigen Übergänge wurde ein Wasserkühler für die Kühlung der CCD-Kamera bis einer Temperatur von  $-60^\circ\text{C}$  eingesetzt. Zwischen den Messungen an der EBIT wurden Referenzmessungen mit dem Cadmium-Target aufgenommen. Eine Ab- und Anschaltung der EBIT war nicht möglich. Deswegen wurde die Brütungszeit auf 0,01 s reduziert, um eine Wechselwirkung des Elektronenstrahls mit dem Argon- sowie dem Restgas zu unterdrücken. Tabelle 5.3 gibt den Schwerpunkt der Cadmium- $L\alpha_1$ -Linie an. Die sehr geringen Schwankungen belegen die hohe Stabilität des Aufbaus über die gesamte Messzeit. Die Abweichungen voneinander sind nur minimal und resultieren höchstwahrscheinlich nicht aus mechanischen Veränderungen, sondern aus einer unterschiedlichen Bewertung der Satellitenlinienintensitäten beim Fitten. Während der Messung an  $\text{Ar}^{16+}$  an der EBIT wurde das Target aus dem Wechselwirkungspunkt mit der Röntgenröhre entfernt. Die Ergebnisse zeigen nur einem Peak mit niedriger Intensität auf der höherenergetischen Seite der CCD, siehe Abbildung 5.6. Naiv würde man stattdessen drei Linien erwarten, siehe Abbildung 5.3.

## 5. Einsatz an der SPARC-EBIT

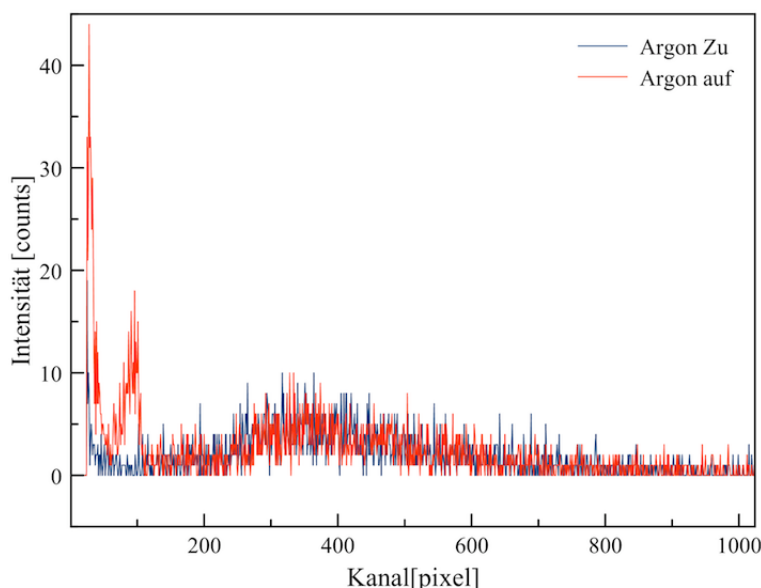


**Abbildung 5.6.:** Ortsbild des He-artigen Argon Übergangs.

Die untersuchten Übergänge des He-artigen Argons können das Ergebnis zweier Prozesse in erster Ordnung sein. Die im Grundzustand gebundenen Elektronen eines heliumartigen Argons können durch Elektronenstoßanregung in die L-Schale gehoben werden und emittieren beim Abregen ein Röntgenphoton. Die andere Möglichkeit besteht über die Rekombination eines wasserstoffartigen Argons und den anschließenden Zerfall oder Kaskaden-Übergänge ein Röntgenphoton zu produzieren. Eine zusätzliche Möglichkeit soll der Vollständigkeits halber erwähnt werden. Im Li-artigen Argon kann durch Ionisation eines Elektrons in der K-Schale und anschließende Anregung des Elektrons in den  $1s2p$   $^3P_{1,2}$ -Niveau gehoben werden und dann ein Röntgenphoton emittiert werden. Dieser Prozess hat einen ca. viermal kleineren Wirkungsquerschnitt als eine Ionisation des Elektrons in der L-Schale und ist für diese Arbeit vernachlässigbar. Der eine Peak aus Abbildung 5.6 konnte mittels der Cadmium-Referenz als der  $^1P_1$  Übergang in den Grundzustand identifiziert werden (die Formel zur Bestimmung unbekannter Linien mit einer Referenzlinie wird im Anhang A.1 hergeleitet). Die niedrige Intensität ist der schwachen Quelle der EBIT geschuldet. Messungen an der Super-EBIT in Heidelberg oder Livermore konnten dank stärkerer Magnetfelder und Elektronenstrahlen eine größere Anzahl Ionen im gewünschten Ladungszustand erzeugen und so eine höhere Intensität

### 5.3. Untersuchung des $1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ Übergangs in He-artigem Argon

erzielen, siehe [83, 84]. Um sicherzugehen, dass wir wirklich die Übergänge von Argon sehen, wurde eine Testmessung mit geschlossenem Einlassgasventil durchgeführt.



**Abbildung 5.7.:** Energiespektrum zweier Messungen, jeweils mit einem offenen Argon Gasventil (rot) und einem geschlossenen (blau), bei gleichen Parametern.

In Abbildung 5.7 ist ein Vergleich der Energiespektren der CCD für die Messung mit und ohne Argon in der EBIT dargestellt. Im Fall von Argon ist im Bereich der Kanäle 60–120 Pixel eindeutig eine Linie zu erkennen. Des Weiteren ist eine gute Übereinstimmung des Untergrunds festzustellen. Vermutlich handelt es sich bei dieser Strahlung um eine Mischung aus Bremsstrahlung und Fluoreszenz des Aufbaus durch die Röntgenstrahlen aus der EBIT. Das Ortsbild der Linie zeigt, dass die Auflösung des Spektrometers bei 0,4 eV liegt und eine mögliche Verbreiterung durch Bewegungen des Ions in der Falle ist in der Größenordnung von meV und somit vernachlässigbar. Bei dem Ortsbild um Kanal 100 handelt es sich um den Reflex des Singulett-Übergang von der L- in die K-Schale. Das Fehlen von den Triplett Übergängen und von möglichen Satelliten-Übergängen von Li-ähnlichem Argon fällt auf. Aufgrund der geringen Intensität sind Schlussfolgerungen nur schwer zu belegen. Doch ein Vergleich mit Ergebnissen aus anderen Experimenten zeigt ein ähnliches Bild [83, 85]. Der Grund liegt wahrscheinlich in der bevorzugten Population

## 5. Einsatz an der SPARC-EBIT

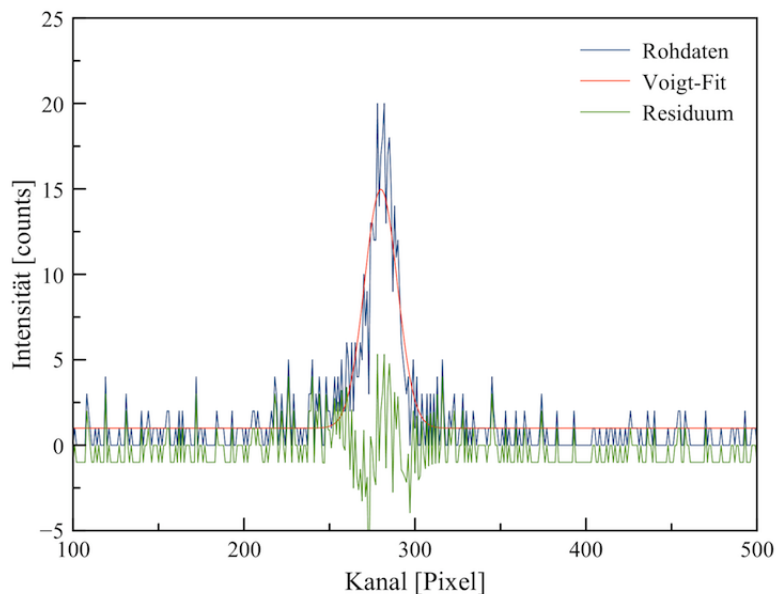
des  $1s2p\ ^1P_1$ -Niveaus durch Elektronenstoßanregung in diesem Energiebereich. Ein tieferer Blick auf die Spinkonfiguration liefert eine mögliche Erklärung. Bei einer Bevölkung der Triplett-Niveaus ist ein Spin-Flip erforderlich, welcher im Vergleich zum Singulett-Niveau von Elektronenstoßanregung nicht bevorzugt wird. Theoretische relativistische Modelle sagen für eine Bevölkung des  $1s2p\ ^1P_1$ -Niveaus einen höheren Wirkungsquerschnitt voraus als für die Triplett-Niveaus [85, 86]. Neben der Elektronenanregung, können die Übergänge auch durch Rekombinationsprozesse induziert werden (siehe Abschnitt 2.2). In unserem Fall spielt die Dielektronische Rekombination keine Rolle, da die kinetisch Energie des Elektrons mit  $\sim 9$  keV nicht im Bereich einer Resonanz liegt. Bei der radiativen Rekombination wurden in Plasmen allerdings eine deutliche Steigerung des Wirkungsquerschnittes für die Triplett-Übergänge gemessen [87]. Erstaunlicherweise konnte in einem Experiment von Deslattes und Beyer bei Stoß-Prozessen zwischen Ionen und Argongas in etwa eine gleich große Population von Singulett und Triplett-Zuständen beobachten werden [73]. Anscheinend sind Prozesse wie Rekombination oder Ionenanregung nicht in dem Maße populationsselektiv wie die Elektronenstoßanregung. Bei der radiative Rekombination werden die Elektronen aus dem Kontinuum in ein wasserstoffartigen Argon eingefangen. Eine Selektion der Elektronen anhand ihrer Spinzustände erfolgt dabei nicht. Da wir keine Übergänge außer dem Singulett-Übergang beobachten und der Anteil von wasserstoffartigen Argon minimal ist, können wir daraus schließen, dass die Elektronenstoßanregung für diese EBIT unter den in Tabelle 5.2 eingestellten Parametern, der dominierende Prozess ist.

Linie	Energie [eV]	Fehler [eV]	FWHM	Fehler
$1s2p\ ^1P_1$	3139,485	0,056	0,414	0,028

**Tabelle 5.5.:** Die in dieser Arbeit gemessene Energie für den  $1s2p\ ^1P_1$  Übergang.

Während der Messungen wurden fünf Referenzmessungen durchgeführt und der Mittelwert der  $L\alpha_1$ -Linie von Cadmium wurde für den Fit des He-artigen Argon Übergangs genutzt, siehe auch Tabelle 5.3. Ein Vorteil der Verwendung des Mittelwertes war die Minimierung des Einflusses der Satellitenlinien auf den Schwerpunkt des Cadmium-Übergangs. Für diese Arbeit wurde ein Wert des  $1s2p\ ^1P_1$  Grundzustandsübergang von 3139,485 eV gemessen, siehe auch Tabelle 5.5. Damit konnte der Übergang mit einer relativen Präzision von  $\frac{\Delta E}{E} \approx 10^{-4}$  bestimmt werden. Ein Vergleich des berechneten Wertes für den  $^1P_1$ -Übergang mit theoretischen Rechnungen und anderen Experimenten zeigt, dass in diesem Experiment ein niedrigerer Wert gemessen wurde, aber innerhalb

### 5.3. Untersuchung des $1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ Übergangs in He-artigem Argon



**Abbildung 5.8.:** Voigt-Fit der Linie mit MINUIT [70].

des Toleranzbereiches liegt, siehe Tabelle 5.5.

Fehler	Wert [eV]
Referenz	0,047
Abstand CCD zum Kristall	0,001
Gesamt systematischer Fehler	0,047
Gesamt statistischer Fehler	0,031
Gesamt Fehler	0,056

**Tabelle 5.6.:** Auflistung der einzelnen Fehlerquellen und ihre Beiträge.

Auffallend an Tabelle 5.6 ist die Dominanz des Referenzfehlers am Gesamtfehler. Der Einfluss des statistischen Fehlers ist um einen Faktor 1,5 kleiner im Vergleich zu den systematischen. Höchstwahrscheinlich liegt der Grund an den fehlenden Satellitenlinien, die die Bestimmung des Schwerpunktes des Singulett-Übergangs erleichtert und somit die Genauigkeit erhöht. Der in dieser Arbeit ermittelte Wert für die Übergangsenergie des Singulett in den Grundzustand liegt nah an dem Wert, der an der Heidelberg-EBIT gemessen wurde [88] und der früheren Messung am UNILAC [73]. Im letztgenannten Experiment wurde die Druckabhängigkeit der Satellitenübergänge gezeigt.

5. Einsatz an der SPARC-EBIT

Methode	Energie [eV]
BSQED	3139,582
UM	3139,577
AO	3139,582

**Tabelle 5.8.:** Eine Auflistung der verschiedenen theoretischen Werte für den  $1s2p$   $^1P_1$  Übergang in den Grundzustand [82, 15, 1].

Durch die höhere Dichte waren vermehrt Satellitenlinien zu beobachten, die die Bestimmung des Schwerpunktes des Peaks beeinflussen könnten. Die induzierten selektiven Übergänge durch Elektronenstoßanregung in diesem Experiment und fehlende Übergänge durch Rekombinationsprozesse sowie fehlende Satellitenlinien bewirkten eine genaue Bestimmung des  $1s2p$   $^1P_1$  Übergangs in den Grundzustand. Mögliche Einflüsse der Satellitenlinien auf den Schwerpunkt des Referenzwertes kann die Ursache sein, dass ein niedriger Wert gemessen wurde.

Experiment	Energie [eV]
Deslattes [73]	3139,552[37]
Bruhns [88]	3139,583[6]
Dieses Experiment	3139,485[56]

**Tabelle 5.7.:** Die Energie für den  $^1P_1$  Übergang von anderen Experimenten.

## 6. Zusammenfassung und Ausblick

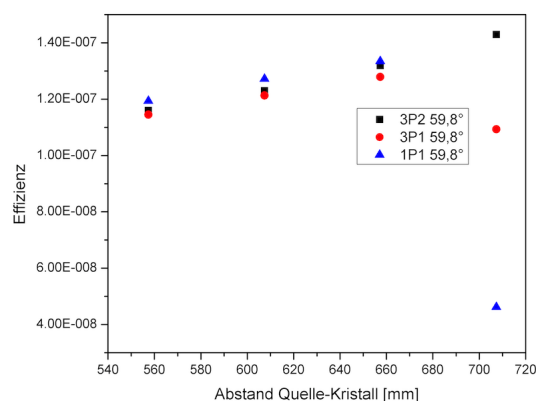
In dieser Arbeit wurden die Ergebnisse des neu gebauten Kristallspektrometers für die  $K\alpha$ -Übergänge des He-artigen Argon präsentiert. Im Labor wurden die Eigenschaften des in Johann-Geometrie gebauten Kristallspektrometers untersucht und für den Einsatz an der SPARC-EBIT vorbereitet. Eine ortsempfindliche CCD-Kamera diente zum Nachweis der Röntgenstrahlen. Als Referenzlinien bzw. Untersuchungsgegenstand im Labor wurden die  $L\alpha_{1,2}$ -Linien von Cadmium in erster Ordnung und die  $L\alpha_{1,2}$ -Übergänge von Terbium in zweiter Ordnung verwendet. Dabei wurde gezeigt, dass der gewünschte Energiebereich im He-ähnlichen Argon mit der CCD-Kamera unter der aufgebauten Geometrie abgedeckt wird. Des Weiteren wurden die Abbildungseigenschaften des Spektrometers bei Variation verschiedener Parametern, wie Abstand zwischen Kristall und Quelle, untersucht. Das Experiment an der SPARC-EBIT verlief erfolgreich und ein Spektrum der heliumartigen Argon-Übergänge konnte detektiert werden. Die gemessene Energie des  $1s2p\ ^1P_1$  Übergangs in den Grundzustand konnte auf einen Wert von 3139,485 eV bestimmt werden. Der gemessene Wert war aufgrund von fehlenden Störeinflüssen präzise und stimmt mit den theoretischen Voraussagen sowie mit der im Moment exaktesten experimentellen Messung, überein. Eine genaue Untersuchung der QED-Korrekturen war wegen der Ungenauigkeit der Referenzlinie nicht möglich. Auch wurde gezeigt, dass das Kristallspektrometer in Johann-Geometrie über eine hohe Auflösung verfügt, aber der Energiebereich auf rund 30 eV beschränkt ist. Um den Energiebereich zu vergrößern und sensibel auf andere Übergänge zu werden und somit mehr Informationen aus den Wechselwirkungsprozessen zu gewinnen, werden ein größerer Kristall und ein größerer Detektor benötigt. Ein größerer ortsempfindlicher Detektor wäre technisch lösbar, aber ein größerer Kristall ist aufgrund der komplizierten Herstellung und Biegung in der nötigen Güte nur schwer realisierbar. Eine andere Option zur Steigerung des Energiebereichs bestünde darin, ein flexibles Spektrometer mit verstellbaren Winkeleinstellungen und Abständen von Kristall zur Quelle bzw. Detektor zu konstruieren. Mit einem neuen fehlerfreien Kristall ließe sich wahrscheinlich auch die Präzision steigern. Für Präzisions-

## 6. Zusammenfassung und Ausblick

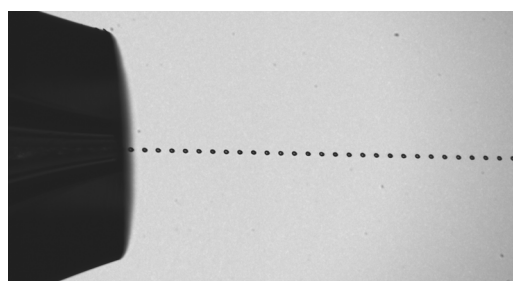
spektroskopie ist eine genaue Kenntnis der Referenzlinie unabdingbar. Wie in diesem Versuch gezeigt, verschmieren die Satellitenlinien von Cadmium den  $L\alpha_1$ -Übergang und der Messfehler wird von der Unsicherheit der Referenzlinie dominiert. Ein Experiment im Experimentier-Speicher-Ring (ESR) könnte diesem Problem vorbeugen. Anders als in einer EBIT sind im ESR reine Ladungszustände erzielbar. Als Referenzlinie könnte beispielsweise der präzise vermessene  $Ly\alpha_1$ -Übergang des wasserstoffartigen Argons dienen. Eventuelle Einflüsse durch Satelliten und Rydberg-Zustände werden nicht ganz vermieden werden können, aber eine Reduzierung auf ein Minimum im Vergleich zu einem EBIT-System ist realisierbar. Eine Alternative zur relativen Energiemessung bestünde darin, ein Doppelkristallspektrometer zu entwickeln. Die Photonen werden von einem fixen Kristall in Richtung eines rotierenden Kristalls reflektiert. Durch die Rotation sind verschiedene Winkeleinstellungen möglich und eine absolute Energie kann gemessen werden. Eine Referenzlinie wäre dann nicht mehr nötig und fiel als Limitierung der experimentellen Genauigkeit weg. Aufgrund der schwachen Ionenquelle war nicht ausreichend Zeit zur Verfügung geblieben, weitere Untersuchungen durchzuführen. Andererseits ist eine Möglichkeit geschaffen worden zu zeigen, dass die SPARC-EBIT ausreichend Ionen produziert, um mit einem Kristallspektrometer Ergebnisse zu gewinnen. Um die Ausbeute zu erhöhen, bestünde die Möglichkeit das Spektrometer mit einem anderen Kristall zu verwenden. Der verwendete InSb (220) Kristall hat einen relativ großen Krümmungsradius von 1,28 m. Bei einem kleineren Krümmungsradius ließe sich die Effizienz steigern, da der Raumwinkel erhöht werden kann. Eine zusätzliche Einsatzmöglichkeit des Kristallspektrometers ist die Messung des Innenschalenübergangs im He-artigen Uran. Mit der Bestimmung der Energie des  $1s2p\ ^3P_2 \rightarrow 1s2s\ ^3S_1$  Übergangs kann u.a. eine Untersuchung der Quantenelektrodynamik in Vielelektronensystemen unter Einfluss starker Felder durchgeführt werden.

Des Weiteren wurde in dieser Arbeit gezeigt, wie stark die Bevölkerung des  $^1P_1$  Niveaus gegenüber den Triplet-Zuständen durch Elektronenstoßanregung favorisiert wird. Auch die Ergebnisse der Heidelberg-EBIT am MPI-K[9] unterstützen diesen Befund. Wohingegen in dichten Plasmen die Bevölkerung der Triplet Unterniveaus höher ausfällt [87]. In Stoßprozesse zwischen Ionen und Argon wurde gezeigt, dass die Bevölkerung der Zustände sich auf gleichem Niveau befinden [73]. In einem für die nahe Zukunft geplantes Experiment wird das Bevölkerungsverhalten in laserproduzierten Plasmen im heliumartigen Argon untersucht. Bei dem Experiment von P. Neumayer werden hochenergetische Laserpulse des Petawatt High Energy Laser for Ion Experiments (PHELIX) auf Argontröpfchentargets geschossen, siehe Abbildung 6.2. Die Gruppe von R. Grisenti ist in der Lage Targetclusters herzustellen, die wenig





**Abbildung 6.1.:** Die Effizienz der He-artigen Übergänge aufgetragen gegen den Abstand zwischen Quelle und Kristall bei einem Winkelblock von  $59,8^\circ$ .



**Abbildung 6.2.:** Abbildung des Tröpfchen Argontargets der Grisenti Gruppe.

bis gar keine Relaxation aufweisen. Die Geometrie des Kristallspektrometers muss dem experimentellen Umfeld angepasst werden. Die experimentelle Bedingung erfordert einen minimalen Abstand von der Quelle zum Kristall von  $\sim 630$  mm. Gemäß der Simulation würde bei dem jetzigen Aufbau, die Singulett-Linie nicht detektierbar sein. Aus diesem Grund wurde ein neuer Winkelblock mit  $59,8^\circ$  geplant. Durch diese Winkeländerung ist ein längerer Abstand von der Quelle zum Kristall möglich. Speziell für die Astrophysik ist es hilfreich, aus dem Wissen der Atomphysik zu schöpfen. Über 95 % der sichtbaren Materie im Universum befindet sich in einem ionisierten Zustand. Mit Ionenquellen, wie die EBIT oder die Beschleunigungsanlage der GSI ist es möglich, Experimente unter kontrollierbaren Parametern durchzuführen und Ergebnisse auszuwerten unter Bedingungen, die in planetaren Gaswolken und auch in Sonnen herrschen. In Sonneneruptionen wurden genau die in dieser Arbeit untersuchten Übergänge von Argon mittels Kristallspektrometer beobachtet.



# A. Anhang

## A.1. Herleitung der Dispersionsformel

Für ein Kristallspektrometer ist eine einzelne Referenzlinie ausreichend, um die unbekannte Linie für den ganzen Detektor den Einfallsort der Strahlung in Energieinformation übersetzen zu können. Die dafür nötige Dispersionsformel soll im folgenden hergeleitet werden.

Die Bragg-Gleichung aus Abschnitt 2.4.3.3 lautet:

$$n\lambda = 2d \sin \theta \quad (\text{A.1})$$

und die Energie eines Photons aus Abschnitt 2.4.1 ist gegeben durch

$$E = h\nu = h \frac{c}{\lambda}. \quad (\text{A.2})$$

Daraus ergibt sich für die Beziehung zwischen Photonenenergie und Brechungswinkel folgender Ausdruck:

$$E = \frac{hc}{2d \sin \theta}. \quad (\text{A.3})$$

Die Ableitung bei einer kleinen Winkeländerung  $\Delta\theta$  lautet:

$$\frac{\Delta E}{\Delta\theta} = -\cot \theta \cdot \frac{hc}{2d \sin \theta}. \quad (\text{A.4})$$

Einsetzen der ursprünglichen Bragg-Gleichung und Auflösen nach  $\Delta E$  ergibt dann:

$$\Delta E = -E \cdot \frac{\Delta\theta}{\tan \theta}. \quad (\text{A.5})$$

Für kleine Winkelabweichung gilt  $\Delta\theta = \sin \Delta\theta$  und so ergibt sich:

$$\sin \Delta\theta \approx \frac{\Delta d}{D}, \quad (\text{A.6})$$

## A. Anhang

wobei  $\Delta d$  der Abstand der unbekannte Linie von der Referenzlinie ist und  $D$  der Abstand vom Kristall zum ortsempfindlichen Detektor. Die Energie einer unbekanntes Linie lässt sich daher mittels einer bekannten Referenzlinie folgendermaßen bestimmen:

$$E_{unbekannt} = E_{Ref} \pm E_{Ref} \frac{\Delta d}{D \cdot \tan \theta}. \quad (\text{A.7})$$

Da es sich um eine stationäre Quelle handelt, werden keine weitere Korrekturen vorgenommen. Ansonsten müsste auf der rechten Seite ein Faktor  $\gamma$  bei bewegenden Quellen hinzugefügt werden. Werden Referenzlinien höherer Ordnung verwendet, muss die entsprechende Energie durch den Faktor  $n$  dividiert werden, wobei  $n$  die Anzahl der Ordnung wiedergibt

## A.2. Terbium

Die Aufnahme von Terbium sollte dazu dienen, die Materialabhängigkeit des Schwanzes im Cadmium-Spektrum zu bestätigen. Aufgrund der Bragg-Streuung in zweiter Ordnung war die Intensität niedriger als bei Cadmium. In diesem Anhang sind die Energie- wie Ortsspektren für Terbium aufgelistet. Auffallend ist eine Asymmetrie zwischen den Peaks. Da keine Satellitenlinien in diesem Energiebereich in der Literatur gefunden wurden, konnten keine in die Analyse einfließen. Die Asymmetrie könnte durch etwaige Kristallfehler verursacht werden.

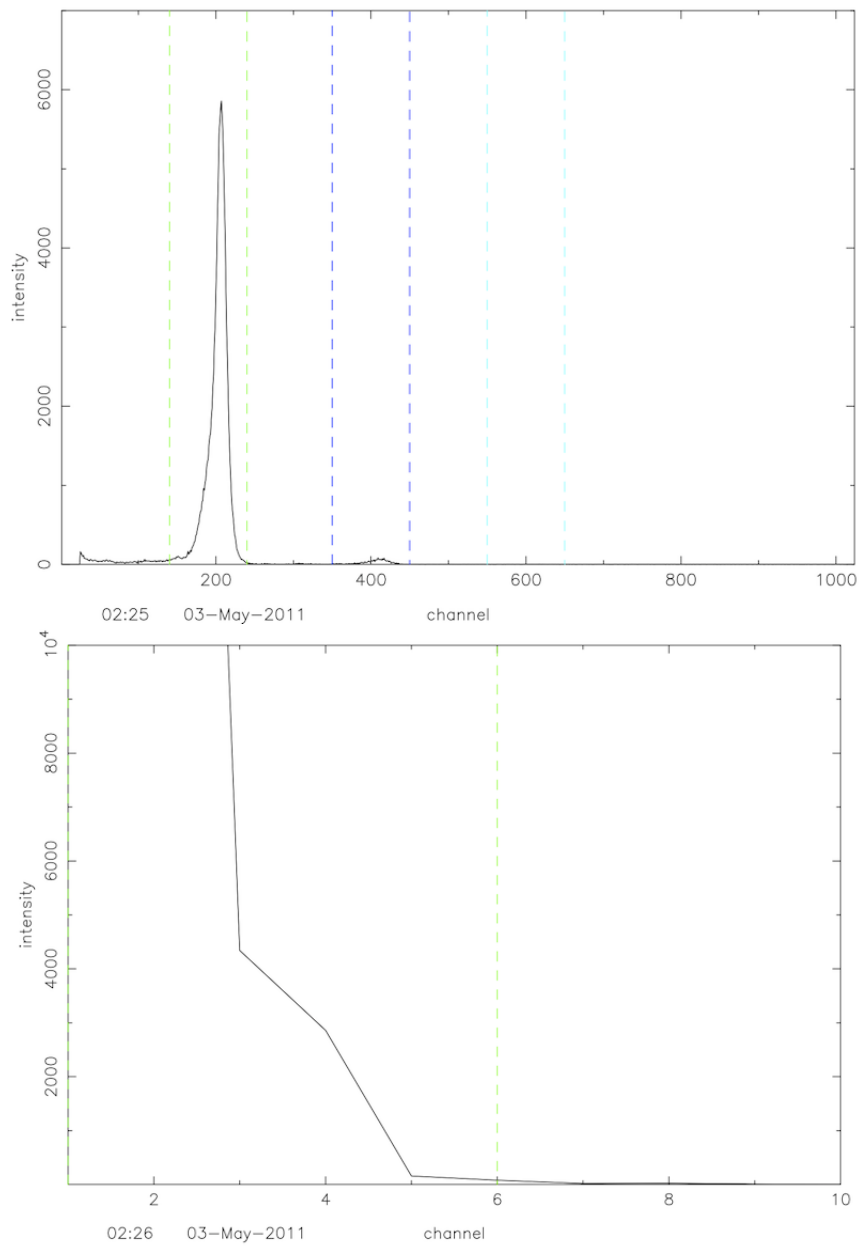
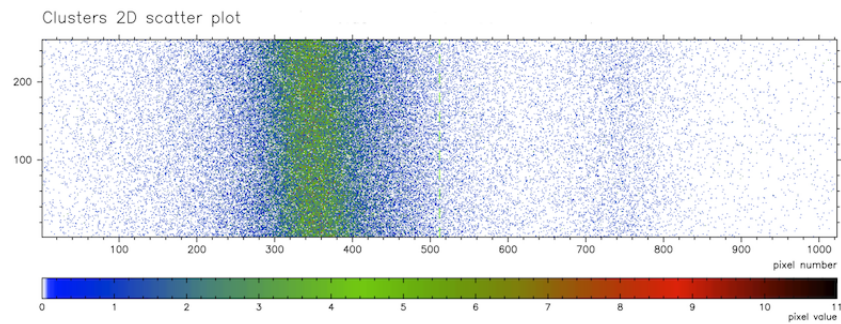
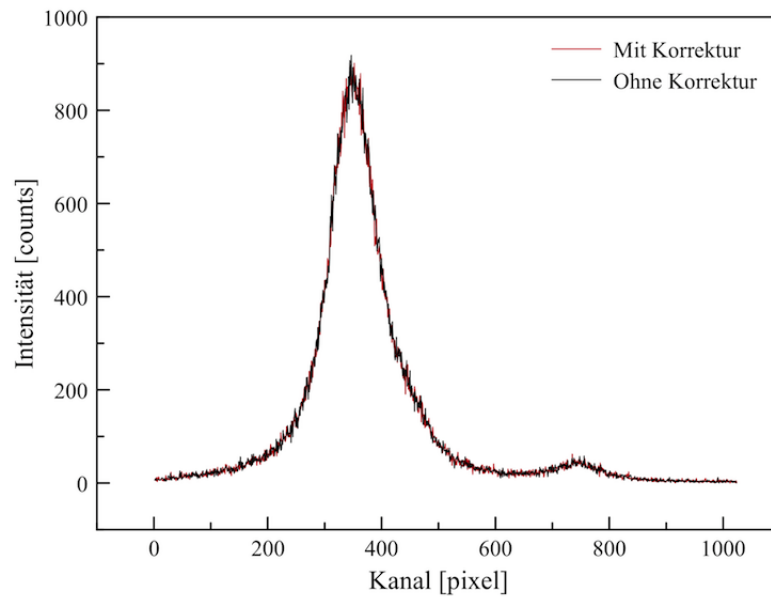


Abbildung A.1.: Oben: Energiespektrum von Terbium. Unten: Die Cluster Verteilung

## A. Anhang

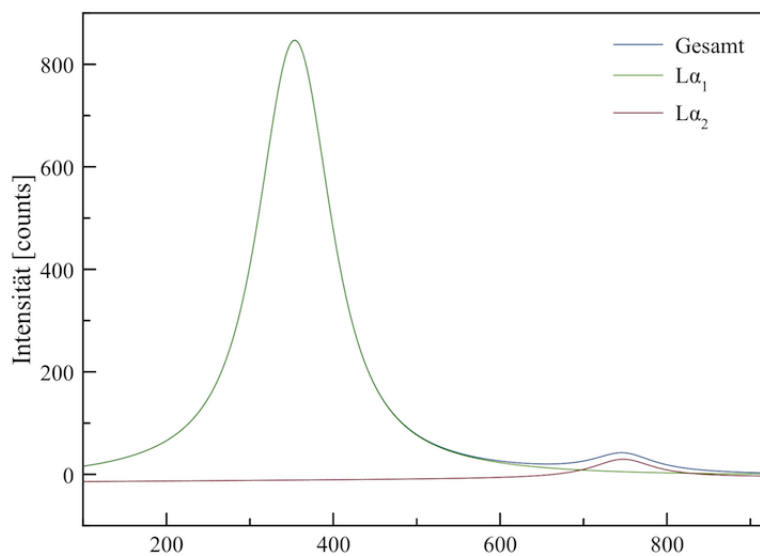


**Abbildung A.2.:** Zweidimensionales Orstbild des Terbium Spektrums. Links ist die starke  $L\alpha_1$  Linie zu sehen und rechts, eine schwache  $L\alpha_2$  Linie.



Parameter	a	b	c
Wert	379,9168	0,0301	$0,3314 \cdot 10^{-4}$

**Abbildung A.3.:** Oben: Das Ternium Spektrum. Wie bei dem Cadmium Spektrum spielen die Krümmungskorrekturen keine signifikante Rolle. Unten: Die Auswertung des Spektrums



Linie	Energie [eV]	Fehler [eV]	Halbwertsbreite [eV]	Fehler [eV]
$L\alpha_1$	6271,15	0,93	4,545	0,053
$L\alpha_2$	6138,84	0,94	3,804	0,238

**Abbildung A.4.:** Oben: Ein Ortspektrum der Terbium  $L\alpha_{1,2}$  Übergänge in zweiter Ordnung. Unten: Die Ergebnisse der Fit-Analyse.

Die Abweichungen gegenüber den Literaturwerten sind womöglich auf Fehler im Kristall oder höchstwahrscheinlich auf unauflösbare Satellitenübergänge zurückzuführen. Wie bei Cadmium dominieren die Fehler des Literaturwertes für den Gesamtfehler.





# Abbildungsverzeichnis

2.1. Feynman-Diagramme für die Selbstenergie und Vakuumpolarisation . . . . .	9
2.2. Lamb-Verschiebung in einem wasserstoff-artigen System . . .	10
2.3. Wirkungsquerschnitt der einzelnen Komponenten der Lamb-Verschiebung. . . . .	11
2.4. QED-Korrekturen eines zwei Elektronen Systems . . . . .	13
2.5. Grafische Darstellung von Satellitenübergängen. . . . .	15
2.6. Grafische Darstellung des Auger-Prozesses und des Shake-Up- bzw. Shake-Off-Effektes. . . . .	16
2.7. Grafische Darstellung der Radiativen Rekombination [27]. . .	21
2.8. Schematische Darstellung der Dielektronische Rekombination.	22
2.9. Produktion von Bremsstrahlung durch Beschleunigungsänderung des Elektrons durch einen positiven Kern . . . . .	23
2.10. Wirkungsquerschnitt verschiedener Photon-Materie-Prozesse .	25
2.11. Comptonstreuung an einem quasifreien Elektron . . . . .	27
2.12. Grafische Darstellung der elastischen Streuung. . . . .	29
2.13. Konstruktive Reflektion an Netzebenen. . . . .	31
3.1. Ein Spektrometer in Von Hamos Anordnung. . . . .	34
3.2. Kristallspektrometer in Johann-Geometrie. . . . .	36
3.3. Ein Beispiel für ein kubisch flächenzentriertes Kristallsystem. .	38
3.4. Ansicht der Netzebenen für die Millerschen Indizes $h = 2$ , $k = 2$ und $l = 0$ . . . . .	39
3.5. Simulierte Rocking-Kurve von InSb (220) bei einer Energie von 3.130 keV. . . . .	40
3.6. Modifizierter Bragg Winkel durch Brechung. . . . .	42
3.7. Die Johann Verbreiterung in graphischer Darstellung. . . . .	43
3.8. Simuliertes Röntgenspektrum von Molybdän als Anodenmaterial bei einer Energie von 30 keV. . . . .	45
3.9. CCD-Kamera von Andor, Typ DO420 BR-DD mit einer Matrix von 1024 x 255 Pixel. . . . .	45

3.10. Eine Kurve über die Quanteneffizienz verschiedener CCD-Kameras von Andor. . . . .	46
4.1. Rauschen aufgetragen gegen die Aufnahmezeit in Sekunden. . . . .	52
4.2. Schematische Darstellung der Clusteranalyse. . . . .	54
4.3. Der Aufbau im Labor. . . . .	57
4.4. Intensität aufgetragen gegen die Targetposition. . . . .	58
4.5. Intensität in Abhängigkeit von Strom und Spannung. . . . .	58
4.6. Die Intensität bei verschiedenen Maskenabständen. . . . .	59
4.7. Energiespektrum jeweils ohne und mit die Cluster-Analyse. . . . .	61
4.8. Verteilung der Clustergrößen. . . . .	62
4.9. Zweidimensionales Ortsspektrum . . . . .	62
4.10. Das Ortsbild des Cadmium Spektrum mit einer Krümmungskorrektur. . . . .	63
4.11. Verschiebung der Linie aufgrund mechanischer Veränderungen. . . . .	64
4.12. Das Cadmium Spektrum unter verschiedenen Winkel. . . . .	66
4.13. Simulation des $\frac{L\alpha_1}{L\alpha_2}$ Verhältnisses mit MacRay unter verschiedenen Winkeln. . . . .	67
4.14. Ortsbild des Cadmium $L\alpha_{1,2}$ ohne einen abfallenden Schwanz. . . . .	68
4.15. Ergebnisse der Auswertung. . . . .	70
5.1. Schematischer Aufbau der SPARC-EBIT. . . . .	74
5.2. Ein Bild der EBIT von der Firma Dreebit GmbH. . . . .	75
5.3. Der $1s2p\ ^1P_1$ Übergang und die $1s2p\ ^3P_1$ und $1s2p\ ^3P_1$ Übergänge im He-artigen Argon . . . . .	77
5.4. Simulation der Effizienz des Spektrometers für die He-ähnlichen Übergänge mit MacRay. . . . .	78
5.5. Aufbau des Kristallspektrometers an der SPARC-EBIT. . . . .	79
5.6. Ortsbild des He-artigen Argon Übergangs. . . . .	82
5.7. Energiespektrum bei geschlossenem und geöffnetem Argonventil. . . . .	83
5.8. Voigt-Fit der Linie mit MINUIT [70]. . . . .	85
6.1. Die Effizienz der He-artigen Übergänge bei einem Winkelblock von $59,8^\circ$ . . . . .	89
6.2. Abbildung des Tröpfchen Argontargets der Grisenti Gruppe. . . . .	89
A.1. Oben: Energiespektrum von Terbium. Unten: Die Cluster Verteilung . . . . .	93
A.2. Zweidimensionales Ortsbild des Terbium Spektrums. . . . .	94
A.3. Das Terbium Spektrum mit Krümmungskorrektur. . . . .	94
A.4. Fit der Terbium-Linie. . . . .	95

# Tabellenverzeichnis

3.1. Die Übergangsenergien der Referenzlinien und ihre Bragg-Winkeln. . . . .	49
4.1. Die Tabelle gibt die Halbwertsbreite in Abhängigkeit der Maskenabständen wieder. . . . .	59
4.2. Tabelle mit dem $\frac{L\alpha_1}{L\alpha_2}$ Verhältnis der einzelnen Messungen. . .	66
4.3. Auflistung der Satellitenlinien auf der höherenergetischen Seite [75]. . . . .	68
5.1. Parameter der SPARC-EBIT von der Firma Dreebit GmbH [81].	76
5.2. Die Einstellung der EBIT während der Messung. . . . .	79
5.3. Der Schwerpunkt der verschiedenen Referenzmessung des Cadmium-Übergangs. . . . .	80
5.4. Eine Auflistung der Übergänge vom <i>Argon</i> <sup>16+</sup> in den Grundzustand. . . . .	80
5.5. Die in dieser Arbeit gemessene Energie für den $1s2p\ ^1P_1$ Übergang. . . . .	84
5.6. Auflistung der einzelnen Fehlerquellen und ihre Beiträge. . .	85
5.8. Auflistung der Werte des Singulett-Linie von verschiedenen theoretischen Ansätze. . . . .	86
5.7. Die Energie für den $^1P_1$ Übergang von anderen Experimenten.	86



# Literaturverzeichnis

- [1] 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(6):062104, Jun 2005.
- [2] E. Schrödinger. Quantisierung als eigenwertproblem. *Annalen der Physik*, 386(18):109–139, 1926.
- [3] B.H. Bransden and C.J. Joachain. Physics of atoms and molecules. 2nd Edition, 2003.
- [4] J. C. Slater. Atomic shielding constants. *Phys. Rev.*, 36(1):57–64, Jul 1930.
- [5] P. A. M. Dirac. The quantum theory of the electron. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, 117(778):610–624, 1928.
- [6] W. E. Lamb and R. C. Retherford. Fine structure of the hydrogen atom by a microwave method. *Phys. Rev.*, 72(3):241–243, Aug 1947.
- [7] T. Stöhlker. Atomphysik sehr starker zentralfelder: Die röntgenstrahlung der schwersten ein- und zwei-elektronensysteme. *Habilitationsschrift, Johann-Wolfgang-Goethe-Universität*, 1998.
- [8] W. R. Johnson and Gerhard Soff. The lamb shift in hydrogen-like atoms, 1 [less-than-or-equals, slant] z [less-than-or-equals, slant] 110. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 33(3):405 – 446, 1985.
- [9] K. Kubicek. *Absolut- und Relativbestimmungen der Energien von 2p-1s-Übergängen in wasserstoff-, helium- sowie lithiumartigen Schwefel-, Argon- und Eisenionen*. PhD thesis, MPI-K, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2010.
- [10] A. Gumberidze. Quantum electrodynamics in strong electric fields: The ground-state lamb shift in hydrogenlike uranium. *Phys. Rev. Lett.*, 94(22):223001, Jun 2005.

- [11] H.F. Beyer, Th. Stöhlker, D. Banas, D. Liesen, D. Protic, K. Beckert, P. Beller, J. Bojowald, F. Bosch, E. Förster, B. Franzke, A. Gumberidze, S. Hagmann, J. Hozzowska, P. Indelicato, O. Klepper, H.-J. Kluge, St. König, Chr. Kozhuharov, X. Ma, B. Manil, I. Mohos, A. Orsic-Muthig, F. Nolden, U. Popp, A. Simionovici, D. Sierpowski, U. Spillmann, Z. Stachura, M. Steck, S. Tachenov, M. Trassinelli, A. Warczak, O. Wehrhan, and E. Ziegler. Focal: X-ray optics for accurate spectroscopy. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 59(10-11):1535 – 1542, 2004. 17th International Congress on X-Ray Optics and Microanalysis.
- [12] R. Reuschl. *Untersuchungen zur Lamb-Verschiebung in schweren Ein- und Zwei-Elektronen-Systemen*. PhD thesis, Johann-Wolfgang-Goethe Universität,, Frankfurt 2009.
- [13] W. R. Johnson, I. M. Savukov, U. I. Safronova, and A. Dalgarno. E1 transitions between states with  $n = 1-6$  in helium-like carbon, nitrogen, oxygen, neon, silicon, and argon. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 141(2):543, 2002.
- [14] A.M Costa, M.C Martins, F Parente, J.P Santos, and P Indelicato. Dirac-fock transition energies and radiative and radiationless transition probabilities for ar9+ to ar16+ ion levels with k-shell holes. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 79(2):223 – 239, 2001.
- [15] 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(5):3519–3530, 1994.
- [16] 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. Tachenov, 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(20):203004, May 2004.
- [17] L. Meitner. Über die beta strahl spektra und ihren zusammenhang mit der gamma strahlung. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 11:35–54, 1922. 10.1007/BF01328399.
- [18] D. Coster and R. De L. Kronig. New type of auger effect and its influence on the x-ray spectrum. *Physica*, 2(1-12):13 – 24, 1935.

- [19] D. Thorn. Electron- and proton-impact excitation in stored hydrogenlike uranium ions. Technical report, GSI, 2009.
- [20] J. H. Scofield.  $k$ - and  $l$ -shell ionization of atoms by relativistic electrons. *Phys. Rev. A*, 18(3):963–970, Sep 1978.
- [21] Y. Namito and H. Hirayama. Implementation of electron-impact ionization into the egs4 code. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 423(2-3):238 – 246, 1999.
- [22] W. Lotz. An empirical formula for the electron-impact ionization cross-section. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 206:205–211, 1967.
- [23] M. Vinodkumar, C. Limbachiya, B. Antony, and K. N. Joshipura. Calculations of elastic, ionization and total cross sections for inert gases upon electron impact: threshold to 2 keV. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 40(16):3259, 2007.
- [24] A. A. Sorokin, L. A. Shmaenok, S. V. Bobashev, B. Möbus, M. Richter, and G. Ulm. Measurements of electron-impact ionization cross sections of argon, krypton, and xenon by comparison with photoionization. *Phys. Rev. A*, 61(2):022723, Jan 2000.
- [25] I.V. Hertel und C.-P. Schulz. *Atome, Moleküle und optische Physik 2*, Springer-Lehrbuch, 2010.
- [26] R. E. Marrs, S. R. Elliott, and J. H. Scofield. Measurement of electron-impact ionization cross sections for hydrogenlike high- $z$  ions. *Phys. Rev. A*, 56(2):1338–1345, Aug 1997.
- [27] S. Geyer. Charakterisierung einer elektronenstrahl-ionenfalle für spar. *Diplomarbeit, Johann-Wolfgang-Goethe-Universität, Frankfurt* 2009.
- [28] A. Müller and R. Frodl.  $l$ -shell contributions to multiple ionization of  $ar^{i+}$  ions ( $i = 1, 2, 3$ ) by electron impact. *Phys. Rev. Lett.*, 44(1):29–32, Jan 1980.
- [29] R. Muller-Fiedler, K. Jung, and H. Ehrhardt. Double differential cross sections for electron impact ionisation of helium. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, 19(8):1211, 1986.
- [30] H. van Regemorter. *Astrophysical Journal*, 136:906, 1962.

- [31] V. Fisher, Y. Ralchenko, A. Goldgirsh, D. Fisher, and Y. Maron. A scaling of multiple ionization cross sections. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 28(14):3027, 1995.
- [32] H.A. Kramers. On the theory of x-ray absorption and of the continuous x-ray spectrum. *Philosophical Magazine*, 6(46):836–871, 1923.
- [33] M. Stobbe. Zur quantenmechanik photoelektrischer prozesse. *Annalen der Physik*, 399(6):661–715, 1930.
- [34] A. Müller. Electron-ion collisions: Fundamental processes in the focus of applied research. volume 55 of *Advances In Atomic, Molecular, and Optical Physics*. Academic Press, 2008.
- [35] C. Brandau, C. Kozhuharov, Z. Harman, A. Müller, S. Schippers, Y. S. Kozhedub, D. Bernhardt, S. Böhm, J. Jacobi, E. W. Schmidt, P. H. Mokler, F. Bosch, H.-J. Kluge, Th. Stöhlker, K. Beckert, P. Beller, F. Nolden, M. Steck, A. Gumberidze, R. Reuschl, U. Spillmann, F. J. Currell, I. I. Tupitsyn, V. M. Shabaev, U. D. Jentschura, C. H. Keitel, A. Wolf, and Z. Stachura. Isotope shift in the dielectronic recombination of three-electron  $^{A}nd^{57+}$ . *Phys. Rev. Lett.*, 100(7):073201, Feb 2008.
- [36] D. Bernhardt, C. Brandau, Z. Harman, C. Kozhuharov, A. Müller, W. Scheid, S. Schippers, E. W. Schmidt, D. Yu, A. N. Artemyev, I. I. Tupitsyn, S. Böhm, F. Bosch, F. J. Currell, B. Franzke, A. Gumberidze, J. Jacobi, P. H. Mokler, F. Nolden, U. Spillman, Z. Stachura, M. Steck, and Th. Stöhlker. Breit interaction in dielectronic recombination of hydrogenlike uranium. *Phys. Rev. A*, 83(2):020701, Feb 2011.
- [37] National Institute of Standards and Technology (NIST). Xcom: Photon cross sections database, April 2011.
- [38] A. Einstein. Über einen die erzeugung und verwandlung des liches betreffenden heuristischen gesichtspunkt. *Annalen der Physik*, 322(6):132–148, 1905.
- [39] A. H. Compton. A quantum theory of the scattering of x-rays by light elements. *Phys. Rev.*, 21(5):483–502, May 1923.
- [40] O. Klein and Y. Nishina. *Zt f. Phy.*, 52(853), 1929.
- [41] G. Weber. *Untersuchung zur Anisotropie und linearen Polarisation radiativer Prozesse in energiereichen Ion-Atom-Stößen*. PhD thesis, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2010.



- [42] C. Kittel. *Einführung in die Festkörperphysik*. Oldenbourg Verlag München Wien, 14th edition, 2005.
- [43] P. Debye. Interferenz von röntgenstrahlen und wärmebewegung. *Annalen der Physik*, 348(1):49–92, 1913.
- [44] I. Waller. Zur frage der einwirkung der wärmebewegung auf die interferenz von röntgenstrahlen. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 17:398–408, 1923. 10.1007/BF01328696.
- [45] Paul A. Tipler. *Physik*. Spektrum Lehrbuch, 3rd edition edition, 2000.
- [46] H. H. Johann. Die erzeugung lichtstarker röntgenspektren mit hilfe von konkavkristallen. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 69:185–206, 1931. 10.1007/BF01798121.
- [47] H. F. Beyer and D. Liesen. Ray tracing of curved-crystal x-ray optics for spectroscopy on fast ion beams. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 272(3):895 – 905, 1988.
- [48] L. v. Hámos. Röntgenspektroskopie und abbildung mittels gekrümmter kristallreflektoren. *Naturwissenschaften*, 20:705–706, 1932. 10.1007/BF01494468.
- [49] G. Egert and H. Dachs. Verwendung gebogener Idealkristalle als Neutronenmonochromatoren. *Journal of Applied Crystallography*, 3(4):214–220, Aug 1970.
- [50] Tryggve Johansson. Über ein neuartiges, genau fokussierendes röntgenspektrometer. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 82:507–528, 1933. 10.1007/BF01342254.
- [51] E. Rossmanith, G. Adiwidjaja, J. Eck, G. Kumpat, and G. Ulrich. Estimation of the mosaic spread and the mosaic-block size of zinc single-crystal spheres by simulations of  $\psi$  scans with UMWEG90. *Journal of Applied Crystallography*, 27(4):510–516, Aug 1994.
- [52] Z. C. Feng, A. Mascarenhas, and W. J. Choyke. Low temperature photoluminescence spectra of (001) cdte films grown by molecular beam epitaxy at different substrate temperatures. *Journal of Luminescence*, 35(6):329 – 341, 1986.

## Literaturverzeichnis

- [53] <http://www.esrf.eu/UsersAndScience/Experiments/TBS/SciSoft/xop2.3>. ESRF.
- [54] L. V. Azároff. *X-Ray Spectroscopy*. International Series in pure and applied physics, 1974.
- [55] M. Trassinelli. *Quantum Electrodynamics Tests and X-rays Standards using Pionic Atoms and Highly Charged Ions*. PhD thesis, Laboratoire Cassler-Brossel; Université Pierre et Marie Curie, Paris, 2005.
- [56] J. Eggs und K. Ulmer. Röntgenspektroskopie mit sphärisch gekrümmten Kristallen. *Zf. angew. Phys.*, (20):118–128, 1965.
- [57] C.T. Chantler and R.D. Deslattes. Systematic correlations in Bragg x-ray diffraction of flat and curved crystals. *Review of Scientific Instruments*, 66(11):5123, 1995.
- [58] M. Servidori A. Zani G. Basile G. Cavagnero A. Bergamin F. Cembali, R. Fabbri and G. Zosi. Precise x-ray relative measurement of lattice parameters of silicon wafers by multiple-crystal Bragg-case diffractometry. computer simulation of the experiment. *J. Appl. Crystallogr.*, (2):424–431, 1992.
- [59] Andor technology. Scientific digital camera solutions, 2006.
- [60] W. Schottky. Über spontane Stromschwankungen in verschiedenen elektrizitätsleitern. *Annalen der Physik*, 362(23):541–567, 1918.
- [61] *A User's guide to Andor CCDs*. Andor Technology Limited, 2006.
- [62] <https://www.edwardsvacuum.com/homepage.aspx>.
- [63] <http://www.ebaratech.com/>.
- [64] R.D. Deslattes, E.G. Kessler, P. Indelicato, L. de Billy, E. Lindroth, and J. Anton. X-ray transition energies: new approach to a comprehensive evaluation. *Rev. Mod. Phys.*, 75(1):35–99, Jan 2003.
- [65] R. Martin. *Entwicklung eines Kristallspektrometers zur Untersuchung von Innerschalenubergängen in hochgeladenen Ionen*. Diplomarbeit, Johann-Wolfgang-Goethe-Universität, Frankfurt 2009.
- [66] D. Thorn. private mitteilung. 2010.

- [67] L. Engström. Lund reports on atomic physics lrap-232, <http://kurslab-atom.fysik.lth.se/lars/gfit/html/index.html>.
- [68] P.R. Revington. *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences*. Number p. 237-245. McGraw-Hill New York, 1969.
- [69] J.J. Olivero and R.L. Longbothum. Empirical fits to the voigt line width: A brief review. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 17(2):233 – 236, 1977.
- [70] Minuit, 1998. <http://wwwasdoc.web.cern.ch/wwwasdoc/minuit/min-main.html>.
- [71] Lawrence Berkeley National Laboratory. X-ray data booklet, October 2009.
- [72] T. Tadic, Y. Mokuno, Y. Horino, M. Jaksic, I. D. Desnica, and R. Trojko. High-energy resolution pixe study of heat induced changes in cadmium compounds using ion microbeam. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 158(1-4):241 – 244, 1999.
- [73] R. D. Deslattes, H. F. Beyer, and F. Folkmann. Precision x-ray wavelength measurements in helium-like argon recoil ions. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, 17(21):L689, 1984.
- [74] C.A. Randall and L.G. Parratt.  $l\alpha$  satellite lines for elements mo(42) to ba(56). *Phys. Rev.*, 57(9):786–791, May 1940.
- [75] Y. Couchais und C. Senemaud. *Wavelengths of X-ray emissionlines and absorption edges*. International Tables of Selectedd Constants. Pergamon Press, Oxford, 1978.
- [76] S. I. Salem and P. L. Lee. Experimental widths of k and l x-ray lines. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 18(3):233 – 241, 1976.
- [77] F. Herfurth, Th. Beier, L. Dahl, S. Eliseev, S. Heinz, O. Kester, C. Kozhuharov, G. Maero, and W. Quint. Precision measurements with highly charged ions at rest: The hitrap project at gsi. *International Journal of Mass Spectrometry*, 251(2-3):266 – 272, 2006. ULTRA-ACCURATE MASS SPECTROMETRY AND RELATED TOPICS Dedicated to H.-J. Kluge on the occasion of his 65th birthday anniversary - Juergen Kluge Special Issue.

- [78] L. A. Morton, R. E. Marrs, J. R. Henderson, D. A. Knapp, and M. B. Schneider. The electron beam ion trap: A new instrument for atomic physics measurements. *Physica Scripta*, 1988(T22):157, 1988.
- [79] R. E. Marrs, P. Beiersdorfer, S. R. Elliott, D. A. Knapp, and Th. Stoehlker. The super electron beam ion trap. *Physica Scripta*, 1995(T59):183, 1995.
- [80] G.R. Brewer. *Focusing of Charged Particles*. A. Septier, 1967.
- [81] Dreebit GmbH. <http://www.dreebit.com/>.
- [82] G.W. Drake. Theoretical energies for the  $n = 1$  and  $2$  states of the helium isoelectronic sequence up to  $z=100$ . *Canadian Journal of Physics*, 66(7):586–611, 1988.
- [83] H. Bruhns. *High precision x-ray spectroscopy on highly charged argon ions High precision x-ray spectroscopy on highly charged argon ions*. PhD thesis, MPI-K, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2005.
- [84] P. Beiersdorfer, M. Bitter, D. Hey, and K. J. Reed. Identification of the  $1s2s2p^4p_{5/2} \rightarrow 1s^22s^2s_{1/2}$  magnetic quadrupole inner-shell satellite line in the  $ar^{16+}$  k-shell x-ray spectrum. *Phys. Rev. A*, 66(3):032504, Sep 2002.
- [85] K. L. Wong, P. Beiersdorfer, K. J. Reed, and D. A. Vogel. Electron-impact excitation cross-section measurements of highly charged heliumlike and lithiumlike ions. *Phys. Rev. A*, 51(2):1214–1220, Feb 1995.
- [86] H. L. Zhang, S. H. Sampson, and R. E. H. Clark. Relativistic cross sections for excitation of highly charged ions to specific magnetic sublevels by an electron beam. *Phys. Rev. A*, 41(1):198–206, Jan 1990.
- [87] E. Källne, J. Källne, A. Dalgarno, E. S. Marmar, J. E. Rice, and A. K. Pradhan. Observations of recombination population of  $n = 2$  excited states of  $ar^{16+}$  in tokamak plasmas. *Phys. Rev. Lett.*, 52(25):2245–2248, Jun 1984.
- [88] H. Bruhns, J. Braun, K. Kubiček, J. R. Crespo López-Urrutia, and J. Ullrich. Testing qed screening and two-loop contributions with he-like ions. *Phys. Rev. Lett.*, 99(11):113001, Sep 2007.

# Danksagung

Abschließend möchte ich bei allen bedanken, die mich beim Gelingen dieser Arbeit unterstützt haben.

An erster Stelle möchte ich mich bei Prof. T. Stöhlker für die Aufnahme in seine Gruppe und in die Atomphysik der GSI, seine vielfältigen Ideen, das Vertrauen und die sehr freundliche Betreuung bedanken. Bei Dr. D. F. A. Winter, N. Winters und Dr. R. Reuschl möchte ich mich für die sehr nette Zusammenarbeit, Betreuung und die Gespräche über die Physik bedanken. Ein großer Dank an meinen ersten Betreuer R. Martin und Dr. G. Weber für die Hilfe bei meinen ersten Schritten an der GSI und trotz der Distanz die Unterstützung bei physikalischen Fragen und der Korrektur dieser Arbeit. Dr. H. Beyer möchte ich mich für die Geduld, die Vermittlung der Kristallspektroskopie und der QED bedanken. Ein großer Dank an Dr. M. Trassinelli für die Erklärung der Kristallspektroskopie und der Analyseprogramme. Ein großer Dank an Dr. U. Spillmann bei der Hilfe der CCD-Kamera. Bei Dr. Weidong Chen und P.M. Hillenbrand möchte ich mich für die Unterstützung beim Aufbau bedanken.

Ein großer Dank an Dr. G. Vorobjev und Dr. F. Herfurth für die Möglichkeit und Unterstützung ein Experiment an der EBIT durchführen zu können. An dieser Stelle möchte ich mich bei Dr. A. Surzhykov für die Übernahme der Zweitkorrektur bedanken.

Prof. R. DuBois, Prof. S. Hagmann, Dr. M. Lestinsky, Dr. A. Gumberidze, Dr. S. Trotsensky, Dr. D. Thorn, Dr. C. Koshuharov, N. Petridis, S. Geyer, W. Wen, M. Schwemlein, T. Gross, M. Hegewald, K.H. Blumenhagen und T. Gassner möchte ich mich für die sehr angenehme Atmosphäre an der GSI bedanken, die Diskussionen während des Mittagstees und allgemein die Zusammenarbeit. Danke. Einen großen Dank an A. Bardonner und Wolfgang Enders für die technische Unterstützung. Der GSI-Werkstatt und der Werkstatt an der PI Heidelberg danke ich für die Herstellung der Teile. Bedanken möchte ich mich bei D. Racano für die Hilfe beim Aufbau und Herstellung von Teilen. Bei S. Lüttgens möchte ich mich für die administrative Hilfe bedanken.

Bei meinen Eltern, meiner Tante, meiner Schwester und meinem Bruder möchte ich mich für die Unterstützung bedanken. Ein besonderer Dank gilt meiner Großmutter, die mein Weltbild geprägt und mein Blick auf das We-

## *Literaturverzeichnis*

sentliche geschärft hat. An alle, die ich trotz Nachdenkens vergessen habe hier zu erwähnen, bitte ich um Nachsicht und ein Dank an euch.



Erklärung:

Ich versichere, dass ich diese Arbeit selbständig verfasst habe und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.

Heidelberg, den 01.06.2011

.....

Zhong Yin