

Master-Thesis

Elektronenstoßionisation mehrfach geladener Wolframionen

Electron-Impact Single-Ionisation of Multiply Charged Tungsten
Ions

Kaija Spruck

September 2011

Institut für Atom- und Molekülphysik der
Justus-Liebig-Universität Giessen

Zusammenfassung

Die Forschung an Fusionsreaktoren stellt auf Grund der hohen Plasmatemperaturen besondere Ansprüche an Beschichtungsmaterialien. Wolfram ist eines der Materialien, die auf Grund ihrer hohen Hitzebeständigkeit verwendet werden. Im Experiment werden Wolframionen von der Beschichtung abgetragen und gelangen so in das Plasma. Für die Interpretation der Ergebnisse von Experimenten mit Wolframbeschichtung werden deshalb u.a. experimentelle Daten zu Elektron-Ion-Stößen von verschiedenen Ladungszuständen von Wolfram benötigt. Für Experimente mit wolframbeschichteten Divertorplatten, die das Plasma von entstehenden Verunreinigungen befreien sollen, sind auf Grund der geringeren Plasmatemperatur in diesem Bereich insbesondere Wirkungsquerschnitte der Ladungszustände bis W^{10+} von Interesse.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden absoluten Wirkungsquerschnitte der Elektronenstoß-Einfachionisation von W^{5+} , W^{8+} , W^{11+} und W^{12+} mit der Methode der gekreuzten Strahlen gemessen. Zusätzlich wurde der theoretische Wirkungsquerschnitt durch störungstheoretische und semi-empirische Berechnungen ermittelt. Die Ergebnisse für W^{5+} und W^{8+} werden abschließend mit früheren experimentellen Daten verglichen. Für W^{11+} und W^{12+} sind die Resultate der vorliegenden Arbeit die bisher einzigen experimentellen Ergebnisse.

Der Vergleich der CADW-Rechnungen mit den gemessenen Wirkungsquerschnitten hat gezeigt, dass dies kein geeignetes Modell für hochgeladenen Wolframionen ist. Die Lotz-Formel stellt nur eine sehr grobe Näherung dar. Umfangreiche Rechnungen mit anderen Näherungsverfahren wären hier angebracht, allerdings würde der Zeitaufwand dafür den Rahmen dieser Arbeit sprengen.

Inhaltsverzeichnis

| | |
|---|-----------|
| 1. Einführung | 11 |
| 2. Theoretische Grundlagen | 13 |
| 2.1. Elektron-Ion-Stoßprozesse | 13 |
| 2.1.1. Rekombination | 13 |
| 2.1.2. Streuung | 14 |
| 2.1.3. Ionisation | 15 |
| 2.1.4. Kombinationen der Prozesse | 18 |
| 2.1.5. Theoretische Beschreibung | 21 |
| 2.2. Theoretische Methoden | 22 |
| 2.2.1. Klassische Beschreibung | 22 |
| 2.2.2. Quantenmechanische störungstheoretische Beschreibung | 23 |
| 2.2.3. Quantenmechanische nicht-störungstheoretische Beschreibung | 24 |
| 2.2.4. Semi-empirische Näherung | 25 |
| 3. Experimentelle Grundlagen | 27 |
| 3.1. Versuchsaufbau | 27 |
| 3.2. Untergrund | 30 |
| 3.3. Energieeichung | 31 |
| 3.3.1. Energieauflösung | 32 |
| 3.4. Elektronenstromkorrekturfunktion | 32 |
| 3.5. Messverfahren | 34 |
| 3.5.1. Methode der gekreuzten Strahlen | 35 |

| | |
|---|-----------|
| 3.5.2. Absolutmessungen | 35 |
| 3.5.2.1. Fehlerbetrachtung | 37 |
| 3.5.3. Scanmessungen | 38 |
| 3.5.3.1. Fehlerbetrachtung | 39 |
| 4. Ergebnisse | 40 |
| 4.1. Verwendete theoretische Methoden | 41 |
| 4.2. Massenscans | 41 |
| 4.3. Einfachionisation von W^{5+} | 44 |
| 4.4. Einfachionisation von W^{8+} | 53 |
| 4.5. Einfachionisation von W^{11+} | 59 |
| 4.6. Einfachionisation von W^{12+} | 64 |
| 5. Abschließende Diskussion und Ausblick | 69 |
| Anhang | 70 |
| A. Ergänzende Graphen | 72 |
| B. Tabellierte absolute Wirkungsquerschnitte | 74 |

Abbildungsverzeichnis

| | | |
|------|---|----|
| 2.1. | Schematische Darstellung der dielektronischen Rekombination. | 14 |
| 2.2. | Schematische Darstellung der resonanten elastischen Streuung. | 15 |
| 2.3. | Schematische Darstellung der inelastischen Streuung im resonanten Fall. | 16 |
| 2.4. | Schematische Darstellung der direkte Ionisation. | 17 |
| 2.5. | Schematische Darstellung der Anregungs-Autoionisation. | 17 |
| 2.6. | Schematische Darstellung der REDA- und READI-Prozessen. | 18 |
| 2.7. | Schematische Darstellung eines typischen totalen Wirkungsquerschnittes. | 20 |
| | | |
| 3.1. | Schematische Zeichnung des Versuchsaufbaus. | 29 |
| 3.2. | Graph zur Berechnung der Energieeichung. | 32 |
| 3.3. | Vergrößerte Darstellung einer Scanmessungen zur Ermittlung der Energieauflösung. | 33 |
| 3.4. | Schematischer Aufbau der Elektronenkanone. | 33 |
| 3.5. | Elektronenstromkorrekturfunktion, gemessen im April 2010. | 34 |
| 3.6. | Vierkanaldarstellung der mit Origin eingelesenen Absolutdaten. | 36 |
| | | |
| 4.1. | Massenspektrum von hochgeladenen Wolframionen. | 42 |
| 4.2. | Vergrößerte Darstellung eines Massenspektrums im Bereich von W^{29+} . . . | 43 |
| 4.3. | Abbildung eines Massenscans, wobei die Ionenoptik auf W^{6+} optimiert wurde. | 44 |
| 4.4. | Darstellung des Wirkungsquerschnittes von W^{5+} | 45 |
| 4.5. | Vergleich des gemessenen Wirkungsquerschnittes von W^{5+} mit CADW-Rechnungen. | 47 |
| 4.6. | Vergrößerte Darstellung des Energiebereichs um die Ionisationsschwelle von W^{5+} | 49 |
| 4.7. | Vergleich des gemessenen Wirkungsquerschnittes von W^{5+} mit CADW-Rechnungen bei unterschiedlichen Anteilen an Ionen im Grundzustand. | 50 |
| 4.8. | Vergleich des gemessenen Wirkungsquerschnittes von W^{5+} mit CADW-Rechnungen mit unterschiedlicher Verteilung der Ionen in den metastabilen Zuständen. | 51 |
| 4.9. | Vergleich des gemessenen Wirkungsquerschnittes von W^{5+} mit CADW-Rechnungen mit verschiedenen Verzweigungsverhältnissen V | 52 |

| | |
|---|----|
| 4.10. Darstellung der gemessenen Absolutwerte von W^{5+} im Vergleich mit Werten von Stenke <i>et al.</i> | 52 |
| 4.11. Abbildung eines Massenscans, wobei die Ionenoptik auf W^{8+} optimiert wurde. | 53 |
| 4.12. Darstellung des absoluten Wirkungsquerschnittes und der Energiescansmessung von W^{8+} | 54 |
| 4.13. Vergrößerte Darstellung der Schwellenregion des Wirkungsquerschnittes von W^{8+} | 55 |
| 4.14. Darstellung zum Vergleich der CADW-Rechnungen mit dem gemessenen Wirkungsquerschnitt von W^{8+} | 56 |
| 4.15. Vergleich des gemessenen Wirkungsquerschnittes von W^{8+} mit den Ergebnissen der Lotz-Formel. | 57 |
| 4.16. Vergleich der Ergebnisse der Lotz-Formel für unterschiedlich hohe Strahlanteile im Grundzustand von W^{8+} | 58 |
| 4.17. Vergleich des neu gemessenen Wirkungsquerschnittes von W^{8+} mit der Messreihe von Stenke <i>et al.</i> | 58 |
| 4.18. Abbildung eines Massenscans, wobei die Ionenoptik auf W^{11+} optimiert wurde. | 59 |
| 4.19. Darstellung des Wirkungsquerschnittes von W^{11+} | 60 |
| 4.20. Vergrößerte Darstellung des Wirkungsquerschnittes von W^{11+} im Bereich der beobachteten Stufe. | 61 |
| 4.21. Vergrößerte Darstellung der Schwellenregion des Wirkungsquerschnittes von W^{11+} | 62 |
| 4.22. Vergleich des gemessenen Wirkungsquerschnittes von W^{11+} mit CADW-Rechnungen. | 63 |
| 4.23. Vergleich des gemessenen Wirkungsquerschnittes von W^{11+} mit den Ergebnissen der Lotz-Formel. | 63 |
| 4.24. Abbildung eines Massenscans, wobei die Ionenoptik auf W^{12+} optimiert wurde. | 64 |
| 4.25. Lineare Darstellung des Wirkungsquerschnittes von W^{12+} | 65 |
| 4.26. Vergrößerte Darstellung der Schwellenregion des Wirkungsquerschnittes von W^{12+} | 66 |
| 4.27. Darstellung zum Vergleich des gemessenen Wirkungsquerschnittes von W^{12+} mit CADW-Rechnungen. | 67 |
| 4.28. Darstellung zum Vergleich des gemessenen Wirkungsquerschnittes von W^{12+} mit den Ergebnissen der Lotz-Formel. | 68 |
| A.1. Lineare Darstellung der gemessenen absoluten Wirkungsquerschnitte. | 72 |
| A.2. Lineare Darstellung des absoluten Wirkungsquerschnittes von W^{5+} | 73 |
| A.3. Lineare Darstellung des absoluten Wirkungsquerschnittes von W^{8+} | 73 |

Tabellenverzeichnis

| | |
|---|----|
| 2.1. Übersicht der wichtigsten Elektron-Ion Stoßprozesse. | 19 |
| 2.2. Tabellierte Abkürzungen der Stoßprozesse. | 19 |
| 3.1. Gemessene Energiekorrekturen seit 2007. | 31 |
| 4.1. Verwendete Versuchsparameter. | 40 |
| 4.2. Tabelliertes Isotopenverhältnis von Wolfram. | 42 |
| 4.3. Berechnete Feinstrukturaufspaltungen der einzelnen Elektronenkonfigurationen von W^{5+} und W^{6+} | 46 |
| 4.4. Berechnete Feinstrukturaufspaltungen der einzelnen Elektronenkonfigurationen von W^{5+} | 46 |
| 4.5. Berechnete Feinstrukturaufspaltungen der einzelnen Elektronenkonfigurationen von W^{8+} und W^{9+} | 55 |
| 4.6. Berechnete Feinstrukturaufspaltungen der einzelnen Elektronenkonfigurationen von W^{11+} und W^{12+} | 61 |
| 4.7. Berechnete Feinstrukturaufspaltungen der einzelnen Elektronenkonfigurationen von W^{12+} und W^{13+} | 65 |
| B.1. Tabellierter absoluter Wirkungsquerschnitt von W^{5+} | 74 |
| B.2. Tabellierter absoluter Wirkungsquerschnitt von W^{8+} | 75 |
| B.3. Tabellierter absoluter Wirkungsquerschnitt von W^{11+} | 75 |
| B.4. Tabellierter absoluter Wirkungsquerschnitt von W^{12+} | 76 |

1. Einführung

Mit der Wende in der deutschen Atompolitik und dem geplanten Ausstieg aus der Energiegewinnung durch Kernspaltung rücken andere Wege der Energiegewinnung wieder mehr in den Mittelpunkt des Interesses. An dem Fusionsreaktor ITER (engl. *international thermonuclear experimental reactor*) sollen in ein paar Jahren Experimente zur Erforschung von Kernfusion als alternative Energiequelle durchgeführt werden. Die Arbeit mit Plasmen erfordert die Untersuchung von geeigneten Beschichtungsmaterialien, die hohen Temperaturen standhalten können. Im Tokamak-Experiment ASDEXUpgrade (*axialsymmetrisches Divertorexperiment*) wurde Wolfram erfolgreich als Beschichtungsmaterial eingesetzt [1]. Durch Materialerosion können Spuren des Wandmaterials in das Plasma gelangen. Auf Grund seiner hohen Kernladungszahl sind allerdings nur geringe Mengen an Wolfram als Verunreinigung im Brennraum erlaubt, da das Fusionsplasma ansonsten durch zu hohe Energieabstrahlung erlischt. In dem Fusionsexperiment ITER wird deshalb Beryllium als Plasmabegrenzung verwendet [1]. Im Hinblick auf Wärmelasten eignet sich Beryllium allerdings nicht für die Beschichtung der Divertorplatten¹, welche die Leistungs- und Teilchenabfuhr regeln. Aus diesem Grund wurde hier erneut auf Wolfram als Beschichtungsmaterial zurückgegriffen. Nach theoretischen Berechnungen der ITER Physics Expert Group on Divertor [2] liegen hier typische Elektronentemperaturen zwischen 25 eV und 100 eV, maximale Temperaturen bei bis zu 150 eV. Ausgehend von den Ionisationsschwellen von Wolfram liegen nach Clementson *et al.* [3] in einem Großteil des Divertorplasmas Wolframionen in Ladungszuständen von W^{3+} bis W^{10+} vor. Um für diese Experimente aussagekräftige Plasma-Modelle erarbeiten zu können, werden experimentelle Daten zu Elektron-Ion-Stößen von Wolfram benötigt. Der Wirkungsquerschnitt ist dabei eine experimentell zugängliche Größe, die ein Maß für die Wahrscheinlichkeit liefert, dass zwischen einem Projektilektron und einem Ionentarget eine bestimmte Wechselwirkung stattfindet. Durch den Vergleich von experimentell und theoretisch bestimmten Wirkungsquerschnitten kann die Qualität und Anwendbarkeit von theoretischen Methoden überprüft werden, die wiederum eine Vielzahl an weiteren Wirkungsquerschnitten liefern können.

Im Bereich bis W^{10+} wurden 1994 absolute Wirkungsquerschnitte der Elektronenstoßionisation von Stenke *et al.* [4] gemessen. Der Wirkungsquerschnitt von W^{17+} wurde

¹Ablenkplatten, die das Plasma von entstehenden Verunreinigungen befreien sollen, indem die Fremdkörper darauf gelenkt werden.

2011 experimentell von Rausch *et al.* [5] bestimmt.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden die Wirkungsquerschnitte für die Einfachionisation durch Elektronenstoß von W^{5+} , W^{8+} , W^{11+} und W^{12+} experimentell bestimmt und die Ergebnisse diskutiert. Durchgeführt wurden die Messungen an der Elektronen-Ionenstoß-Apparatur des Instituts für Atom- und Molekülphysik der Justus-Liebig-Universität Giessen. Die Wirkungsquerschnitte wurden im Energiebereich bis 1000 eV mit der Methode der gekreuzten Strahlen bestimmt. Neben den absoluten Wirkungsquerschnitten wurden auch die relativen Wirkungsquerschnitte mittels Energiescans gemessen und an den absoluten Wirkungsquerschnitt angepasst. Für W^{5+} und W^{8+} können die gemessenen Wirkungsquerschnitte abschließend mit den Daten von Stenke *et al.* verglichen werden. Für die Wirkungsquerschnitte von W^{11+} und W^{12+} existieren keine Referenzmessungen. Die gewonnenen Datensätze werden deshalb nur mit theoretischen Kurven verglichen, die im Rahmen dieser Arbeit durch störungstheoretische CADW-Rechnungen (siehe Abschnitt 2.2.2) gewonnen wurden. Im Fall einer zu großen Abweichung zwischen dem gemessenen Wirkungsquerschnitt und der theoretischen Kurve wurden zusätzlich Berechnungen mit der semi-empirischen Lotz-Formel (siehe Abschnitt 2.2.4) durchgeführt. Der so errechnete Wirkungsquerschnitt der direkten Ionisation wird ebenfalls mit den experimentellen Daten verglichen.

2. Theoretische Grundlagen

2.1. Elektron-Ion-Stoßprozesse

Die Stoßprozesse zwischen Elektronen und Ionen lassen sich grob in drei Gruppen unterteilen. Bei einigen Prozessen muss man zusätzlich zwischen direkten und indirekten, sowie zwischen resonanten und nicht-resonanten Prozessen unterscheiden. Bei indirekten Prozessen ist immer ein Zwischenzustand beteiligt. Resonante Prozesse unterscheiden sich von den nicht-resonanten dadurch, dass die Elektronenenergie genau der Differenz zwischen zwei Zuständen entsprechen muss. Resonante und nicht-resonante Prozesse sind im Experiment sowie in der Theorie prinzipiell nicht unterscheidbar, wenn sie identische Anfangs- und identische Endzustände besitzen.

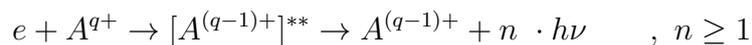
Im Folgenden werden die einfachsten Stoßprozesse kurz erläutert.

2.1.1. Rekombination

Die **radiative Rekombination** (RR) ist ein nicht-resonanter Prozess, in dem das Projektilektron von einem Ion der Ladung q eingefangen wird. Die überschüssige Energie wird direkt durch Emission eines Photons freigesetzt. Die Reaktionsgleichung für diesen Prozess lautet



Die **dielektronische Rekombination** (DR) ist das resonante Gegenstück zur RR. Hier wird nach einem Elektroneneinfang das Ion zunächst in einen angeregten Zwischenzustand versetzt. Dieser Vorgang wird dielektronischer Einfang (DC) genannt oder auch inverser Auger-Prozess. Im zweiten Schritt stabilisiert sich das Ion durch Emission eines oder mehrerer Photonen. Der Prozess wird durch die Reaktionsgleichung



und Abbildung 2.1 beschrieben.

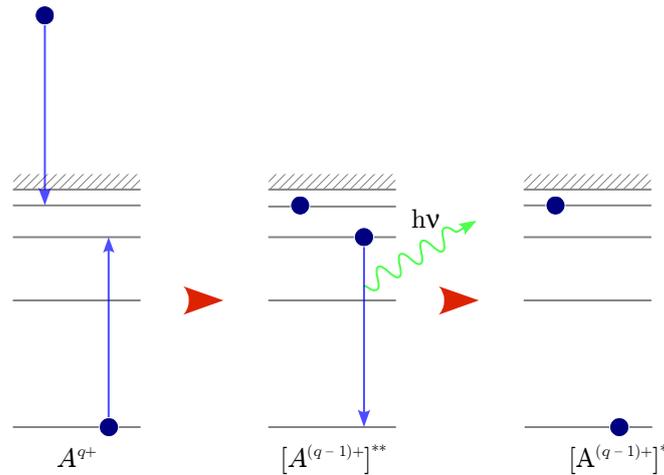
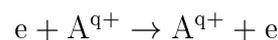


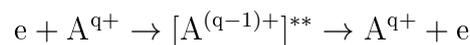
Abbildung 2.1.: Schematische Darstellung der dielektronischen Rekombination.

2.1.2. Streuung

Anschaulich kann man die nicht-resonante **elastische Streuung** mit der Reflexion eines Elektrons am Coulombfeld eines Ions beschreiben. Dabei verändert sich der Zustand des Ions nicht, das Elektron kann im Laborsystem aber einen kleinen Anteil an kinetischer Energie an das Ion abgeben. Im Schwerpunktsystem (engl. *center-of-mass-system*, kurz CMS) wird bei diesem Prozess hingegen keine kinetische Energie ausgetauscht und es ändert sich nur die Flugrichtung des Elektrons. Die direkte elastische Streuung von einem Elektron an einem Ion mit dem Ladungszustand q wird durch die Gleichung



beschrieben. Im resonanten Fall wird das Elektron kurzzeitig von dem Ion eingefangen und regt dieses dabei an. Im zweiten Schritt wird das Elektron wieder emittiert. Die Zeit zwischen Einfang und Aussenden des Elektrons wird Lebensdauer des Zwischenzustandes genannt. Das Ion verbleibt am Ende im gleichen Zustand wie vor dem Elektroneneinfang. Der Prozess kann dementsprechend durch die Reaktionsgleichung



beschrieben werden und ist in Abbildung 2.2 schematisch dargestellt.

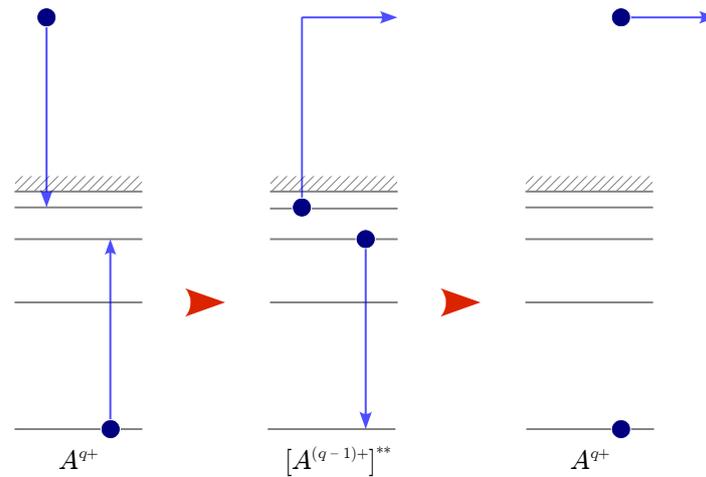
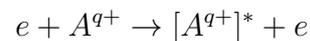


Abbildung 2.2.: Schematische Darstellung der resonanten elastischen Streuung mit kurzzeitigem Elektroneneinfang.

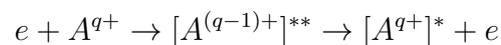
Je nachdem welche Schalen an dem Prozess beteiligt sind, spricht man von einem Augerprozess oder im Speziellen von einem Coster-Kronig- oder Super-Coster-Kronig-Übergang.

Anders als bei der elastischen Streuung von Elektronen verbleibt das Ion bei der **inelastischen Streuung** am Ende in einem angeregten Zustand. Man spricht deshalb auch von Anregung. Im nicht-resonanten Fall folgt der Prozess der Reaktionsgleichung



Als resonanter Prozess kann eine Anregung aber auch über einen Zwischenzustand erfolgen (siehe Abbildung 2.3).

Die zugehörige Reaktionsgleichung lautet



2.1.3. Ionisation

Sind die Elektronenenergien beim Beschuss von Ionen mit Elektronen hoch genug, kann es zur Ionisation kommen. Die Reaktionsgleichung für die nicht-resonante **direkte Ioni-**

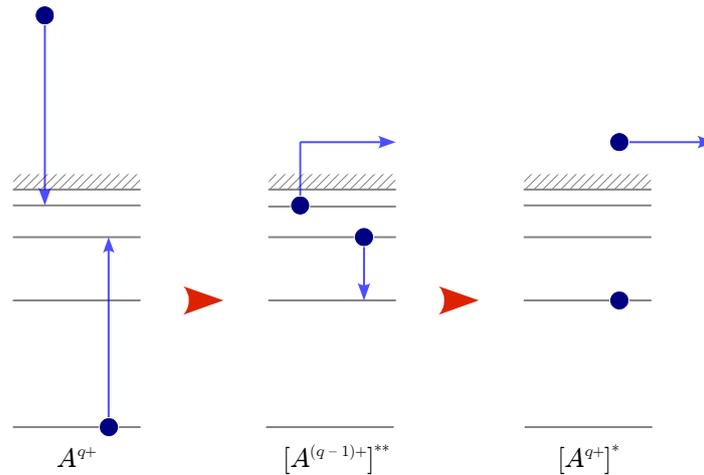
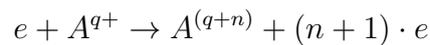


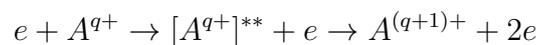
Abbildung 2.3.: Schematische Darstellung der inelastischen Streuung im resonanten Fall.

sation (DI) lautet



und ist für die Einfachionisation mit $n = 1$ in Abbildung 2.4 verdeutlicht.

Unter **indirekter Ionisation** versteht man eine Ionisation über einen angeregten Zwischenzustand. Dieser entsteht, wenn die Stoßenergie des Elektrons hoch genug ist um ein Innerschalenelektron in einen Zustand zu heben, der oberhalb eines Grundzustandes eines höher geladenen Ions liegt. Im einfachsten Fall wird ein Elektron von diesem angeregten Zwischenzustand durch Autoionisation emittiert, so dass das Ion am Ende einfach ionisiert wurde. Dieser EA-Prozess folgt der Reaktionsgleichung



Der EA-Prozess gehört zu den nicht-resonanten Reaktionskanälen (siehe Abbildung 2.5).

Resonant kann die indirekte Ionisation über einen Elektroneneinfang mit darauf folgender Doppelautoionisation oder Auto-Doppelionisation verlaufen. Diese Prozesse werden REDA- bzw. READI-Prozesse genannt. Der Elektroneneinfang hat zunächst einen

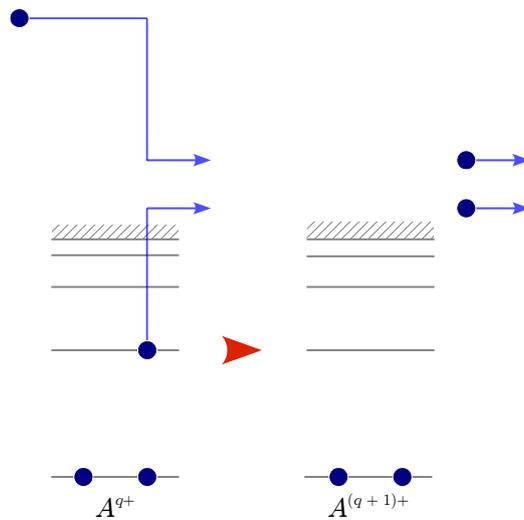


Abbildung 2.4.: Schematische Darstellung der direkte Ionisation.

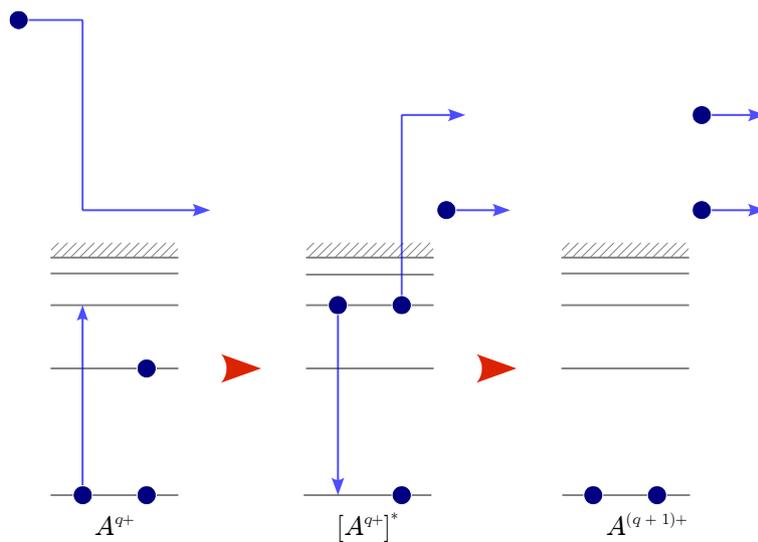


Abbildung 2.5.: Schematische Darstellung der Anregungs-Autoionisation.

hochangeregten Zustand zu Folge, der unter Aussendung von zwei Elektronen zerfällt. Das Aussenden der Elektronen kann als zweistufiger REDA-Prozess (sequenzieller Auger- oder Coster-Kronig-Prozess) erfolgen (Abbildung 2.6, oberer Reaktionskanal) oder mit einer kleinen Wahrscheinlichkeit als einstufiger Prozess unter gleichzeitiger

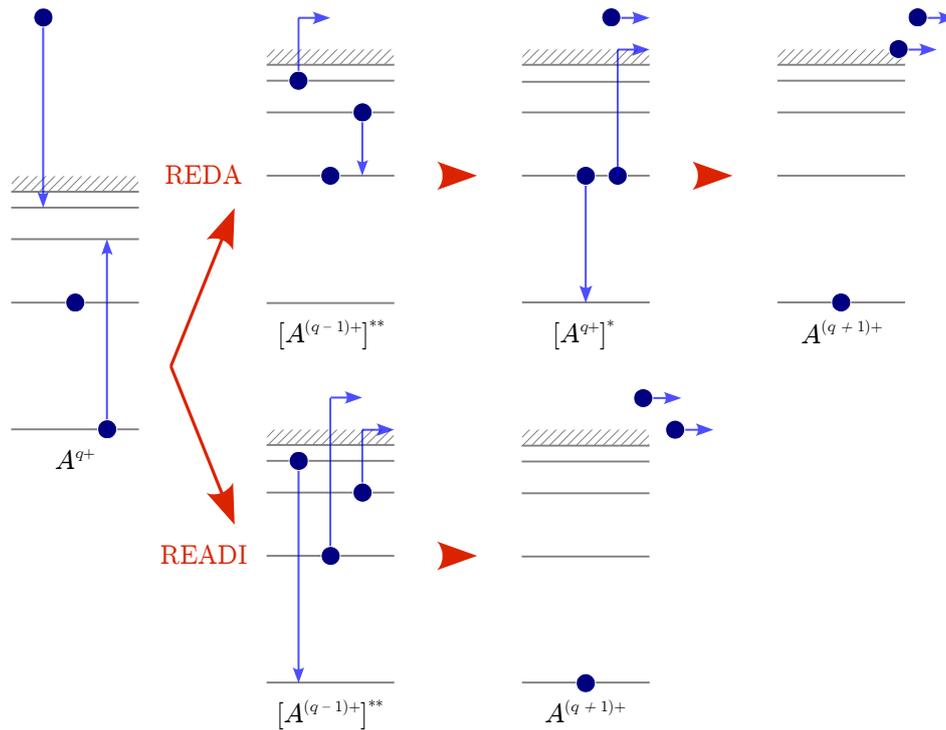
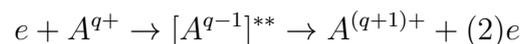


Abbildung 2.6.: Schematische Darstellung der REDA- und READI-Prozessen.

Aussendung von beiden Elektronen (READI-Prozess, Abbildung 2.6, unterer Reaktionskanal).

Beide Prozesse folgen der Gleichung



REDA- und READI-Prozesse sind im Experiment normalerweise nicht unterscheidbar, allerdings sind unterhalb der Schwelle für EA-Prozesse keine REDA-Prozesse möglich. Resonanzen in diesem Energiebereich können deshalb READI-Prozessen zugeordnet werden.

2.1.4. Kombinationen der Prozesse

Bei genügend hohen Elektronenenergien sind beliebig komplexe Prozesse vorstellbar. Ein kleiner Überblick über weitere mögliche Prozesse wird in Tabelle 2.1 gegeben, die

Abkürzungen und ihre Bedeutungen finden sich in Tabelle 2.2.

| Prozess | direkt | indirekt (über Zwischenzustand) | | ΔE | q |
|--------------------|---------------|---------------------------------|----------------|------------|----|
| | nichtresonant | | resonant (+EC) | | |
| Streuung | elastisch | | RS (DC+A) | = 0 | = |
| | inelastisch | | RE (DC+A) | > 0 | |
| Rekombination | RR | | DR (DC+R) | | - |
| | | | TR (TC+R) | | |
| Einfachionisation | DI (IE) | EA | REDA (DC+DA) | > I_1 | + |
| | | | READI (DC+AD) | | |
| n-fache Ionisation | DI | IA | ETA | > I_n | n+ |
| | | IDA | REQA (DC+nA) | | |
| | | ... | ... | | |

Tabelle 2.1.: Übersicht der wichtigsten Elektron-Ion Stoßprozesse.

| Abkürzung | Bezeichnung | |
|-----------|-------------------------------|--------------------------------|
| | Englisch | Deutsch |
| EC | electron capture | Elektronen Einfang |
| DC | dielectronic capture | dielektronischer Einfang |
| TC | trielelectronic capture | trielektronischer Einfang |
| A | autoionization | Autoionisation |
| DA | double-autoionization | zweifache Autoionisation |
| AD | auto-doubleionization | Auto-Doppelionisation |
| RS | resonant scattering | resonante Streuung |
| RE | resonant excitation | resonante Anregung |
| R | radiative relaxation | radiative Abregung |
| RR | radiative recombination | radiative Rekombination |
| DR | dielectronic recombination | dielektronische Rekombination |
| TR | trielelectronic recombination | trielektronische Rekombination |
| DI | direct ionization | direkte Ionisation |
| IE | ionization excitation | Ionisation Anregung |
| IA | ionization autoionization | Ionisation Autoionisation |
| EA | excitation autoionization | Anregung Autoionisation |
| REDA | | RE + DA |
| READI | | RE + AD |

Tabelle 2.2.: Tabellierte Abkürzungen der Stoßprozesse.

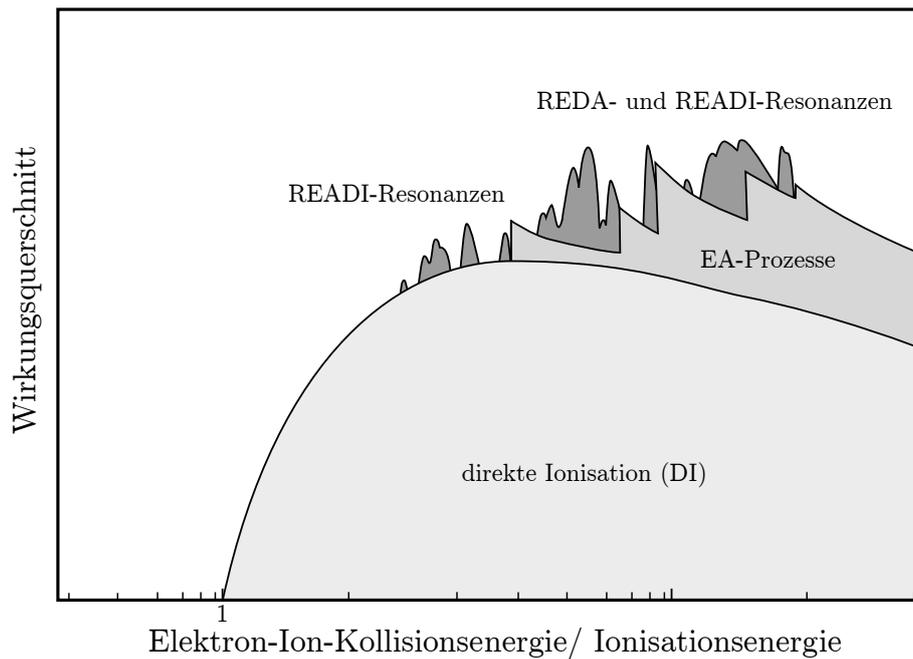


Abbildung 2.7.: Schematische Darstellung eines typischen totalen Wirkungsquerschnittes ausgehend von einem einzigen Anfangszustand.

In Abbildung 2.7 ist schematische ein totaler Wirkungsquerschnitt ausgehend von einem einzigen Anfangszustand abgebildet. Sind im Primärionenstrahl neben dem stabilen Grundzustand auch angeregte, metastabile Zustände vorhanden, so setzt sich der gesamte Wirkungsquerschnitt des Ladungszustandes anteilig aus der Summe der Wirkungsquerschnitte der einzelnen Anfangszustände zusammen. In der Regel haben metastabile Zustände auf Grund der Anregungsenergie eine geringere Bindungsenergie als der Grundzustand und der zugehörige Wirkungsquerschnitt ist zu niedrigeren Energien hin verschoben. Es kann allerdings vorkommen, dass auf Grund der Elektronenkonfiguration ein Übergang von einem metastabilen Zustand in den Grundzustand des nächsthöher geladenen Ions nicht möglich ist und die Ionisationsenergie deshalb auch größer sein kann, als die des Grundzustandes. Die Wirkungsquerschnitte der einzelnen Anfangszustände überlagern sich zu einem gesamten Wirkungsquerschnitt, was die Zuordnung der einzelnen Strukturen erschwert wenn nicht unmöglich macht. Die Verbreiterung durch die Energieauflösung des Experiments und die Überlagerung energetisch nah beinander liegender Resonanzen stellen weitere Hindernisse für die Identifizierung der beteiligten Prozesses dar.

2.1.5. Theoretische Beschreibung

Ob ein angeregter Zustand überhaupt in den gewünschten Ladungszustand zerfällt, hängt nicht zuletzt von dem Verzweigungverhältnis (engl. *branching ratio*) des Zustandes ab. Im einfachen Fall setzt sich dieses zusammen aus

- der Wahrscheinlichkeit A_{jf}^A , dass ein angeregter Zustand j durch Autoionisation in einen Zustand f zerfällt
- und der Wahrscheinlichkeit A_{jk}^R , dass der ein radiativer Übergang in den Zustand k stattfindet

Das Verzweigungsverhältnis B_j^A für einen angeregten Zustand j berechnet sich zu

$$B_j^A = \frac{\sum_f A_{jf}^A}{\sum_f A_{jf}^A + \sum_k A_{jk}^R} \quad (2.1)$$

wobei über alle möglich Endzustände f und k summiert wird. Für niedrige Ladungszustände ist die Autoionisation dominant und damit $B_j^A \rightarrow 1$ und für hohe Ladungszustände $B_j^A \rightarrow 0$ [6]. Bei mehrfach autoionisierenden Zuständen wird das Verzweigungsverhältnis auf Grund der möglichen Zerfallskanäle komplizierter.

Nach dem *independent process model*, welches voraussetzt, dass keine Interferenzen zwischen direkten und indirekten Prozessen stattfinden, lässt sich der totale Wirkungsquerschnitt $\sigma(E)$ als Summe aller möglichen Prozessen formulieren: [6]

$$\sigma(E) = \sigma^{DI}(E) + \sum_j \sigma_j^E(E) \cdot B_j^A + \sum_k \sigma(E)_k^{RE} \cdot B_k^{DA} + \sum_l \sigma_l^{RE}(E) \cdot B_l^{AD}. \quad (2.2)$$

mit den Abkürzungen

- $\sigma^{DI}(E)$: Wirkungsquerschnitt für direkte Ionisation
- $\sigma_j^E(E)$: Wirkungsquerschnitt für Anregung in einen autoionisierenden Zustand
- $\sigma_j^{RE}(E)$: Wirkungsquerschnitt für resonante Anregung in einen mehrfach autoionisierenden Zustand
- B_j^A : Verzweigungsverhältnis Autoionisation–radiative Abregung
- B_j^{DA} : Verzweigungsverhältnis zweifache Autoionisation–radiative Abregung
- B_j^{AD} : Verzweigungsverhältnis Auto-Doppelionisation–radiative Abregung

2.2. Theoretische Methoden

Totale Wirkungsquerschnitte stellen eine Superposition der Wirkungsquerschnitte der einzelnen Prozesse dar (siehe Abbildung 2.7). Ihre Beschreibung durch theoretische Rechnung ist auf Grund des Drei-Körper-Problems komplex und wird meistens durch Näherungsverfahren realisiert. Die Schwierigkeit besteht nicht nur in der Einbindung aller Prozesse, sondern auch in der Berücksichtigung aller möglichen beteiligten Elektronen.

2.2.1. Klassische Beschreibung

1912 formulierte **Thomson** die erste klassische Beschreibung der Elektronenstoßionisation [7]. Unter der Voraussetzung, dass das Elektron des Targets als quasifrei betrachtet werden kann und dass eine Ionisation bei einem genügend hohem Energieübertrag mit einer Wahrscheinlichkeit von 1 eintritt, konnte ein einfaches Modell erstellt werden, das einen Wirkungsquerschnitt in der richtigen Größenordnung lieferte [8]:

$$\sigma_i = 4 \cdot a^2 \pi \frac{1}{E E_i} \left(1 - \frac{E_i}{E} \right) \quad (2.3)$$

mit

$$a = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

E : Elektronenenergie

E_i : Ionisationsenergie

ϵ_0 : Permittivität

Allerdings liegen die theoretischen Berechnungen im Vergleich mit experimentellen Ergebnissen auf Grund der Vernachlässigung aller Quanteneffekte des Targets für niedrige Energien zu hoch und für hohe Energien zu niedrig.

2.2.2. Quantenmechanische störungstheoretische Beschreibung

Im nicht-relativistischen Fall lässt sich die stationäre zeitunabhängige Schrödinger Gleichung eines Systems von $(N + 1)$ Elektronen formulieren zu

$$H(Z, N + 1)\Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi \quad (2.4)$$

$$\Rightarrow (H_T + T_e + V)(N + 1)\Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi \quad (2.5)$$

wobei

- H : Gesamthamiltonoperator
- Z : Kernladungszahl des Targets
- N : Anzahl der Elektronen des Targets
- H_T : Hamiltonoperator des ungestörten Targets
- T_e : Operator der kinetischen Energie des Projektilelektrons
- V : Wechselwirkungspotential

Die ersten quantenmechanischen Modelle der Störungstheorie unter Verwendung der Born'schen Näherung zeigten nur im Energiebereich $E \geq 20 \cdot E_i$ (mit der Elektronenenergie E und der Ionisationsenergie E_i) und für DI-Prozesse eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten. Die verschiedenen Näherungsmethoden unterscheiden sich in der Zusammensetzung des ungestörten Hamiltonoperators $H_0 = H_T + T_e$ und des Wechselwirkungspotentials V [9].

Die **Plane-Wave Born Approximation (PWBA)**, die 1930 von Bethe für seine Theorie verwendet wurde, setzt als Ansatz für die Wellenfunktion Ψ einlaufende, ebene Wellen ein. Der Einfluss der Targetelektronen auf das Projektilektron wird dabei vernachlässigt [10, 11]. Die ebene Welle des Projektilelektrons wird am Targetion gestreut und läuft als Kugelwelle wieder aus. Die PWBA zeigt ab einer Energie $E > 30E_i$ [9] (mit der Ionisationsenergie E_i der i -ten Schale) eine gute Übereinstimmung.

In der **Coulomb Born Approximation (CBA)** werden als Ansatz für die Wellenfunktion Coulombwellen verwendet. Das Potential $V(r) = -Z_{eff}/r$ entspricht dabei der vom Projektil aus gesehenen, effektiven Kernladungszahl. Im Vergleich zur PWBA liefert die CBA bessere Ergebnisse [9], insbesondere für hochgeladene Ionen, da deren Potential in hinreichend großem Abstand Coulomb-ähnlich ist [12].

Die **Distorted-Wave Born Approximation (DWBA)** ist eine Erweiterung der CBA Methode, bei der das Potential $V(\vec{r})$ mit einem Beitrag aus der Wechselwir-

kung zwischen dem Projektilektron und dem durchschnittlichen sphärischen Potential der Targetelektronen ergänzt wird. Dieser zusätzliche Beitrag $V_{DW}(\vec{r})$ kann sich für Eingangs- und Ausgangskanal unterscheiden [9]. Die Berechnungen nach der DWBA zeigen sehr gute Übereinstimmungen mit experimentellen Daten, allerdings sind diese Rechnungen insbesondere zu höheren Energien hin aufwändig [12].

Bei der **Configuration-Averaged Distorted-Wave (CADW)** Methode wird deshalb mit einer Vereinfachung gearbeitet. Die Elektronenkonfigurationen von Vielelektronensystemen können durch die Drehimpulskopplungen in mehrere Niveaus aufspalten. Um den Rechenaufwand zu reduzieren wird bei der CADW Methode über die Multiplett-Aufspaltung gemittelt und ein durchschnittlicher Wirkungsquerschnitt für die gegebene Elektronenkonfigurationen bestimmt [12].

Die **Distorted Wave Born Exchange Approximation (DWBEA)** ist eine noch genauere Methode zur Berechnung von Wirkungsquerschnitten. Sie berücksichtigt zusätzlich Austauscheffekte wie die Wechselwirkungen des Projektilektrons mit den Targetelektronen und der beiden freien Elektronen im Endzustand. Dazu werden die Übergangsmatrixelemente für die Ionisation eines Targetelektrons in erster Ordnung Störungstheorie berechnet und über alle Drehimpulse aufsummiert. Das Integral über die Energieverteilung der beiden Kontinuumselektronen liefert den totalen Wirkungsquerschnitt [12].

2.2.3. Quantenmechanische nicht-störungstheoretische Beschreibung

Störungstheoretische Ansätze liefern bei hohen Elektronenenergien gute Ergebnisse. Zu niedrigeren Elektronenenergien hin greift man auf andere theoretische Ansätze zurück.

Eine Alternative zu den Methoden in Abschnitt 2.2.2 stellt die **Close-Coupling Methode (CCM)** dar. Dabei werden Projektil und Target gleich behandelt. Die gesamte Wellenfunktion des (N+1)-Elektronensystems wird als antisymmetrisierte Entwicklung nach den Produkten der Wellenfunktionen des N-Elektronentargets und der Wellenfunktion des streuenden Elektrons dargestellt [12]. Dabei werden Zustände bevorzugt, die mit den Anfangs- und Endzuständen stark koppeln. Ein Problem stellt dabei die unendliche Anzahl der Kontinuumszustände dar. Durch die Einführung von Pseudozuständen, die das Kontinuum durch diskrete Zustände in geeigneter Weise darstellen, kann dies umgangen werden. Die CCM stellt eine gute Näherung für langsame Stöße und insbesondere für detaillierte Untersuchungen der Resonanzen und der Schwellenregion dar [9].

Der **R-Matrix Formalismus** wurde 1970 erstmals für Elektron-Ion-Stößen verwendet [13]. Das Prinzip beruht auf der Unterteilung der Wechselwirkungszone durch eine Kugelfläche. In der inneren Region kommen Näherungen für Austausch- und Korrelationseffekte zwischen den gestreuten und den Targetelektronen zur Anwendung. Außerhalb der Kugelfläche werden Projektil und Target als Zweikörperproblem im schwachen, langreichweitigen Potential betrachtet, was eine Vereinfachung des ursprünglichen Vielteilchenproblem darstellt. Durch Lösen der Schrödinger-Gleichung ergeben sich die Übergangswahrscheinlichkeiten in Form einer Matrix, der R-Matrix. Daraus lässt sich der Wirkungsquerschnitt bestimmen. Das Verfahren hat einen geringeren Rechenaufwand als die CCM, allerdings liefert es nur für mittlere Stoßenergien sinnvolle Ergebnisse. Für niedrige und hohe Energien eignen sich andere Verfahren besser [12].

2.2.4. Semi-empirische Näherung

Die **Lotz-Formel** ist eine semi-empirische Näherung der Einfachionisation, die helfen soll, Wirkungsquerschnitte ohne großen Rechenaufwand geeignet zu parametrisieren. Sie ist eine gute Näherung, wenn keine indirekten Prozesse beteiligt sind. Die Formel setzt voraus, dass der Wirkungsquerschnitt unterhalb des Maximums der klassischen Theorie von Thomson folgt und zu höheren Energien hin der quantenmechanischen Theorie von Bethe [9]. Sie ist definiert als

$$\sigma^{DI}(E) = \sum_{i=1}^N a_i n_i \frac{\ln(E/E_i)}{E \cdot E_i} [1 - b_i \cdot e^{-c_i \cdot (E/E_i - 1)}] \quad (2.6)$$

mit

- E : Elektron-Ion Kollisionsenergie
- E_i : Ionisationsenergie der i-ten Schale
- N : Anzahl Schalen i
- n_i : Anzahl Elektronen auf Schale i

und den Fitparametern a_i , b_i und c_i . Üblicherweise verwendet man für $q \geq 4$ [9] die von Lotz empfohlenen Parameter [14]:

$$\begin{aligned} a_i &= 4.5 \times 10^{-14} \text{ cm}^2 \text{ eV}^2 \\ b_i &= c_i = 0 \end{aligned}$$

Allerdings müssen die Rechnungen mit der Lotz-Formel mit Vorsicht durchgeführt werden. Eine Innerschalenionisation kann zu einem autoionisierenden Zwischenzustand führen, der durch Elektronenemission zerfällt. In diesem Fall muss der entsprechende Beitrag mit einem Fluoreszenzkoeffizient multipliziert werden, der das Verhältnis der Photonenemission zur Gesamtzahl an möglichen Übergängen angibt.

3. Experimentelle Grundlagen

3.1. Versuchsaufbau

Im Rahmen dieser Arbeit wurden Messungen an der Elektronen-Ionenstoß-Apparatur des Instituts für Atomphysik an der JLU Giessen durchgeführt. Die relevanten Komponenten des Aufbaus sind in Abbildung 3.1 dargestellt und wurden bereits in den Arbeiten von Stenke [15] und Titte [12] detailliert besprochen.

Die für die Messungen benötigten Ionen werden in einer **EZR Ionenquelle** (engl. *electron-cyclotron-resonanz ionsource*, kurz ECR) erzeugt. Bei der im Experiment verwendete Ionenquelle erfolgt die Heizung des Plasmas über die Einspeisung von 10 GHz-Hochfrequenz-Mikrowellen. In einem separaten Behältnis wird Wolframhexacarbonyl $W(CO)_6$ in Pulverform eingebracht. Dessen Gasdruck bei Raumtemperatur beträgt 0.02 mbar [16] und es lässt sich deshalb ohne zusätzliches Heizen in die Quelle einbringen. Der Gasfluss in die EZR-Quelle wird durch ein Thermoventil reguliert.

Die in der Ionenquelle erzeugten Wolfram-Ionen werden mit 12 kV beschleunigt, durch verschiedene **ionenoptische Elemente** fokussiert und am **ersten Analysiermagneten** nach ihrem Masse-zu-Ladungs-Verhältnis gefiltert. Der Faradaybecher hinter dem ersten Analysiermagneten dient zur Fokussierung und zur Aufnahme von Massenspektren.

Hinter dem **ersten Kugelkondensator** befinden sich **zwei Schlitzblenden** im Abstand von 195 mm [12]. Jede Blende besteht aus vier individuell einstellbaren Schlitzbacken. Je nach Art der Messung und Intensität des Ionenstrahls werden verschiedene Einstellungen der Schlitzblenden verwendet. Typische Einstellungen finden sich im Abschnitt 4.

In der **Streukammer** hinter den Schlitzblenden wird der Ionenstrahl im 90° -Winkel mit einem kollimierten Strahl aus Elektronen gekreuzt. Die Elektronenenergie E_e lässt sich durch das Kathodenpotential U in einem Bereich bis 1000 eV variieren. Es konnten Elektronenströme von bis zu 425 mA erreicht werden. Die Wechselwirkungszone lag bei allen getätigten Messungen auf Erdpotential. Mit Hilfe eines zusätzlich angelegten Potentials V_0 und des zweiten Analysiermagneten wäre es allerdings möglich, zwischen

den in der Wechselwirkungszone und den außerhalb erzeugten höhergeladenen Ionen zu differenzieren (siehe Abschnitt 3.2).

Nach Austritt aus der Wechselwirkungszone liegen Primärstrahl und Produktstrahl übereinander. Im **zweiten Analysiermagneten** werden die beiden Strahlen gemäß ihres Masse-zu-Ladungs-Verhältnisses separiert. Der Primärstrahl wird hinter dem Magneten in einen der beiden fahrbaren Faradaybecher gelenkt, während der Produktstrahl nach Passieren zweier Schlitzblenden zur Unterdrückung des Untergrunds (z.B. UV-Photonen) und eines weiteren Kugelkondensators auf einen **Channeltron-Detektor** (engl. *channel-electron-multiplier*, kurz CEM) trifft. Bei früheren Beobachtungen wurden am Detektor mehr Pulse gemessen, als Ionen auftrafen [9]. Deshalb wurde eine paralysierende Totzeit implementiert, deren Auswirkungen Hillenbrand [6] in seiner Arbeit beschreibt. Nach Totzeitkorrektur beträgt die Ansprechwahrscheinlichkeit ϵ des Detektors $97\% \pm 3\%$ [12]. Eine detaillierte Beschreibung des Detektors findet sich in der Arbeit von Timphus [17].

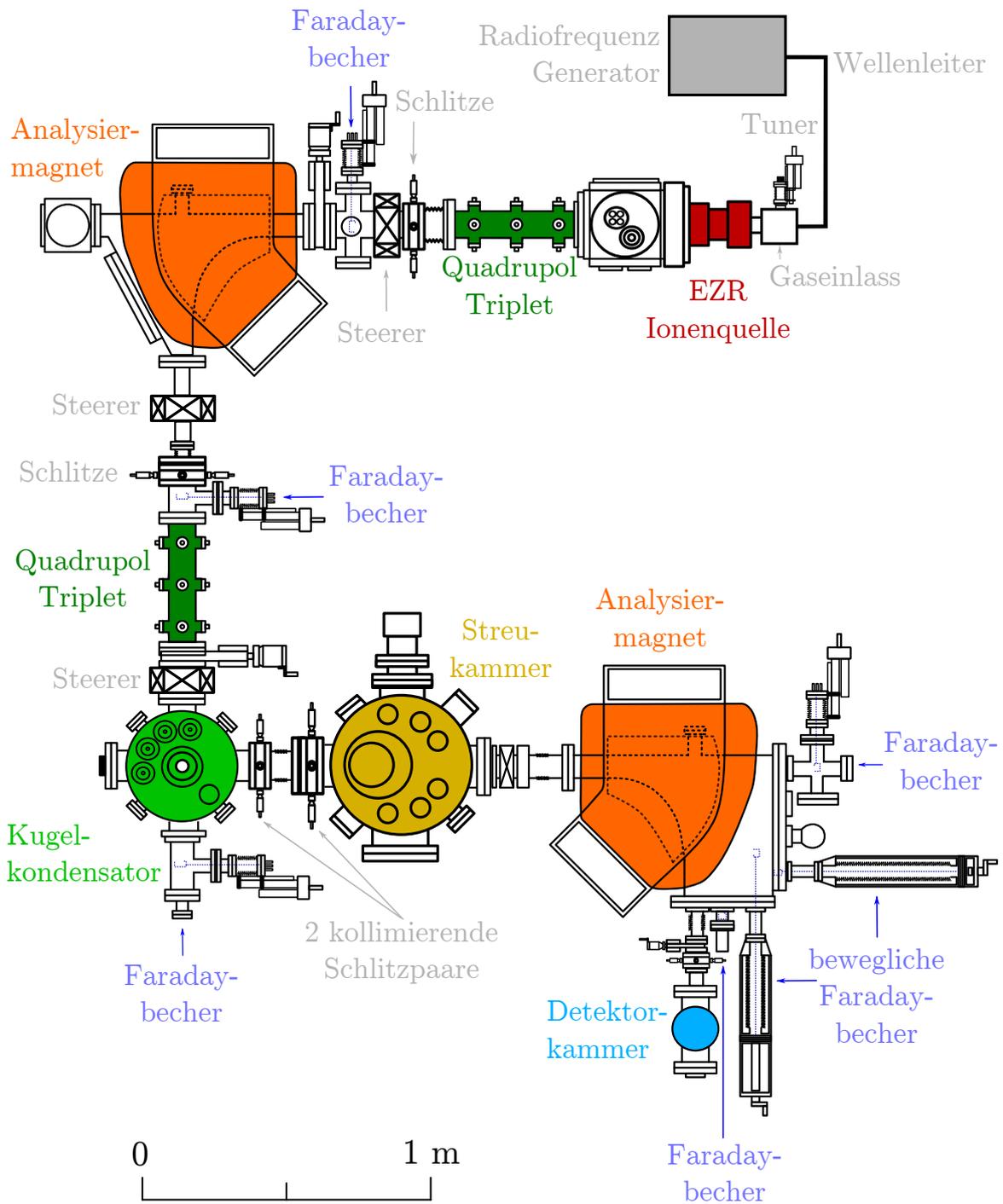


Abbildung 3.1.: Schematische Zeichnung des Versuchsaufbaus.

3.2. Untergrund

Der Messuntergrund wird von den Ionisationsprozessen erzeugt, die im Bereich zwischen dem ersten Kugelkondensator und dem zweiten Analysiermagneten stattfinden und nicht durch Elektronenstöße in der Wechselwirkungszone entstehen.

Der intensive Elektronenstrahl erzeugt eine Potentialmulde, die bis zu 4% des Kathodenpotentials tief sein kann [12]. Dies führt zu einer systematischen Überhöhung des Wirkungsquerschnittes. Zur Kompensation der Raumladung des Elektronenstrahles wird hochreines Kryptongas in die Kammer gelassen. Der Druck innerhalb der Streukammer wurde während der Messung auf konstanten 2×10^{-7} mbar gehalten, da man bei diesem Druck von einer vollständigen Kompensation der Raumladung durch im Elektronenstrahl erzeugte Kr^+ -Ionen ausgehen kann [12].

Einen weiteren Beitrag zum Untergrund liefern die Stöße der Ionen mit Elektronen und Restgasionen innerhalb der Wechselwirkungszone, sowie Stöße mit Restgasatomen außerhalb der Wechselwirkungszone und Stöße mit den Wänden der Anlage. Der Zerfall autoionisierender metastabiler Zustände im Primärstrahl führt ebenfalls zu einer erhöhten Signalarate.

Durch Anlegen eines Referenzpotentials V_0 an die Wechselwirkungszone lässt sich der Untergrund der außerhalb der Wechselwirkungszone stattfindenden Prozesse vermeiden. Die Ionen mit der Ladung q , die durch Elektronenstoßionisation in der Wechselwirkungszone auf eine Ladung von n ionisiert werden, erhalten ein zusätzliches Potential von $(q+n) \cdot V_0$. Der Betrag $q \cdot V_0$ geht beim Austritt aus der Wechselwirkungszone wieder verloren, so dass eine Nettoenergiegewinn von $n \cdot V_0$ übrig bleibt. Die beiden Strahlkomponenten mit bzw. ohne Energiegewinn lassen sich im zweiten Magneten trennen.

Der Beitrag zum gemessenen Wirkungsquerschnitt durch Stoßprozesse mit Restgasteilchen innerhalb der Wechselwirkungszone lässt sich durch

$$\Delta\sigma = \sigma_{RG} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{m_i E_e}{m_e E_i}}} \quad (3.1)$$

| Datum | Energiekorrekturen |
|---------|--------------------|
| | (eV) |
| 04.2007 | +0.3 |
| 03.2008 | -0.9 |
| 11.2008 | -1.8 |
| 07.2009 | -1.6 |
| 04.2010 | -1.3 |

Tabelle 3.1.: Gemessene Energiekorrekturen seit 2007.

mit

- σ_{RG} : Wirkungsquerschnitt für die Ionisation durch Restgasionen
- m_i : Ionenmasse
- m_e : Elektronenmasse
- E_i : Ionenenergie
- E_e : Elektronenenergie

beschreiben [12]. Für hohe Elektronenenergien kann man von gemessenen Wirkungsquerschnitt einen $1/\sqrt{E_e}$ -Anteil, der sich aus den Ion-Ion-Stößen von Ionenstrahl und Restgas ergibt, abziehen. In der Regel ist dies aber nicht nötig [12].

3.3. Energieeichung

Anhand einer Kontrollmessung mit He^+ wurde untersucht, ob die Elektronenenergie bzw. die Beschleunigungsspannung an der Kathode, korrekt registriert wird, oder ob es zu Verschiebungen durch Kontaktpotentiale zwischen den Elektroden der Elektronenkanone und den Elektroden der Hochspannungsversorgung kommt [9]. Dazu wurde ein Energiescan der Einfachionisation von He^+ im Bereich der Ionisationsschwelle bei 54.42 eV [18] durchgeführt. Durch einen Fit nach Wannier wurden die Energieverschiebung zu -1.26 eV berechnet. Die neu aufgenommenen Energiedaten müssen also um einen Wert von 1.26 eV reduziert werden. Eine genauere Beschreibung der Fit-Funktion findet sich bei Becker [19]. Es wurden keine zusätzlichen Absolutwerte gemessen, so dass die Energiescandaten in Abbildung 3.2 nicht angepasst wurden und ihre Höhe nicht dem realen Wirkungsquerschnitt entspricht.

In Tabelle 3.1 sind die Energiekorrekturen der letzten Jahre aufgelistet.

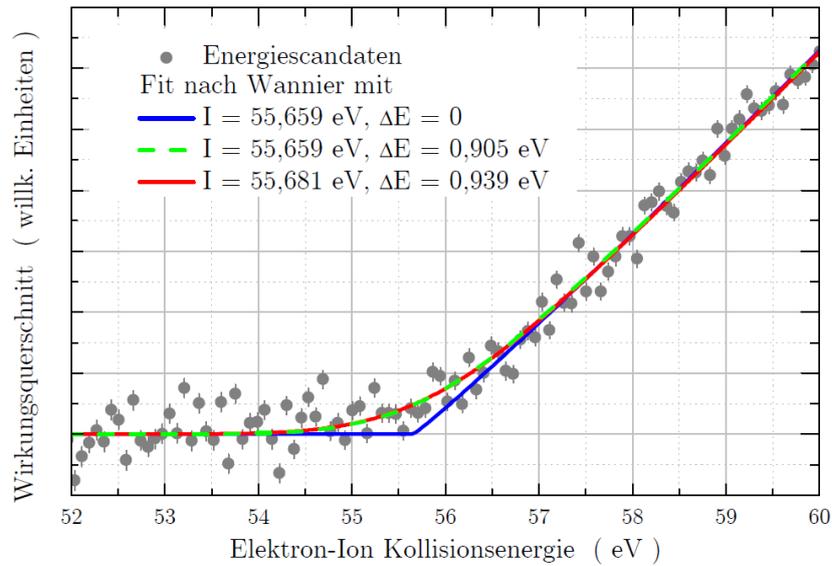


Abbildung 3.2.: Graph zur Berechnung der Energieeichung.

3.3.1. Energieauflösung

Experimentell konnte die Energiebreite bei $E = 253.51 \text{ eV}$ aus Abbildung 3.3 zu $\Delta E = 1.29 \text{ eV}$ bestimmt werden. Damit ergibt sich als untere Grenze für das Energieauflösungsvermögen $E/\Delta E$ ein Wert von 196.5.

3.4. Elektronenstromkorrekturfunktion

Bei kleinen Elektronenenergien E_e besteht auf Grund des Stromes, der über das erste Stangenpaar abfließt (siehe Abbildung 3.4), eine relativ große Differenz zwischen dem Kathodenstrom und dem Anodenstrom. Um den systematischen Fehler zu verringern muss der Elektronenstrom, der die Wechselwirkungszone tatsächlich durchquert, bestimmt werden. Dies kann über eine Strommessung an der Kathode (I_K) und dem ersten Stangenpaar (I_S) geschehen. Mit

$$C(E_e) = \frac{I_K - I_S}{I_K} \quad (3.2)$$

lässt sich ein Korrekturfaktor für den effektiven Strom in der Wechselwirkungszone $I_{\text{eff}} = I_K \cdot C(E_e)$ bestimmen.

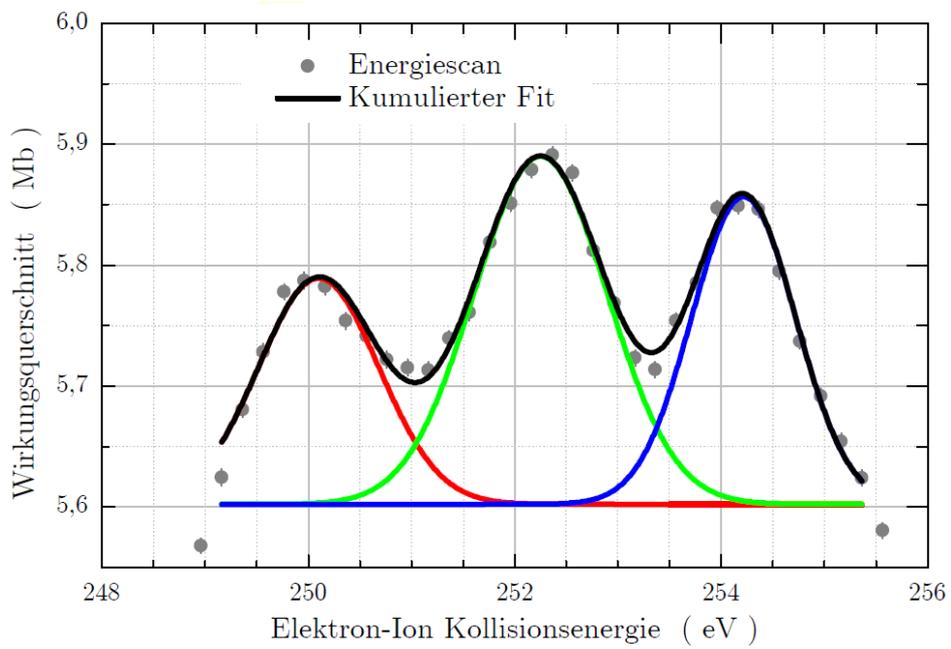


Abbildung 3.3.: Vergrößerte Darstellung einer Scanmessungen zur Ermittlung der Energieauflösung.

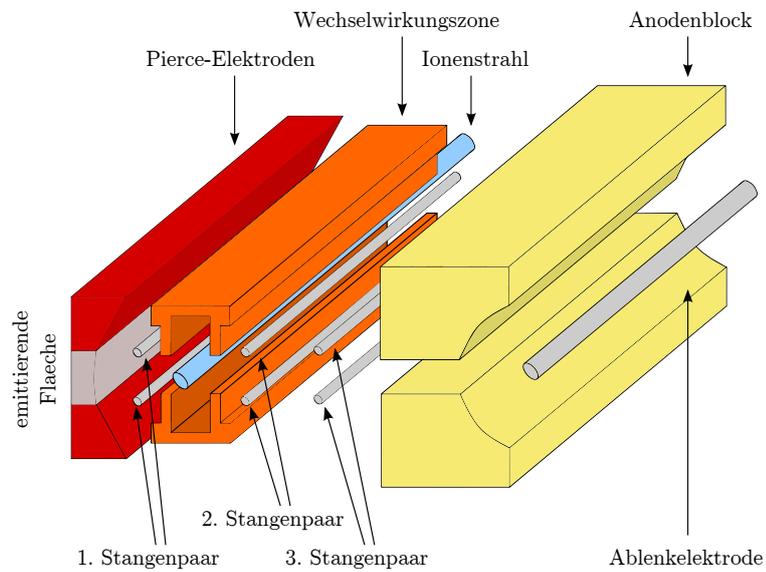


Abbildung 3.4.: Schematischer Aufbau der Elektronenkanone.

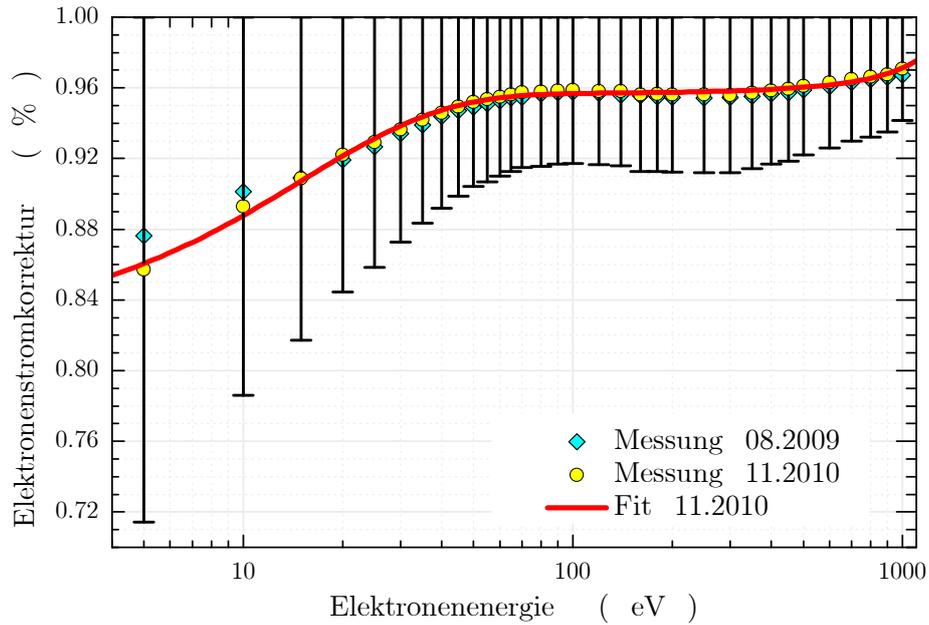


Abbildung 3.5.: Elektronenstromkorrekturfunktion, gemessen im April 2010.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde im November 2010 eine neue Elektronenstromkorrekturfunktion aufgenommen. Der Fehler im effektiven Strom kann als $\pm I_S$ angenommen werden. Er liegt im Bereich von 15 eV bei unter 10% und ab 50 eV bei unter 5%.

Aus Abbildung 3.5 konnte der Korrekturfaktor zu

$$C(E_e) = 0.95446 - 0.13406 \cdot e^{\frac{-E_e}{14.96364}} + 0.00202 \cdot e^{\frac{E_e}{471.90802}} \quad (3.3)$$

bestimmt werden.

3.5. Messverfahren

Im Rahmen dieser Arbeit wurden zwei unterschiedliche Messverfahren verwendet. Im Folgenden sind diese in Kürze beschrieben. Ein detaillierterer Einblick findet sich bei Rausch *et al.* [5].

3.5.1. Methode der gekreuzten Strahlen

Die Berechnung der Wirkungsquerschnitte beruht auf der Methode der gekreuzten Strahlen (engl. *crossed-beams*). Nach [12] ist der Wirkungsquerschnitt

$$\sigma = \frac{RF}{MI_i I_e} \quad (3.4)$$

mit dem kinematischen Faktor M , dem Formfaktor F , der beobachteten Reaktionrate R , dem Ionenstrom I_i und dem Elektronenstrom I_e .

Der kinematische Faktor M berechnet sich nach [12] zu

$$M = \frac{v_{rel}}{v_i v_e q_i q_e e^2 \sin(\theta)} = \frac{\sqrt{v_i^2 + v_e^2 - 2v_i v_e \cos(\theta)}}{v_i v_e q_i q_e e^2 \sin(\theta)} \quad (3.5)$$

mit dem Winkel zwischen den Teilchenstrahlen θ , den Ionen- und Elektronengeschwindigkeiten v_i und v_e , sowie den entsprechenden Ladungszuständen q_i und q_e .

Der Formfaktor ergibt sich aus der Geometrie des Strahlüberlapps zu [12]

$$\int i_i(z) i_e(z) dz = \frac{I_i I_e}{F} \quad (3.6)$$

mit der Linienstromdichte des Ionenstromes i_i und der des Elektronenstromes i_e [12]. Allerdings kann die Bestimmung des Formfaktors nicht zeitgleich mit der Messung erfolgen und eine Änderung der Messbedingungen bei einer späteren Bestimmung kann nicht ausgeschlossen werden. Das in Abschnitt 3.5.2 beschriebene Messverfahren hat dieses Problem nicht.

3.5.2. Absolutmessungen

Im dynamischen Messverfahren zur Bestimmung von Absolutwerten muss der Formfaktor F nicht bestimmt werden, da der Elektronenstrahl durch den Ionenstrahl gefahren wird. Der Untergrund wird an den Stellen bestimmt, an denen die Strahlen nicht überlappen. Dazu werden im Spektrum des Ionisationssignals manuell vier Grenzen so angepasst, dass sich je zwei rechts und links des Strahl befinden und zwischen den beiden äußeren jeweils ein Untergrundbereich liegt.

In Abbildung 3.6 sind die Zählkurven des Einzelteilchendetektors, des Ionenstromes, des Elektronenstromes und des Zeitzählers abgebildet.

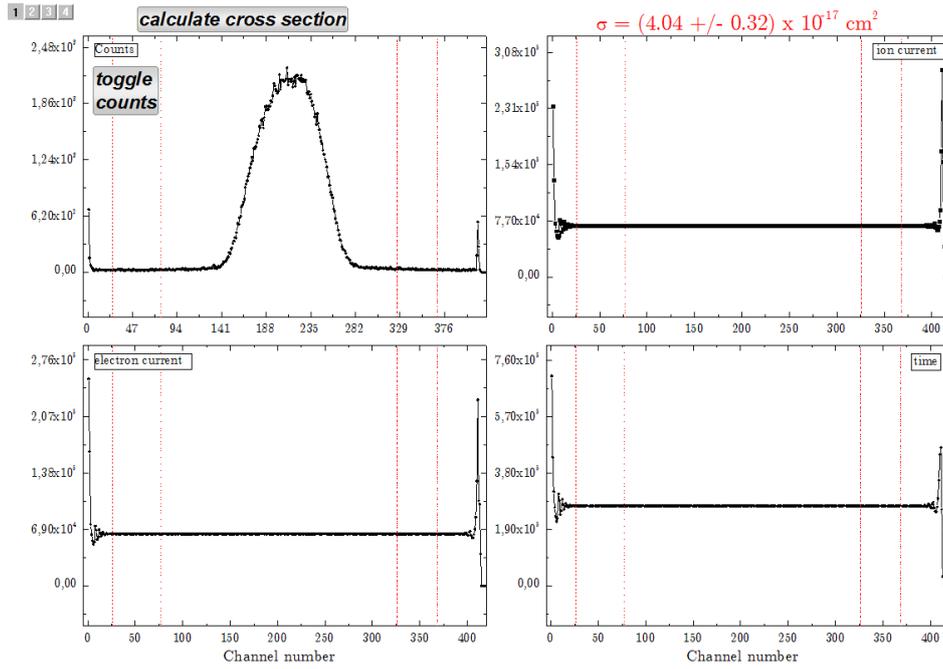


Abbildung 3.6.: Vierkanalardarstellung der mit Origin eingelesenen Absolutdaten. Dargestellt sind die Zählkurven des Einzelteilchendetektors, des Ionenstromes, des Elektronenstromes und des Zeitzählers.

Der Wirkungsquerschnitt wird mit

$$\sigma = S \cdot \frac{\Delta z}{M} \cdot \frac{K}{\epsilon \cdot C(U_e)} \quad (3.7)$$

berechnet.

Die Signalarate S ergibt sich aus

$$S = \sum_{j=j_2}^{j_3-1} S(j) - U \quad (3.8)$$

wobei j_2 und j_3 die Kanalzahlen der inneren beiden Grenzen sind.

Der Faktor Δz bezeichnet die Fahrstrecke pro Messkanal und wird anhand eines Winkelschrittgebers für die Motorsteuerung der Elektronenkanone bestimmt. Der kinematische

Faktor aus Gleichung 3.5 bei einem Wechselwirkungswinkel von 90° ist

$$M = \frac{\sqrt{v_i^2 + v_e^2}}{v_i v_e q_i e^2} \quad (3.9)$$

Der Konversionsfaktor K wird aus den Einstellungen der Strom-Frequenz-Wandler für die Ionen- und Elektronenstrommessung gewonnen. Der Korrekturfaktor $C(U_e)$ beschreibt den tatsächlich in der Wechselwirkungszone verfügbaren Elektronenstrom. Er ergibt sich aus der Elektronenstromkorrekturfunktion.

3.5.2.1. Fehlerbetrachtung

Der experimentelle Gesamtfehler ergibt sich durch die quadratische Addition des statistischen und des systematischen Fehlers.

Die Signalrate S ist die einzige Messgröße die mit einem statistischen Fehler behaftet ist. Ihr relativer statistischer Fehler berechnet sich mit einem Konfidenzintervall von 95% zu

$$\frac{\Delta S}{S} = \frac{\sqrt{\sum_{j_s} (b(j)N(j))^2 + a^2 \sum_{j_U} (b(j)N(j))^2}}{\sum_{j_s} b(j)N(j) - a \sum_{j_U} b(j)N(j)} \quad (3.10)$$

Die Genauigkeit des Messvorgangs erhöht sich mit einer entsprechend größeren Messzeit. Für detaillierte Rechnungen siehe [12].

Die anderen Größen aus Gleichung 3.7 sind mit systematischen Messfehlern behaftet. Der Fehler der Kanalbreite Δz wird mit der Messgenauigkeit der Gesamthubstrecke als 1% angegeben. Der kinematische Faktor M enthält sowohl Geschwindigkeit der Ionen als auch die der Elektronen. Aufgrund der viel größeren Masse haben die Ionen im Vergleich zu den Elektronen eine viel kleinere Geschwindigkeit. Deshalb geht in die Relativgeschwindigkeit v_{rel} nur der Fehler der Elektronengeschwindigkeit von maximal 1% ein. Der Fehler der Ansprechwahrscheinlichkeit ϵ des Einzelteilchendetektors wird mit 3% angegeben. Die Fehler des Elektronen- und Ionenstroms enthalten den Fehler des Konversionsfaktors K . Der Fehler des Korrekturfaktors $C(U_e)$ liegt ebenfalls im Elektronenstrom. Für den Ionenstrom wird ein Fehler von 5% angenommen, da nicht davon ausgegangen werden kann, dass bei der Messung des Ionenstroms alle entstehenden Sekundärelektronen zurückgehalten werden können. Für den Kathodenstrom wird eine Messunsicherheit von 0.1% angesetzt. Der Fehler des Elektronenstrom ergibt sich aus der Elektronenstromkorrekturfunktion. [12]

3.5.3. Scanmessungen

Die in Abschnitt 2.1 beschriebenen indirekten Prozessen haben eine natürliche Linienbreite von kleiner 0.1 eV [12] und tragen nur einen kleinen Teil zum Wirkungsquerschnitt bei. Aus diesem Grund wird ein Messverfahren mit einem kleinen Energieabstand zwischen den Messpunkten sowie einer möglichst hohen statistischen Genauigkeit benötigt. Das Verfahren für die Absolutmessungen ist dafür ungeeignet, da es während der Messung zu Veränderungen der experimentellen Parameter kommen kann. Die Messergebnisse sind bestenfalls auf 1% genau reproduzierbar [12]. Im Gegensatz dazu werden Energiescanmessungen so schnell durchgeführt, dass sich die physikalischen Gegebenheiten in dieser Zeit nicht signifikant ändern. Durch Wiederholung lässt sich ferner eine gute statistische Genauigkeit erzielen. Der Elektronenstrahl wird im Bereich des größten Überlapps mit dem Ionenstrahl fixiert. Das allerdings führt dazu, dass nur eine Messung von Relativwerten möglich ist. Durch die Fixierung des Elektronenstrahls können der Formfaktor und der Untergrund nicht zeitgleich bestimmt werden. Zum Zwecke der Darstellung der Messdaten wird daher die folgende Formel für den Formfaktor verwendet [12]

$$F(E_e) = \frac{1}{1.39 \log(E_e) - 0.44} \text{ cm}, \quad E_e \text{ in [eV]} \quad (3.11)$$

Der Untergrund wird entweder durch eine Messung ohne Strahlüberlapp oder durch eine Messung unterhalb der Ionisationsschwelle bestimmt. Im zweiten Fall berechnet sich der Untergrund zu [12]

$$U_{norm} = \frac{\sum_{j=1}^{j_S} N(j)}{\sum_{j=1}^{j_S} Q_i(j)} = \frac{U}{Q_i} \quad (3.12)$$

wobei j_S für die Kanalzahl bis zur Schwelle, N für die Gesamtzahl der Reaktionsereignisse und Q_i für die Ionenladung steht. Die untergrundbereinigte Reaktionsrate ergibt sich daraus zu [12]

$$R(j) = N(j) - Q_i(j) \cdot U_{norm} \quad (3.13)$$

Der Wirkungsquerschnitt errechnet sich separat für jeden Kanal aus [12]

$$\sigma(E(j)) = \frac{R(j)T(j)F(E(j))}{Q_i(j)Q_e(j)M(E(j))} \cdot \frac{K}{\epsilon C(E(j))} \quad (3.14)$$

mit der Elektronenstrahlladung Q_e , der Messzeit $T(j)$ und dem kinematischen Faktor $M(E(j))$.

Die Anlage erlaubt eine Messung über 200 eV mit bis zu 4096 Kanälen. Rechnerisch ergibt sich daraus ein minimaler Energieabstand der Messpunkte von 0.05 eV. Die Messzeit pro Kanal liegt bei etwa 3 ms und die Messelektronik benötigt etwa 3 μ s für die Umstellung auf den nächsten Energiewert.

3.5.3.1. Fehlerbetrachtung

Während der systematische Fehler der Scanmessung bis auf eine Unsicherheit im Formfaktor dem der Absolutmessung entspricht, lässt sich der statistische Fehler mit der Formel [12]

$$\frac{\Delta\sigma(E(j))}{\sigma(E(j))} = \frac{\Delta\sigma(R(j))}{\sigma(R(j))} = \frac{\sqrt{N(j) + \left(\frac{Q_i(j)}{Q_i}\right) \cdot U}}{N(j) - \frac{Q_i(j)}{Q_i} \cdot U} \quad (3.15)$$

mit

$$\sigma : \text{Wirkungsquerschnitt der Reaktion} \quad (3.16)$$

$$E : \text{Elektronenenergie} \quad (3.17)$$

$$j : \text{Kanalzahl} \quad (3.18)$$

$$R : \text{Reaktionsrate} \quad (3.19)$$

$$N : \text{Gesamtzahl der Reaktionsereignisse} \quad (3.20)$$

$$Q_i : \text{Ladung der Ionen} \quad (3.21)$$

$$U : \text{Untergrund} \quad (3.22)$$

$$(3.23)$$

berechnen. Er lässt sich durch die Zusammenfassung ("binnen") von mehreren Kanälen reduzieren.

4. Ergebnisse

Im Rahmen dieser Arbeit wurden Wirkungsquerschnitte der Einfachionisation durch Elektronenstoß von W^{5+} , W^{8+} , W^{11+} und W^{12+} im Energiebereich bis 1000 eV separat mit dem dynamische Messverfahren (siehe Abschnitt 3.5.2) ermittelt. Die relativen Wirkungsquerschnitte aus den Energiescannmessungen wurden mit einer Schrittweite von 5 Kanälen pro eV und einer Auflösung von ca. 1 eV aufgenommen. Sie wurden in der Regel mit Hilfe eines Polynomes ersten oder zweiten Grades an die Absolutwerte angepasst.

Abhängig von den Versuchsparametern und den vorherrschenden Umgebungsbedingungen konnten unterschiedlich starke Ionenströme der einzelnen Ladungszustände von Wolfram erzeugt werden. Bei sehr starken Ionenströmen und damit verbundenen hohen Zählraten auf dem Detektor, wurde der Primärstrahl durch die Schlitze so beschnitten, dass sich auf dem Detektor auch bei einer Elektronenenergie von 1000 eV eine Zählrate kleiner als 10 kHz ergab. Damit konnten die Zählverluste durch Totzeit minimiert werden. In Tabelle 4.1 sind die verschiedenen Schlitzstellungen und die damit bei einer Elektronenenergie von 1000 eV erhaltenen Ströme auf den beiden fahrbaren Faradaybechern aufgelistet.

Die gemessenen Absolutwerte sind im Anhang aufgelistet.

| Ion | Art der Messung | Schlitzweite | Ionenstrom |
|------------------|-----------------|---------------------|------------|
| | | (mm ²) | (nA) |
| W ⁵⁺ | Scannmessung | 1×1 | 6.1 |
| | Absolutmessung | 0.5×0.5 | 1.3 |
| W ⁸⁺ | Scannmessung | 2×2 | 6.8 |
| | Absolutmessung | 0.8×0.8 | 2.8 |
| W ¹¹⁺ | Scannmessung | 2×2 | 8.1 |
| | Absolutmessung | 0.6×0.6 | 0.7 |
| W ¹²⁺ | Scannmessung | 2×2 | 8.8 |
| | Absolutmessung | 0.8×0.8 | 1.5 |

Tabelle 4.1.: Verwendete Schlitzstellungen für Wolframmessungen mit dem entsprechenden Ionenstrom auf einem der fahrbaren Faradaybecher.

4.1. Verwendete theoretische Methoden

Zur Berechnung von theoretischen Ionisationsquerschnitten und Atomstrukturen wurden der LANL-Code [20] verwendet. Dabei werden Atomstrukturen bzw. Energieniveaus mit der Hartree-Fock Method von R.D. Cowan [21] ermittelt. Für die Berechnung der Wirkungsquerschnitte stehen mehrere Methoden zur Auswahl.

Für diese Arbeit wurden die Wirkungsquerschnitte der Einfachionisation nach der CADW-Näherung berechnet. Von einer Berechnung der Wirkungsquerschnitte unter Berücksichtigung der Feinstrukturaufspaltung musste auf Grund der großen Anzahl von Energieniveaus abgesehen werden.

Zu jedem beteiligen Ladungszustand wurden mit dem LANL-Code die Energiebereiche berechnet, in der die Zuständen unter Berücksichtigung der Feinstruktur aufspalten. Diese Energiebereiche sind in Tabellen in den Unterabschnitten der jeweiligen Ladungszustände aufgeführt.

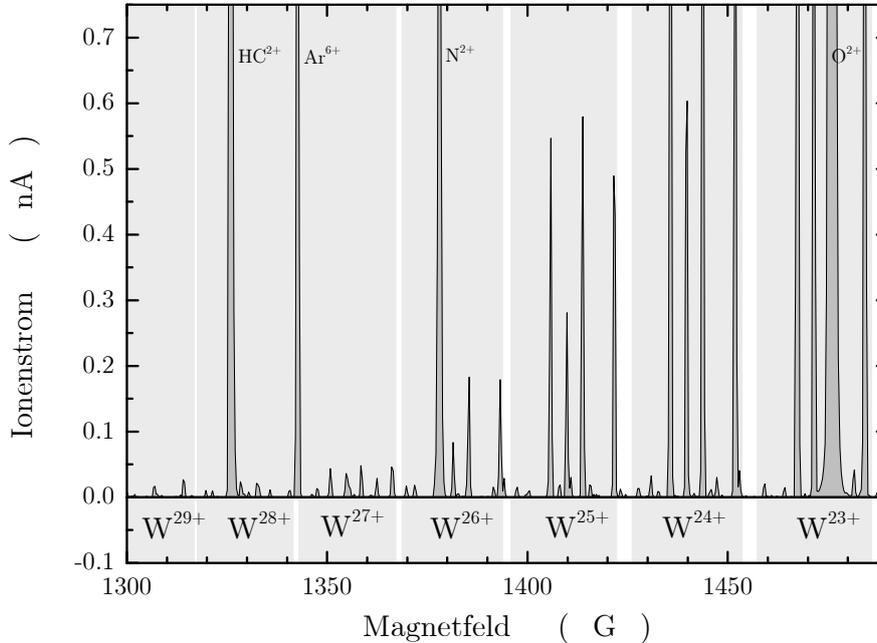
Bei zu großen Abweichungen der CADW-Rechnungen zu den gemessenen Wirkungsquerschnitten wurde außerdem ein theoretischer Wirkungsquerschnitt der direkten Ionisation mit der Lotz-Formel ermittelt. Die dabei einzusetzenden Ionisationsenergien der Schalen wurden mit LANL berechnet.

Berechnungen des Wirkungsquerschnittes der direkten Ionisation wurden jeweils bis zu jener inneren Schale durchgeführt, ab der auf Grund der hohen Energiedifferenz zwischen den Energien der gemittelten Zustände einer Konfiguration ein anschließender Zerfall durch Autoionisation nicht ausgeschlossen werden kann. Die Anregungsenergien von einzelnen Zuständen, über die gemittelt wurde, kann allerdings trotzdem hoch genug sein, sodass ein solcher Prozess möglich ist.

4.2. Massenscans

Vor jeder Wirkungsquerschnittsmessung werden Massenscans durchgeführt, bei denen das Magnetfeld des ersten Magneten durchgeföhrt wird und der Ionenstrom in einem Faradaybecher gemessen wird. Dabei wird entweder der Faradaybecher hinter dem ersten Magneten oder der fest positionierte Faradaybecher hinter dem zweiten Magneten benutzt. Auf Letzterem wird auf Grund des beschnittenen Ionenstrahls eine bessere Auflösung erreicht. Der zweite Magnet ist während der Massenscans abgeschaltet.

| Massenzahl | 180 | 182 | 183 | 184 | 186 |
|--------------|--------|--------|--------|--------|--------|
| Anteil (%) | 0.0012 | 0.2650 | 0.1431 | 0.3064 | 0.2843 |

Tabelle 4.2.: Tabelliertes Isotopenverhältnis von Wolfram nach Böhlke *et al.*Abbildung 4.1.: Massenspektrum von hochgeladenen Wolframionen. Die Ionenoptik ist auf W^{25+} optimiert.

Anhand von Massenscans kann der gewünschte Ladungszustand und das Isotop identifiziert und der Magnet entsprechend eingestellt werden. Alle Wirkungsquerschnittsmessungen wurden am Wolframisotop ^{184}W durchgeführt. Das natürliche Isotopenverhältnis von Wolfram nach Böhlke *et al.* [22] ist in Tabelle 4.2 dargestellt.

Abhängig von den Einstellungen der Ionenquelle konnten unterschiedlich hohe Ionenströme für die verschiedenen Ladungszustände gemessen werden (siehe Tabelle 4.1). Der höchste Ladungszustand, der mit diesem Versuchsaufbau erzeugt und nachgewiesen werden konnte, ist W^{29+} . In Abbildung 4.1 und 4.2 sind die entsprechenden Massenspektren dargestellt. Sie wurden mit einer Massenauflösung von 1700.45 und bei einer SchlitzEinstellung von $2 \times 2 \text{ mm}^2$ auf dem Faradaybecher hinter dem zweiten Magneten aufgenommen. Die Bereiche, in denen sich die Isotope des jeweiligen Ladungszustandes befinden, sind grau hinterlegt.

Bis zu einem Ladungszustand von W^{17+} können die Wirkungsquerschnitte noch "di-

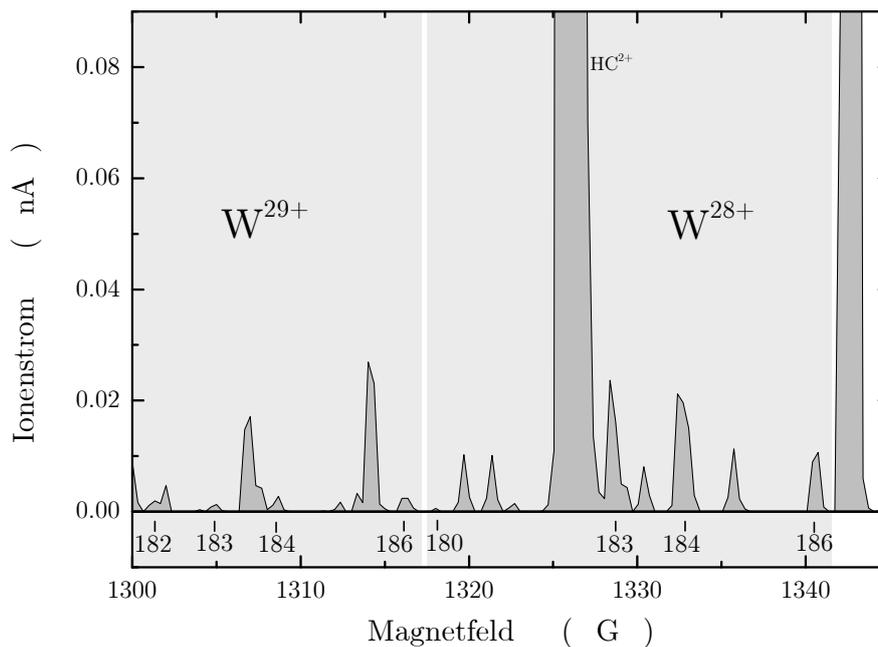


Abbildung 4.2.: Vergrößerte Darstellung eines Massenspektrums. Abgebildet sich die beiden höchsten Ladungszustände von Wolfram, welche nachgewiesen werden konnten.

rekt" gemessen werden, da der Abstand zwischen Primär- und Sekundärstrahl hinter dem zweiten Magneten noch genügend groß ist, um die beiden Strahlen gleichzeitig im Einzelteilchendetektor und im Faradaybecher zu messen. Bei höheren Ladungszuständen liegen die beiden Ionenstrahlen so nah zusammen, dass der Faradaybecher den Einzelteilchendetektor teilweise verdeckt. Messungen in diesem Ladungsbereich erfolgen in zwei Schritten: Zunächst wird eine Messung des Primärionenstrahles mit dem Faradaybecher durchgeführt. Im zweiten Schritt wird der Faradaybecher herausgefahren und der Sekundärstrahl wird mit dem Channeltron-Detektor gemessen. Zwischen den Messungen müssen die Versuchsparameter konstant gehalten werden. Aus den Messerwerten lässt sich der Wirkungsquerschnitt nach den in Abschnitt 3.5 beschriebenen Verfahren berechnen.

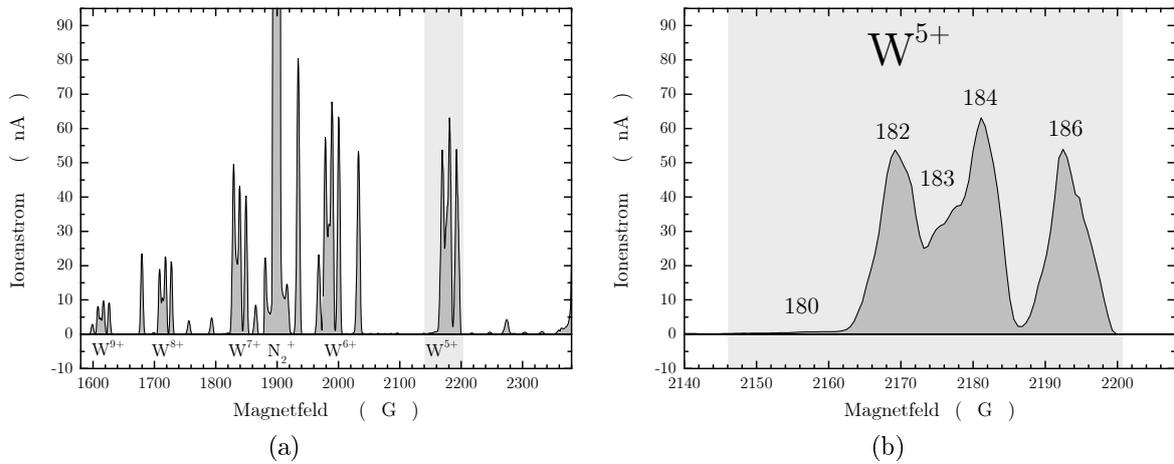


Abbildung 4.3.: Abbildung eines Massenscans, wobei die Ionenoptik auf W^{6+} optimiert wurde. Im linken Bild ist ein Überblick über mehrere Ionisationszustände von Wolfram zu sehen. Rechts ist eine vergrößerte Darstellung des Ausschnittes mit W^{5+} abgebildet.

4.3. Einfachionisation von W^{5+}

Wie im Abbildung 4.3 zu sehen wird W^{5+} im Massenscan nicht von Ionen mit gleichem Masse-zu-Ladungs-Verhältnis überlagert. Die einzelnen Peaks konnten in dieser Messung nicht vollständig getrennt werden, da sie mit dem Faradaybecher hinter dem ersten Magneten aufgenommen wurde. Die Peakhöhen der Isotope von W^{5+} entsprechen dem natürlichen Isotopenverhältnis von Wolfram, was ein Indikator für eine gute Ionenoptik ist.

Der aus den Energiescans resultierende relative Wirkungsquerschnitt wurde an die Absolutwerte angepasst (siehe Abbildung 4.4). Die Abbildungen über den gesamten Energiebereich sind logarithmisch skaliert, um die Strukturen bei niedrigeren Energien besser erkennbar zu machen. Eine lineare Darstellung des absoluten Wirkungsquerschnittes findet sich in Abbildung A.2.

Der Wirkungsquerschnitt (siehe Abbildung 4.4) hat bei einer Energie von 33 eV eine stufenförmige Einsatzschwelle. Unterhalb dieser Schwelle wurde kein verwertbares Signal gemessen. Oberhalb der Schwelle liegt das Signal bis zu einer Energie von ca. 60 eV bei etwas unterhalb von 10 Mb. Die Ionisationsschwelle des Grundzustandes mit der Konfiguration $5p^6 4f^{14} 5d^1$, deren Wert bei 64.7656 eV [18] liegt, wurde in Abbildung 4.4 gekennzeichnet. Im gemessenen Wirkungsquerschnitt befindet sich an dieser Stelle

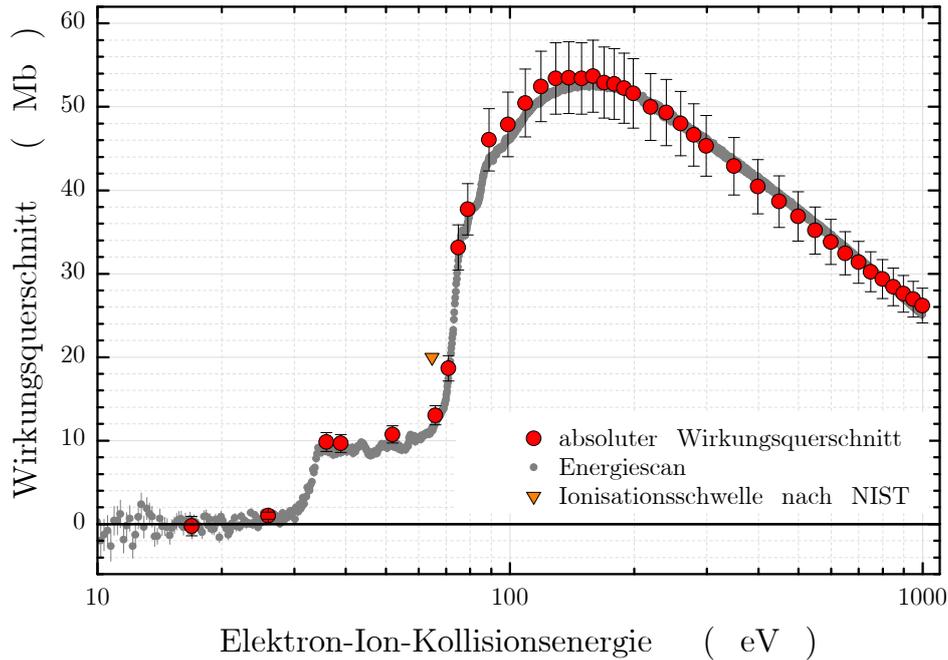


Abbildung 4.4.: Darstellung des absoluten Wirkungsquerschnittes und des daran angepassten relativen Wirkungsquerschnittes der Einfachionisation von W^{5+} mittels Elektronenstoß-Ionisation. Die Ionisationsschwelle des Grundzustandes nach NIST wurden mit einem Symbol gekennzeichnet.

eine weitere Schwelle, die mit einem starken Anstieg verbunden ist. Bei einer Energie von etwa 100 eV ist bei einem Wirkungsquerschnitt von 4.6 Mb eine dritte, schwache Schwelle zu erkennen. Der Wirkungsquerschnitt erreicht bei einer Energie von ca. 150 eV ein Maximum von 54 Mb. Zu höheren Energien hin fällt das Signal wieder ab auf 26 Mb bei 1000 eV.

Das Signal zwischen den beiden ersten Schwellen wird offensichtlich durch die Ionisation metastabiler Zustände erzeugt. Nach Stenke *et al.* [4] gibt es möglicherweise metastabile Zustände der Elektronenkonfigurationen $5p^6 4f^{13} 5d^2$ und $5p^5 4f^{14} 5d^2$. Deren Anregungsenergien liegen im Bereich der beobachteten Schwelle, allerdings entsprechen die Ionisationsenergien dieser Zustände in etwa der Ionisationsenergie des Grundzustandes, da von diesen Konfigurationen aus keine direkte Ionisation in den Grundzustand von W^{6+} ($5p^6 4f^{14}$) möglich ist. Dadurch kommt es bei der direkten Ionisation eines solchen Zustandes zu einem Beitrag zu der entsprechenden Schwelle bei etwa 65 eV, nicht jedoch bei 33 eV. In Tabelle 4.3 sind die Ergebnisse der Berechnung der Feinstruktur-aufspaltung der einzelnen Zustände aufgelistet.

4. Ergebnisse

| Anfangszustand W^{5+} | | Endzustand W^{6+} | |
|--------------------------|----------------|--------------------------|-----------------|
| Elektronenkonfiguration | Energie (eV) | Elektronenkonfiguration | Energie (eV) |
| $5s^2 5p^6 4f^{14} 5d^1$ | 0 - 1.12 | $5s^2 5p^6 4f^{14}$ | 64.65 |
| | | $5s^2 5p^6 4f^{13} 5d^1$ | 101.64 - 106.54 |
| | | $5s^2 5p^5 4f^{14} 5d^1$ | 103.63 - 122.20 |
| | | $5s^1 5p^6 4f^{14} 5d^1$ | 150.69 - 154.06 |
| $5s^2 5p^6 4f^{13} 5d^2$ | 34.44 - 43.29 | $5s^2 5p^6 4f^{13} 5d^1$ | 101.64 - 106.54 |
| | | $5s^2 5p^6 4f^{12} 5d^2$ | 145.63 - 167.21 |
| | | $5s^2 5p^5 4f^{13} 5d^2$ | 142.10 - 167.04 |
| | | $5s^1 5p^6 4f^{13} 5d^2$ | 189.77 - 200.97 |
| $5s^2 5p^5 4f^{14} 5d^2$ | 37.68 - 57.44 | $5s^2 5p^5 4f^{14} 5d^1$ | 103.63 - 122.20 |
| | | $5s^2 5p^5 4f^{13} 5d^2$ | 142.10 - 167.04 |
| | | $5s^2 5p^4 4f^{14} 5d^2$ | 143.99 - 179.77 |
| | | $5s^1 5p^5 4f^{14} 5d^2$ | 186.25 - 212.33 |

Tabelle 4.3.: Berechnete Feinstrukturaufspaltungen der einzelnen Elektronenkonfigurationen von W^{5+} und W^{6+} bezogen auf den Grundzustand von W^{5+} (blau).

| Anfangszustand W^{5+} | | Zwischenzustand W^{5+} | |
|-------------------------|----------------|--------------------------|----------------|
| Elektronenkonfiguration | Energie (eV) | Elektronenkonfiguration | Energie (eV) |
| $5p^6 4f^{13} 5d^2$ | 34.44 - 43.29 | $5p^6 4f^{13} 5d^1 6s^1$ | 46.03 - 51.54 |
| | | $5p^6 4f^{13} 5d^1 6p^1$ | 54.54 - 62.45 |
| | | $5p^6 4f^{13} 5d^1 6d^1$ | 68.40 - 75.37 |
| $5p^5 4f^{14} 5d^2$ | 37.68 - 57.44 | $5p^5 4f^{14} 5d^1 6s^1$ | 48.62 - 67.11 |
| | | $5p^5 4f^{14} 5d^1 6p^1$ | 57.09 - 77.93 |
| | | $5p^5 4f^{14} 5d^1 6d^1$ | 70.93 - 90.16 |

Tabelle 4.4.: Berechnete Feinstrukturaufspaltungen der einzelnen Elektronenkonfigurationen von W^{5+} bezogen auf den Grundzustand von W^{5+} und unter Einbeziehung des Grundzustands sowie des metastabilen Anfangszustandes. Die Zwischenzustände, die *nicht* autoionisieren können, und Energien, die unterhalb der Grundzustandsenergie von W^{6+} liegen, sind rot gekennzeichnet.

Nach den Rechnungen von Stenke *et al.* und den LANL-Rechnungen zu EA-Prozessen in Tabelle 4.4, liegen schon bei den Anregungen eines 5d-Elektrons nach 6s oder nach 6p einige Niveaus oberhalb des W^{6+} -Grundzustandes und ab einer Anregung zu 6d, die bei einer Energie von etwa 33 eV beginnt, ist ein Übergang in den Grundzustand via Autoionisation möglich.

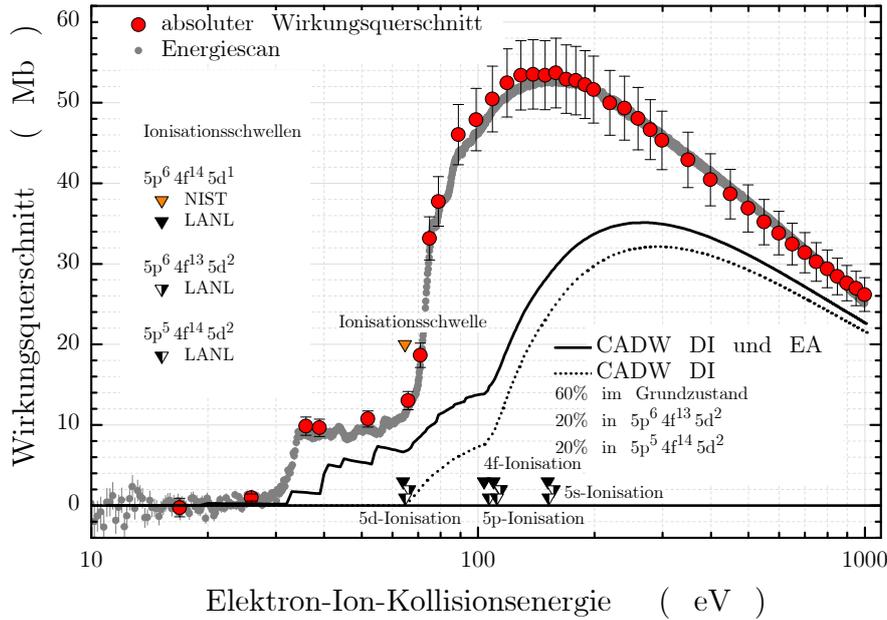


Abbildung 4.5.: Darstellung des gemessenen Wirkungsquerschnittes von W^{5+} über den gesamten Energiebereich. Zum Vergleich sind der Wirkungsquerschnitt nach CADW-Rechnungen, die Ionisationsschwellen nach NIST und die mit dem LANL-Code berechneten Ionisationsschwellen mit abgebildet.

Die Anregungsenergien der 5p-Elektronen aus den Zuständen mit den Elektronenkonfigurationen $5p^6 4f^{13} 5d^2$ und $5p^5 4f^{14} 5d^2$ liegen in Bereich der beobachteten Einsatzschwelle. Wie schon von Stenke *et al.* vermutet, lässt sich die Schwelle bei 33 eV vermutlich auf EA-Prozesse ausgehend von metastabilen Zuständen der beiden oben genannten Elektronenkonfigurationen zurückführen.

In Abbildung 4.5 wurden die gemessenen Wirkungsquerschnitte mit den Ergebnissen von CADW-Rechnungen verglichen. Die Ionisationsschwelle nach NIST und die Ionisationsschwellen der Unterschalen, die mit dem LANL-Code berechnet wurden, sind mit dargestellt. Die Einsatzenergien für die 4f- und die 5p-Ionisation überschneiden sich teilweise. Im Vergleich mit dem gemessenen Wirkungsquerschnitt ist anzunehmen, dass sich die dort sichtbare Schwelle bei ca. 100 eV auf die einsetzende Ionisation der 5p- und 4f-Schale zurückführen lässt. Der neu gemessene Wirkungsquerschnitt weist im Bereich zwischen den beiden ersten Schwellen einige markante Strukturen auf. Nach den Rechnungen von Stenke *et al.* können in diesem Energiebereich mehrere verschiedene Zustände angeregt werden, die zu einem solchen Wirkungsquerschnitt führen können. Es ließen sich jedoch keine eindeutigen Zuordnungen machen.

Für Abbildung 4.5 wurde sowohl der Wirkungsquerschnitt der direkten Ionisation bis eingeschlossen der 5s-Ionisation, als auch der Wirkungsquerschnitt unter Einbeziehung von EA-Prozessen bis zu einer Anregung von einem 5p-Elektron in eine 6f-Schale berechnet. Die Energien der Zustände mit angeregtem 5p-Elektron in einer 6s bzw. 6p-Schale liegen teilweise unter und teilweise über der Grundzustandsenergie von W^{6+} . Auf Grund der Vielzahl an Zuständen durch die Feinstrukturaufspaltung wurden die gemittelten Wirkungsquerschnitte der Elektronenkonfiguration mit der Anzahl der Zustände skaliert, von denen aus eine Autoionisation möglich ist. In allen Abbildungen der CADW-Rechnungen ist zu sehen, dass der theoretische Wirkungsquerschnitt durch EA-Prozesse unter Anregung eines 5p-Elektrons in eine 6s-Schale im Energiebereich zwischen 20 eV und 30 eV deutlich zu niedrig liegt. An dieser Stelle würde die zeitaufwändige Berechnung der einzelnen theoretischen Wirkungsquerschnitte wahrscheinlich ein besseres Ergebnis liefern.

Das Verzweigungsverhältnis (siehe Gleichung 2.1) wurde zunächst auf Grund des großen Signals unterhalb der Ionisationsschwelle des Grundzustandes auf 0.3 gesetzt. Unterschiedliche Verzweigungsverhältnisse sind in Abbildung 4.9 dargestellt und werden später diskutiert. Für die CADW-Rechnungen wurde zunächst angenommen, dass sich nur 60% der Ionen des Primärstrahles im Grundzustand und die restlichen 40% zu gleichen Anteilen in Zuständen der beiden anderen Elektronenkonfigurationen befinden. Der Energiebereich der Ionisationsschwelle des Grundzustandes wurde vergrößert in Abbildung 4.6 linear dargestellt.

Der hohe Wirkungsquerschnitt unterhalb der Ionisationsschwelle des Grundzustandes lässt vermuten, dass sich ein großer Anteil der Ionen im Primärionenstrahl in angeregten Zuständen befand. Allerdings liegt die gesamte Theoriekurve nach CADW-Rechnungen ab der Einsatzschwelle der Ionisation des Grundzustandes deutlich unterhalb der gemessenen Werte. Das Maximum des theoretischen Wirkungsquerschnittes ist im Vergleich zu den gemessenen Werten um ca. 100 eV zu höheren Energien hin verschoben und liegt bei 270 eV. Mit größeren Energien gleicht sich die theoretische Kurve dem gemessenen Wirkungsquerschnitt an, liegt allerdings bei einer Energie von 1000 eV immer noch zu niedrig.

Auf Grund des hohen Beitrages von indirekten Ionisationsprozessen zum Wirkungsquerschnitt wurden keine Berechnungen mit der Lotz-Formel durchgeführt.

Der Anteil der metastabilen Zustände im Primärstrahl lässt sich auf Grund der relativ großen Abweichung der Theoriekurve von den Messwerten nicht durch Anpassen ermitteln. Um die Auswirkungen von verschiedenen Anteilen an Ionen im Grundzustand und in Zuständen der beiden anderen Elektronenkonfigurationen zu untersuchen, wurden CADW-Rechnungen mit unterschiedlichen Parametern durchgeführt. In Abbildung 4.7

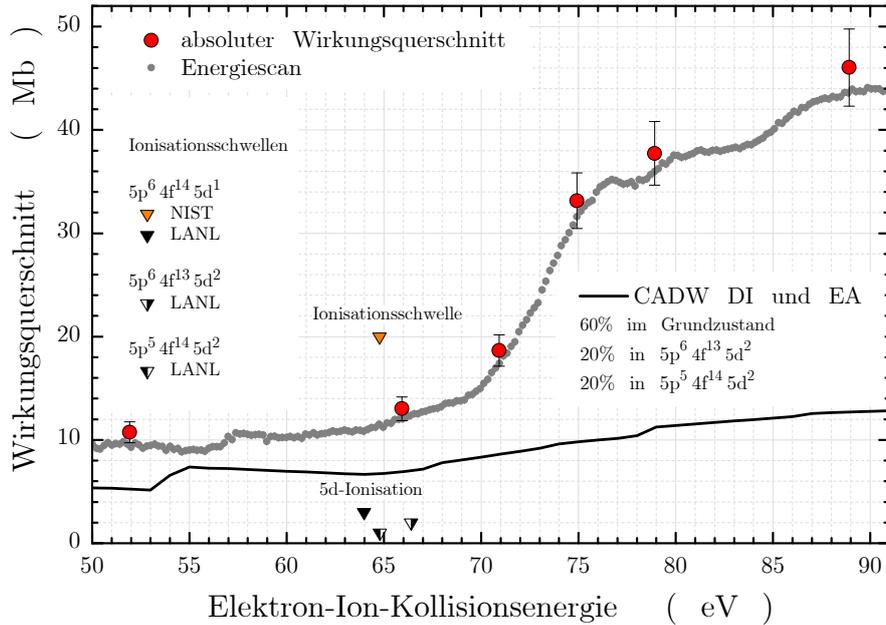


Abbildung 4.6.: Vergrößerte Darstellung des Energiebereiches um die Ionisationsschwelle des Grundzustandes von W^{5+} . Die Ionisationsschwellen der einzelnen Elektronenschalen, sowie die Ionisationsschwelle des Grundzustandes nach NIST wurde gekennzeichnet.

sind Berechnungen mit verschieden großen Anteilen des Primärionenstrahles im Grundzustand zu sehen. Mit einem größeren Anteil an Ionen in metastabilen Zuständen liegt die Theoriekurve höher und näher an den gemessenen Absolutwerten. Allerdings wären in diesem Fall nur noch 40% der Ionen im Grundzustand. Ausgehend von vorhergehenden Messungen wäre dies ein ungewöhnlich hoher Wert. Realistischer ist ein Anteil an Ionen im Grundzustand von 80%, allerdings liegt die damit ermittelte Kurve noch tiefer als die des ursprünglich angenommenen Anteiles von 60%. Als Kompromiss wird für die weiteren Rechnungen mit einem Anteil an Ionen im Grundzustand von 60% gearbeitet.

Der Verlauf der Theoriekurve ändert sich mit einer unterschiedlichen Verteilung der Ionen in Zuständen der beiden Elektronenkonfigurationen (Abbildung 4.8). Ein höherer Anteil an Ionen in Zuständen der Konfiguration $5p^5 4f^{14} 5d^2$ bringt die Theoriekurve im Bereich 33 eV bis 65 eV näher an die gemessenen Werte. Ein höherer Anteil an Ionen in Zuständen der Konfiguration $5p^6 4f^{13} 5d^2$ führt zu einer deutlich niedrigeren Theoriekurve. Aus diesem Grund ist anzunehmen, dass sich mehr Ionen in metastabilen Zuständen der Konfiguration $5p^5 4f^{14} 5d^2$ befinden, als in Zuständen der zweiten diskutierten Konfiguration. Eine genaue Bestimmung lässt sich auch hier nicht durchführen,

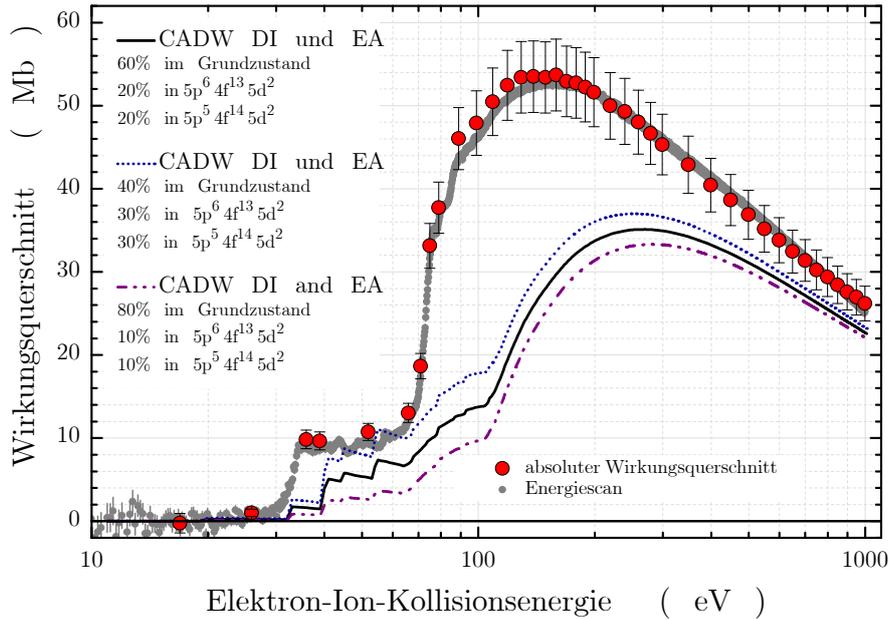


Abbildung 4.7.: Vergleich des gemessenen und des nach der CADW-Methode berechneten Wirkungsquerschnittes von W^{5+} . Die theoretischen Kurven wurden mit unterschiedlich großen Anteilen des Primärionenstrahles im Grundzustand errechnet.

da die theoretische Kurve immer noch deutlich niedriger liegt als der gemessene Wirkungsquerschnitt. Eine Anpassung der theoretischen Kurve an die gemessenen Werte durch Verändern der Anteile ist deshalb nicht möglich.

Das Verzweigungsverhältnis für EA-Prozesse ist nicht bekannt und wurde anfangs auf 0.3 gesetzt. In Abbildung 4.9 ist der gemessene Wirkungsquerschnitt im Vergleich mit theoretischen Kurven verschiedener Verzweigungsverhältnisse V abgebildet.

Mit einem Wert von $V=0.4$ gibt die theoretische Kurve den gemessenen Wirkungsquerschnitt im Bereich zwischen 40 eV und 60 eV sehr gut wieder. Die Diskrepanz im Bereich zwischen 20 eV und 30 eV ist immer noch deutlich sichtbar. Diese Abweichung kann Folge der Näherung sein, die durch die Skalierung der Ergebnisse der CADW-Rechnungen gemacht wurde. Eine Berechnung der einzelnen Wirkungsquerschnitte wäre hier sinnvoll, allerdings auf Grund der Vielzahl an Zuständen zeitaufwändig. Im Bereich oberhalb der Ionisationsschwelle des Grundzustandes liegt der theoretische Wirkungsquerschnitt deutlich zu niedrig. Dies kann entweder mit einem starken Anteil an bisher vernachlässigten, indirekten Prozessen am Wirkungsquerschnitt erklärt werden, oder aber ein Hinweis darauf liefern, dass die CADW-Näherung in diesem Fall keine geeig-

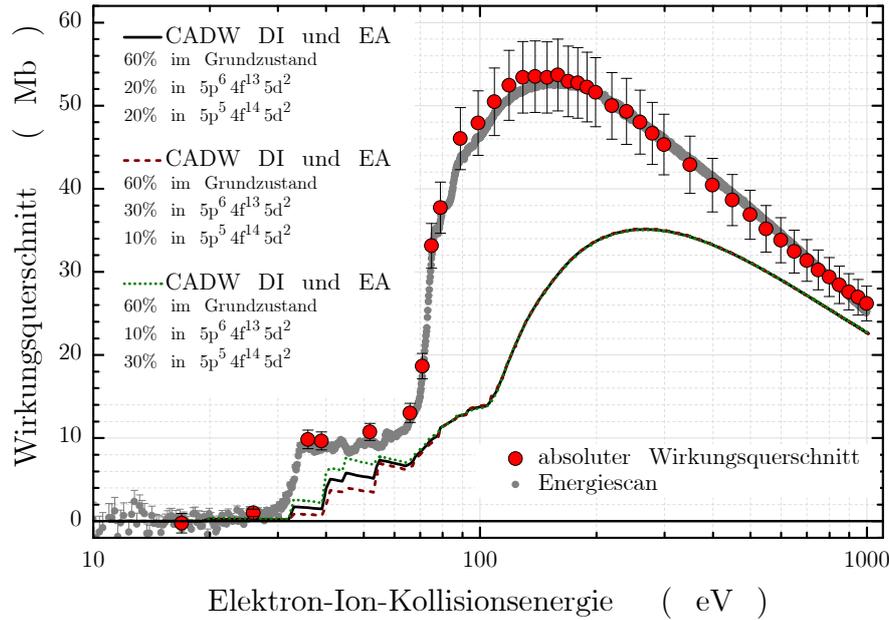


Abbildung 4.8.: Vergleich des gemessenen Wirkungsquerschnittes von W^{5+} mit CADW-Rechnungen, die mit unterschiedlichen Verteilungen der Ionen des Primärstrahles in Zuständen der beiden diskutierten Elektronenkonfigurationen durchgeführt wurden.

nete Berechnungsmethode darstellt.

Zuletzt wurden die gemessenen Absolutwerte mit den Ergebnissen von Stenke *et al.* [4] verglichen. Wie in Abbildung 4.10 deutlich zu erkennen stimmen die beiden Messreihen sehr gut überein. Die Werte liegen im Fehlerbereich der jeweils anderen Messreihe. Die Fehlerbalken an sich sind vergleichbar groß, die neue Messreihe weist im Energiebereich unterhalb der Schwelle bei ca. 65 eV einen etwas kleineren Fehler auf. Im Energiebereich zwischen den beiden Schwellen liegen die Werte von Stenke *et al.* etwa 2 Mb höher als der neu gemessene Wirkungsquerschnitt. Ddieser Unterschied kann mit einem höheren Anteil an metastabilen Zuständen im Primärstrahl in den Messungen von Stenke *et al.* erklärt werden.

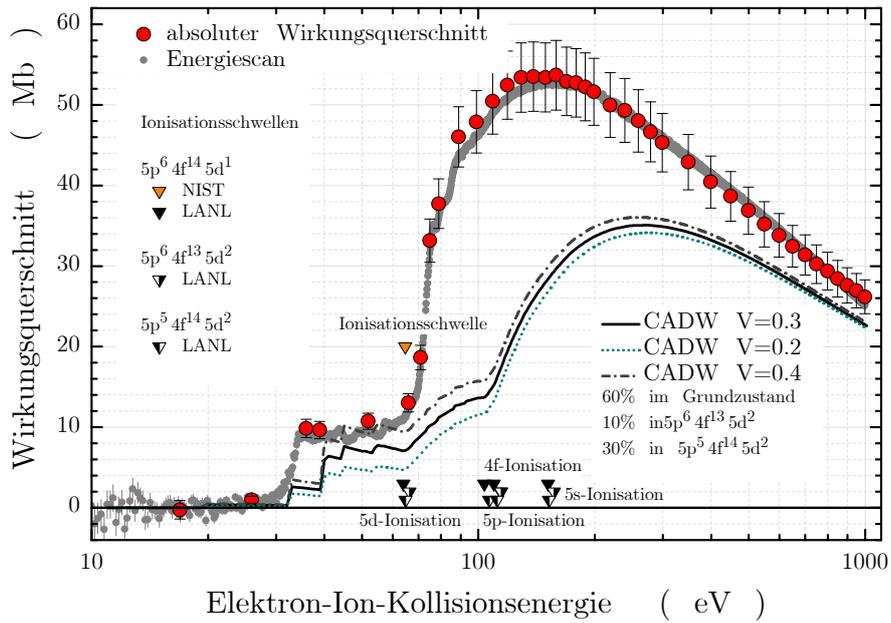


Abbildung 4.9.: Vergleich des gemessenen Wirkungsquerschnittes von W^{5+} mit CADW-Rechnungen, die mit unterschiedlichen Verzweungsverhältnissen V für EA-Prozesse errechnet wurden.

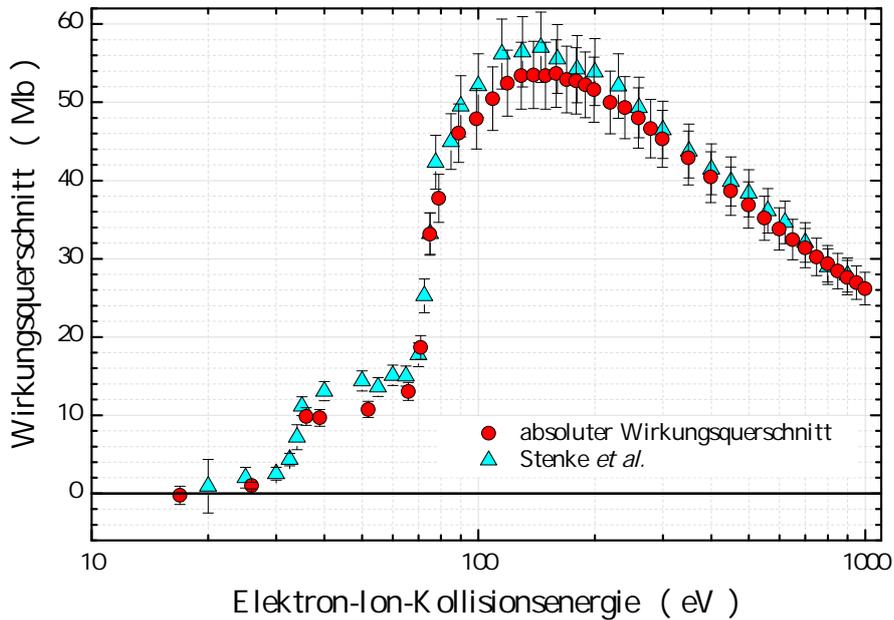


Abbildung 4.10.: Darstellung der gemessenen Absolutwerte im Vergleich zu dem 1994 von Stenke *et al.* aufgenommenen Wirkungsquerschnitt von W^{5+} .

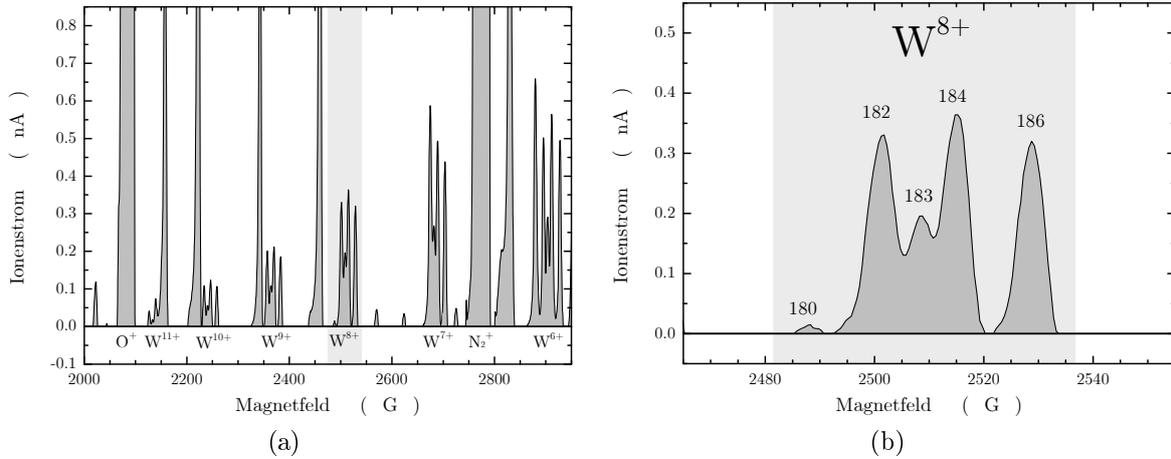


Abbildung 4.11.: Abbildung eines Massenscans, wobei die Ionenoptik auf W^{8+} optimiert wurde. Im linken Bild ist ein Überblick über mehrere Ionisationszustände von Wolfram zu sehen. Rechts ist eine vergrößerte Darstellung des Ausschnittes mit W^{8+} abgebildet.

4.4. Einfachionisation von W^{8+}

Im Massenscan in Abbildung 4.11 liegen alle Isotope von W^{8+} frei und werden nicht von Ionen mit gleichem Masse-zu-Ladungs-Verhältnis überlagert. Dieser Massenscan wurde mit dem Faradaybecher hinter dem ersten Magneten aufgenommen. Die Peakhöhen der W^{8+} -Isotope spiegeln das Isotopenverhältnis von Wolfram wider und sind ein Indikator für eine gute Ionenoptik.

Der relative Wirkungsquerschnitt wurde an den absoluten Wirkungsquerschnitt angepasst. In Abbildung 4.12 ist das Ergebnis der Anpassung zu sehen. Die Graphen über den gesamten Energiebereich sind wieder logarithmisch skaliert, um die Schwellenregion besser untersuchen zu können. Eine lineare Darstellung findet sich im Anhang, Abbildung A.3. Die Einsatzschwelle des Wirkungsquerschnittes liegt zwischen 90 eV und 100 eV. Mit höherer Energie steigt der Wirkungsquerschnitt leicht an, bleibt aber bei einem Wert kleiner 1 Mb. Bei ca. 150 eV gibt es einen steilen Anstieg, der bei einer Energie von ungefähr 330 eV in ein Maximum von 12 Mb läuft. Von da aus fällt der Wirkungsquerschnitt auf 9 Mb bei 1000 eV ab.

Der Grundzustand hat nach Kramida und Shirai [23] eine Elektronenkonfiguration von $5p^4 4f^{14}$. Die Ionisationsenergie des Grundzustandes liegt nach NIST [18] bei 160.2 eV. Die Ergebnisse von Stenke *et al.* [4] ließen vermuten, dass es im Primärionenstrahl Ionen

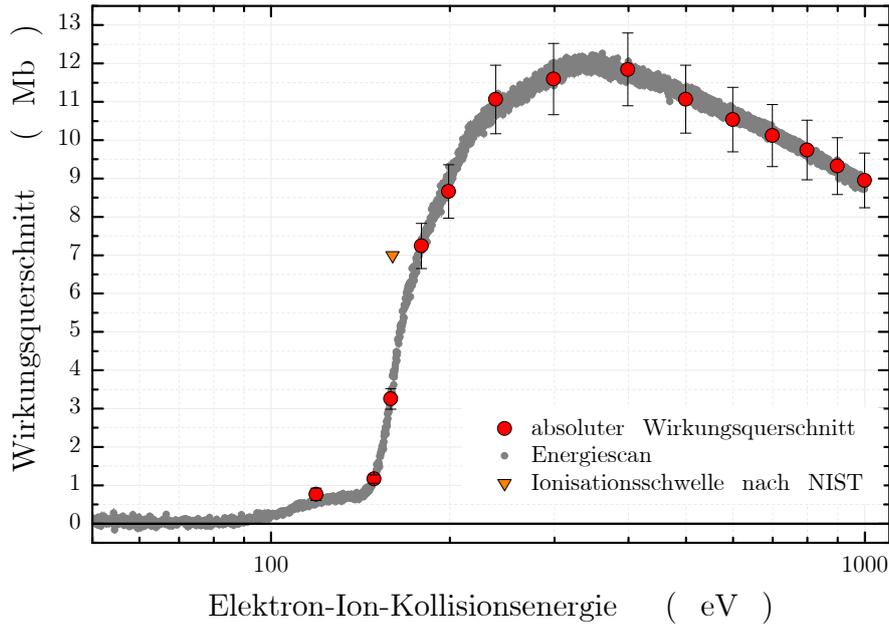


Abbildung 4.12.: Darstellung des absoluten Wirkungsquerschnittes und der Energiescannmessung von W^{8+} über den gesamten gemessenen Energiebereich. Die Ionisationsschwelle des Grundzustandes nach NIST ist mit einem Symbol gekennzeichnet.

in metastabilen Zustände der Elektronenkonfiguration $5p^3 4f^{14} 5d^1$ gibt. In Abbildung 4.13 ist die Schwellenregion vergrößert und mit einer linearen Skalierung dargestellt. Die Lotz-Formel mit einem Anteil an Ionen im Grundzustand von 70% wurde mit abgebildet. Die Ionisationsenergie des Grundzustandes nach NIST und die Ionisationsenergien der einzelnen Schalen nach LANL wurden markiert. In dieser Darstellung ist leicht zu erkennen, dass der starke Anstieg des Wirkungsquerschnittes schon 10 eV unterhalb des erwarteten Wertes einsetzt.

Rechnungen mit dem LANL-Code (siehe Tabelle 4.5) haben ergeben, dass der Grundzustand durch die Feinstruktur-Aufspaltung in Zustände auffächert, die sich deutlich in ihren Energien unterscheiden. Die Einsatzschwelle des starken Anstiegs ist demnach wahrscheinlich auf die direkte Ionisation langlebiger Zustände der Grundzustandskonfiguration zurückzuführen.

Die Zustände der Elektronenkonfiguration $5p^3 4f^{14} 5d^1$ von W^{8+} spaltet sich ebenfalls auf. Es ist anzunehmen, dass sich die Einsatzschwelle zwischen 90 eV und 100 eV auf DI-Prozesse von metastabilen Zuständen dieser Konfiguration zurückführen lässt.

Die Rechnungen von theoretischen Wirkungsquerschnitten wurden zunächst mit einem

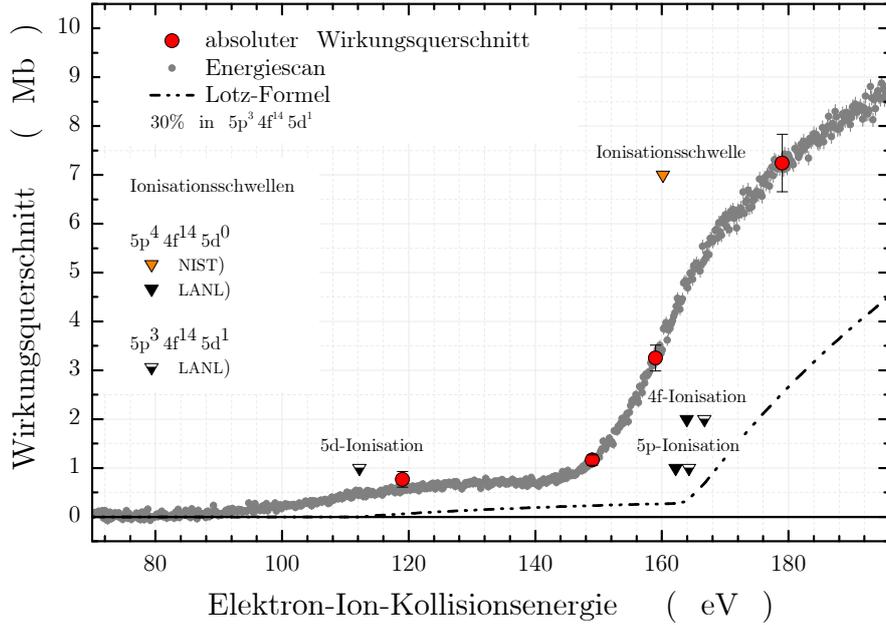


Abbildung 4.13.: Vergrößerte Darstellung der Schwellenregion des Wirkungsquerschnittes von W^{8+} . Die Ionisationsschwelle nach NIST sowie die Ionisationsschwellen der Unterschalen, die mit dem LANL-Code berechnet wurden, sind mit eingezeichnet.

| Anfangszustand W^{8+} | | Endzustand W^{9+} | |
|-------------------------|----------------|-------------------------|-----------------|
| Elektronenkonfiguration | Energie (eV) | Elektronenkonfiguration | Energie (eV) |
| $5p^4 4f^{14}$ | 0 - 24.48 | $5p^3 4f^{14}$ | 158.42 - 182.89 |
| | | $5p^4 4f^{13}$ | 161.81 - 190.85 |
| $5p^3 4f^{14} 5d^1$ | 43.39 - 77.46 | $5p^3 4f^{14}$ | 158.42 - 182.89 |
| | | $5p^2 4f^{14} 5d^1$ | 204.05 - 236.89 |
| | | $5p^3 4f^{13} 5d^1$ | 206.84 - 247.28 |

Tabelle 4.5.: Berechnete Feinstrukturaufspaltungen der einzelnen Elektronenkonfigurationen von W^{8+} und W^{9+} bezogen auf den Grundzustand von W^{8+} (blau).

angenommenen Anteil an Ionen in Zuständen der Elektronenkonfiguration $5p^3 4f^{14} 5d^1$ von 30% durchgeführt. Für W^{8+} wurde auf Grund der großen Abweichungen zwischen den Ergebnissen der CADW-Rechnungen und den Messwerten der Wirkungsquerschnitt zusätzlich mit der Lotz-Formel (siehe Gleichung 2.6) ausgerechnet. Abbildung 4.14 und 4.15 zeigen jeweils den gemessenen Wirkungsquerschnitt bis 1000 eV, sowie die Ergebnisse der CADW-Rechnungen bzw. die Theoriekurve nach der Lotz-Formel. Die

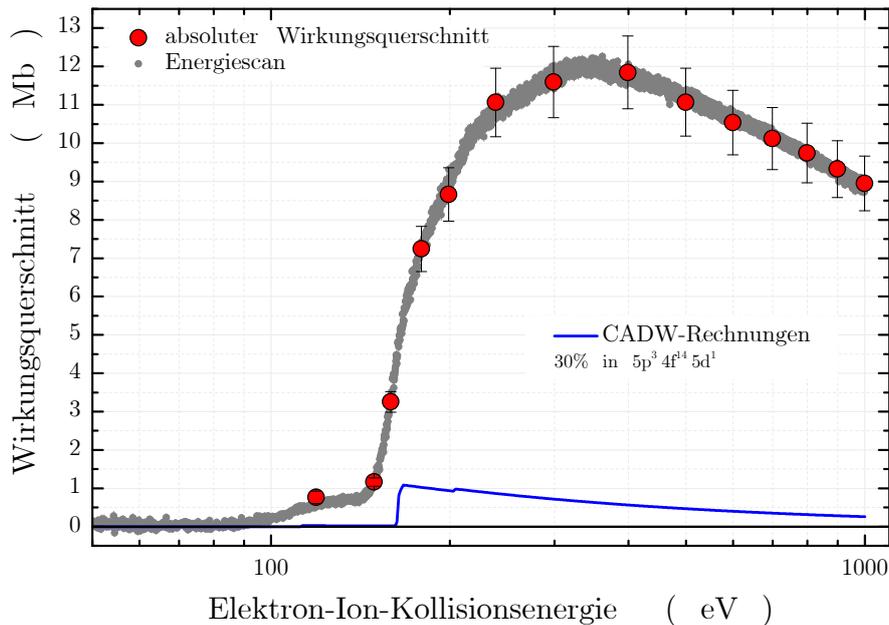


Abbildung 4.14.: Darstellung zum Vergleich der CADW-Rechnungen mit dem gemessenen Wirkungsquerschnitt von W^{8+} .

CADW-Rechnungen beschränken sich auf die direkte Ionisation bis einschließlich 5s-Schale.

Die CADW-Rechnungen in Abbildung 4.14 liegen deutlich zu niedrig und zeigen einen gänzlich anderen Verlauf als der gemessene Wirkungsquerschnitt.

Die Berechnungen bis zur 5s-Ionisation mit der Lotz-Formel (siehe Abbildung 4.15) liefern einen theoretischen Wirkungsquerschnitt, der einen sehr ähnlichen Verlauf wie der gemessene Wirkungsquerschnitt hat und im gleichen Wertebereich liegt. Die Einsatzschwelle des Wirkungsquerschnittes liegt allerdings mehr als 10 eV niedriger als die Einsatzschwelle der theoretischen Kurve. Im Energiebereich bis 400 eV liegen die Werte der Lotz-Formel etwas unterhalb der gemessenen Absolutwerte, im Energiebereich über 400 eV liegen sie im Rahmen der Fehler der Absolutwerte.

In Abbildung 4.16 sind die Ergebnisse der Lotz-Formel ausgehend von unterschiedlich hohen Strahlanteilen im Grundzustand von W^{8+} abgebildet. Der Vergleich zeigt, dass der Anteil der direkten Ionisation von metastabilen Zuständen nur einen kleinen Teil des gesamten Wirkungsquerschnittes ausmacht. Die deutliche Einsatzschwelle des gemessenen Wirkungsquerschnittes unterhalb der Ionisationsschwelle des Grundzustandes

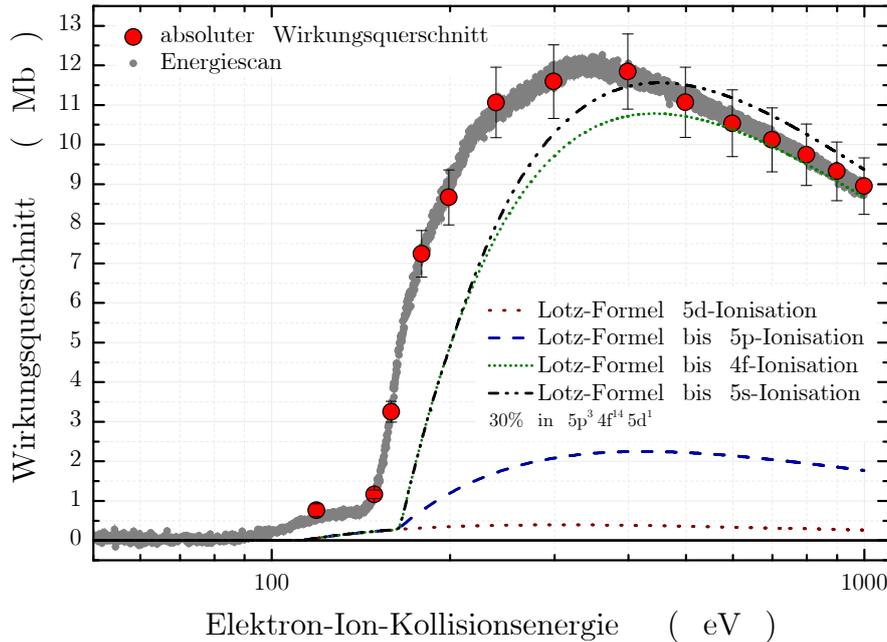


Abbildung 4.15.: Vergleich des gemessenen Wirkungsquerschnittes von W^{8+} mit den Ergebnissen der Lotz-Formel.

lässt allerdings darauf schließen, dass ein nicht zu vernachlässigender Anteil der Ionen sich in metastabilen Zuständen befand.

Die gemessenen Absolutwerte wurde mit dem 1994 gemessenen Wirkungsquerschnitt von Stenke *et al.* verglichen. In Abbildung 4.17 sind die beiden Messreihen gegenüber gestellt. Mit Ausnahme von dem Bereich um 160 eV liegen die Werte von Stenke *et al.* geringfügig höher als die neuen Messungen. Im Bereich unterhalb der Ionisationschwelle des Grundzustandes kann diese Abweichung, die bei etwa 0.5 Mb liegt, mit einem etwas höheren Anteil an metastabile Zuständen im Primärstrahl erklärt werden. Im Bereich um 160 eV gibt es eine gute Übereinstimmung der beiden Messreihen. Ab einer Energie von 200 eV liegen die Absolutwerte von Stenke *et al.* wieder deutlich über den neuen Messungen. Die Diskrepanz wird zu höheren Energien hin größer und erreicht bei 1000 eV etwa 2 Mb. Der Vergleich der beiden Messreihen zeigt außerdem, dass die neuen Messwerte glatter und damit dem Energiescan ähnlicher verlaufen als die Absolutwerte von Stenke *et al.*.

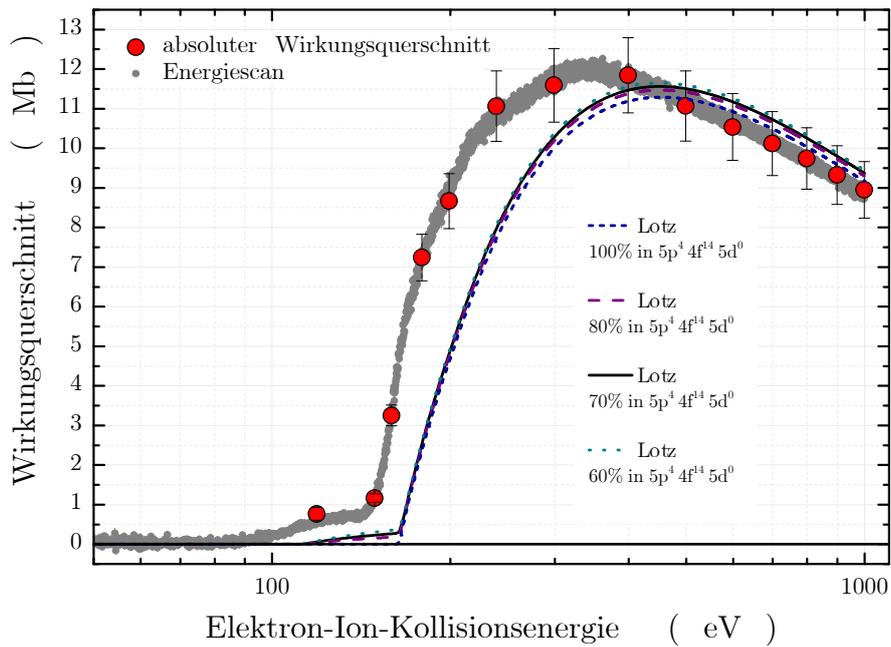


Abbildung 4.16.: Vergleich der Ergebnisse der Lotz-Formel für unterschiedlich hohe Strahlanteile im Grundzustand von W^{8+} .

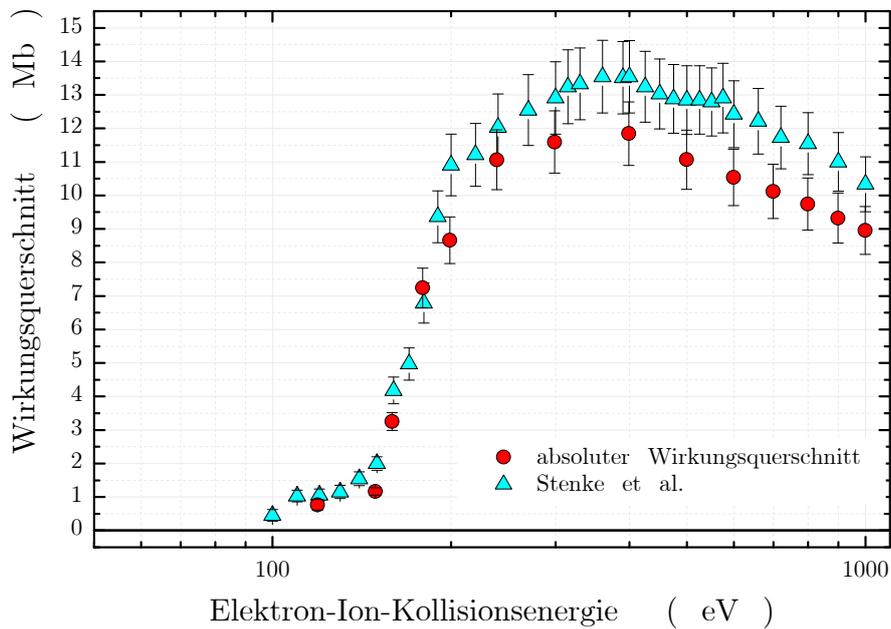


Abbildung 4.17.: Vergleich des neu gemessenen Wirkungsquerschnittes von W^{8+} mit der Messreihe von Stenke *et al.*.

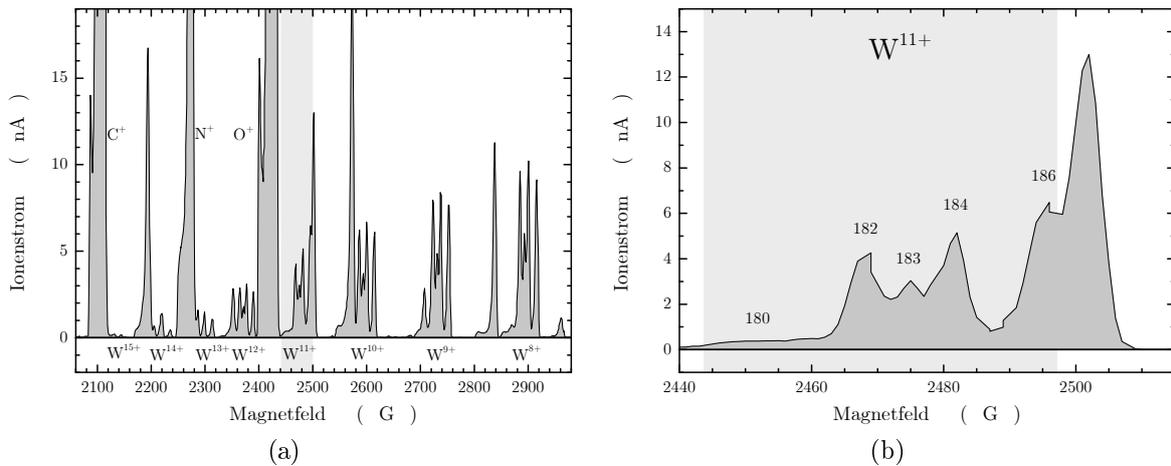


Abbildung 4.18.: Abbildung eines Massenscans, wobei die Ionenoptik auf W^{11+} optimiert wurde. Im linken Bild ist ein Überblick über mehrere Ionisationszustände von Wolfram zu sehen. Rechts ist eine vergrößerte Darstellung des Ausschnittes mit W^{11+} abgebildet.

4.5. Einfachionisation von W^{11+}

Im Massenscan in Abbildung 4.18 ist deutlich zu sehen, dass das Isotop ^{186}W von W^{11+} von einer nicht identifizierten Ionensorte überlagert wird. Allerdings wurde dieser Massenscan mit dem Faradaybecher hinter dem ersten Magneten aufgenommen. Im Faradaybecher hinter dem zweiten Magneten konnten die Peaks aufgrund der besseren Auflösung des durch die Schlitze beschnittenen Strahles getrennt werden.

In Abbildung 4.19 ist der an die Absolutwerte angepasste relative Wirkungsquerschnitt dargestellt. Der Wirkungsquerschnitt wird nicht logarithmisch skaliert, da sich im unteren Energiebereich keine markanten Strukturen befinden.

Die Einsatzschwelle des Wirkungsquerschnittes liegt bei etwa 190 eV. Mit höherer Energie steigt das Signal steil an, um bei einer Energie von etwa 500 eV ein Maximum von etwa 7.8 Mb zu erreichen. Von dem Maximum aus zu höheren Energien hin fällt das Signal wieder leicht ab auf ungefähr 7 Mb bei 1000 eV. Der Wirkungsquerschnitt verläuft glatt, abgesehen von schwachen Strukturen im Energiebereich zwischen 320 eV und 400 eV. Für eine vergrößerte Darstellung, siehe Abbildung 4.20, wurde der Energiescan in diesem Energiebereich zu 1 eV-Schritten gebinnt. Die Strukturen konnten energetisch keinem Prozess zugeordnet werden.

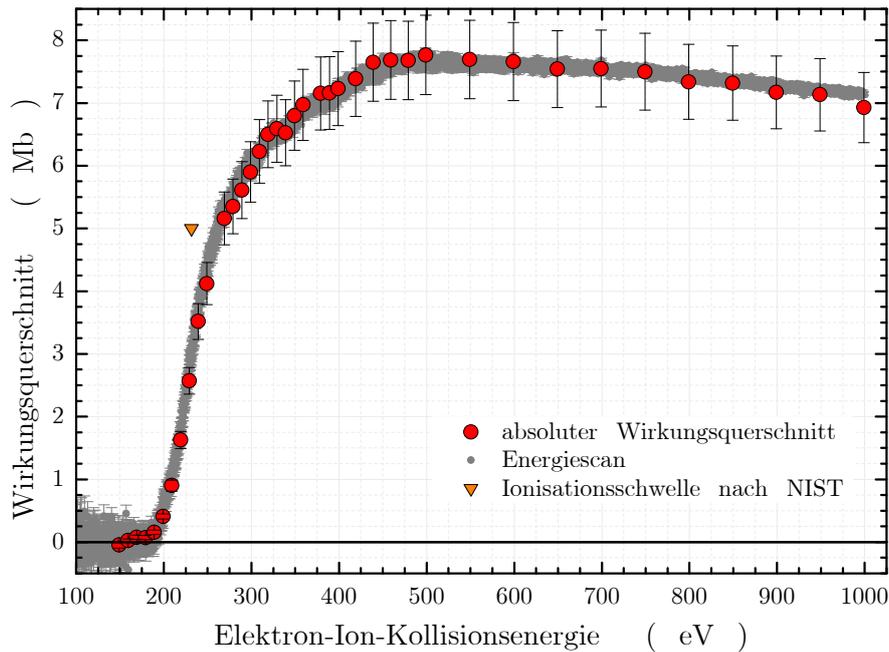


Abbildung 4.19.: Darstellung des absoluten Wirkungsquerschnittes und des daran angepassten relativen Wirkungsquerschnittes der Einfachionisation von W^{11+} mittels Elektronenstoß-Ionisation. Die Ionisationsschwelle nach NIST mit eingezeichnet.

Die Ionisationsschwelle des Grundzustandes mit der Konfiguration $5p^2 4f^{13}$ [23], deren Wert nach NIST [18] bei 231.6 eV liegt, ist in Abbildung 4.21 markiert. Metastabile Zustände sind nicht bekannt.

Der Wert der Ionisationsschwelle nach NIST liegt etwa 50 eV oberhalb der gemessenen Einsatzschwelle. Deutlich ist die Diskrepanz zwischen der gemessenen Kurve und den Theoriewerten zu erkennen, die vermutlich auf die Feinstrukturaufspaltung des Grundzustandes von W^{11+} und des angeregten Zustandes von W^{12+} (siehe Tabelle 4.6) zurückzuführen ist. Auf Grund der Elektronenkonfiguration ist keine direkte Ionisation vom Grundzustand von W^{11+} ($5p^2 4f^{13}$) in den Grundzustand von W^{12+} ($5p^0 4f^{14}$) möglich.

Die gemessenen Absolutwerte wurden mit den Ergebnissen der CADW-Rechnungen verglichen. Dabei wurden die Wirkungsquerschnitte der direkten Ionisation bis einschließlich der Ionisation der 4d-Schale errechnet. Wie in Abbildung 4.22 deutlich zu erkennen liegen die Theoriewerte um mehr als eine Größenordnung zu niedrig und stimmen auch im Verlauf nicht mit dem gemessenen Wirkungsquerschnitt überein.

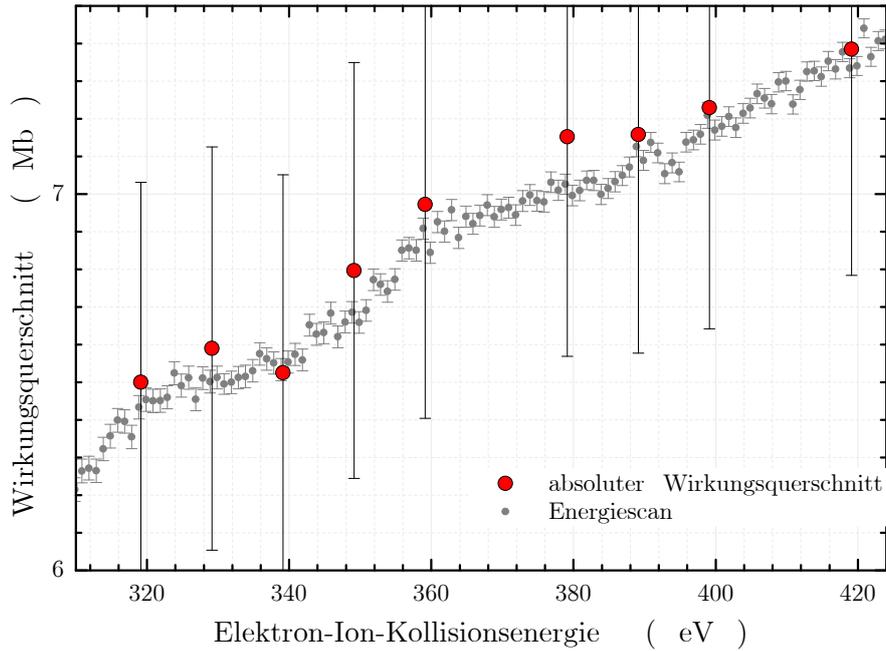


Abbildung 4.20.: Vergrößerte Darstellung des zu 1 eV-Schritten gebinneten Energiescans und des absoluten Wirkungsquerschnittes von W^{11+} im Bereich der beobachteten Stufe.

| Anfangszustand W^{11+} | | Endzustand W^{12+} | |
|-----------------------------|----------------|-----------------------------|-----------------|
| Elektronenkonfiguration | Energie (eV) | Elektronenkonfiguration | Energie (eV) |
| $4d^{10} 5s^2 5p^2 4f^{13}$ | 0 - 32.44 | $4d^{10} 5s^2 5p^2 4f^{12}$ | 238.29 - 285.53 |
| | | $4d^{10} 5s^2 5p^1 4f^{13}$ | 232.77 - 250.08 |
| | | $4d^{10} 5s^1 5p^2 4f^{13}$ | 263.48 - 300.94 |
| | | $4d^9 5s^2 5p^2 4f^{13}$ | 451.55 - 513.55 |

Tabelle 4.6.: Berechnete Feinstrukturaufspaltungen der einzelnen Elektronenkonfigurationen von W^{11+} und W^{12+} bezogen auf den Grundzustand von W^{11+} (blau).

Die Ergebnisse der Lotz-Formel unter Einbeziehungen von direkte Ionisation bis einschließlich der 4d-Schalen-Ionisation (siehe Abbildung 4.23) zeigen einen ähnlichen Verlauf wie der gemessene Wirkungsquerschnitt. Die theoretische Kurve der Lotz-Formel liegt etwa 2 Mb bis 3.5 Mb niedriger als die gemessenen Werte. Diese Abweichung könnte durch resonante Prozesse hervorgerufen werden. Einen Hinweis darauf, dass solche Prozesse beteiligt sind, liefern die nicht identifizierten, schwachen Strukturen im Energiebereich unterhalb von 400 eV. Auf Grund der vielen Energieniveaus einer Elektro-

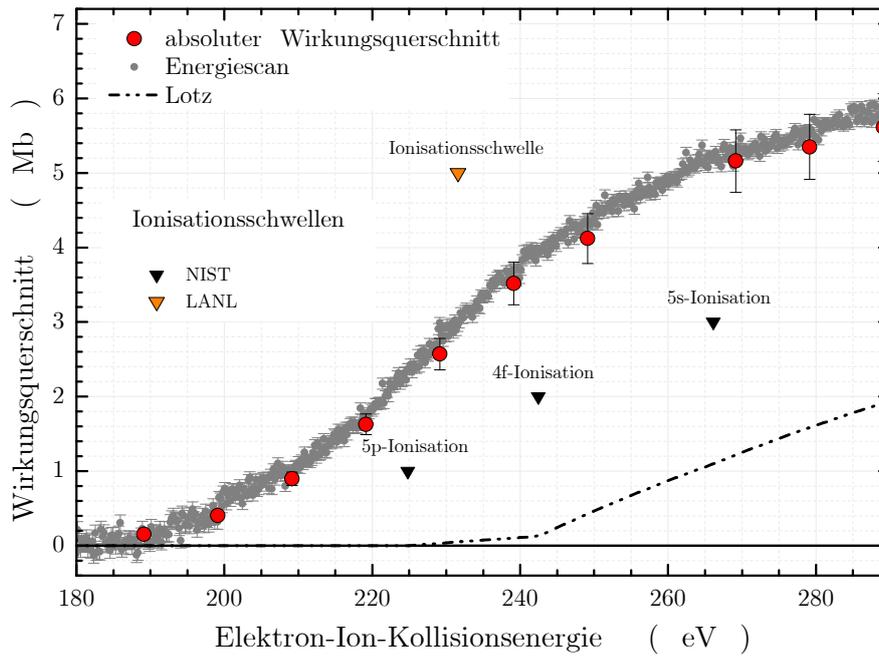


Abbildung 4.21.: Vergrößerte Darstellung der Schwellenregion des Wirkungsquerschnittes von W^{11+} . Die Ionisationsschwelle des Grundzustandes nach NIST sowie die Ionisationsschwellen der Unterschalen, die mit dem LANL-Code errechnet wurden, sind mit eingezeichnet.

nenkonfiguration sind eine Vielzahl von Übergängen denkbar, deren Energien so nah zusammen liegen, dass sich die Resonanzen überlagern und nicht mehr aufgelöst werden können.

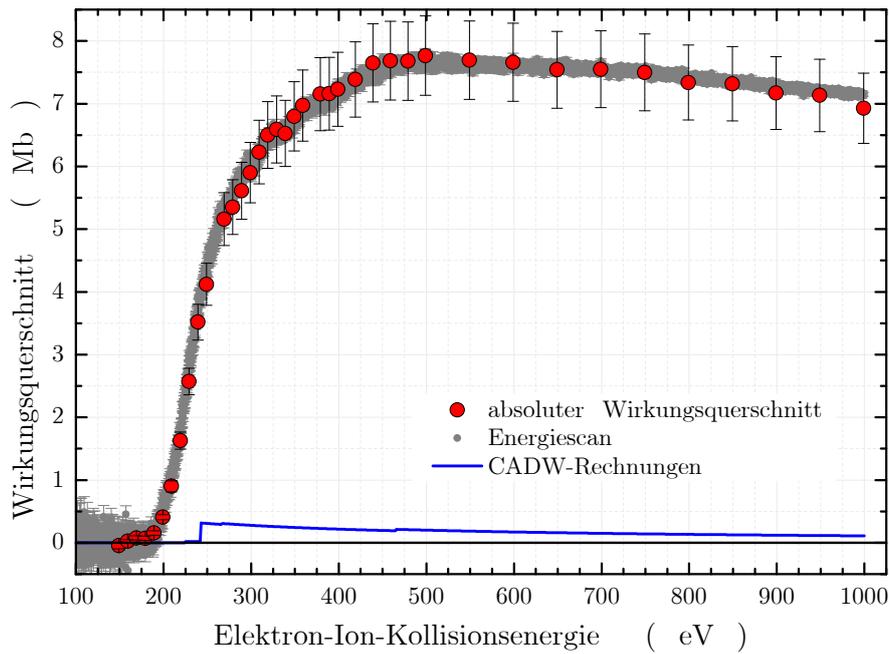


Abbildung 4.22.: Vergleich des gemessenen Wirkungsquerschnittes von W^{11+} mit CADW-Rechnungen.

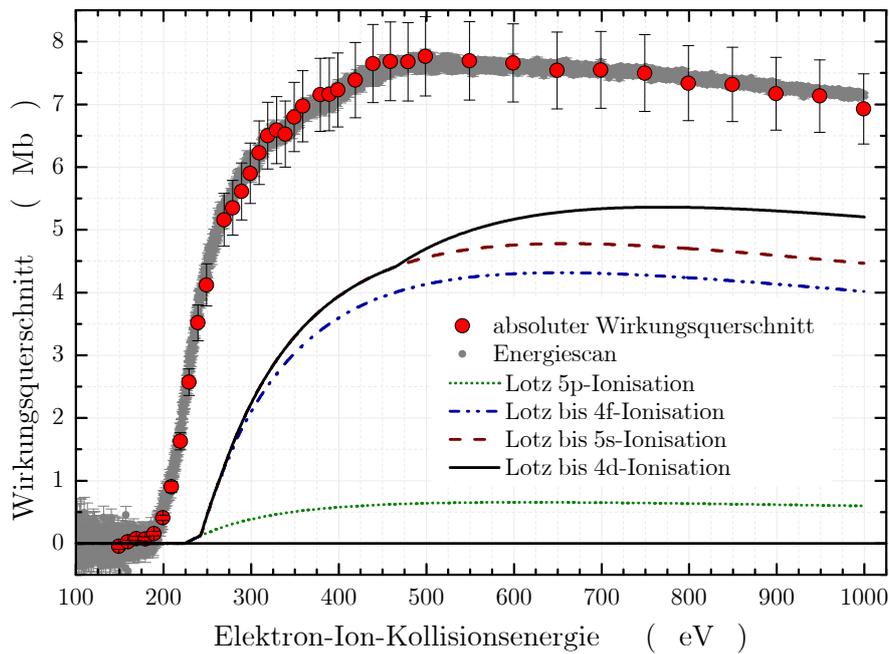


Abbildung 4.23.: Vergleich des gemessenen Wirkungsquerschnittes von W^{11+} mit den Ergebnissen der Lotz-Formel.

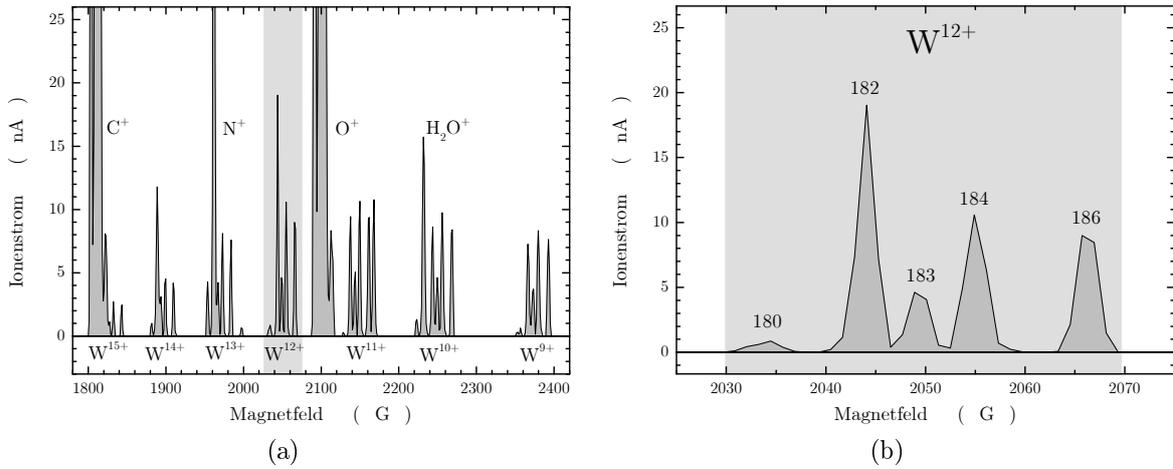


Abbildung 4.24.: Abbildung eines Massenscans, wobei die Ionenoptik auf W^{12+} optimiert wurde. Im linken Bild ist ein Überblick über mehrere Ionisationszustände von Wolfram zu sehen. Rechts ist eine vergrößerte Darstellung des Ausschnittes mit W^{12+} abgebildet.

4.6. Einfachionisation von W^{12+}

Im Massenscan, der mit dem Faradaybecher hinter dem zweiten Magneten aufgenommen wurde, liegen alle Isotope von W^{12+} frei und werden nicht von anderen Ionen überlagert (siehe Abbildung 4.24). In Vergleich mit der natürlichen Isotopenverteilung ist hier der Anteil an ^{182}W verhältnismäßig zu groß. Der Unterschied ist jedoch nicht gravierend und die restlichen Peak sind nicht verzerrt, so dass deshalb nicht auf eine schlechte Ionenoptik geschlossen werden kann.

Die Energiescans von W^{12+} zeigen einen glatten, strukturlosen Verlauf des Wirkungsquerschnittes (siehe Abbildung 4.25). Auch in der Schwellenregion zeigen sich keine markanten Strukturen. Aus diesem Grund wurden die Darstellungen des gesamten Wirkungsquerschnittes, wie schon bei W^{11+} , linear skaliert.

In Abbildung 4.25 ist zu erkennen, wie der Wirkungsquerschnitt von der Schwelle bei ca. 220 eV steil ansteigt, bei einer Energie von ungefähr 550 eV ein Maximum von 6.4 Mb erreicht und bis zur maximalen Energie von 1000 eV wieder auf 6 Mb abfällt.

W^{12+} hat nach Kramida und Shirai [23] einen Grundzustand der Elektronenkonfiguration $5s^2 5p^0 4f^{14}$. Metastabile Zustände sind nicht bekannt. In Abbildung 4.26 ist eine vergrößerte Darstellung des Schwellenbereiches des gemessenen Wirkungsquerschnittes zu sehen.

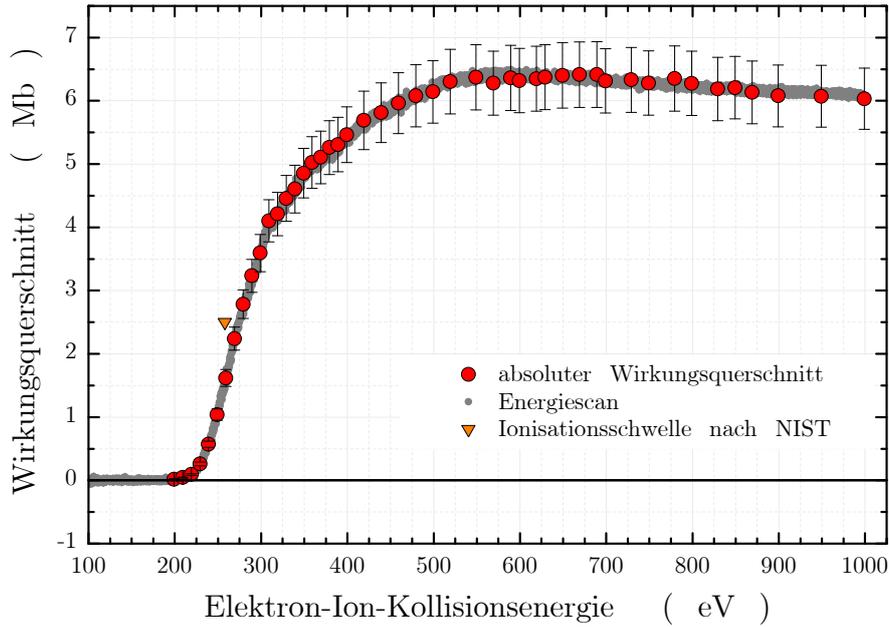


Abbildung 4.25.: Lineare Darstellung des absoluten Wirkungsquerschnittes und des daran angepassten relativen Wirkungsquerschnittes der Einfachionisation von W^{12+} . Die Ionisationsschwelle nach NIST ist mit eingezeichnet.

| Anfangszustand W^{12+} | | Endzustand W^{13+} | |
|--------------------------|----------------|-----------------------------|-----------------|
| Elektronenkonfiguration | Energie (eV) | Elektronenkonfiguration | Energie (eV) |
| $5p^0 4f^{14}$ | 0 | $4d^{10} 5s^2 5p^0 4f^{13}$ | 256.22 - 258.52 |
| | | $4d^{10} 5s^1 5p^0 4f^{13}$ | 279.95 |
| | | $4d^9 5s^2 5p^0 4f^{13}$ | 475.19 - 487.71 |

Tabelle 4.7.: Berechnete Feinstrukturaufspaltungen der einzelnen Elektronenkonfigurationen von W^{12+} und W^{13+} bezogen auf den Grundzustand von W^{12+} (blau).

Die Ionisationsschwelle des Grundzustandes liegt nach NIST [18] bei 258.2 eV. Sie liegt etwa 40 eV höher als die Einsatzschwelle des gemessenen Wirkungsquerschnittes. Dies kann nicht auf die Feinstrukturaufspaltung des Grundzustands von W^{12+} und W^{13+} zurückgeführt werden. Der Grundzustand von W^{12+} spaltet nicht auf und der Grundzustand von W^{13+} spaltet nur in einem Bereich von 2 eV auf (siehe Tabelle 4.7).

Wie bei der Auswertung von W^{11+} wurden die gemessenen Absolutwerte mit den Ergebnissen der CADW-Rechnungen verglichen. Dabei wurden auch hier der Wirkungsquer-

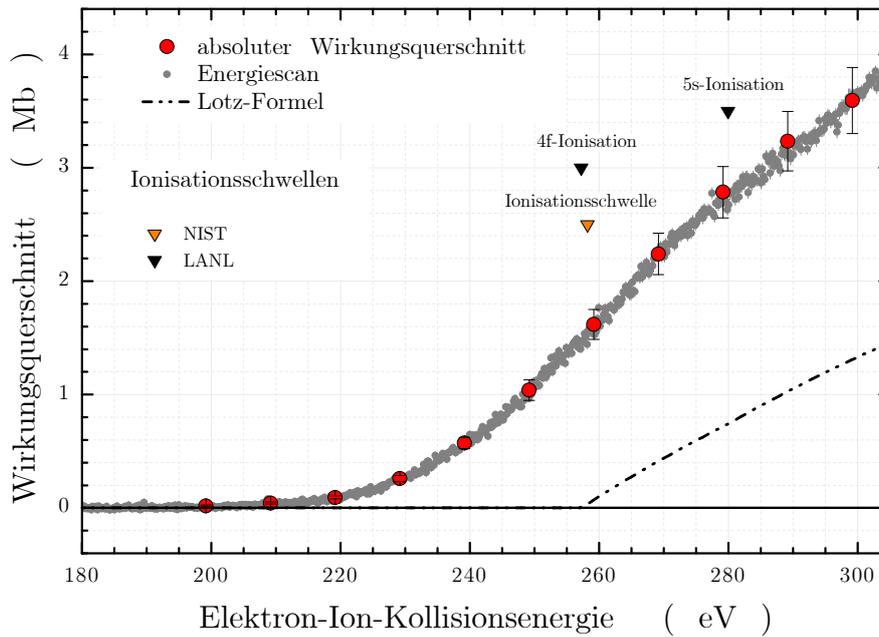


Abbildung 4.26.: Vergrößerte Darstellung der Schwellenregion des Wirkungsquerschnittes von W^{12+} . Die Ionisationsschwelle des Grundzustandes nach NIST, sowie die mit dem LANL-Code errechneten Ionisationsschwellen der Unterschalen wurden mit eingezeichnet.

schnitt der direkten Ionisation bis einschließlich der 4d-Schalen-Ionisation errechnet. In Abbildung 4.27 ist erkennbar, dass auch bei diesem Ladungszustand die CADW-Rechnungen viel zu niedrig liegen und einen anderen Verlauf aufweisen, als die gemessenen Daten.

Der mit der Lotz-Formel (siehe Abbildung 4.28) errechnete Wirkungsquerschnitt bis einschließlich 4d-Schalen-Ionisation liegt näher an den Absolutwerten als die CADW-Rechnungen und nur ca. 1.5 Mb bis 2.5 Mb niedriger als die gemessenen Werte. Die Abweichungen zu den gemessenen Werten betragen damit maximal rund 30%. Im Verlauf zeigt die theoretischen Kurve große Ähnlichkeit mit dem gemessenen Wirkungsquerschnitt.

Es ist anzunehmen, dass die Abweichungen zwischen der Einsatzschwelle der theoretischen Kurve der Lotz-Formel und der Einsatzschwelle des gemessenen Wirkungsquerschnittes sich auf bislang unbekannte metastabile Zustände von W^{12+} zurückführen lassen. Beispielsweise liefern Berechnungen der Feinstrukturaufspaltung mit dem LANL-Code für die Elektronenkonfiguration $5p^2 4f^{12}$ über 100 verschiedene Energieniveaus, die zum Teil über hohe Drehimpulse verfügen und metastabilen Zustände beinhalten kön-

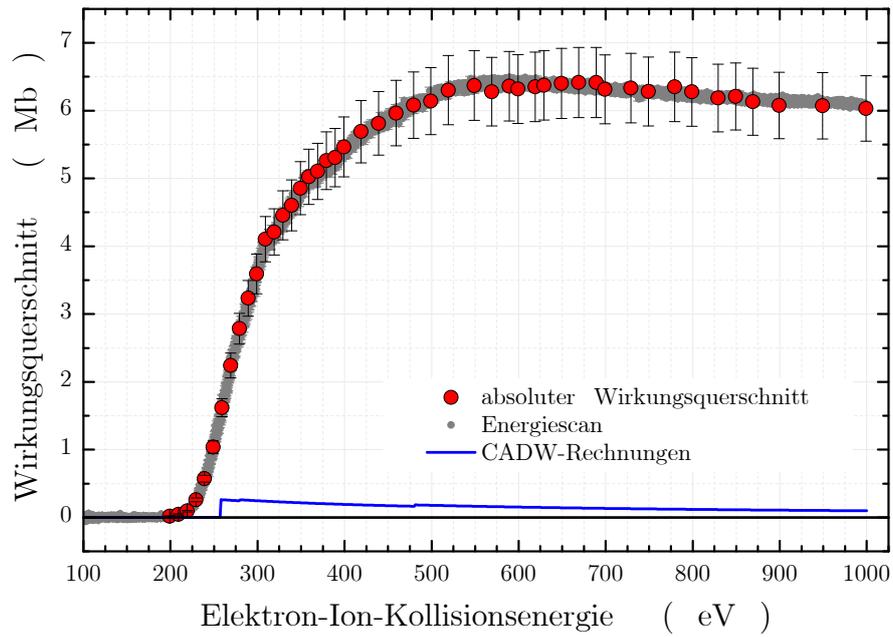


Abbildung 4.27.: Darstellung zum Vergleich des gemessenen Wirkungsquerschnittes von W^{12+} mit CADW-Rechnungen.

nen. Die Energiedifferenz zwischen dem höchsten dieser Niveaus und dem niedrigsten Niveau der Konfiguration $5p^1 4f^{12}$ von W^{13+} beträgt ungefähr 210 eV. Die Abweichungen in der Höhe der nach der Lotz-Formel berechneten Kurve könnte auf viele sich überlagernde und damit nicht auflösbare, resonante Prozesse hindeuten.

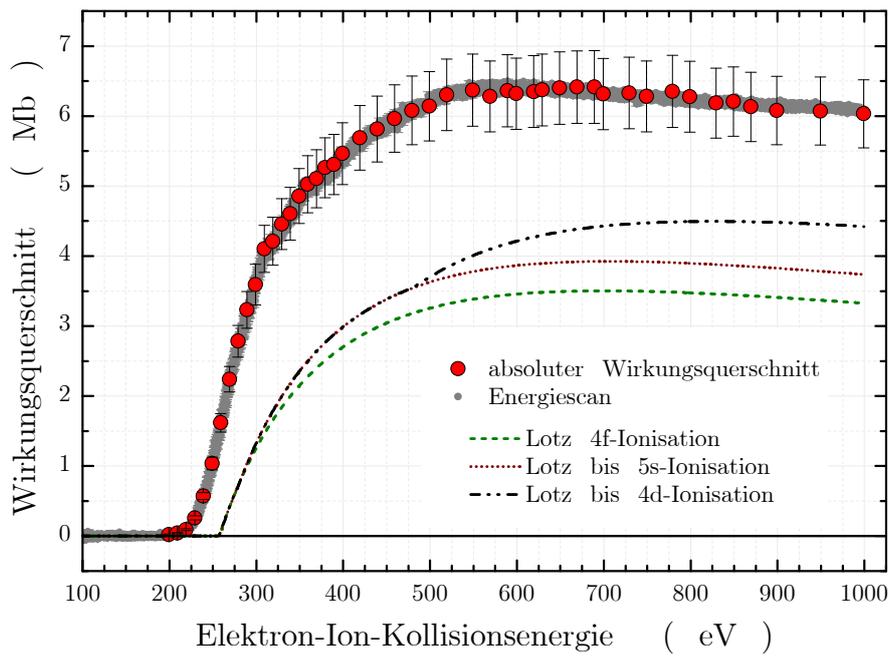


Abbildung 4.28.: Darstellung zum Vergleich des gemessenen Wirkungsquerschnittes von W^{12+} mit den Ergebnissen der Lotz-Formel.

5. Abschließende Diskussion und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurden hochgeladene Wolframionen bis W^{29+} erzeugt und absolute sowie relative Wirkungsquerschnitte der Einfachionisation von W^{5+} , W^{8+} , W^{11+} und W^{12+} gemessen. Die Wirkungsquerschnitte von W^{11+} und W^{12+} wurden bisher noch in keiner Arbeit veröffentlicht. Zur Analyse der Strukturen wurden für die vier Ladungszustände CADW-Rechnungen mit dem LANL-Code [20] sowie Berechnungen mit der Lotz-Formel durchgeführt. Die absoluten Wirkungsquerschnitte der gemessenen Ladungszustände sind im Anhang A in Abbildung A.1 gemeinsam dargestellt.

Die Absolutwerte von W^{5+} und W^{8+} konnten mit früheren Messungen von Stenke *et al.* [4] verglichen werden, die 1994 ebenfalls an dieser Anlage durchgeführt wurden. Beide Messreihen zeigen eine gute Übereinstimmung. Der Anteil an Ionen in metastabilen Zuständen im Primärstrahl liegt bei den Messungen von Stenke *et al.* etwas höher.

Der gemessene Wirkungsquerschnitt von W^{5+} zeigt den gleichen Verlauf wie die CADW-Rechnungen, liegt allerdings deutlich höher. Eine mögliche Ursache könnten Beiträge von bisher nicht betrachteten, indirekten Prozessen sein.

Die Vergleiche der gemessenen Wirkungsquerschnitte von W^{8+} , W^{11+} und W^{12+} mit CADW-Rechnungen haben gezeigt, dass diese Näherung für hochgeladenen Wolframionen kein sinnvolles Modell ist. Die Ergebnisse der Berechnungen liegen um etwa eine Größenordnung zu niedrig und haben einen anderen Verlauf.

Bei den Analysen der Wirkungsquerschnitte von W^{8+} , W^{11+} und W^{12+} ergab sich eine deutliche Diskrepanz zwischen den theoretischen Schwellenenergien und den Messwerten. Diese Abweichungen werden im Fall von W^{8+} und W^{11+} auf die Feinstrukturaufspaltung der Zustände zurückgeführt. Der Grundzustand von W^{12+} spaltet allerdings nicht auf. Die Diskrepanz von etwa 40 eV zwischen der von NIST angegebenen Ionisationsschwelle und der gemessenen Schwelle konnte auf diese Weise nicht erklärt werden. Eine mögliche Erklärung wäre die direkte Ionisation von bisher nicht bekannten, metastabilen Zuständen.

Die Wirkungsquerschnitte, die im Fall von W^{8+} , W^{11+} und W^{12+} mit der Lotz-Formel berechnet wurde, stimmt in der Größenordnung und im groben Verlauf mit den gemessenen Daten überein, liegen aber zum Teil deutlich zu niedrig. Die Abweichungen lassen sich mit einem starken Beitrag indirekter Prozesse erklären, da die Lotz-Formel

nur den Wirkungsquerschnitt der direkten Ionisation berechnet. Auf Grund der Vielzahl an Energieniveaus können sich die einzelnen Prozesse zu einem scheinbar glatten Verlauf des Wirkungsquerschnittes überlagern. Einen Hinweis auf die Beteiligung solcher Prozesse liefern die schwachen Strukturen, die im Wirkungsquerschnitt von W^{11+} beobachtet wurden.

Umfangreiche Rechnungen mit anderen Näherungsverfahren könnten bessere Ergebnisse liefern, allerdings würde der Zeitaufwand dafür den Rahmen dieser Arbeit sprengen.

Die Massenscans haben gezeigt, dass sich Wolframionen bis zu einem Ladungszustand von W^{29+} erzeugen und nachweisen lassen. Die Mehrzahl dieser Ladungszustände wurden bis heute noch nicht untersucht. Neben den Wirkungsquerschnitten der Einfachionisation, wie sie in dieser Arbeit gemessen wurden, werden für aussagekräftige Plasma-Modelle auch die Wirkungsquerschnitte der Mehrfachionisationen benötigt.

Der untersuchte Energiebereich wurde durch die maximale Spannung der Elektronenkanone von 1 keV beschränkt. Insbesondere für die Untersuchung von höhergeladenen Wolframionen wäre ein größerer Energiebereich wünschenswert. Aktuell wird an der Elektronen-Ionenstoß-Apparatur des Instituts für Atom- und Molekülphysik der Justus-Liebig-Universität Giessen eine neue Elektronenkanone implementiert. Diese soll im Endausbau einen Energiebereich von bis zu 10 keV abdecken [9].

Anhang

A. Ergänzende Graphen

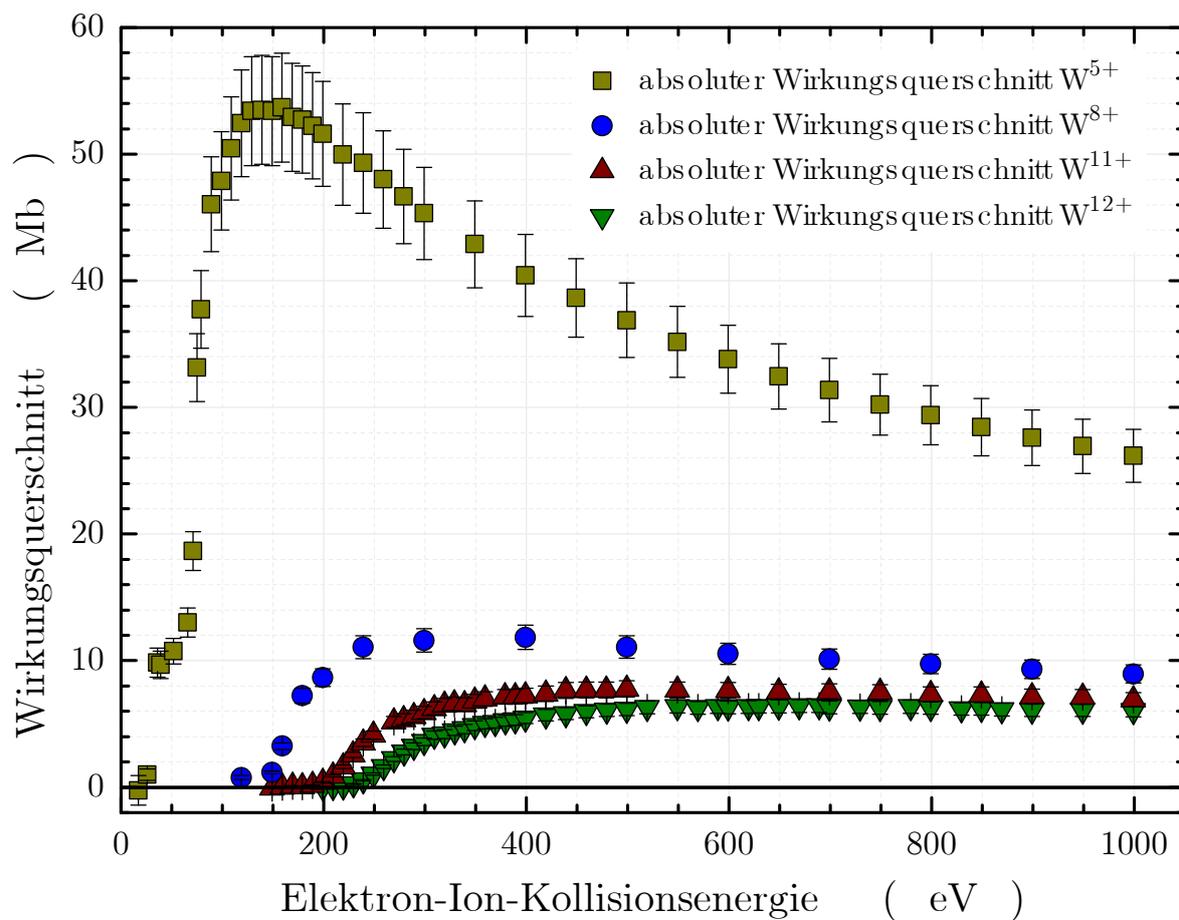


Abbildung A.1.: Lineare Darstellung der absoluten Wirkungsquerschnitte von W^{5+} , W^{8+} , W^{11+} und W^{12+} .

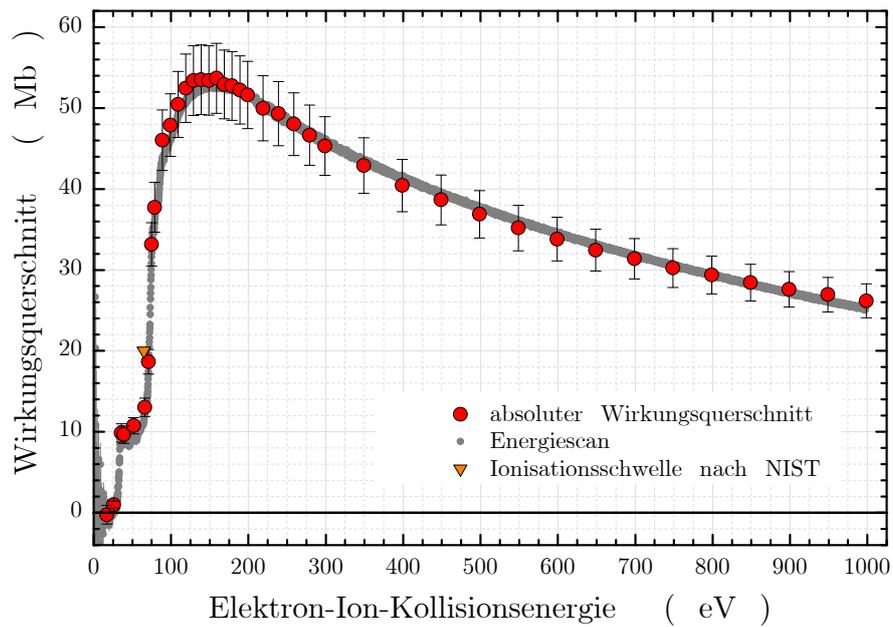


Abbildung A.2.: Lineare Darstellung des absoluten Wirkungsquerschnittes von W^{5+} mit eingezeichneter Ionisationsschwelle nach NIST.

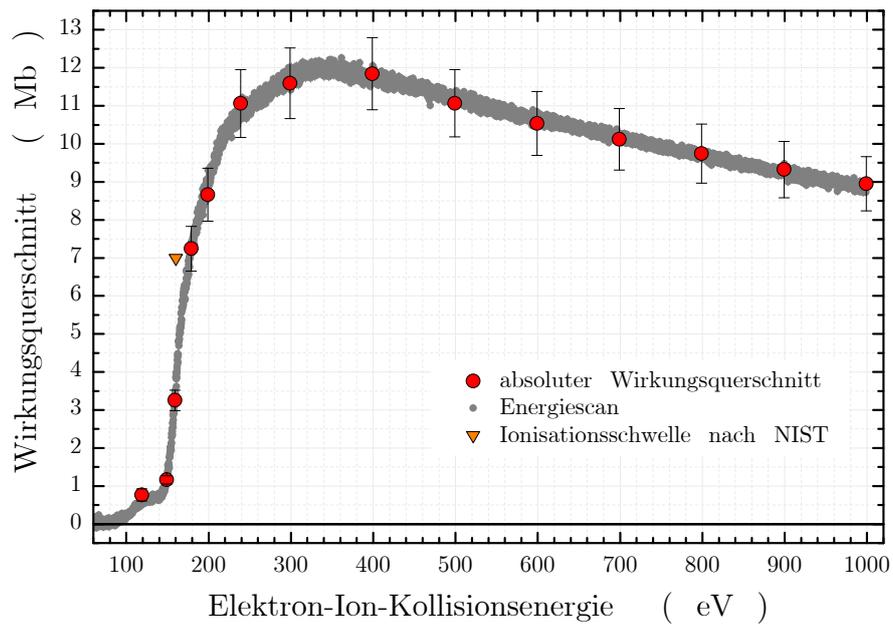


Abbildung A.3.: Lineare Darstellung des absoluten Wirkungsquerschnittes von W^{8+} mit eingezeichneter Ionisationsschwelle nach NIST.

B. Tabellierte absolute Wirkungsquerschnitte

| Energie (eV) | σ (Mb) | $\Delta\sigma$ |
|-------------------|--------------------|----------------|
| 16.92 | -0.247 | -1.167 |
| 25.92 | 0.997 | 4.410 |
| 35.92 | 9.843 | 1.134 |
| 38.92 | 9.659 | 1.078 |
| 51.92 | 10.745 | 1.014 |
| 65.92 | 13.027 | 1.147 |
| 70.92 | 18.658 | 1.524 |
| 74.92 | 33.147 | 2.692 |
| 78.92 | 37.735 | 3.074 |
| 88.92 | 46.042 | 3.736 |
| 98.92 | 47.895 | 3.878 |
| 108.92 | 50.450 | 4.065 |
| 118.92 | 52.444 | 4.226 |
| 128.92 | 53.402 | 4.297 |
| 138.92 | 53.495 | 4.305 |
| 148.92 | 53.404 | 4.291 |
| 158.92 | 53.681 | 4.314 |
| 168.92 | 52.914 | 4.253 |
| 178.92 | 52.732 | 4.237 |
| 188.92 | 52.236 | 4.199 |

| Energie (eV) | σ (Mb) | $\Delta\sigma$ |
|-------------------|--------------------|----------------|
| 198.92 | 51.616 | 4.148 |
| 218.92 | 49.974 | 4.010 |
| 238.92 | 49.308 | 3.961 |
| 258.92 | 48.012 | 3.854 |
| 278.92 | 46.651 | 3.734 |
| 298.92 | 45.320 | 3.628 |
| 348.92 | 42.888 | 3.432 |
| 398.92 | 40.431 | 3.233 |
| 448.92 | 38.647 | 3.087 |
| 498.92 | 36.875 | 2.943 |
| 548.92 | 35.178 | 2.806 |
| 598.92 | 33.808 | 2.695 |
| 648.92 | 32.442 | 2.585 |
| 698.92 | 31.367 | 2.498 |
| 748.92 | 30.232 | 2.407 |
| 798.92 | 29.373 | 2.337 |
| 848.92 | 28.441 | 2.262 |
| 898.92 | 27.599 | 2.194 |
| 948.92 | 26.943 | 2.142 |
| 998.92 | 26.185 | 2.080 |

Tabelle B.1.: Tabellierter absoluter Wirkungsquerschnitt σ der Einfachionisation durch Elektronenstoß von W^{5+} mit dem absoluten Fehler $\Delta\sigma$.

| Energie | σ | $\Delta\sigma$ |
|---------|----------|----------------|
| (eV) | (Mb) | |
| 119.03 | 0.766 | 0.159 |
| 149.03 | 1.164 | 0.107 |
| 159.03 | 3.252 | 0.265 |
| 179.03 | 7.241 | 0.589 |
| 199.03 | 8.665 | 0.696 |
| 239.03 | 11.064 | 0.893 |
| 299.03 | 11.593 | 0.929 |

| Energie | σ | $\Delta\sigma$ |
|---------|----------|----------------|
| (eV) | (Mb) | |
| 399.03 | 11.844 | 0.947 |
| 499.03 | 11.068 | 0.883 |
| 599.03 | 10.536 | 0.843 |
| 699.03 | 10.121 | 0.808 |
| 799.03 | 9.742 | 0.776 |
| 899.03 | 9.324 | 0.743 |
| 999.03 | 8.953 | 0.712 |

Tabelle B.2.: Tabellierter absoluter Wirkungsquerschnitt σ der Einfachionisation durch Elektronenstoß von W^{8+} mit dem absoluten Fehler $\Delta\sigma$.

| Energie | σ | $\Delta\sigma$ |
|---------|----------|----------------|
| (eV) | (Mb) | |
| 149.13 | -0.044 | -0.053 |
| 159.13 | 0.024 | 0.026 |
| 169.13 | 0.077 | 0.033 |
| 179.13 | 0.071 | 0.032 |
| 189.13 | 0.154 | 0.035 |
| 199.13 | 0.406 | 0.040 |
| 209.13 | 0.899 | 0.090 |
| 219.13 | 1.629 | 0.137 |
| 229.13 | 2.570 | 0.213 |
| 239.13 | 3.516 | 0.285 |
| 249.13 | 4.121 | 0.334 |
| 269.13 | 5.160 | 0.420 |
| 279.13 | 5.350 | 0.435 |
| 289.13 | 5.610 | 0.455 |
| 299.13 | 5.901 | 0.481 |
| 309.13 | 6.227 | 0.507 |
| 319.13 | 6.500 | 0.531 |
| 329.13 | 6.590 | 0.536 |
| 339.13 | 6.525 | 0.526 |
| 349.13 | 6.797 | 0.553 |

| Energie | σ | $\Delta\sigma$ |
|---------|----------|----------------|
| (eV) | (Mb) | |
| 359.13 | 6.972 | 0.568 |
| 379.13 | 7.152 | 0.583 |
| 389.13 | 7.158 | 0.581 |
| 399.13 | 7.229 | 0.588 |
| 419.13 | 7.385 | 0.600 |
| 439.13 | 7.649 | 0.621 |
| 459.13 | 7.685 | 0.626 |
| 479.13 | 7.679 | 0.624 |
| 499.13 | 7.766 | 0.632 |
| 549.13 | 7.692 | 0.625 |
| 599.13 | 7.659 | 0.622 |
| 649.13 | 7.540 | 0.612 |
| 699.13 | 7.548 | 0.613 |
| 749.13 | 7.499 | 0.611 |
| 799.13 | 7.337 | 0.596 |
| 849.13 | 7.317 | 0.594 |
| 899.13 | 7.170 | 0.581 |
| 949.13 | 7.133 | 0.576 |
| 999.13 | 6.925 | 0.559 |

Tabelle B.3.: Tabellierter absoluter Wirkungsquerschnitt σ der Einfachionisation durch Elektronenstoß von W^{11+} mit dem absoluten Fehler $\Delta\sigma$.

B. Tabellierte absolute Wirkungsquerschnitte

| Energie (eV) | σ (Mb) | $\Delta\sigma$ |
|-------------------|--------------------|----------------|
| 219.17 | 0.093 | 0.013 |
| 229.17 | 0.259 | 0.029 |
| 239.17 | 0.572 | 0.049 |
| 249.17 | 1.038 | 0.090 |
| 259.17 | 1.619 | 0.132 |
| 269.17 | 2.240 | 0.183 |
| 279.17 | 2.784 | 0.227 |
| 289.17 | 3.233 | 0.262 |
| 299.17 | 3.593 | 0.292 |
| 309.17 | 4.103 | 0.334 |
| 319.17 | 4.212 | 0.343 |
| 329.17 | 4.457 | 0.362 |
| 339.17 | 4.604 | 0.375 |
| 349.17 | 4.856 | 0.392 |
| 359.17 | 5.024 | 0.408 |
| 369.17 | 5.106 | 0.415 |
| 379.17 | 5.262 | 0.427 |
| 389.17 | 5.309 | 0.430 |
| 399.17 | 5.465 | 0.442 |
| 419.17 | 5.691 | 0.461 |
| 439.17 | 5.813 | 0.471 |
| 459.17 | 5.964 | 0.481 |
| 479.17 | 6.081 | 0.492 |

| Energie (eV) | σ (Mb) | $\Delta\sigma$ |
|-------------------|--------------------|----------------|
| 499.17 | 6.141 | 0.495 |
| 519.17 | 6.303 | 0.510 |
| 549.17 | 6.371 | 0.514 |
| 569.17 | 6.279 | 0.507 |
| 589.17 | 6.361 | 0.515 |
| 599.17 | 6.320 | 0.509 |
| 619.17 | 6.350 | 0.513 |
| 629.17 | 6.374 | 0.513 |
| 649.17 | 6.401 | 0.518 |
| 669.17 | 6.414 | 0.517 |
| 689.17 | 6.415 | 0.519 |
| 699.17 | 6.315 | 0.507 |
| 729.17 | 6.332 | 0.512 |
| 749.17 | 6.282 | 0.507 |
| 779.17 | 6.352 | 0.514 |
| 799.17 | 6.277 | 0.506 |
| 829.17 | 6.186 | 0.500 |
| 849.17 | 6.209 | 0.495 |
| 869.17 | 6.133 | 0.495 |
| 899.17 | 6.078 | 0.490 |
| 949.17 | 6.073 | 0.488 |
| 999.17 | 6.033 | 0.485 |

Tabelle B.4.: Tabellierter absoluter Wirkungsquerschnitt σ der Einfachionisation durch Elektronenstoß von W^{12+} mit dem absoluten Fehler $\Delta\sigma$.

Literaturverzeichnis

- [1] NEU, R. ; DUX, R. ; KALLENBACH, A. ; PÜTTERICH, T. ; BALDEN, M. ; FUCHS, J.C. ; HERRMANN, A. ; MAGGI, C.F. ; O'MULLANE, M. ; PUGNO, R. ; RADIVOJEVIC, I. ; ROHDE, V. ; SIPS, A.C.C. ; SUTTROP, W. ; WHITEFORD, A. ; TEAM, ASDEX U.: Tungsten: an option for divertor and main chamber plasma facing components in future fusion devices. In: *Nucl. Fusion* 45 (2005), S. 209–218 11
- [2] DIVERTOR, ITER Physics Expert G.: Chapter 4: Power and particle control. In: *Nuclear Fusion* 39 (1999), Nr. 12, 2391-2469. <http://iopscience.iop.org/0029-5515/39/12/304> 11
- [3] CLEMENTSON, J. ; BEIERSDORFER, P. ; MAGEE, E. W. ; MCLEAN, H. S. ; WOOD, R. D.: Tungsten spectroscopy relevant to the diagnostics of ITER divertor plasmas. In: *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 43 (2010), 144009. <http://stacks.iop.org/JPhysB/43/144009> 11
- [4] STENKE, M. ; AICHELE, K. ; HARTHUAMANI, D. ; HOFMANN, G. ; STEIDL, M. ; VOLPEL, R. ; SALZBORN, E.: Electron-impact single-ionization of singly and multiply charged tungsten ions. In: *1. Phys. 9: At. Mol. Opt. Phys.* 28 (1995), S. 2711–2721 11, 45, 51, 53, 69
- [5] RAUSCH, J. ; BECKER, A. ; SPRUCK, K. ; HELLHUND, J. ; A. BOROVNIK, Jr. ; HUBER, K. ; SCHIPPERS, S. ; MÜLLER, A.: Electron-impact single and double ionisation of W^{17+} . In: *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 44 (2011), 165202. <http://stacks.iop.org/JPhysB/44/165202> 12, 34
- [6] HILLENBRAND, Pierre-Michel: *Doppelionisation hochgeladener Zinn-Ionen durch Elektronenstoß*, Justus-Liebig-Universität Giessen, Diplomarbeit, 2009 21, 28
- [7] THOMSON, S. J. J.: Ionization by moving electrified particles. In: *Philos. Mag.* 23 (1912), S. 449–457 22
- [8] MARGREITER, D. ; DEUTSCH, H. ; SCHMIDT, M. ; MÄRK, T.D.: Electron impact ionization cross sections of molecules: Part II. Theoretical determination of total (counting) ionization cross sections of molecules: a new approach. In: *International Journal of Mass Spectrometry and Ion Processes Volume 100, 31 October 1990, Pages 100* (1990), S. 157–176 22

- [9] BOROVYK, Oleksandr: *Electron-Impact Ionization of Xenon and Tin Ions*, Justus-Liebig-Universität Giessen, Diss., 2010 23, 24, 25, 28, 31, 70
- [10] BETHE, H.: Zur Theorie des Durchgangs schneller Korpuskularstrahlen durch Materie. In: *Ann. Phys. (Leipzig)* 397 (1930), S. 325–400 23
- [11] SCHNEIDER, Hans ; TOBEHN, Ingo ; HIBBLER, Rainer: Inner-shell ionisation by positron and electron impact. In: *Hyperfine Interactions* 73 (1992), S. 17–26 23
- [12] TITTE, Alexander: *Elektronenstoßionisation von heliumähnlichen metastabilen Lithium-Ionen*, Institut für Atom- und Molekülphysik der Justus-Liebig-Universität Giessen, Diplomarbeit, 2006 23, 24, 25, 27, 28, 30, 31, 35, 37, 38, 39
- [13] BURKE, P. G. ; HIBBERT, A. ; ROBB, W. D.: Electron scattering by complex atoms. In: *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 4 4 (1970), S. 153–161 25
- [14] SHEVELKO, V. P. ; TAWARA, H. ; SCHEUERMANN, F. ; FABIAN, B. ; MÜLLER, A. ; SALZBORN, E.: Semiempirical formulae for electron-impact double-ionization cross section of light positive ions. In: *J. Phys. B* 38 (2005), S. 525–545 25
- [15] STENKE, Matthias: *Entwicklung einer Elektronenkanone für den Energiebereich 50 - 6500 eV und Messungen zur Elektronenstoßionisation von Fe-, Ni- und W-Ionen*, Justus-Liebig-Universität Giessen, Diss., 1994 27
- [16] LAI, Ken K. ; LAMB, H. H.: Tungsten chemical vapor deposition using tungsten hexacarbonyl: microstructure of as-deposited and annealed films. In: *Thin Solid Films* 370 (2000), S. 114–121 27
- [17] TIMPHUS, Frank: *Ausbau einer Experimentieranlage mit gekreuzten Elektronen*, Institut für Kernphysik, Strahlencentrum der Justus-Liebig-Universität Giessen, Diplomarbeit, 1998 28
- [18] RALCHENKO, Yu. ; TEAM, NIST A.: *NIST Atomic Spectra Database*. <http://physics.nist.gov/asd>, 2010. – version 4.0 31, 44, 53, 60, 65
- [19] BECKER, Arno: *Einfachionisation von Ar⁵⁺ und Ar⁶⁺ durch Elektronenstoß*, Justus-Liebig-Universität Giessen, Diplomarbeit, 2011 31
- [20] LABORATORY, Los Alamos N.: *LANL Atomic Physic Code*. <http://www.t4.lanl.gov/>, 2010-2011 41, 69
- [21] COWAN, R.D.: *Theory of Atomic Spectra*. University of California Press, Berkely, 1981 41

- [22] BÖHLKE, J. K. ; LAETER, J. R. ; BIÈVRE, P. D. ; HIDAKA, H. ; PEISER, H. S. ; ROSMAN, K. J. R. ; TAYLOR, P. D. P.: Isotopic Compositions of the Elements, 2001. In: *J. Phys. Chem. Ref. Data* 34 (2005), Nr. 1, S. 57–67 42
- [23] KRAMIDA, A. E. ; SHIRAI, T.: Energy levels and spectral lines of tungsten, W III through W LXXIV. In: *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 95 (2009), S. 305–474 53, 60, 64

Danksagung

Diese Arbeit hat mehr Zeit und Mühe gekostet, als es eigentlich vorgesehen war. Ich danke Prof. Dr. Alfred Müller und Prof. Dr. Stefan Schippers, dass sie mir über so einen langen Zeitraum ermöglicht haben diese Arbeit durchzuführen und mich in dieser Zeit betreut haben.

Für gute Zusammenarbeit, schlaflose Nächte und lustige Putzaktionen in der EZR danke ich Dr. Alexander Borovik, Jr., Dr. Mohammad Gharaibeh und MSc. Joachim Rausch.

Ein besonderer Dank gebührt auch Dr. Kurt Huber, der allzeit bereit war, mir mit seine detektivischen Fähigkeiten bei der Lösung eines Problems zu helfen.

Für schnelle Hilfe bei technischen Schwierigkeiten danke ich außerdem Heinz-Jürgen Schäfer.

Zudem bedanke ich mich bei meiner Verwandtschaft für Korrekturlesen, Fledermaus-sitting, den wöchentlichen Taxidienst zum UWR-Training und ein Vierteljahrhundert unermüdlicher Erziehungsmaßnahmen.

Der größte Dank gilt meinem Freund und Kollegen BSc. Arno Becker. Eine detaillierte Auflistung würde den Rahmen dieser Arbeit sprengen :o)

Erklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst, den Inhalt wissenschaftlich erarbeitet und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.

Giessen, den 30.09.2011
