

„OPTIMIERUNG EINES FLUGZEITSPEKTROMETERS UND LADUNGSSPEKTROSKOPISCHE UNTERSUCHUNGEN AN XENON NACH PHOTOIONISATION IM BEREICH DER L-KANTEN“

Stefan Drees

Abstract

Time-of-flight charge state spectra of Xe have been obtained after photoionisation at energies from 4 keV to 8 keV (L-edges). The measurements were carried out at the beamline BN0 of ELSA (Electron Stretcher and Accelerator) in Bonn, using the tunable, monoenergetic synchrotron light of a double-crystal-monochromator ($\text{Ge}_{(220)}$, $\Delta E \approx 1.5\text{ eV}$).

The relative abundances of the ionic charge states Xe^{7+} and Xe^{8+} were found to increase significantly well below the L_3 -edge. The relative production cross sections were obtained by multiplying the relative abundances of the ionic charge states with the total ion flux recorded separately, i.e. the total photoionisation cross section. The effective photon flux was monitored by recording the total photoelectron yield from a Be-target and the total ion yield of a nitrogen filled ionisation chamber. The monitors were successfully tested and revealed irregularities in the monoenergetic photon flux as a function of the circulating electron current.

The time-of-flight spectrometer has been studied by means of a 2-dimensional grid-model implemented in the software-package TOFMODEL. The influence of field distortions in the spectrometer upon the observed line shapes has been examined with the help of other software tools.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Gliederung	1
1.2	Atomare Photoionisation	2
1.2.1	Zwei-Schritt-Modell	2
1.2.2	Einheitliches Modell	2
2	Experimentelle Techniken	4
2.1	Die Lichtquelle	5
2.2	Das Strahlrohr	5
2.3	Der Monochromator	7
2.4	Das Spektrometer	13
2.4.1	Prinzip	13
2.4.2	Flugzeit und Masse-Ladung-Quotient	13
2.4.3	Nachweissystem	14
2.4.4	Probengasdruck	14
2.4.5	Massenauflösungsvermögen	15
2.5	Das Lichtmonitorsystem	19
2.5.1	Samson-Kammer	19
2.5.2	Channeltron	24
2.5.3	Speicherringstrom und Photonenfluß	30
3	Modell des Spektrometers	37
3.1	Eindimensionales Modell	38
3.2	Zweidimensionales Modell	40
3.3	Ergebnisse der Rechnungen	44
4	Reduktion und Auswertung der Ladungsstufen-Spektren	48
4.1	Koinzidenzinformation und Untergrundereignisse	48
4.2	Integration der Massenlinien	50
4.3	Berechnung der physikalischen Parameter	50
4.4	Mittlere Ladung und Photonenfluß	52
5	Vorstellung und Diskussion der Resultate	54
5.1	Mittlere Ladung \bar{Q} des Xenon	55
5.2	Relative Häufigkeiten von Xe^{n+}	58
5.3	Nahkantenstrukturen	62
5.4	Relative Erzeugungsquerschnitte der Ladungsstufen Xe^{n+}	67
5.4.1	Berechnung der relativen Erzeugungsquerschnitte	67

5.4.2	Korrektur der Absorptionsdaten auf den ELSA–Strom	68
5.4.3	Korrektur der Absorptionsdaten auf das Strahlungsspektrum	68
5.4.4	Erzeugungsquerschnitte der ionischen Ladungsstufen	68

6 Zusammenfassung **71**

Verzeichnis der Abbildungen

1	Prinzipskizze des Experiments	4
2	Energiespektrum des Photonenflusses von ELSA	6
3	Rockingkurve von Ge ₍₂₂₀₎ vor den <i>L</i> -Kanten	10
4	Rockingkurve von InSb ₍₁₁₁₎ vor den <i>L</i> -Kanten	11
5	Schwefel 1s auf $2\pi_u$ Resonanz im CS ₂	12
6	Relation: Flugzeit - (Masse/Ladung)	16
7	Xenon Isotope	17
8	Typisches Flugzeitspektrum(Xenon)	18
9	Samson-Anordnung	19
10	Eichspektrum	21
11	Nahkantenstrukturen im Absorptionsspektrum von Xenon	22
12	Spektrum der totalen Ionenausbeute	23
13	Beschaltung des Channeltrons	24
14	Abschätzung der CEM-Rate	27
15	Extrapolierte CEM-Rate als Funktion der Energie	28
16	Ausbeute-Spannungs-Charakteristik(CEM)	29
17	Typische Datenraten der verwendeten Detektoren	31
18	Zeitabhängigkeit der Detektorraten	32
19	Gemessener Photonenfluß als Funktion des Ringstroms	33
20	Photonenfluß für ELSA-Ströme < 25 mA	34
21	Monitorsignale im Vergleich	35
22	Transmission des Monochromators	36
23	Das eindimensionale Modell des Spektrometers	37
24	Das zweidimensionale Modell	42
25	Konvergenzverhalten des SOR-Algorithmus	45
26	Relaxierte elektrische Potentiale im Vergleich	46
27	Xe ⁴⁺ -Peakgruppe: Experiment und Rechnung	47
28	Koinzidenzlevel-2–Spektrum	49
29	Mittleren Ladung und Photonenfluß	53
30	Energiespektrum der mittleren Ladung	56
31	Ladungsstufenspektren von Xenon an der <i>L_{III}</i> -Kante	59

32	Ladungsstufenspektren zwischen 4.5 keV und 5.5 keV	60
33	Energiespektrum der Ladungsstufen Xe^{2+} bis Xe^{13+}	61
34	Nahkantenstrukturen der mittleren Ladung von Xenon	63
35	Verhalten von Xe^{8+} ... Xe^{11+} an der L_3 -Kante	64
36	Verhalten von Xe^{4+} ... Xe^{7+} an der L_3 -Kante	65
37	Photoionisationsquerschnitt von Xenon	66
38	Erzeugungsquerschnitt $\tau(E)$ der ionischen Ladungsstufen Xe^{2+} bis Xe^{13+}	70

Verzeichnis der Tabellen

1	Zugeordnete Energien der CS_2 -Resonanzen	9
2	Daten der verwendeten Kristalle	9
3	Zugeordnete Energien der Xe-Resonanzen	20
4	Längen der Teilstrecken	38
5	Typische Potentialdifferenzen	38
6	Mittlere Ladung von Xenon im Vergleich	55
7	Relative Häufigkeiten von Xe^{i+} im Vergleich	58

1 Einleitung

In dieser Arbeit wurde Xenon durch monochromatisierte Synchrotronstrahlung im Bereich der L -Kanten photoionisiert. Gegenstand der Untersuchungen waren die aus der Relaxation dieser hochangeregten atomaren Vielelektronensysteme ($Z=54$) herrührenden Ladungsstufenverteilungen und ihrer Energieabhängigkeit nahe der L_3 -Kante. Die Messungen erfolgten am Elektronenspeicherring ELSA mittels eines Flugzeitmassenspektrometers, das zwecks etwaiger Verbesserungen näher studiert wurde. Um die zur Optimierung des Spektrometers notwendigen Parameter sinnvoll variieren und die Auswirkungen von z.B. Fehljustierungen quantitativ abschätzen zu können, wurde ein numerisches Modell des Spektrometers erstellt. Dieses ermöglicht die Berechnung realistischer apparativer Breiten der Masselinien in den Spektren aus der angelegten Potentialverteilung.

1.1 Gliederung

Der Bericht über die Arbeiten sowie deren Resultate gliedert sich wie folgt:

- Zunächst wird in Kapitel 1 ein kurzer Überblick über die an der Relaxation von Innerchalenvakanzen beteiligten Prozesse gegeben. Hierbei wie auch in den Messungen liegt der Schwerpunkt auf der Beschreibung der zu den vielfältigen Relaxationskaskaden führenden Prozesse (Auger-Effekt, Postkollisions-Wechselwirkung und Shake-Up bzw. Shake-Off) nach der primären Photoionisation eines Innerschalenelektrons und nicht auf der Beschreibung des zur Anregung oder Ionisation dieses $2p_{3/2^-}$, $2p_{1/2^-}$ oder $2s$ -Elektrons selbst führenden atomaren Photoeffekts.
- Im nächsten Kapitel werden der Aufbau des Experiments: Quelle (ELSA), Monochromator (ROEMO), Flugzeitspektrometer (TOF), Monitore (CEM und Ionisationskammern) und die experimentellen Techniken erläutert. Die Messungen zur Energie- und Massenauflösung der Spektrometeranordnung sowie der Zeit- und Energieabhängigkeit des Photonenflusses werden dort diskutiert. Hier findet die vergleichende Bewertung der verwendeten Monitore statt.
- Die Beschreibung des entwickelten Spektrometermodells, der verwendeten numerischen Methoden sowie die Resultate erster Rechnungen zur Feldverteilung im Spektrometer und daraus abgeleiteten apparativen Linienbreiten in den Flugzeitspektren sind in Kapitel 3 zu finden.
- In Kapitel 4 sind die Reduktion der Rohdaten (gemessene Flugzeitspektren) erläutert sowie die darauf basierende Berechnung der physikalischen Parameter: mittlere Ladungsstufe von Xe, relative Häufigkeiten der ionischen Ladungsstufen und die Erzeugungsquerschnitte für die Reaktionen



alle als Funktion der Energie im Bereich der L -Kanten des Xenon.

- Die in dieser Arbeit gewonnenen Daten werden im Vergleich mit denen anderer Autoren in Kapitel 5 dargestellt. Dieses Kapitel enthält detaillierte Untersuchungen zum Verhalten der Ladungsspektren in der Umgebung der drei L -Kanten. Hier fällt vor allem der Anstieg der relativen Häufigkeiten der ionischen Ladungsstufen Xe^{7+} und Xe^{8+} vor der Xenon- L_3 -Kante auf, welcher deutlich von dem der anderen Ladungsstufen abweicht. Dieser von unserer Gruppe [Doppelfeld 93a,b] erstmalig an der Argon- K -Kante in Ladungsstufenspektren gemessene Anstieg rührt wahrscheinlich von der unterschiedlichen Asymptotik des die niedrigste Resonanz beschreibenden Lorentz-Profiles einerseits und des das Kontinuum beschreibenden Arcustangens andererseits her.
- Im letzten Kapitel werden die Ergebnisse dieser Arbeit zusammengefaßt und ein Ausblick auf darauf basierende weitere Entwicklungen gegeben.

1.2 Atomare Photoionisation

Die einfachste Beschreibung der Emission eines oder mehrerer Elektronen nach Absorption eines Photons (atomare Photoionisation [Amusia 92]) ist das „Zwei-Schritt-Modell“, welches die Erzeugung der primären Vakanz von den vielfältigen statistischen Prozessen, die zur Abführung der im atomaren System deponierten Energie führen, entkoppelt. Diese Trennung in primäre Photoemission und sekundäre Relaxation ist nur fern der Schwellen sinnvoll anzuwenden. Nahe den Schwellen sind Primärionisation und Relaxation nicht separabel, so daß eine einheitliche Behandlung als inelastische Photonstreuung im allgemeinen Sinne nötig ist, wie sie für den Fall eines Prozesses bestehend aus Photoionisation und einfacher Augeremission für die Emission zweier Elektronen von [Aberg 92] durchgeführt wurde.

1.2.1 Zwei-Schritt-Modell

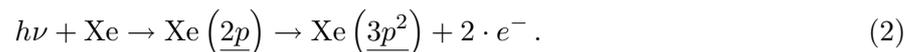
Zur umfassenden (modernen) Darstellung des atomaren Photoeffektes sei hier auf [Amusia 92] verwiesen. Nimmt man die primäre Vakanz als gegeben, so kann die Energieabführung strahlend oder strahlungslos, eventuell mit „Shake“ gekoppelt, geschehen. Bei der Relaxation einer Xenon-L-Vakanz findet die Abregung zu etwa 10% durch Röntgenfluoreszenz statt [Krause 79a]. In den verbleibenden Fällen wird die Energie über Kaskaden aus Augerzerfällen und begleitenden „Shake“-Prozessen abgegeben.

Als Auger-Effekt bezeichnet man die Auffüllung einer Vakanz mit einem schwächer gebundenen Elektron, bei dem die freiwerdende Energie strahlungslos auf ein zweites, ebenfalls schwächer gebundenes, Elektron übertragen wird. Die Wahrscheinlichkeit eines Augerzerfalls nimmt mit dem Überlapp der beteiligten Wellenfunktionen zu, so daß Auger-Prozesse, bei denen primäre Vakanz und eines (Coster-Kronig) bzw. beide (Super-Coster-Kronig) übergehenden Elektronen dieselbe Hauptquantenzahl besitzen, deutlich dominieren.

„Shake“-Prozesse nennt man zusammenfassend die Mehrelektronenanregungen, die bei Photoabsorption oder Auger-Übergang auftreten können, und die sich aus den Änderungen des zentral-symmetrischen Potentials ableiten lassen. Durch den primären Prozeß ändert sich der Hamiltonoperator des atomaren Systems. Im sogenannten „sudden limit“, d.h. bei nichtadiabatischer Potentialänderung, z.B. Photoionisation weit oberhalb der Schwellen, werden dadurch die Einteilchen-Eigenzustände des „alten“ Hamiltonoperators auf die des „neuen“ projiziert. Bei geringen Energien des Photoelektrons verläuft die Relaxation adiabatisch, behalten also alle Elektronen des Rest-Systems ihre Quantenzahlen bei. Ist die kinetische Energie des primär emittierten Elektrons aber zu groß, so kann diese nicht-adiabatische Anregung schwächer gebundene Elektronen in Rydberg-(Shake-Up) oder Kontinuums-Zustände (Shake-Off) anheben.

1.2.2 Einheitliches Modell

Nahe der Schwelle sind Anregung bzw. Ionisation und Folgezerfall nicht zu trennen. Z.B. können unterhalb der Schwelle virtuelle Ionisation und Augerzerfall auftreten, also



Dicht oberhalb der Schwelle ist der Wiedereinfang des langsam auslaufenden Photoelektrons durch Coulombwechselwirkung mit einem schnellen Auger-Elektron möglich. Ferner gibt es die Region adiabatischer Relaxation der nicht ejizierten Elektronen. Im einheitlichen Modell des Gesamtprozesses hat [Aberg 92] den einfachen Augerzerfall bei Anregung durch Photoionisation theoretisch untersucht. Er berechnete die primäre Photoionisation und den Augerzerfall als eine Doppelresonanz im Streuquerschnitt. Bei diesem Prozess kann sinnvoll zwischen drei Regionen der Überschußenergie \mathcal{E}_{exc} unterschieden werden.

- Dem durch Shake-Prozesse modifizierten Bereich der „Autoionisation“, wobei sich „Autoionisation“ auf den Augerprozeß im neutralen Atom, d.h. nach Anregung in diskrete Niveaus bezieht.
- Der Region, in der Postkollisions-Wechselwirkung, dem angelsächsischen Sprachgebrauch folgend mit PCI von (Post-Collision Interaction) abgekürzt, möglich ist. Sie wird durch:

$$0 \lesssim \mathcal{E}_{exc} \lesssim \varepsilon_A^0 \quad (3)$$

abgegrenzt (ε_A^0 ist die Diagrammenergie des auslaufenden Augerelektrons).

- Der sogenannten „Zwei-Schritt-Region“ Kap. **1.2.1**, in der die beiden Prozesse Photoionisation und Auger-Emission getrennt behandelt werden können. Diese beginnt bei

$$\mathcal{E}_{exc} \gtrsim \varepsilon_A^0. \quad (4)$$

Diese Bereichsunterteilung läßt sich qualitativ auf Kaskaden mit mehreren gekoppelten Prozessen dieser Art übertragen. (Nach Erzeugung einer L-Schalenvakanz beim Xenon besitzt das relaxierte Ion im Mittel die Ladungsstufe $8+$. Die Verteilung erstreckt sich von Xe^{2+} bis Xe^{14+} .)

Verschiedene Relaxationsprozesse können zu ein und derselben Ladungsstufe führen, so daß sich aus den Ladungsstufenspektren die durchlaufene Relaxationskaskade nicht eindeutig rekonstruieren läßt. Die als Funktion der Anregungsenergie zu messende Verteilung der Ladungsstufen des Xenon sollte durch die Vielzahl der möglichen beteiligten Prozesse statistisch breit verteilt sein. Da die vollen Halbwertsbreiten der Xenon-L-Niveaus, welche die Breiten der Resonanzlinien bestimmen, laut [Krause 79b] mit 3.64 eV , 3.40 eV und 3.13 eV für die L_1 -, L_2 - bzw. L_3 -Schale im Bereich der Termwerte von $\mathcal{T} = IP - E_{Resonanz} \approx 2 \text{ eV}$ ([Dezarnaud 92]) liegen, ist eine signifikante Aussage über den Einsatz und die Reichweite der Postkollisions-Wechselwirkung wohl kaum möglich. Lediglich der Gesamtverlauf fern der L-Kanten sowie die Verteilung der ionischen Ladungsstufen in den Bereichen unterhalb und oberhalb der Schwellenregion wird mit dem Apparat des Zwei-Schritt-Modells erfaßt werden können. Im Bereich der Kanten wird sich ein zum Teil gradueller Übergang der relativen Häufigkeiten in die Region des „sudden limit“ zeigen.

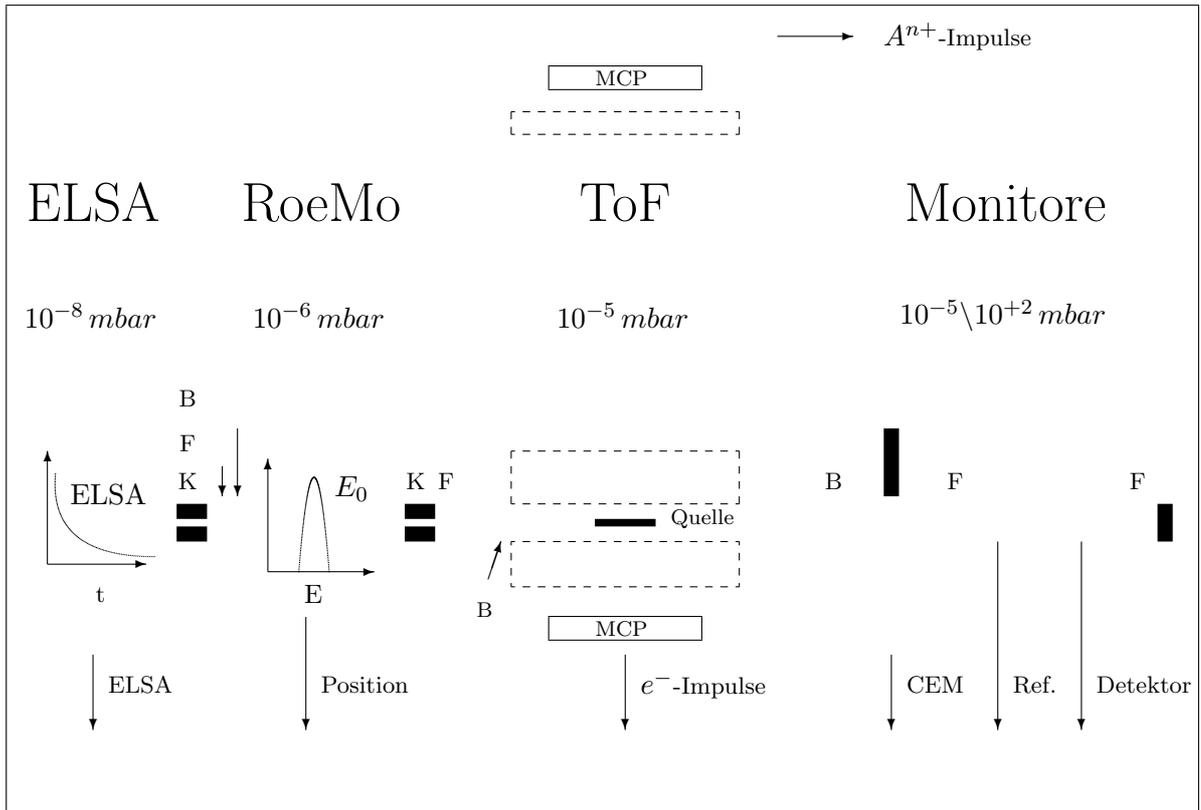


Abb. 1: Prinzipskizze des Experiments. Erläuterung der Bezeichnungen: Der Aufbau gliedert sich grob in ELSA (Elektronen-Stretcher-Anlage), den ROentgenMONochromator, Time-Of-Flight-Spektrometer und Monitore. Blenden B, Kollimatoren und Fenster ergänzen den Aufbau. Das ELSA-Signal ist eine dem umlaufenden Elektronenstrom in ELSA proportionale Gleichspannung. Die Lage des als Gaußprofil angenommenen Energiebandpasses wird über die Position eines Schrittmotors äquivalent dem Braggwinkel variiert. Die je zwei Multi-Channel-Plates (MCP), der Channel-Electron-Multiplier (CEM) mit Be-Target, Referenz- und Detektor-Ionisationskammer sind die fünf benutzten Detektoren. Das ausgefüllte Rechteck in Spektrometer, das mit Quelle bezeichnet ist, repräsentiert die senkrecht zur Blattebene angeordnete Gaseinlaßkanüle. Die Fläche entspricht der Projektion des Quellvolumens für die Photoionisation der Atome im TOF auf die Papierebene. Weitere Erklärungen im Text.

2 Der experimentelle Aufbau

Dieses Kapitel beschreibt den Aufbau des Experiments. Die Gliederung entspricht den Funktionsgruppen Quelle, Monochromator (ROEMO, Flugzeitmassenspektrometer (TOF) und Monitore, wie sie schematisch in der Abb. 1 dargestellt sind. Das Experiment wurde am Elektronenspeicherring ELSA (Elektronen-Stretcher-Anlage) ([Althoff 87], [Althoff 90]) an Strahlrohr „BN0“ durchgeführt. Dort ist hinter einem Röntgenmonochromator ein Flugzeitmassenspektrometer aufgebaut. Mit diesem können Spektren der Größe Masse / Ladung von atomaren und molekularen Gasen nach Photoionisation durch Synchrotronlicht aufgenommen werden. Ionisationskammern und ein Channeltron mit Festkörpertarget bieten die Möglichkeit zur Photonenflußmessung. Die Analyse der m/q -Spektren als Funktion der Energie ermöglicht die Untersuchung der für die Relaxation von Innerschalenvakanzen in Atomen und kleinen Molekülen verantwortlichen Prozesse.

2.1 Der Speicherring

Der Speicherring wurde für die hier beschriebenen Experimente als dedizierte Lichtquelle betrieben, das heißt möglichst stark gefüllt (typische Speicherzeiten von einer Stunde). Die Energie der umlaufenden Elektronen betrug meist $E_{ELSA} = 2.30(1) \text{ GeV}$, selten $E_{ELSA} = 1.90(1) \text{ GeV}$ und einmal $E_{ELSA} = 2.50(1) \text{ GeV}$ (Testbetrieb). Die Ringströme direkt nach der Injektion variierten zwischen 120 mA bei niedriger Energie und zeitweise sogar nur 30 mA bei den hohen Energien. Bauliche Maßnahmen und Betriebsstörungen des Beschleunigers verhinderten oft den durchgehenden Betrieb, was der Frage nach den Auswirkungen von Neueinstellungen der ELSA-Parameter besonderes Gewicht verleiht. Die insgesamt im Rahmen dieser Diplomarbeit nutzbare Strahlzeit betrug dennoch ca. einen Monat. Die hinlänglich bekannten Eigenschaften des Synchrotronlichts können an anderer Stelle nachgelesen werden, im allgemeinen z.B. bei [Jackson 75] und speziell über ELSA bei [Althoff 87], [Husmann 88], [Althoff 90], [Kuetgens 90], [Chauvistre 87] und [Pulm 93]. Das Energiespektrum des Photonensflusses an ELSA bei $E_{ELSA} = 2.3 \text{ GeV}$ ist in Abb. 2 dargestellt. Berechnet wurde es mit SYNCHR88 [Pantelouris 93] unter Eingabe der üblichen Maschinenparameter. Der Fluß liegt im Energiebereich zwischen $(4 - 8) \text{ keV}$ bei grob $10^{12} \cdot \frac{\text{Photonen}}{\text{s} \cdot \text{bw}(0.1\%)}$ für die in der Legende zur Abbildung angegebenen Werte von Elektronenstrom (100 mA), beleuchteter Fläche ($2.35 \text{ mm} \times 10 \text{ mm}$) und Abstand dieser Fläche vom Quellpunkt (20 m). Die endliche Ausdehnung der Quelle ist berücksichtigt.

2.2 Das Strahlrohr BN0

Der Tangentenpunkt an die Elektronenbahn für das Strahlrohr BN0 liegt im Ablenkmagneten M 7. Dieser Quellpunkt ist 11 m von der Mauer und ca. 16 m vom Eintrittsspalt des Doppelkristallmonochromators entfernt. Die zum aufgefangenen Strahl beitragende Feldlänge (Quelltiefe) beträgt ungefähr 30 cm [Pantelouris 93]. Der Elektronenstrahl hat im Quellvolumen eine radiale Ausdehnung von 3 cm und eine vertikale von 0.6 cm . Diese Werte sind nur grob abzuschätzen und vom momentanen ELSA-Strom abhängig.

Das Synchrotronlicht aus dem Dipolmagneten Nr.7 tritt nach Kollimation durch ein Berylliumfenster und nach weiterer Kollimation durch den Eintrittsspalt des Doppelkristallmonochromators. Hinter dem Austrittsspalt des Monochromators und einem weiteren Kollimator ist abgetrennt durch ein Kaptonfenster das Flugzeitspektrometer angeordnet. Mit diesem Spektrometer werden durch Röntgenabsorption induzierte Prozesse an Atomen ([Scherer 89], [Doppelfeld 91] sowie [Doppelfeld 93a]) und kleinen Molekülen wie CS_2 , H_2S oder SF_6 ([Anders 92]) in der Gasphase untersucht. Die das Channeltron mit Be-Target enthaltende Kammer schließt ohne Fenster an das Spektrometer an. Hinter einem weiteren Kaptonfenster befinden sich eine kurze und eine lange Ionisationskammer, mit denen außer der Energie-Kalibration über Aufnahme von Absorptionsspektren auch eine Monitormöglichkeit des Photonensflusses gegeben ist (s.Abb. 1).

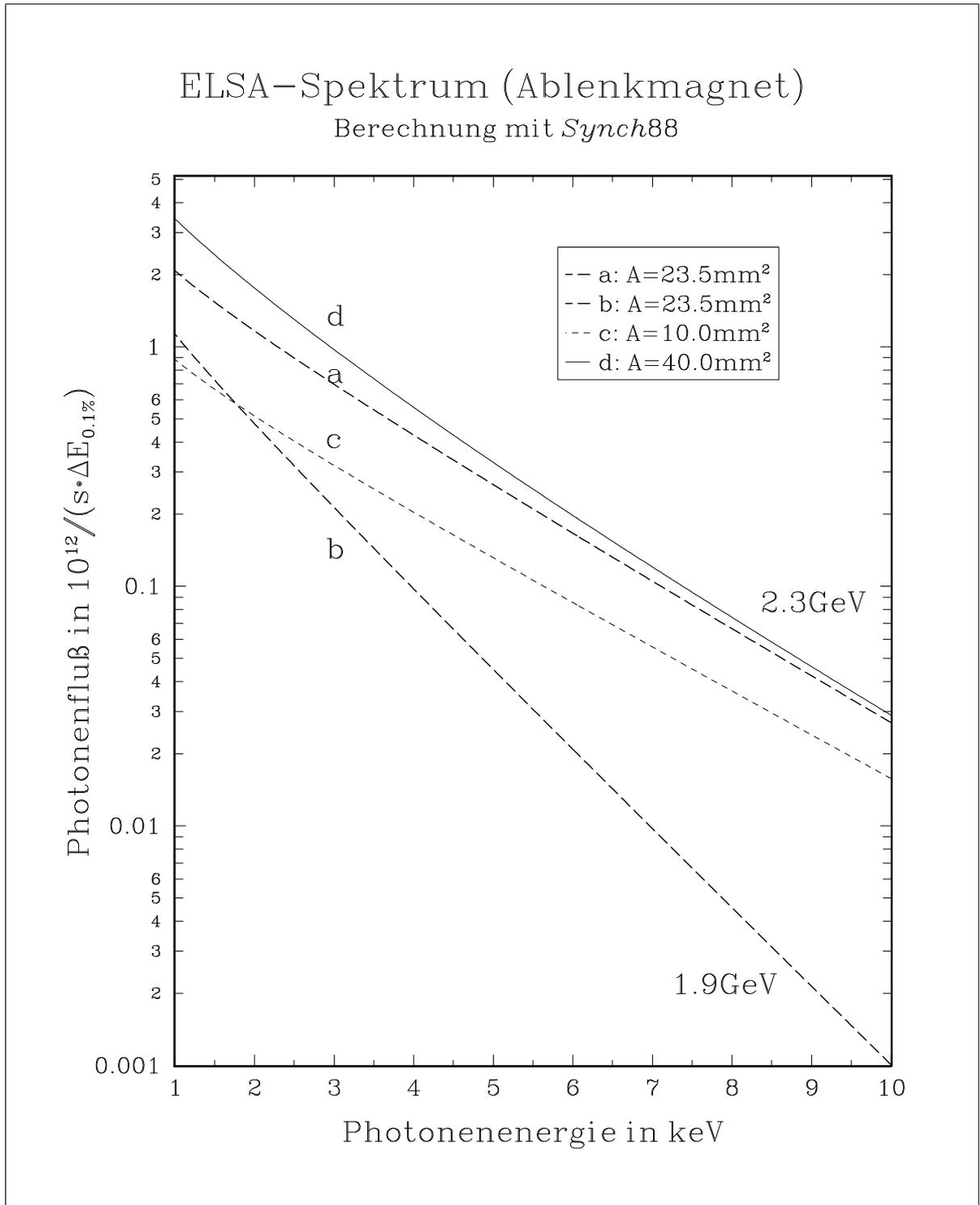


Abb. 2: Energiespektrum des Photonenflusses von ELSA bei Elektronenenergien von 2.3GeV (a, c, d) und 1.9GeV (b) sowie Spalthöhen von $S_v = (1.0, 2.35 \text{ und } 4.0)\text{mm}$ bei fester Spaltbreite von $S_h = 10.0\text{mm}$ in einer Entfernung $d = 20\text{m}$ von der Quelle und bei einem ELSA-Strom von $i_{ELSA} = 100\text{mA}$ im Röntgen-Energiebereich von 1keV bis 10keV .

2.3 Der Doppelkristallmonochromator

Das Synchrotronlicht aus einem Ablenkmagneten wird durch Bragg-Reflexion an zwei Einkristallen monochromatisiert, die parallel zueinander derart angeordnet sind, daß einfallender und monochromatischer Strahl gleiche Richtung haben. Die Energie des monochromatischen Lichtes kann also aus der Bragg-Gleichung:

$$\frac{2}{h \cdot c} \cdot E = \frac{\|\vec{k}\|}{\sin(\theta_{Bragg})}, \quad (5)$$

mit dem reziproken Gittervektor $\|\vec{k}\| = 1/d_{hkl}$, dem Planck'schen Wirkungsquantum h und der Lichtgeschwindigkeit c , für den Primärkristall berechnet werden.

Der Braggwinkel wird über einen Schrittmotor im Bereich von $pos = 0$ bis $pos = 50000$ Schritte variiert. Der Zusammenhang lautet:

$$\theta_{Bragg} \rightarrow pos = 17000 + \frac{\theta_{Bragg}}{mrad}. \quad (6)$$

Nachzulesen ist der Entwurf des Monochromators in der Originalarbeit [Lemonnier 78] und Beschreibungen der „Bonner Realisierung“ in [Kuetsgens 90], [Chauvistre 87] sowie [Anders 92].

Zwei Kristalle sind auf einem Drehtisch parallel zueinander montiert. Der erste, dem „weißen“ Röntgenlicht ausgesetzte Kristall wird durch einfache Drehungen um eine raumfeste Achse gedreht. Diese Drehung wird von einem Schrittmotor (PHYTRON, 48 Schritte pro Umdrehung) über ein Getriebe (48:10000) bewirkt und bestimmt den Bragg-Winkel, also die Energie. Der zweite Kristall wird, um feste Lage des monochromatischen Röntgenstrahles zu gewährleisten, parallel zum ersten auf einer Zwangskurve nachgeführt. Die mathematische Beschreibung der geometrischen Funktionsweise des Doppelkristall-Monochromators, Abschätzungen zu den Auswirkungen von Justierfehlern sowie die optimale Vorgehensweise bei der Justierung sind unter anderem bei [vonBusch 91] und [Lemonnier 78] zu finden.

Die Kristalle werden durch drei Gleichstrommotoren (12 V) über Potentiometer feinjustiert. Beide Kristalle sind drehbar um eine senkrecht zur Einfallsebene liegende Achse (Potentiometer 1P bzw. 2P), der Sekundärkristall um eine parallel zum Schnitt der Einfallsebene mit der Oberfläche liegende Achse (Potentiometer 2V).

Die „Reflexion“ am ersten Kristall gehe in ein Bündel um den Braggwinkel Θ_0 unter Winkeln $\Theta_0 - \vartheta$. Die Fehlstellung des zweiten Kristalls sei γ . Dann findet die zweite Reflexion unter dem Winkel $\Theta_0 - \vartheta - \gamma$ statt. Die Intensität ξ

$$\xi = \int f(\Theta_0 - \vartheta)f(\Theta_0 - \vartheta - \gamma)d\vartheta = \int f(\Theta_0 - \alpha + \gamma)f(\Theta_0 - \alpha)d\alpha = \xi(\Theta_0, \gamma), \quad (7)$$

als Funktion des Fehlwinkels γ gegenüber dem Parameter Θ_0 dargestellt, ist die Rockingkurve. Bei der in Lemonnier-Monochromatoren verwendeten (+, -)-Stellung der Kristalle zueinander muß dieses Profil symmetrisch sein (Gleichung (7)). Der Fehlwinkel γ wurde über das Potentiometer 1P variiert und dabei die Intensität des transmittierten Lichtes mittels einer Ionisationskammer gemessen. Aus der Bragg-Gleichung sowie dem bekannten Zusammenhang zwischen den gemessenen Potentiometerwerten R_{1P} und dem daraus resultierenden Hub ergibt sich für die Energie E :

$$E(R_{1P}) = \frac{a_0}{d_{hkl}} \left(\sin \alpha_0 + \arctan \frac{R_{1P}h_1 + h_2}{h_0} \right)^{-1}. \quad (8)$$

Mit:

Bedeutung	Bezeichnung und Wert
Energie als Fkt. von „1P“	$E(R_{1P})$ in eV
Potentiometerwert „1P“	R_{1P} in $k\Omega$
„Konstante“	$a_0 = \frac{4.14}{A} \cdot 3000 eV = 1.252 \cdot 10^4 \frac{eV}{A}$
Netzebenenabstand von $Ge_{(220)}$	$2d_{hkl} = 4.000 \text{Å}$
Bragg-Winkel-Offset	$\alpha_0 = 0.5485$
Hubnormierung	$h_0 = 70mm$
Hub-Offset	$h_2 = 0.72mm$
Hub pro Widerstand	$h_1 = 400^{-1}mm/k\Omega$

Die Messung für $Ge_{(220)}$ -Kristalle wurde bei einer Speicherringenergie von $E_{ELSA} = 1.90(1)GeV$ gemacht und ist in Abb. 3 in der Integralnorm dargestellt. Die manuelle Variation des Winkels führte zu stark streuenden Einstellzeiten in der Größenordnung von $10s$ bis zu $1min$. Eine Normierung auf die mit steigender Energie sinkende Intensität des einfallenden Synchrotronlichts wurde deshalb nicht vorgenommen. Dies erklärt die leichte Asymmetrie des Profils. Die Messung der Rockingkurve der $InSb_{(111)}$ -Kristalle ist in Abb. 4 dokumentiert.

Die Faltung (7) der beiden Einkristallfunktionen $f(\theta)$ und $f(-\theta)$ bedeutet im Fourier-Raum Multiplikation der Transformierten. Man bestimmt also in der Rockingkurve die Größe $\xi(\vartheta)$ aus den Einkristallfunktionen $f(\vartheta)$ bzw. $f(-\vartheta)$ zu

$$\xi(\vartheta) = \mathcal{FT} (\mathcal{FT}(f(\vartheta)) \cdot \mathcal{FT}(f(-\vartheta))) , \quad (9)$$

so daß letztere, wegen der durch die Produktbildung verlorenen Symmetrieeinformation, nicht getrennt bestimmbar sind. Deshalb kann aus der Rockingkurve das Profil nicht ermittelt werden. Nimmt man jedoch ein Gaußmodell für die Einkristallfunktionen und deren Gleichheit an, so wird die Rockingkurve eine Gaußkurve, deren Breite Γ_{RK} sich gemäß

$$\Gamma_{RK}^2 = \Gamma_1^2 + \Gamma_2^2 \quad (10)$$

aus denen der Einzelbreiten berechnet, also zu

$$\Gamma_{RK} = \sqrt{2}\Gamma_1 . \quad (11)$$

Da aber die Transmission, die letztlich gesucht wird, die Faltung der Einzeltransmission mit sich selbst ist, folgt insgesamt, daß die Rockingkurve doppelt so breit ist wie die Transmissionskurve zweier Kristalle.

In diesem Gaußmodell läßt sich die Energieauflösung, wie z.B. in [Kuetgens 90] beschrieben, auch aus der Anpassung eines Voigtprofils an eine geeignete Resonanz (Absorptionsspektrum) bestimmen. Hier bietet sich im Energiebereich der $InSb_{(111)}$ -Kristalle die $2\pi u$ -Resonanz des Schwefels in CS_2 bei $E = 2470.8 eV$ an. Die Resonanz entspricht dem Übergang eines Schwefel-1s Elektrons in das $2\pi u$ -Molekülorbital. Dies separiert die Linie deutlicher von den wie immer im Röntgenbereich stark überlappenden Rydbergserien vor den Ionisationskanten. Wie in den Abb. (5 (a)-(d)) zu sehen, fällt das Signal bei allen vier Spektren oberhalb der Resonanzenergie genügend stark ab, daß eine sinnvolle Anpassung eines Voigtprofils (d.h. der Faltung einer Lorentz- mit einer Gaußkurve) möglich ist. Die Gaußform wird hier als Näherung an die Reflexionskurve eines Kristalls benutzt, ein übliches Verfahren, aus dem deren Breite angenähert zu bestimmen ist.

In den Teilen (a) und (b) der Abbildung 5 sind die jeweils auf das Maximum normierten Raten des Ionen- bzw. des Elektronendetektors im mit Xenon durchströmten Flugzeitspektrometer und im Teil (c) die invertierte Rate

$$\nu_{inv} = \frac{((-1) \cdot \nu_{Kammer} + \max(\nu_{Kammer}))}{|\max(\nu_{Kammer}) - \min(\nu_{Kammer})|} \quad (12)$$

(Transmission) der dahinterliegenden, mit Luft (Normaldruck) gefüllten Ionisationskammer dargestellt, welche den Absorptionsquerschnitt von Xenon messen. Der Druck im Spektrometer wurde auf $2.5 \cdot 10^{-5} \text{ mbar}$ eingestellt, so daß die Absorption im TOF vor allem durch die große Weglänge von etwa 40 cm bestimmt wird. Diese drei Messungen wurden gleichzeitig gemacht. Das Spektrum der totalen Ionenausbeute (Produkt aus Absorptionsquerschnitt und mittlerer Ladung) in Abb. 5 (d) ist das vorher mit CS_2 in beiden Ionisationskammern (Samson-Anordnung) aufgenommene Eichspektrum. Die Verzerrungen in Kantenhub und Resonanzüberhöhung dieses Spektrums sind mit nichtlinearer Absorption infolge des hohen Drucks (55 mbar) zu erklären. Ziel der Anpassungen war vor allem die Bestimmung der experimentellen Verbreiterung der ersten Resonanz unter Annahme eines Gaußprofils für den Energiebandpaß und eines Lorentzprofils für die natürliche Linienform.

Im Röntgengebiet genügt es, alleine die Lorentz-Breite des Anfangszustandes $\Gamma_L(S1s) = 0.29 \text{ eV}$ zu berücksichtigen, da sie immer groß gegen die Breite des Endzustandes (Molekülorbital) ist. Unter Benutzung der Routinen des Programms MINIS5 (R.Chauvistr) berechnet sich die Gauß-Halbwertsbreite bei den Spektren aus Abb. 5(a-c) zu $0.60(5) \text{ eV}$ und bei dem Eichspektrum zu $0.65(4) \text{ eV}$. Hierbei wurden die energetischen Lagen der Resonanzen und der Wendepunkt der als Arcustangens angenommenen Kontinuumsfunktion sowie ihre Breiten festgehalten. Diese Breiten wurden der des Schwefel-1s Niveaus gleichgesetzt. Die Schwerpunkts- bzw. Wendepunktenergien sind [Perera 84] entnommen. Im einzelnen sind sie in der Tabelle 1 dargestellt: Zusammenfassend

Endzustand	$2\pi_u$	$3\sigma_{g,u}$	4p	5p	$n\epsilon(\text{Kontinuum})$
Lage in eV	2470.8	2473.7	2475.8	2477.4	2478.1

Tabelle 1: Zugeordnete Energien der CS_2 -Resonanzen

sind die Daten für die beiden verwendeten Kristallpaare in Tabelle 2 dargestellt:

Kristalle	$2d_{hkl}$	$E_{min} \dots E_{max}$	FWHM(Gauß)	FWHM(Rocking)
$\text{Ge}_{(220)}$	4.0000 Å	3.4 keV...10 keV	1.5(2) eV	3.0(5)
$\text{InSb}_{(111)}$	7.4806 Å	1.9 keV...7.8 keV	1.2(2) eV	2.4(5)

Tabelle 2: Daten der verwendeten Kristalle

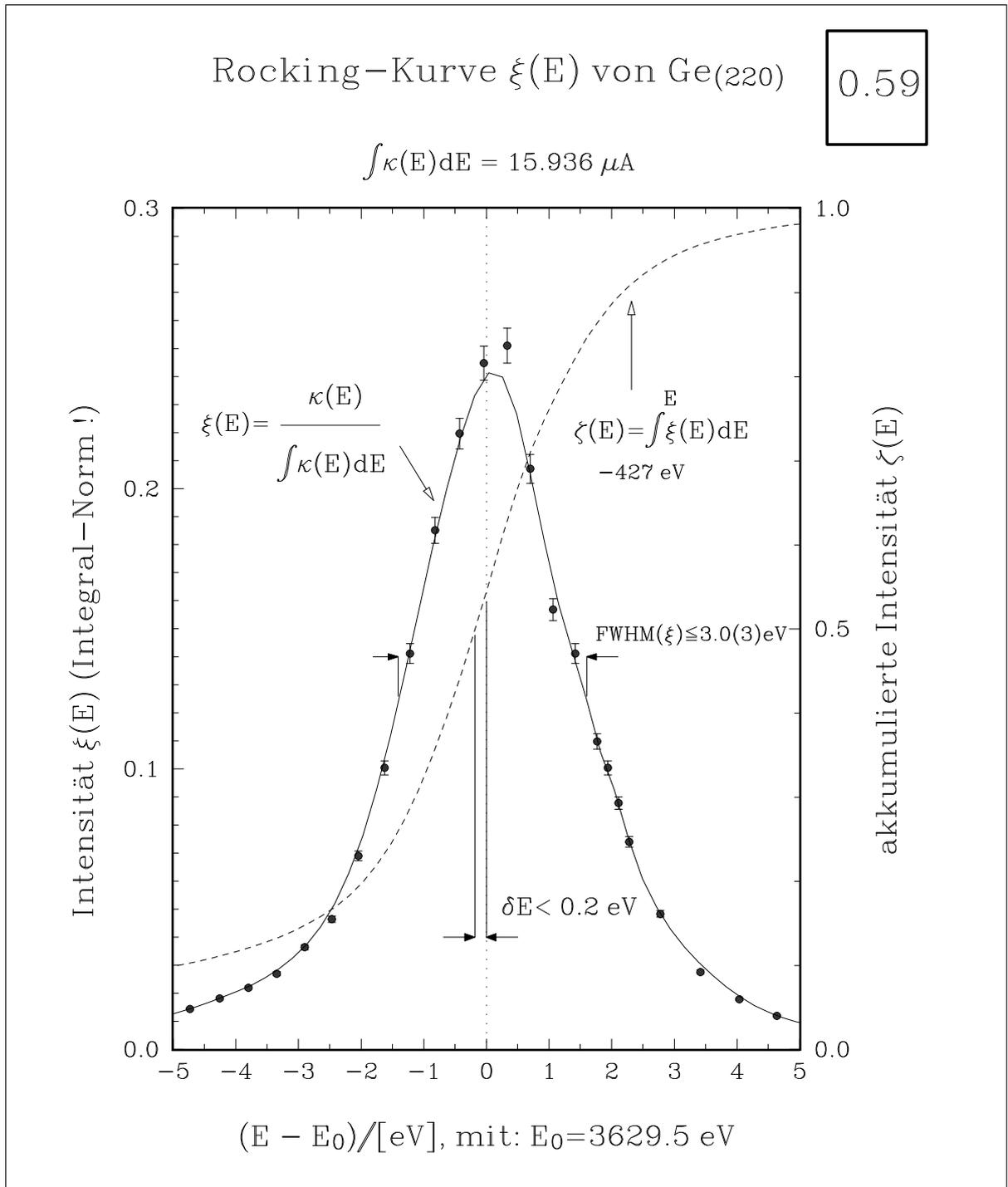


Abb. 3: Rockingkurve von Ge₍₂₂₀₎. Auf das Integral normierte Intensität ξ als Funktion der Energie in eV, relativ zur Schwerpunktsenergie (Braggbedingung) des Sekundärkristalls von ca. 3600 eV. Die volle Breite auf halber Höhe beträgt $FWHM = 3.0(3) eV$ und die Abweichung des arithmetischen Mittels vom Median ist $\delta E < 0.2 eV$. Die wahre Energieauflösung ist bei Annahme eines Gaußprofils für die Einkristallfunktionen F die Hälfte dieser Breite. Die Zahl im Kasten in der rechten oberen Ecke der Abb. ist der Bruchteil der Intensität, der innerhalb der vollen Halbwertsbreite durchgelassen wird. (Er unterscheidet sich nur schwach von dem der InSb₍₁₁₁₎-Kristalle. Siehe Abb. 4)

Rocking-Kurve $\xi(E)$ von InSb₍₁₁₁₎

0.66

$$\int \kappa(E) dE = 27.13 \text{ nA}$$

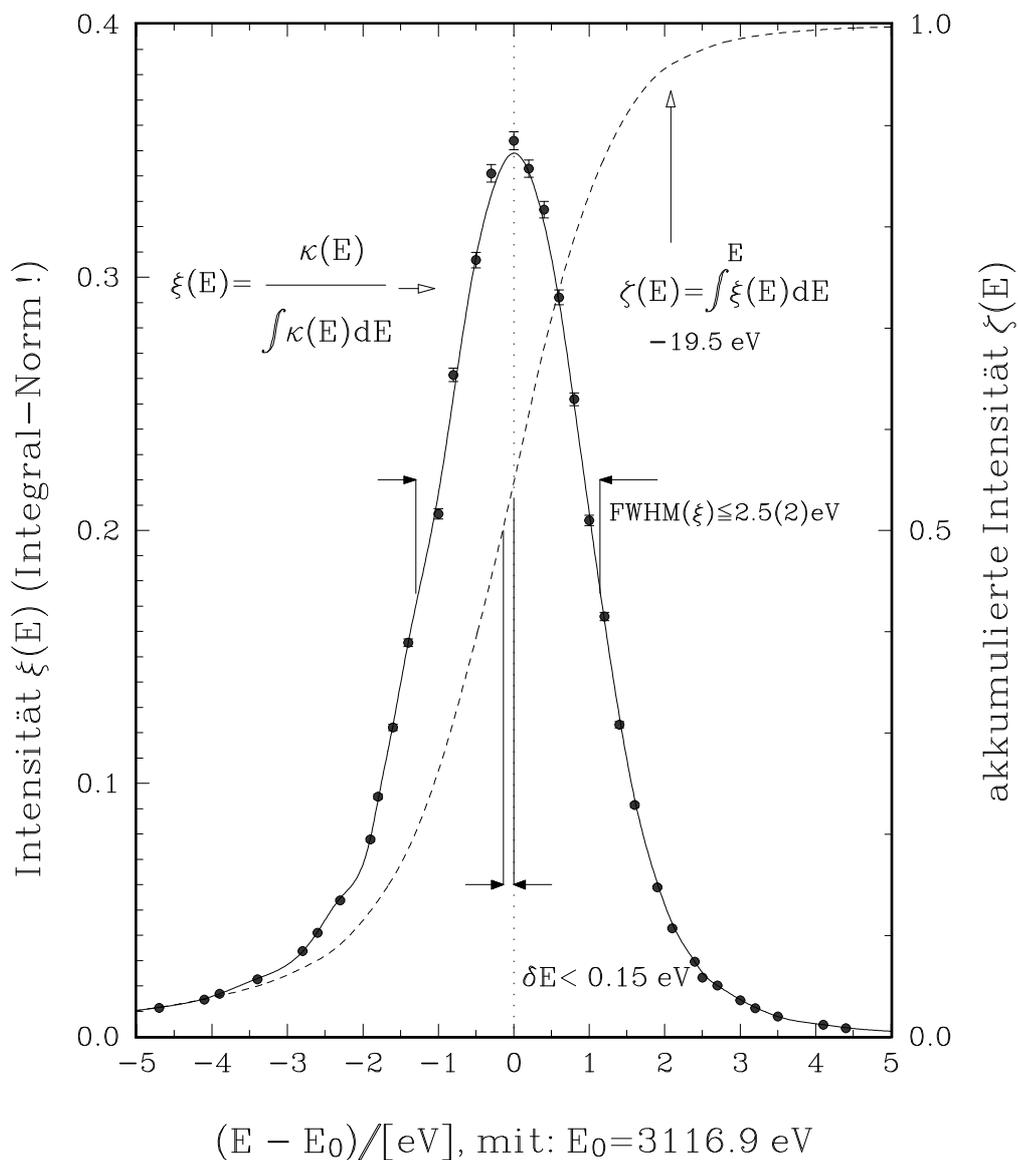


Abb. 4: Rockingkurve von InSb₍₁₁₁₎. Auf das Integral normierte Intensität ξ als Funktion der Energie in eV, relativ zur Scherpunktenergie (Braggbedingung) des Sekundärkristalls von ca. 3200 eV. Zur Datenaufnahme siehe Legende von Abb. 3 Die volle Breite auf halber Höhe (FWHM) beträgt $\text{FWHM} = 2.5(2) \text{ eV}$ und die Abweichung des arithmetischen Mittels vom Median $\delta E < 0.15 \text{ eV}$. Die Zahl im Kasten in der rechten oberen Ecke der Abb. ist der Bruchteil der Intensität, der innerhalb der vollen Halbwertsbreite durchgelassen wird.

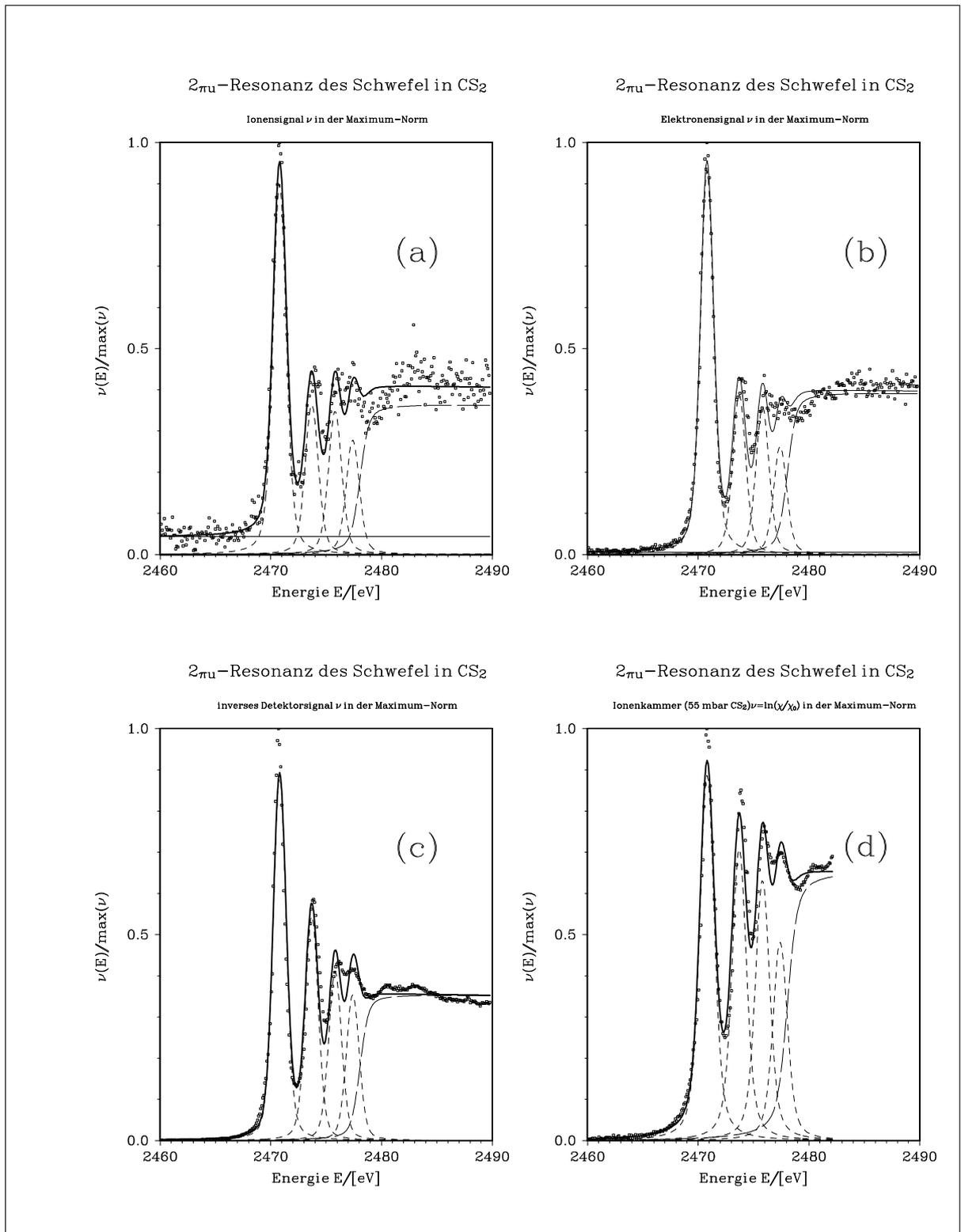


Abb. 5: Vier Anpassungen an die Übergänge vor der Schwefel-K-Kante im CS_2 : (a) Ionendetektorsignal bzw. (b) Elektronendetektorsignal, beide koinzident miteinander, sowie dem (c) invertierten Ionisationskammersignal, welches die Absorption im Spektrometer mißt. In (d) ist das dazugehörige Absorptionsspektrum (Eichung) dargestellt.

2.4 Das modifizierte Flugzeitspektrometer

Die Messungen erfolgten mit einem zweistufigen Flugzeit-Massen-Spektrometer. Es ist vom Wiley-McLaren-Typ [Wiley 55]. Ein solches Spektrometer arbeitet mit statischen elektrischen Feldern und bietet eine Laufzeitfokussierung bezüglich des Ortes der Ionisation.

Gegenüber dem in [Scherer 89], [Doppelfeld 91] und [Anders 92] beschriebenen Spektrometer wurde zwecks Vergrößerung der geometrischen Akzeptanz die Driftstrecke auf ein Drittel verkürzt. Um die notwendige (minimale) Massenauflösung zu erhalten, wurde es für den Betrieb mit Spektrometertopotentialen bis zu sieben Kilovolt ausgelegt.

Diese Änderungen erwiesen sich vor allem für die Untersuchung zur Fragmentation kleiner Moleküle als notwendig, da nur bei Nachweis aller Fragmente eines Zerfalls quantitative Aussagen über Zerfallskanäle möglich sind. Die Bruchstücke eines fragmentierten Moleküls besitzen Dissoziationsenergien in der Größenordnung von 10 eV , so daß es wichtig ist, das akzeptierte Phasenraumvolumen möglichst groß zu halten.

Für die hier beschriebenen Experimente am Xenon, das im Massenbereich von 124 a.u. bis 136 a.u. mehrere ähnlich stark vertretene Isotope aufweist, kommt allerdings allein die verschlechterte Massenauflösung zum Tragen, welche die Separation der hohen Ladungsstufen erschwert.

Die genauere Beschreibung des verwendeten Spektrometers erfolgt in Kap. 3 im Zuge der Beschreibung des numerischen Modells des TOF.

2.4.1 Das Funktionsprinzip des Flugzeitspektrometers

Auf die Funktionsweise des Spektrometers soll hier nur so weit eingegangen werden, als es zum Verständnis wichtiger Meßparameter sowie der Auswirkungen von Inhomogenitäten des elektrischen Feldes im Quellvolumen nötig ist.

Aus den Skalierungseigenschaften der Bewegungsgleichung in allgemeinen statischen Feldern folgt die Relation zwischen Flugzeit t eines Teilchens und seiner Masse m sowie seiner Ladung q zu

$$t \sim l \sqrt{\frac{m}{qU}}, \quad (13)$$

wobei die Größe l die effektive Länge ist.

2.4.2 Flugzeit und Masse-Ladung-Quotient

Der Zeitnullpunkt einer jeden Ionisation wird durch einen Impuls des Elektronendetektors festgelegt. Dies sollte zu einer konstanten Verkürzung der wahren ionischen Flugzeiten durch die Flugzeit des den Startimpuls auslösenden Elektrons führen.

Da die Massen und Ladungsstufen in einem Xenon-Flugzeitspektrum bekannt sind, wurde eine Gerade nach dem Verfahren der kleinsten Quadrate an die gemessenen Flugzeiten eines Xenon-Flugzeitspektrums mit 1.3 Millionen Ereignissen angepaßt. Es wurden die Schwerpunkte von 55 Peaks bestimmt. Die Maxima dieser Profile lagen zwischen 25000 Cts ($^{132}\text{Xe}^{8+}$) und 90 Cts für H^{1+} . Die Flugzeiten variierten von 157 ns bis 1316 ns ($\text{H}^{1+} \dots ^{136}\text{Xe}^{2+}$). Die aus der vollen Halbwertsbreite $\text{FWHM} = 2 \cdot \Gamma_{\text{Gauß}}$ der Linien mittels: $\sigma_{\text{Gauß}} = \frac{\Gamma_{\text{Gauß}}}{\sqrt{\ln 4}}$ berechneten Standardabweichungen in der Zeit lagen bei: $\sigma_{\text{Gauß}} = (0.85 \dots 2.97) \text{ ns}$. Die in der Anpassung verwendeten Gewichte der einzelnen Stützpunkte wurden aus den durch: $\sigma_{\text{Pragma}} = \frac{\text{FWHM}}{\text{MAX}}$ abgeschätzten Unsicherheiten in der Schwerpunktsbestimmung berechnet. Hierbei ist mit MAX die maximale Zahl von Ereignissen im betrachteten Peak gemeint. ($\sigma_{\text{Pragma}} = (0.0001 \dots 0.03) \text{ ns}$).

Die Geradengleichung lautet:

$$t(A^{n+}) = -2.35(81) \text{ ns} + 159.92(19) \text{ ns} \cdot \sqrt{\frac{m \cdot e_0}{q \cdot [\text{a.u.}]}} \quad (14)$$

wobei wie üblich in Klammern die Unsicherheit der letzten Stelle angegeben ist. Da die Abweichungen der experimentell ermittelten Schwerpunkte grob geschätzt wurden, ist es klar, daß das reduzierte χ^2 ungleich Eins ist ($\chi^2/(55 - 2) \approx 0.05$). Die pragmatisch geschätzten Abweichungen sind somit als zu groß angenommen. Durch eine einfache Skalierung kann $\chi^2/(55 - 2) = 1$ erreicht werden.

Die Gerade ist in Abb. 6 im unteren Teil gepunktet dargestellt. Die Verteilung der verwendeten Stützpunkte findet sich im oberen, und die der relativen Abweichungen im mittleren Bildabschnitt. Der Stützpunkt bei der Masse eins ist der in allen Flugzeitspektren nachweisbare einfachgeladene Wasserstoff (H^{1+}). Der durch das Triggerprinzip verursachte negative Achsenabschnitt für $m/q=0$ sollte in der Größenordnung der Elektronenflugzeit liegen. Also:

$$t(m_e \approx 10^{-30} kg, q_e = 1.602 \cdot 10^{-19}) = 0.01m \cdot \sqrt{\frac{2 \cdot m_e}{q_e \cdot 1000V}} \approx 1 ns. \quad (15)$$

Beachtet man die minimale Zeitaufösung von $1 ns$, so ist die Relation auch mit dem vernachlässigbaren systematischen Fehler durch die Elektronenflugzeit gut verträglich, da bei obiger Abschätzung die Unterschiede in den elektronischen Signallaufzeiten unberücksichtigt bleiben.

2.4.3 Das Nachweissystem: Vielkanalplatten

Die Elektronen und Ionen werden im Spektrometer über je zwei Vielkanalplatten mit einer wirksamen Fläche von etwa $40 mm$ Durchmesser und eine nachgeschaltete Anode in Impulse (Anstiegszeit $\tau_{90\%} \approx 0.2 ns$) gewandelt. Da die Nachweiswahrscheinlichkeit der Vielkanalplatten für ein einzelnes Elektron rund 0.5 beträgt, werden niedrige Ladungsstufen systematisch seltener nachgewiesen als hohe.

Die Abhängigkeit der Nachweiswahrscheinlichkeit eines Ions von seiner Ladungsstufe wird in dieser Arbeit wie auch bei den japanischen Gruppen [Tawara 91] vernachlässigt. Wenn ε die Nachweiswahrscheinlichkeit pro Elektron bezeichnet, dann ist die Wahrscheinlichkeit p_0 dafür, daß n Elektronen nicht nachgewiesen werden $p_0 = (1 - \varepsilon)^n$, das heißt die Wahrscheinlichkeit eines Triggers hängt für $n \gtrsim 5$ nur schwach von n ab. Eine Verzerrung der Ladungsstufenspektren resultiert nur für kleine Ladungsstufen. Die bei Xenon im Bereich der L -Kanten beobachteten Ladungsstufen befinden sich im Bereich von $2+$ bis $14+$, bei einem Mittelwert von $6+$ unterhalb der L_3 -Kante und $\approx 8+$ oberhalb der L_1 -Kante.

2.4.4 Probengasdruck

Eine Abhängigkeit der aus den Flugzeitmassenspektren ermittelten relativen Häufigkeiten der einzelnen Ladungsstufen konnte beim Xenon im Druckbereich zwischen $1 \cdot 10^{-6} mbar$ und $3 \cdot 10^{-5} mbar$ nicht festgestellt werden. Da dies bereits bei [Scherer 89] sowie für Argon bei [Doppelfeld 91] gemessen und dargestellt wurde, wird hier auf eine Abbildung verzichtet.

Daß die Dichte sich aber relativ homogen im Spektrometer verteilt, läßt sich aus Abb. 17 erahnen. Aus dem Abfall des Ionen- wie auch des Elektronensignals mit der Zeit nach dem Abschalten der Gaszufuhr ließ sich die empirische „Zeitkonstante“ des Spektrometers zu $\tau \approx 12 s$ abschätzen. Dies geschah über eine Anpassung einer Geraden an die logarithmischen Raten der MCP's (siehe: Abb. 17). Für das Zeitverhalten des nicht-koinzidenten Ionensignals gilt, nachdem die Gaszufuhr abgesperrt wurde:

$$\nu_{ion} = a_0 \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (16)$$

Die Anpassung einer Geraden an $\ln(\nu_{ion})$ nach dem Verfahren der kleinsten Quadrate liefert:

$$\nu_{ion} = 190(11) Hz \cdot \exp\left(-\frac{t}{12.5(4)s}\right) \quad (17)$$

Nimmt man die Ionenrate als eine dem Druck direkt proportionale Größe, so kann man prinzipiell die effektive Pumpkonstante des Spektrometers daraus bestimmen.

Das aus der Kanüle diffundierende Gas ist im wesentlichen homogen im Spektrometer verteilt. Wegen des durch Fehljustierung verursachten, nur vom ELSA-Strom abhängigen Anteils der Elektronenrate muß die nach demselben Verfahren wie bei den Ionen ermittelte Zeitkonstante größer sein, als die ionische. Hier gilt eigentlich $\nu_{ele} = a \cdot \exp(-t/\tau) + b + c \cdot t$. Diese scheinbare Zeitkonstante τ_{ele} ergibt sich zu:

$$\nu_{ele} = 2.1(1) \text{ kHz} \cdot \exp\left(-\frac{t}{12.7(5)\text{s}}\right) \quad (18)$$

Die Abschätzung der Pumpkonstante des Spektrometers aus der Geometrie des Vakuumsystems sowie der Saugleistung der Turbomolekularpumpe wurde nicht versucht, da zuviele willkürliche Annahmen nötig waren, um die Geometrie auf wenige Leitungsquerschnitte und -längen zu reduzieren.

2.4.5 Das Massenauflösungsvermögen

Bei Experimenten an Molekülen müssen alle (geladenen) Fragmentationsprodukte koinzident nachgewiesen werden können, da sonst eine Entscheidung über die realisierten Zerfallskanäle und deren Wahrscheinlichkeiten nicht möglich ist. Bei der Fragmentation von z.B. CS_2 in die atomaren Bruchstücke werden kinetische Energien von 25 eV beim S^{1+} und mehr für höher geladene Schwefelionen gemessen (U. Ankerhold, mündl. Mitteilung), welche allerdings eine kürzere Flugzeit aufweisen.

Der daraus resultierende Versatz der Flugbahn muß im extremen (transversalen) Fall bei den auftretenden Flugzeiten kleiner sein als die Differenz des effektiven Detektorradius $r_{eff}(MCP)$ und des Abstands des Quellortes von der Spektrometerachse r_{Quell} , also $d_{Kin} < r_{eff}(MCP) - r_{Quell}$. Dies setzt ein kurzes, mit hohen Spannungen betriebenes Flugzeitmassenspektrometer voraus, da die empfindliche Fläche der Detektoren fest ist. Das bisherige TOF erwies sich für diese Anforderungen als zu lang, so daß seine Driftstrecke s_3 von $s_3 = 355 \text{ mm}$ auf $s_3 = 88 \text{ mm}$ gekürzt werden mußte. Die schon von [Scherer 89] zu $A = m/\Delta m \approx 100$ bestimmte Massenauflösung hat sich deshalb im Mittel auf $A \approx 30$ verringert. In Abb. 7 ist anhand der Xe^{4+} -Peakgruppe die Isotopenauflösung des langen Spektrometers dargestellt. Die Bestimmung der Isotopenhäufigkeit erfolgte durch einfache Summierung der durch orthogonale Schnitte separierten Linien, was die Überschätzung der Häufigkeit des in der Flanke des dem Isotop ^{129}Xe zugeordneten Profils liegenden ^{128}Xe erklärt.

Es kommt aber in dieser Arbeit nicht auf die Auflösung der Isotope, sondern lediglich auf die der Ladungsstufen an. Hierfür ist das vorhandene Spektrometer sehr gut geeignet, wie Abb. 8 zeigt.

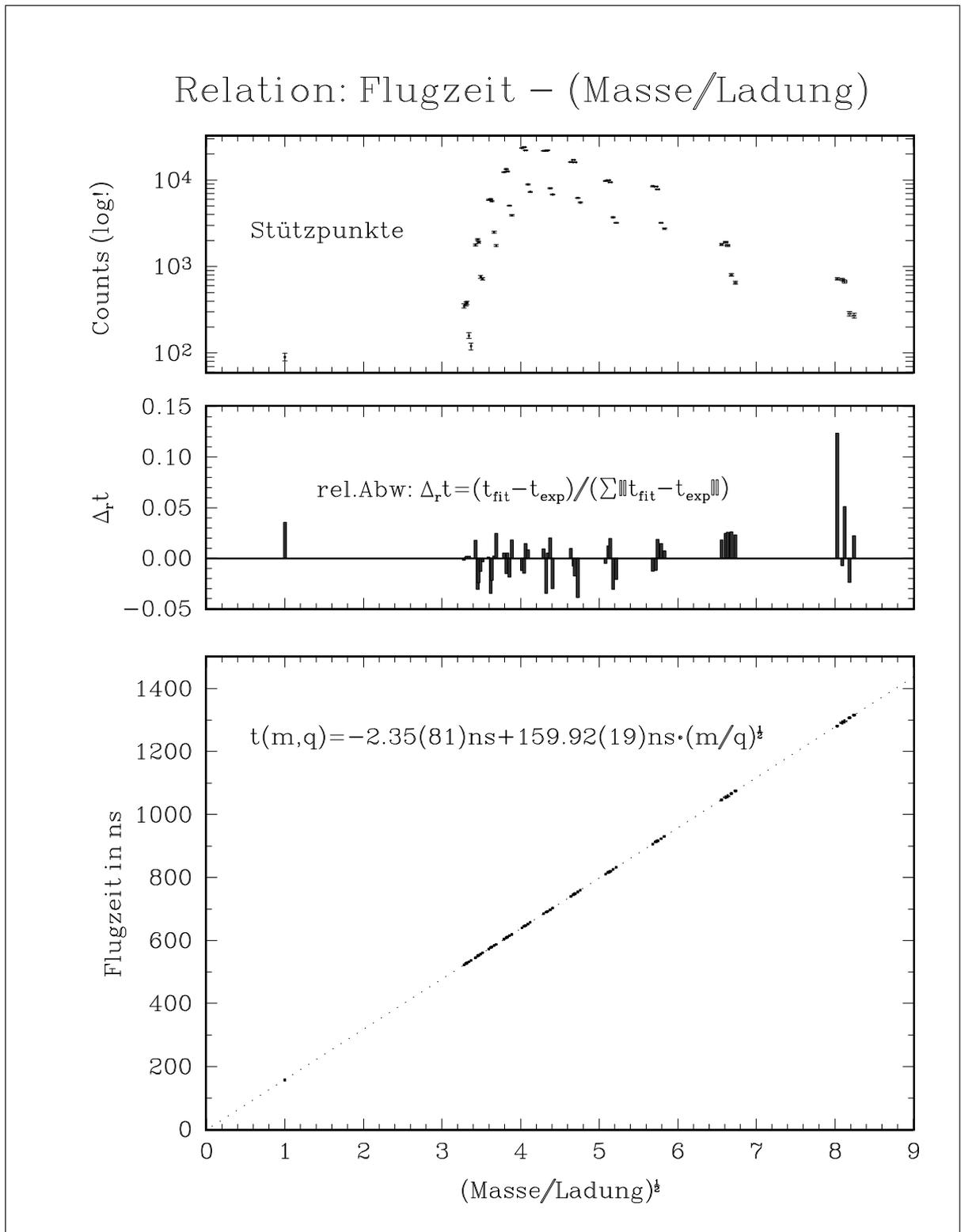


Abb. 6: Die Relation zwischen Flugzeit und dem Quotienten aus Masse und Ladung der nachgewiesenen Ionen. Oben: Verteilung der Stützpunkte. Als Ordinate ist das Maximum des jeweiligen Peaks aufgetragen. Mitte: Die Verteilung der relativen Abweichungen. Das dazugehörige reduzierte $\chi^2 \approx 0.05$. Unten: Die angepaßte Gerade zusammen mit den Stützpunkten.

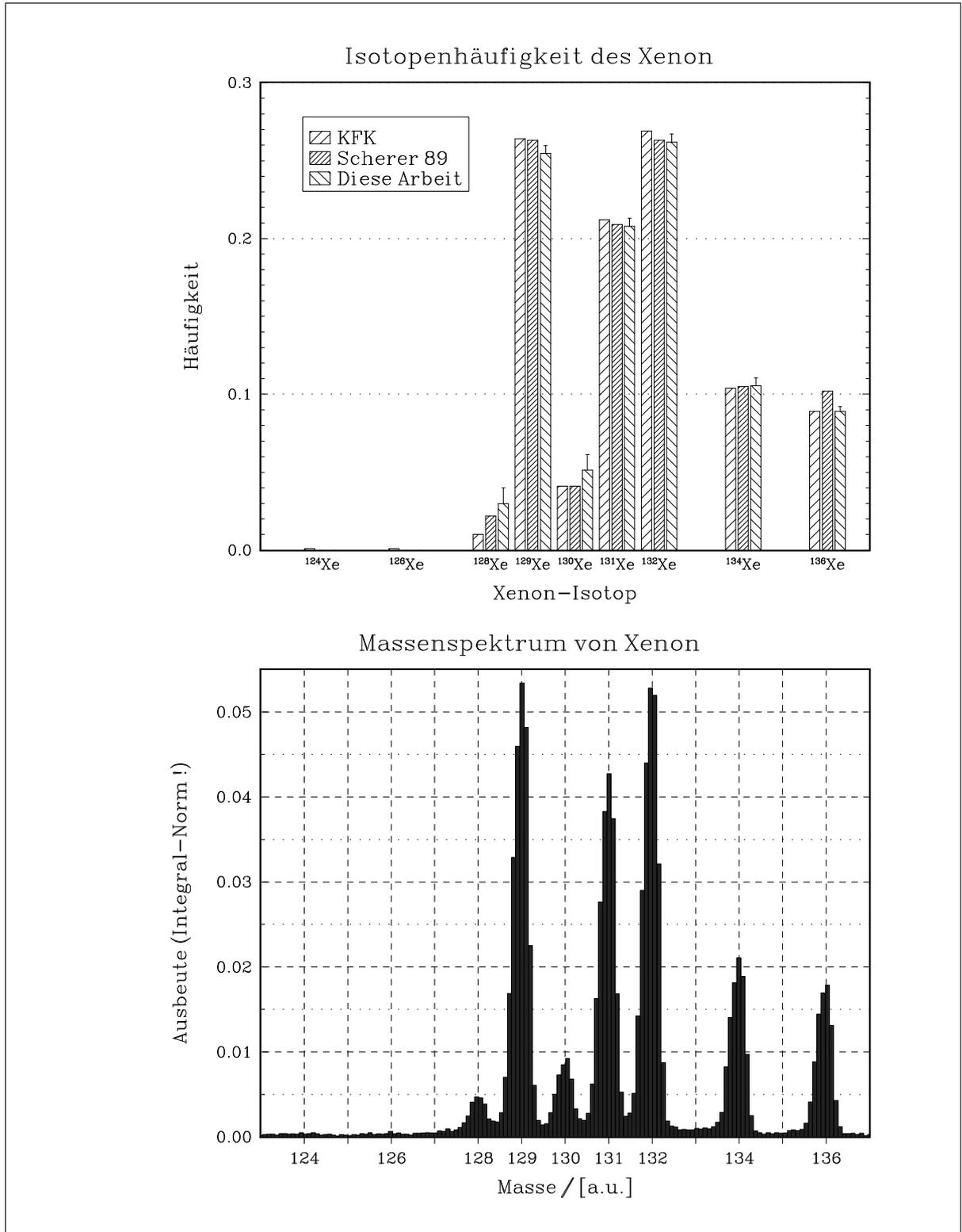


Abb. 7: Die mit dem langen Spektrometer nachgewiesenen Isotope des Xenon. Oben: Vergleich der in dieser Arbeit gemessenen Isotopenhäufigkeiten mit denen der Karlsruher Isotopentafel (KfK), sowie der am selben Spektrometer, aber am 2.3 GeV -Synchrotron gemessenen. Unten: Massenspektrum von Xenon, wie es aus einem Flugzeitspektrum abgeleitet wurde. Das Integral ist auf eins normiert. Die im oberen Teil der Abb. dargestellte Häufigkeit wurde aus den Integralen berechnet.

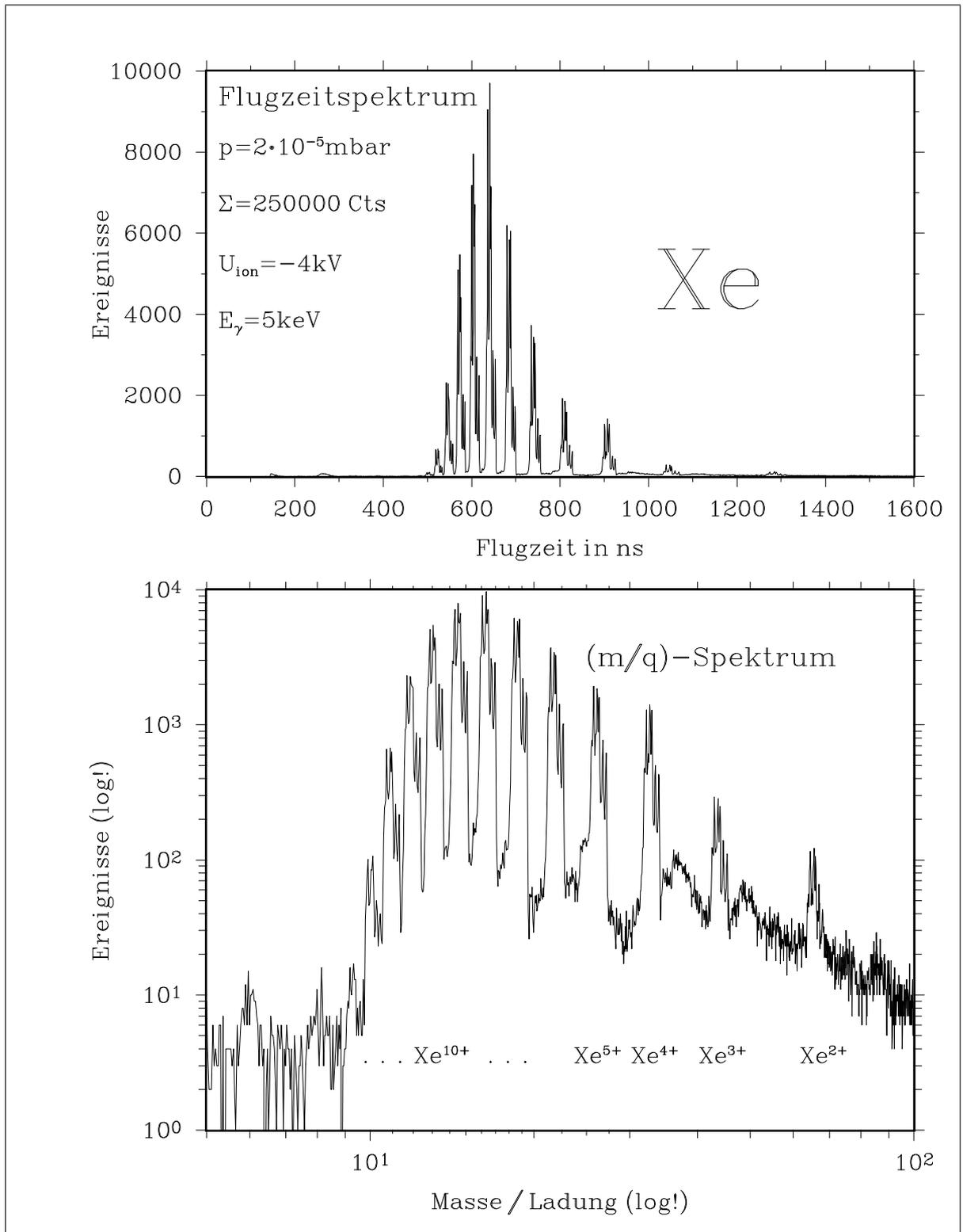


Abb. 8: Ein typisches Flugzeitspektrum (oben) und das daraus abgeleitete Masse-Ladungs-Spektrum (unten). Der Ausschnitt im unteren Teil der Abbildung ist kleiner als im oberen. Man beachte auch die logarithmische Auftragung im Massenspektrum (Wegen der Isotopenverhältnisse siehe Abb. 7).

2.5 Der Gasmonitor und der CEM-Monitor

Die Information über den momentanen ELSA-Strom reicht nicht aus, um relative Erzeugungsquerschnitte aus Ladungsstufenspektren ermitteln zu können, da die primär interessierende Größe nicht der Strom der umlaufenden Elektronen, sondern der monochromatische Photonenfluß im Spektrometer ist. Zu diesem Zweck bieten sich Ionisationskammern und Festkörpertargets an. Wie auch bei den japanischen Gruppen wurde bisher mit einem im betrachteten Energiebereich „kantenfreien“ Gas (Stickstoff) als Ionisationskammerfüllung gearbeitet. Um jedoch den unvermeidlichen Dichteschwankungen im Kammervolumen über den Zeitraum etwa einer Woche (!) sowie den großen Schwierigkeiten in der Reproduzierbarkeit des von Strahlzeit zu Strahlzeit neu einzustellenden Gasdrucks zu entgehen, wurde ein weiterer Monitor, mit einem Festkörpertarget, hinzugefügt. Für diesen Monitor mußte das zu erwartende Signal abgeschätzt werden, da die Raten nicht so einfach wie bei einer Ionisationskammer (Druck) geregelt werden können.

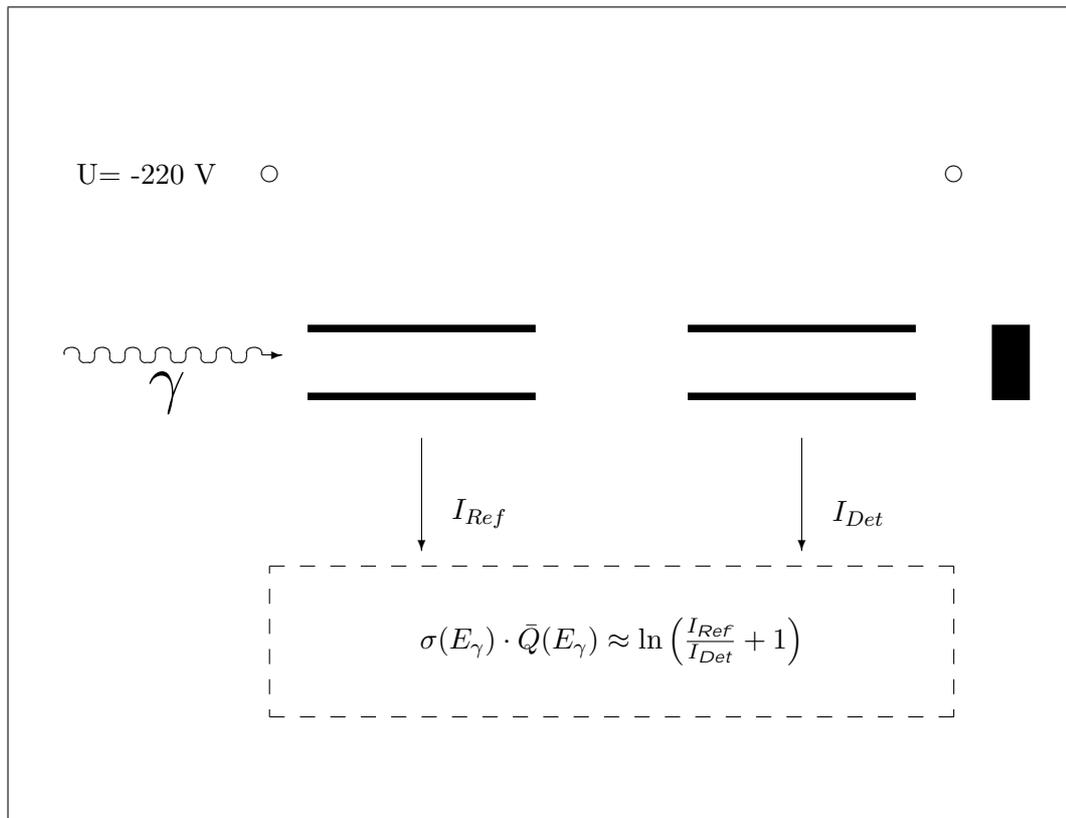


Abb. 9: Vereinfachte Samson-Anordnung, mit der die Energiespektren der totalen Ionenausbeute aufgenommen wurden (Eichspektren)

2.5.1 Die Samson-Kammer

Die Kombination zweier gleichartiger Ionisationskammern wird üblicherweise als Samson-Kammer bezeichnet, wenn sich zwischen ihnen eine Probenkammer befindet. Die Ionisationskammern sind mit demselben Gas unter gleichem Druck gefüllt, aber jeweils durch Fenster von der absorbierenden Probe getrennt. Der Absorptionsquerschnitt für die Probe berechnet sich dann zu:

$$\sigma(E) = \ln \left(\frac{I_{ref}}{I_{det}} + 1 \right) \quad (19)$$

Sind jedoch die Baulängen bzw. die Geometrien der Kammern verschieden voneinander, so wird die 1 in obiger Gleichung zu einer a priori unbekanntem, aber spezifischen Konstanten.

Näheres zu Röntgenabsorptionsmessungen mit solchen Anordnungen findet man unter anderem bei [Chauvistre 87] und [Kuetgens 90]. Am Strahlrohr BN 0 wird die Absorption im Ionisationskammergas selbst gemessen, das heißt Probenkammer und Trennfenster zwischen den beiden Ionisationskammern fallen weg. In diesem Experiment wurden zur Fixierung der Schrittmotorskala an der natürlichen Energieskala in eV Absorptionsspektren mit zwei Kammern an Argon und Xenon bei Kammerdrücken von z.B. 33 mbar beim Xenon (Abb. 10) aufgenommen (Totale Ionenausbeute). Die verwendeten Eichpunkte stammen aus der Arbeit von [Dezarnaud 92], welche ebenfalls Energiespektren der totalen Ionenausbeute \mathcal{I}

$$\mathcal{I}(E) = \sigma(E) \cdot \bar{Q}(E) \quad (20)$$

von Xenon im Bereich der L -Kanten aufgenommen und daraus die energetischen Lagen der Resonanzen bestimmt hat (Abb. 11). Dies liefert verglichen mit reinen Querschnittsmessungen zu höheren Werten verschobene Referenzpunkte, da die mittlere Ladung an den Kanten und danach (Kap. 1.2) ansteigt. Die Referenzpunkte aus [Dezarnaud 92] sind in Tabelle 3 dargestellt.

Zur Bestimmung der Energieauflösung des Monochromators wurde die totale Ionenausbeute in der

Übergang	Resonanzenergie (eV)	Ionisationspotential (eV)	Termwert (eV)
$2p_{3-2} \rightarrow 5d$	4785.2	4787.3	2.1
$2p_{1-2} \rightarrow 5d$	5105.1	5107.2	2.1
$2s \rightarrow 6p$	5450.7	5453.2	2.5

Tabelle 3: Zugeordnete Energien der Xe-Resonanzen nach [Dezarnaud 92] (Resonanzenergien) und Siegbahn et al. 1971 (Ionisationspotentiale). Die Ionisationspotentiale wurden aus XPS-Spektren ermittelt.

Umgebung der Schwefel($1s$) $\rightarrow 2\pi_u$ -Resonanz beim CS_2 gemessen. Im Monitorbetrieb wurde meist nur die hintere, längere Ionisationskammer ausgelesen. An eine Elektrode der Ionisationskammern ist jeweils die Spannung $U = +220\text{ V}$ angelegt, und der durch Photoionisation verursachte Ionenstrom der Größenordnung NanoAmpere wird von Elektrometerverstärkern zu einer proportionalen Gleichspannung gewandelt (CVC). Diese wird von einem Spannungs-Frequenz-Wandler (VFC) zu TTL-Pulsen der Frequenz ν_{det} bzw. ν_{ref} gewandelt. Die Frequenz ν_{det} wird im folgenden als Detektorsignal oder -rate bezeichnet.

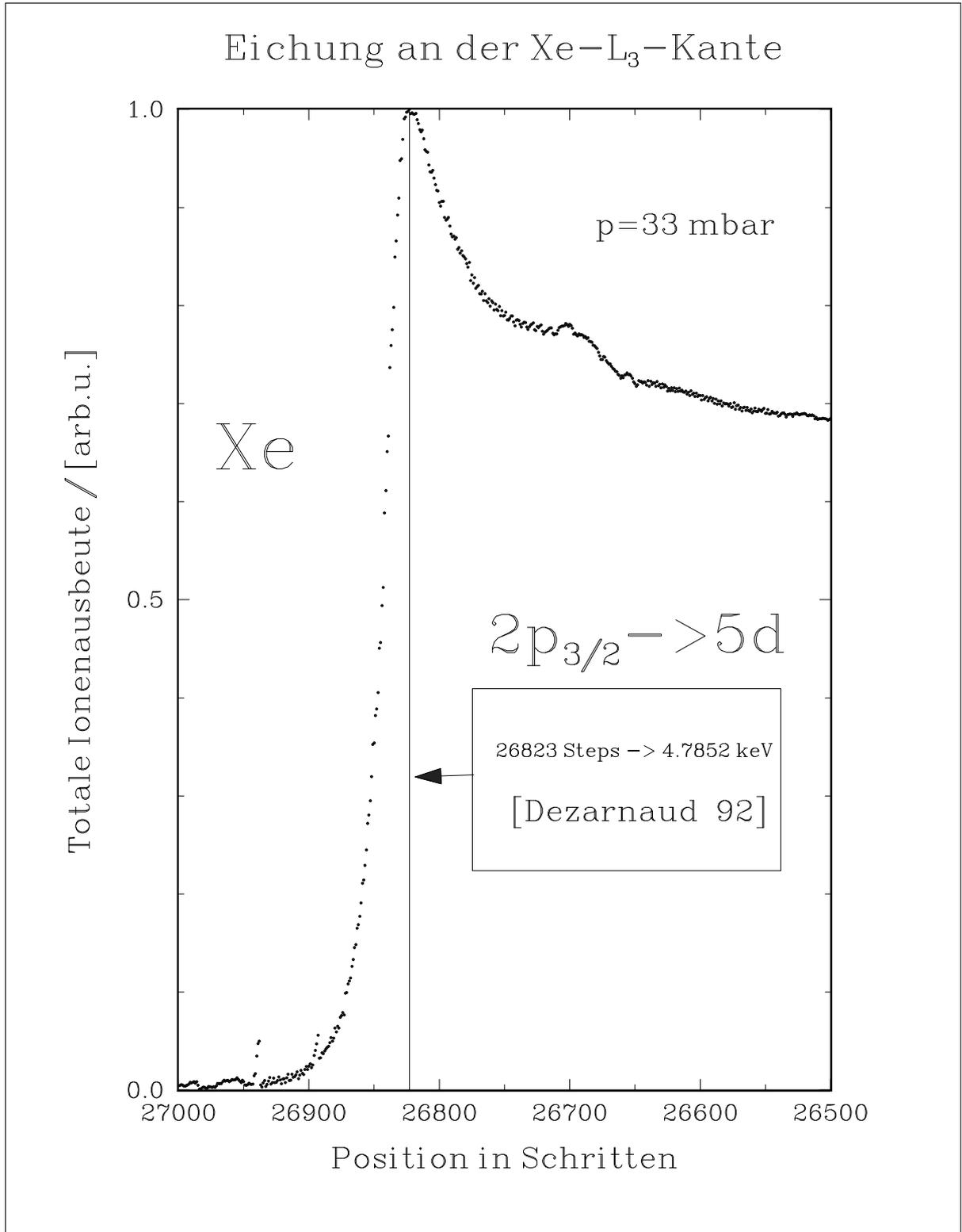


Abb. 10: Typisches Eichspektrum an der L_3 -Kante des Xenon. Die dargestellte Größe ist dem Produkt aus Absorptionsquerschnitt und der mittleren Ladung proportional, also die totale Ionenausbeute und nicht das Absorptionsspektrum. Die von [Dezarnaud 92] übernommene Referenzenergie wurde ebenfalls durch eine totale Ionenausbeutemessung bestimmt. Reine Absorptionmessungen von [Breinig 80] ergaben 4.78423 keV . Der durch PCI „verlangsamte“ Anstieg der mittleren Ladung an der Kante verschiebt die Resonanzenergie also um ca. 1 eV zu höheren Energien.

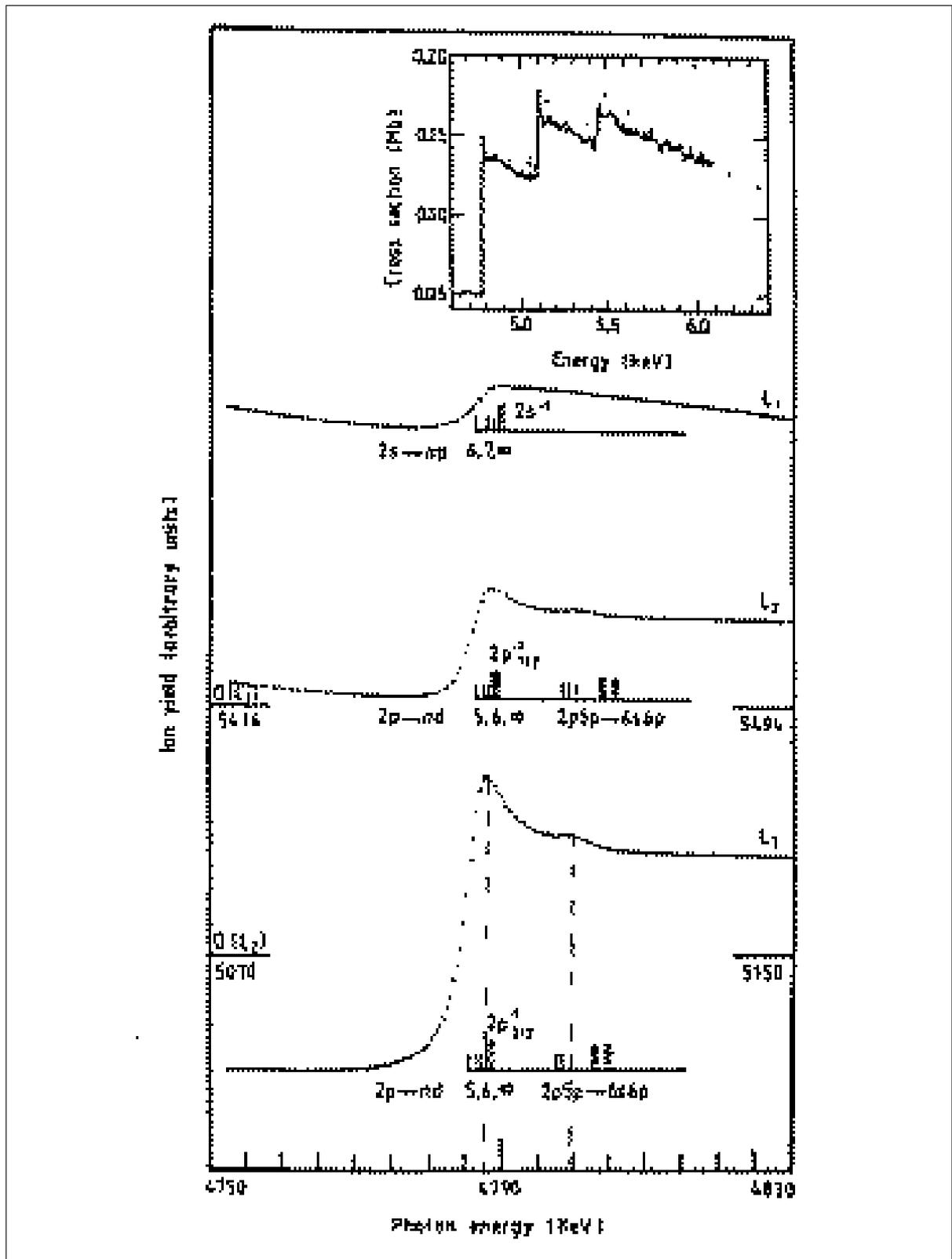


Abb. 11: Nahkantenstrukturen im Absorptionsspektrum von Xenon. Totale Ionen-Ausbeute nahe den L_3 , L_2 und L_1 -Kanten des Xenon. Diese Abb. wurde der Arbeit von [Dezarnaud 92] entnommen. Der Ausschnitt im oberen Teil der Abb. zeigt den von Koizumi et al. (1989) (durchgezogene Kurve) gemessenen Photoisationsquerschnitt, normiert auf den absoluten atomaren photoelektronischen Querschnitt von Wuilleumier (1972) (Punkte).

Typisches Eichspektrum

Totale Ionenausbeute von Xe

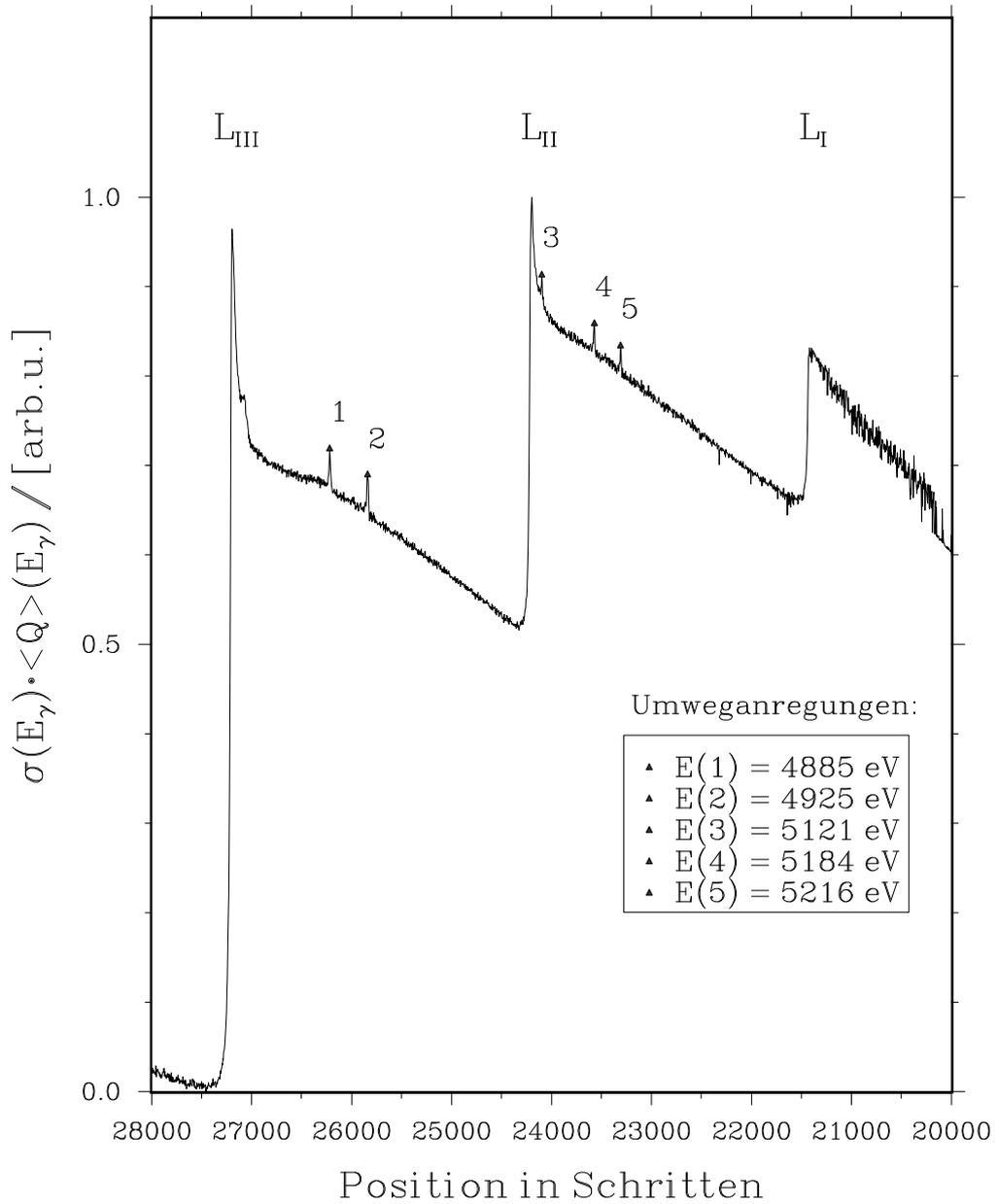


Abb. 12: Spektrum der totalen Ionenausbeute (im Überblick) im Bereich der L-Kanten des Xenon. Da der Azimutwinkel der Einkristalle, hier $\text{Ge}_{(220)}$, unbekannt ist, kann eine genauere Zuordnung der Umweganregungen nicht erfolgen. Es sind die als White Line bezeichneten Resonanzen vor der L_3 - und der L_2 -Kante aufgelöst.

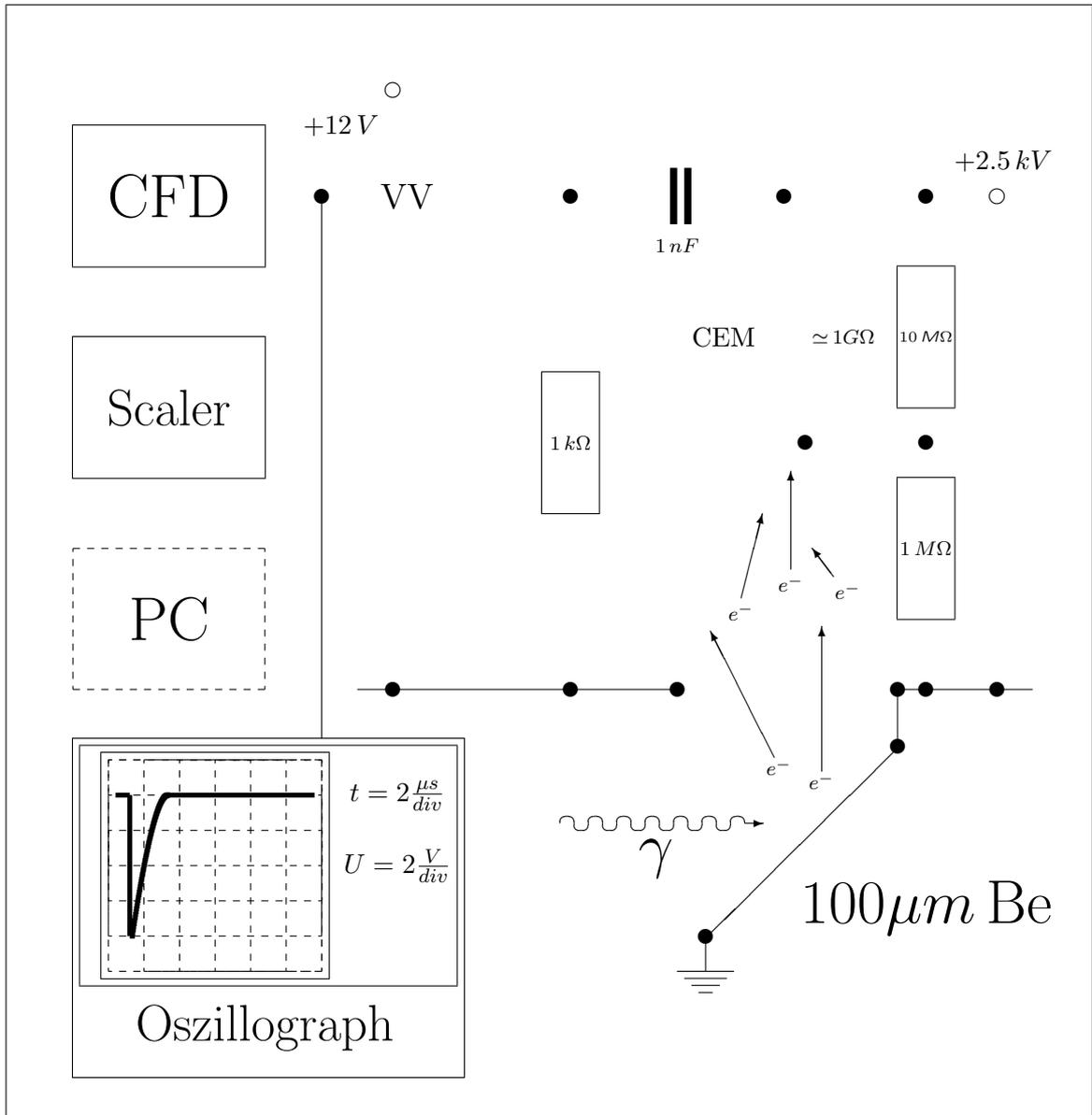


Abb. 13: Beschaltung des CEM. Photonen lösen bei Absorption in der $100\ \mu\text{m}$ -Be-Folie Elektronen aus. Diese können im CEM einen Ladungsimpuls erzeugen, der über einen Hochpaß mit $\nu_{-3\text{dB}} = 1\ \text{MHz}$ ausgekoppelt wird. Nach Vorverstärkung um einen Faktor 50 haben die Impulse eine Maximal-Amplitude von $8\ \text{V}$ und eine Halbwertsbreite von $1\ \mu\text{s}$. Der Oszillograph hat eine Bandbreite von $300\ \text{MHz}$, sodaß der Impuls kaum verfälscht wird. Vor der Öffnung des Channeltrons befindet sich ein Netz, das auf Erdpotential liegt. Über den 1:10-Spannungsteiler ist das Channeltron gegen das Netz vorgespannt (Elektronenenergieunabhängiger Nachweis). Die Verstärkungsspannung ist hier $2.250\ \text{kV}$. VV steht hier für Vorverstärker und CFD für Constant-Fraction-Discriminator.

2.5.2 Das Channeltron mit Festkörper-Target

Während man bei der Ionisationskammer die Datenrate über den Druck geeignet wählen kann, geht das bei Channeltron und Festkörper-Target nicht. So muß das zu erwartende Signal abgeschätzt werden.

Die Ausbeute an Photo-Elektronen aus Berylliumfolie bei Absorption von monoenergetischem

Röntgenlicht wird durch

$$\mathcal{A}_{e^-} = \xi(\mathcal{P}_{spec}(h\nu); i_{ELSA}(t); \eta_{CEM}) \cdot \{1 - \exp(-\lambda_{Flucht} \cdot n \cdot \sigma(h\nu))\} \quad (21)$$

beschrieben. Hierbei ist ξ abhängig von der Spektralverteilung $\mathcal{P}_{spec}(h\nu)$ von ELSA, dem momentanen Elektronenstrom $i_{ELSA}(t)$ in ELSA sowie der Nachweiswahrscheinlichkeit η_{CEM} des Channeltrons. Der einfachste Ansatz für ξ ist ein Produktansatz, also:

$$\xi(\mathcal{P}_{spec}(h\nu); i_{ELSA}(t); \eta_{CEM}) \stackrel{!}{=} \mathcal{P}_{spec}(h\nu) \cdot i_0 \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \cdot \eta_{CEM}. \quad (22)$$

Der letzte Faktor auf der rechten Seite von Gleichung (21) beschreibt die Absorption im Beryllium-Target. Zur Abschätzung der zu erwartenden Zählrate wurde das Argument der Exponentialfunktion $\mathfrak{N}(Be, h\nu)$ in der Form:

$$\mathfrak{N}(Be, h\nu) = - \left(\frac{\rho}{A} \cdot N_L \right) \cdot \sigma(h\nu) \cdot \lambda_{Flucht} \quad (23)$$

geschrieben. Eingesetzt wurde für die Dichte $\rho = 1.86 \text{ g/cm}^3$, die ausgeleuchtete Fläche von $A \approx 10 \text{ mm} \times 3 \text{ mm} = 30 \text{ mm}^2$ und die Loschmidt-Zahl $N_L = 6 \cdot 10^{23}$. Die 1/e-Tiefe λ_{Flucht} wurde zu $\lambda_{Flucht} = 15 \text{ \AA}$ (energieunabhängig!) angenommen. Der Photoionisationsquerschnitt $\sigma(h\nu)$ von Be wurde an den Stützpunkten (1, 2, 3, 4 und 5) keV den Tabellen von [Veigele 73] entnommen und nach dem dominierenden Term in der Victoreen-Abschätzung interpoliert:

$$\sigma(h\nu) \approx a_{-3} \cdot E^{-3} + a_{-4} \cdot E^{-4} \rightsquigarrow \left(\sigma(h\nu = 111.5 \text{ eV}) \cdot 111.5^3 \cdot \text{eV}^3 \right) \cdot E^{-3}, \quad (24)$$

mit $(\sigma(h\nu = 111.5 \text{ eV}) \cdot 111.5^3 \cdot \text{eV}^3) = 8.3 \cdot 10^{12} \cdot \text{barn} \cdot \text{eV}^3$ (Die Be-K-Kante liegt bei $E = 111.5 \text{ eV}$!). Also:

$h\nu$ in eV	1000	2000	3000	4000	5000
$\sigma(h\nu)$ in barn	8860	1110	309	124	60

Berücksichtigt man auch den K-LL-Augerzerfall des Beryllium mit der Energie $\epsilon_A^0 \approx 100 \text{ eV}$ der Diagrammlinie, so ergibt sich die totale Ausbeute für Elektronen nach Röntgenstreuung hier zu $\mathcal{A}_{Total} = 2 \cdot \mathcal{A}_{e^-}$. Grob sei jetzt das Energiespektrum des Photonenflusses von ELSA als konstant mit $10^9 \cdot \frac{\text{Photonen}}{\text{s} \cdot \text{mm}^2 \cdot \text{mA} \cdot \text{eV}}$ angenommen. Die Transmission des Monochromators sowie die Nachweiswahrscheinlichkeit des Channeltrons seien gleich eins, da unbekannt. Dann berechnet sich die energieabhängige Datenrate $\nu_{CEM}(h\nu)$ am Channeltron zu:

$h\nu$ in eV	1000	2000	3000	4000	5000
$\nu_{CEM}(h\nu)$ in kHz	400	45	15	5	3

Nach der Faltung mit dem ELSA-Spektrum und der Filterung durch das vor dem Monochromator installierte Be-Fenster ergibt sich eine Verteilung, wie in Abb. 14 zu sehen ist. Das zugrundeliegende ELSA-Spektrum wurde mit dem von B. Maid und R. Dany entwickelten Programm LITOP2 für eine ELSA-Energie von 2.3 GeV und die Dicken sowie die Materialien der verwendeten Fenster numerisch berechnet. Die Annahme von 100 mA für den Ringstrom und $2 \times 10 \text{ mm}$ für die beleuchtete Fläche liefert die Photonennrate (rechte Skala!). Multiplikation mit der näherungsweise bestimmten Elektronenausbeute \mathcal{A}_{Total} (s.o.) ergab die Abschätzung der CEM-Rate (linke Skala!). Das Maximum dieser Verteilung liegt zwischen (2-3) keV . Die wahre Zählrate sollte deutlich kleiner 1 MHz sein, da die gemachten Näherungen die Transmission der Photonen bis zum Target sowie den Ringstrom im Normalbetrieb deutlich überschätzen.

Die Ableitung der Größenordnung der Elektronenausbeute aus den tabellierten Werten für den Wirkungsquerschnitt von Beryllium im Energiebereich zwischen 1 und 5 keV zusammen mit der

Annahme eines weißen ELSA-Spektrums sowie auch der Eingabe eines numerisch berechneten Spektrums rechtfertigten beide den Betrieb des Channeltrons im Pulszählmodus, da die erwarteten Raten im üblichen Bereich dieser Betriebsart liegen. Diese Auslegung wurde durch die Messungen bestätigt (s.u.). Gemessen wurden Channeltron-Raten im Bereich von 10 kHz bis 100 kHz . Zum Vergleich sind in Abb. 15 zwei gemessene Energiespektren der CEM-Rate mit einer extrapolierten Kurve dargestellt. Die Raten aus den Messungen wurden mittels

$$\nu_{CEM} \rightarrow \widetilde{\nu_{CEM}} = \nu_{CEM} \cdot \frac{20.54\text{ kHz} + 0.638 \cdot \frac{\text{kHz}}{\text{mA}} \cdot 100\text{ mA}}{20.54\text{ kHz} + 0.638 \cdot \frac{\text{kHz}}{\text{mA}} \cdot i_{ELSA}} \quad (25)$$

auf konstanten Ringstrom $i_{ELSA} = 100\text{ mA}$ umgerechnet. Die Extrapolation des niederenergetischen Teils der mit $\text{InSb}_{(111)}$ gemessenen Kurve zu der mit $\text{Ge}_{(220)}$ -Kristallen gemessenen, nähert ein (mögliches) kristallunabhängiges Energiespektrum an. Dadurch bleiben nämlich die L-Absorptionskanten des Indium als auch des Antimon unberücksichtigt. Der Einfluß sowohl der Energie des monochromatisierten Lichtes als auch der Justierung der beiden Kristalle auf die Lage des Maximums kann jedoch nicht herauskorrigiert werden. Das energetische Verhalten der Channeltron-Rate ist im großen und ganzen wie erwartet. Die gemessenen Raten sind in der Größenordnung der geschätzten. Glaubt man der Extrapolation in Abb. 15, so liegt ein Maximum zwischen 3 keV und 3.5 keV vor. Sieht man von den Kantenstrukturen bei $\approx 6\text{ keV}$ (Chrom-K) und vor allem bei $\approx 7.1\text{ keV}$ (Eisen-K) ab, so liegt ein zu Monitorzwecken geeignetes Energiespektrum vor.

Die Kammer, in der das Be-Target mit CEM und Spannungsteilern sowie dem Koppelkondensator montiert ist, wird aus Platzgründen hinter dem Flugzeitspektrometer fensterlos angeflanscht. Sie ist mit einem $50\text{ }\mu$ dicken Kaptonfenster gegen die nachfolgende Ionisationskammer abgedichtet und wird also von der Turbomolekularpumpe des Spektrometers mitbepumpt. Der erreichte Enddruck ist $5 \cdot 10^{-7}\text{ mbar}$. Während der Messungen herrschen ca. $2 \cdot 10^{-5}\text{ mbar}$, was für den Betrieb eines CEM gerade noch akzeptabel ist. So muß für die Betriebsspannung des CEM ein Kompromiß erreicht werden. Die Ausbeute-Spannungs-Charakteristik ist in Abb. 16 mit den zwei Arbeitspunkten dargestellt. Die Wahl des Arbeitspunktes stellte sich aber als relativ unkritisch heraus, da beim verwendeten Hochspannungsmodul (Bertan) keine Schwankungen auftraten und die Verteilung des CEM bei 2.25 kV effektiver Beschleunigungsspannung bereits im Plateaubereich liegt. Die Form der Impulse ist vergleichbar mit denen der im Elektronen- und Ionendetektor eingebauten MCP's. Die Schwelle des verwendeten Diskriminators (CFD) war auf $U_{CFD}^{CEM} = -0.3\text{ V}$ eingestellt. Die in Abb. 13 dargestellte Impulsform wurde vom Oszillographen abskizziert. Die Amplitude der Impulse beträgt ca. 8 V nach dem Vorverstärker bei $U_{eff}^{CEM} = 2.25\text{ kV}$. Die volle Breite auf halber Höhe mißt $\text{FWHM} = 1\text{ }\mu\text{s}$. Der Betrieb des CEM beeinflußt weder das Vakuum noch die Spektren nachweisbar. Nach dem CFD treten praktisch keine Untergrundimpulse mehr auf, also $\nu_{BG}^{CEM} < 1\text{ Hz}$. Die Datenraten liegen je nach Energie der Photonen und ELSA-Strom zwischen 10 kHz und 100 kHz .

Abschätzung der CEM-Rate

Mit: $\nu_\gamma(E) \leftarrow Litop2$, und: $\nu_e(E) \leftarrow Beryll$.

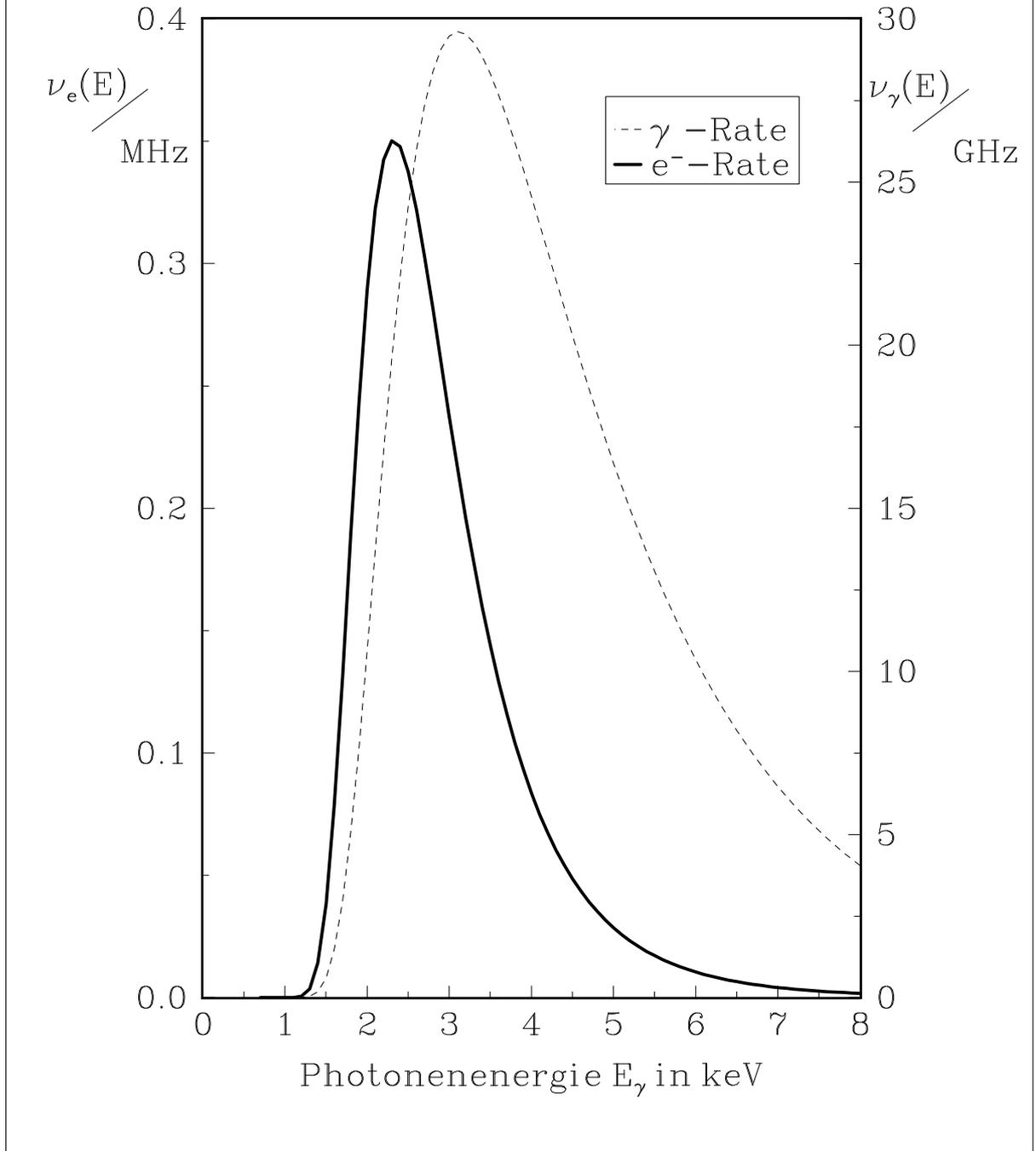


Abb. 14: Abschätzung der CEM-Rate. Hineingesteckt wurden die das Strahlrohr BN 0 beschreibenden Parameter in das Programm LITOP. Der so berechnete Photonenfluß im Bereich von 1 bis 8 keV wurde in Gleichung (21) für ξ eingesetzt. Die Werte der übrigen Parameter sind in der Box zu finden. Wesentlich ist hier die grobe Form der Verteilung der Channeltron-Datenrate als Funktion der Energie, sowie die (maximale) Größenordnung der Rate: $\nu_{CEM}^{MAX} \approx 300 kHz$. Näheres Text.

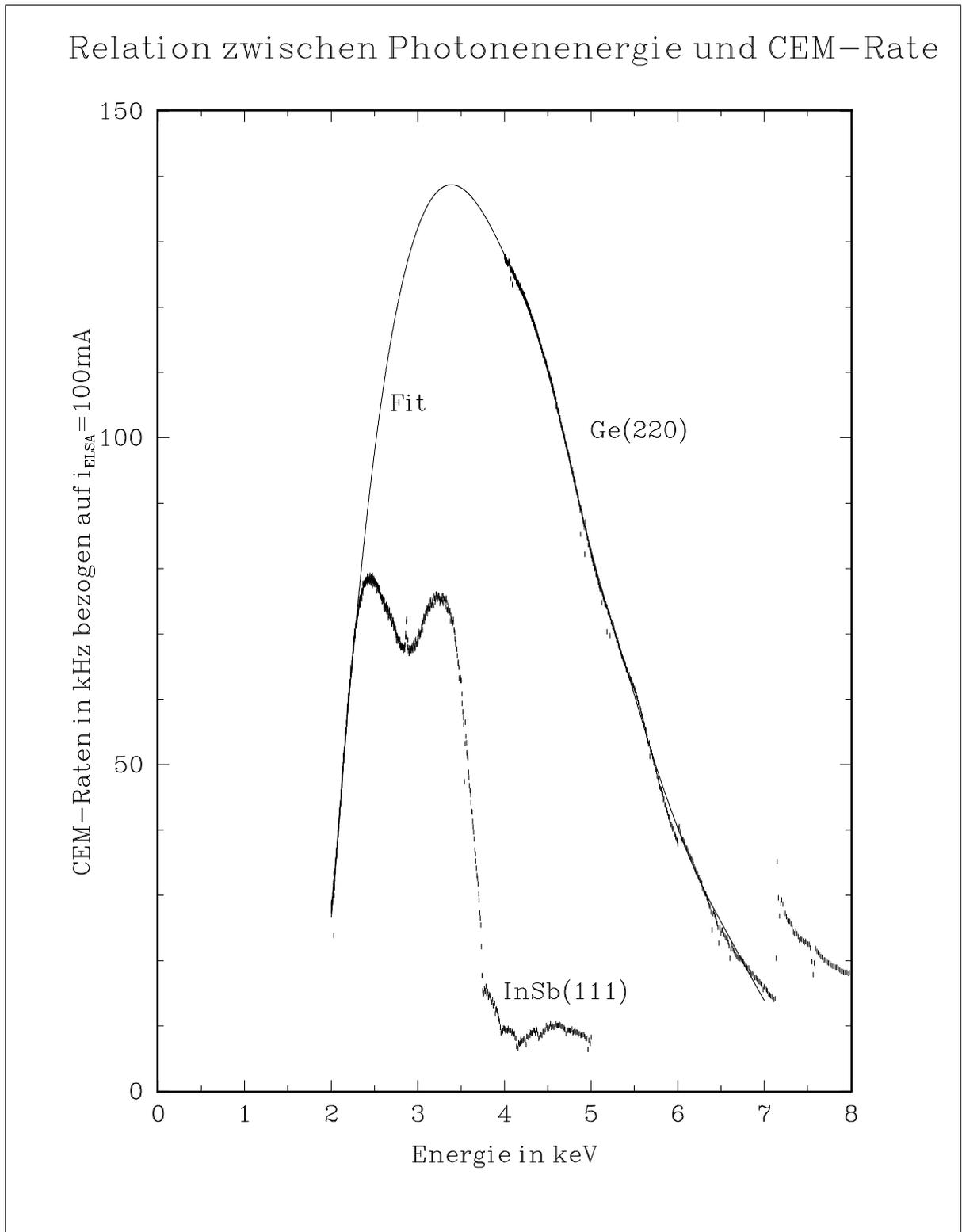


Abb. 15: Extrapolierte CEM-Rate als Funktion der Energie. Die Raten wurden mit den beiden verschiedenen Kristallpaaren $\text{InSb}_{(111)}$ und $\text{Ge}_{(220)}$ aufgenommen. Beide Signale wurden mittels einer Geradenanpassung des stromabhängigen CEM-Signals zwischen 15 mA und 25 mA auf konstanten Strom umgerechnet. Die Extrapolation vermittelt zwischen den gemessenen Kurven, um die Abhängigkeit des Spektrums von den kristallbedingten Einflüssen (Absorption an den In- und Sb-L-Kanten bei 3.73 , 3.938 und 4.238 keV respektive 4.132 , 4.38 und 4.698 keV !) möglichst unabhängig darzustellen.

Zählrate als Funktion der Spannung

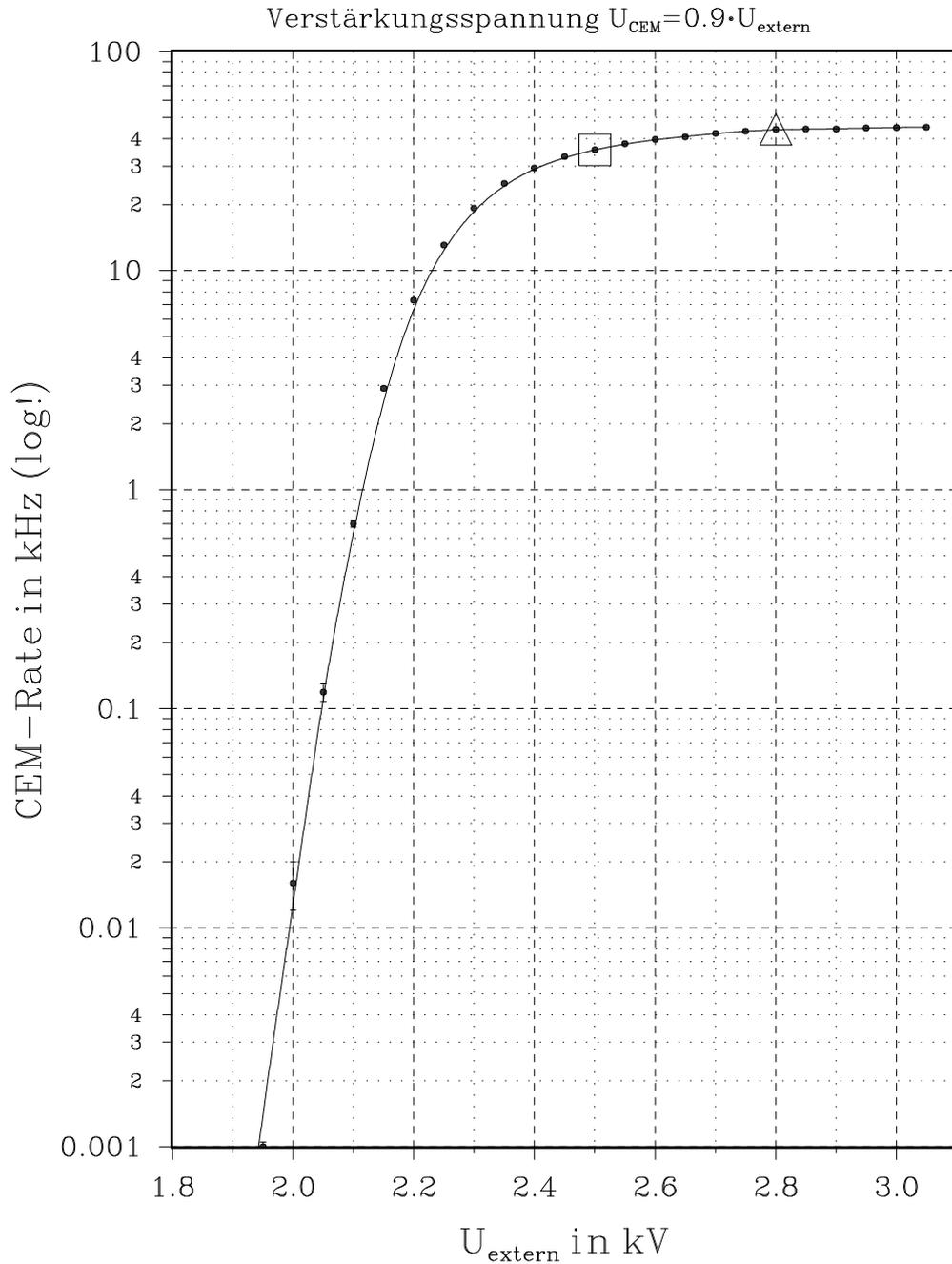


Abb. 16: Zählrate des CEM bei Einstrahlung von Photonen mit $E_\gamma = 4.6$ keV Energie, in Abhängigkeit der externen Hochspannung. Diese wird intern noch einmal mit 10:1 geteilt, um von der Elektronenenergie unabhängigen Nachweis (siehe Text) zu erreichen. Zwei verwendete Arbeitspunkte sind als Symbole bei $U = 2.5$ kV und $U = 2.8$ kV eingezeichnet.

2.5.3 Der Zusammenhang zwischen ELSA-Strom und Photonenfluß

Die Transmission des Lichts vom Beschleuniger zum Ionisationsraum des Flugzeitspektrometers ist nicht nur vom Zusammenwirken der oben beschriebenen festen Komponenten des Experiments:

- Kollimatoren,
- Fenster,
- Blenden,
- und Monochromator

bestimmt, sondern veränderlich mit dem Strom der umlaufenden Elektronen. Oberhalb von Ringströmen $i_{ELSA} \approx 30$ mA ist der Zusammenhang zwischen Ringstrom und monochromatischer Photonenintensität unklar (Abb. 19). Dies wird noch drastischer deutlich, wenn man die Photonenenergie variiert. Als ein Beispiel für die Komplexität der „Lichtverhältnisse“ hinter dem Monochromator sei auf Abb. 22 verwiesen.

In Abb. 18 ist hervorragende Übereinstimmung zwischen den Detektorsignalen unterschiedlicher Art gegeben. Das „**ELSA**-Signal“ beschreibt nur einen Teil der im monochromatischen Lichte vorhandenen Aspekte. Die typischen Datenraten der im Experiment verwendeten Detektoren sind in Abb. 17 abzulesen. Auch bei Zählraten der Größenordnung MHz, im Bild mit „Penning An“ gekennzeichneten Bereich, liefern die Mikrokanalplatten eine konstante Rate. Die Dunkelrate der Ionen kann als lichtunabhängig angenommen werden, da ohne Gastarget kein Unterschied zwischen offenem bzw. geschlossenem Strahlverschluß zu erkennen ist. Dies ist beim Elektronensignal anders. Hier ist die Ursache in aus den Spektrometerwänden durch Streulicht ausgelösten Elektronen zu suchen. Deren Rate liegt je nach Güte der optischen Justierung im Bereich zwischen (20 – 200) Hz, was mit „echten“ Raten von ca. 5 kHz zu vergleichen ist.

Der Zusammenhang zwischen dem Strom der umlaufenden Elektronen und der Intensität des monochromatischen Lichtes ist aber nur bei ELSA-Strömen kleiner 30 mA einigermaßen linear. Im Bereich höherer Ringströme gibt es Bereiche, in denen die Intensität des Lichtes konstant bleibt, während der Elektronenstrom abnimmt. Beispielhaft ist dies in Abb. 19 dargestellt. Dort ist die Zählrate der Ionisationskammer (Stickstoff) gegen den ELSA-Strom aufgetragen. Eine lineare Anpassung an das Signal im Bereich von 15 mA bis 25 mA ist als Gerade eingezeichnet. Die Abschnitte mit $\partial_i \nu_{det}(i) \approx 0$ sind als waagerechte dicke Balken dargestellt. Die Dauer dieser Phasen ist im Bereich von fünf Minuten. Vermutet wird, daß jedenfalls auch der Durchmesser des Strahles in ELSA (unstetig) abnimmt.

Die Abb. 20 zeigt die vier verschiedenen Monitorsignale in Abhängigkeit vom ELSA-Strom. Es liegt auch im Bereich mit ELSA-Strömen < 25 mA keine direkte Proportionalität zwischen dem Ringstrom der umlaufenden Elektronen einerseits und dem monochromatischen Photonenfluß andererseits vor. Die stärkeren Schwankungen des Channeltron-Signals sind durch dessen geringere Zählrate plausibel. Auch die Signale der Vielkanalplattendetektoren im Spektrometer sind als Funktion des ELSA-Stroms ausgewertet worden (Abb. 21, 20). Hier wurde erst nach einer lokalen Glättung, welche die kleinen Zählraten ausgleichen soll, eine Gerade angepaßt. Es ist jeder neunte Meßpunkt dargestellt.

Von Füllung zu Füllung variieren die Monitorsignale ebenfalls nicht reproduzierbar (Abb. 21). Hier liegt der Verdacht vor, daß dies mit einer Variation der Maschinenparameter begründet werden kann, die unterschiedliche Lagen des Elektronenstrahls zweier Füllungen bedingen und so eine effektive Verschiebung der eingestellten monochromatischen Photonenenergie über Veränderung des Bragg-Winkels bewirken. Das Auftreten solcher Verschiebungen in der Energie des monochromatisierten Lichtes um (maximal) etwa 3 eV (!) zwischen zwei Speicherringfüllungen wurde bereits von [Breinig 80] nachgewiesen.

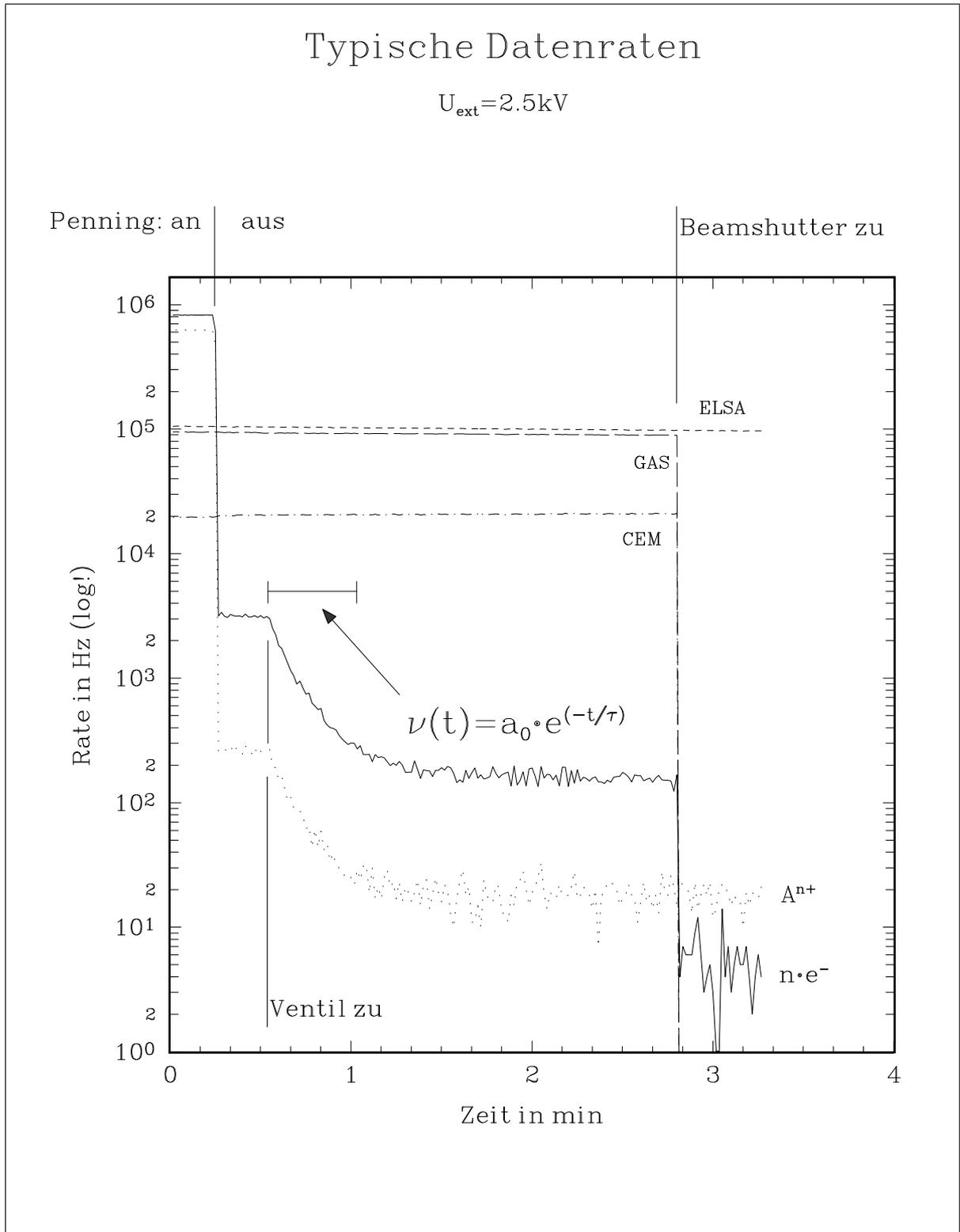


Abb. 17: Typische Datenraten der verwendeten Detektorsysteme. Man beachte die logarithmische Ordinate! Näheres zur Unterscheidung der ausgezeichneten Bereiche siehe Text.

Gemeinsame Messungen mit der Beschleunigermannschaft, die die genauere Ursache dieser Effekte feststellen sollen sind in naher Zukunft geplant.

Zeitabhängigkeit des Photonenflusses

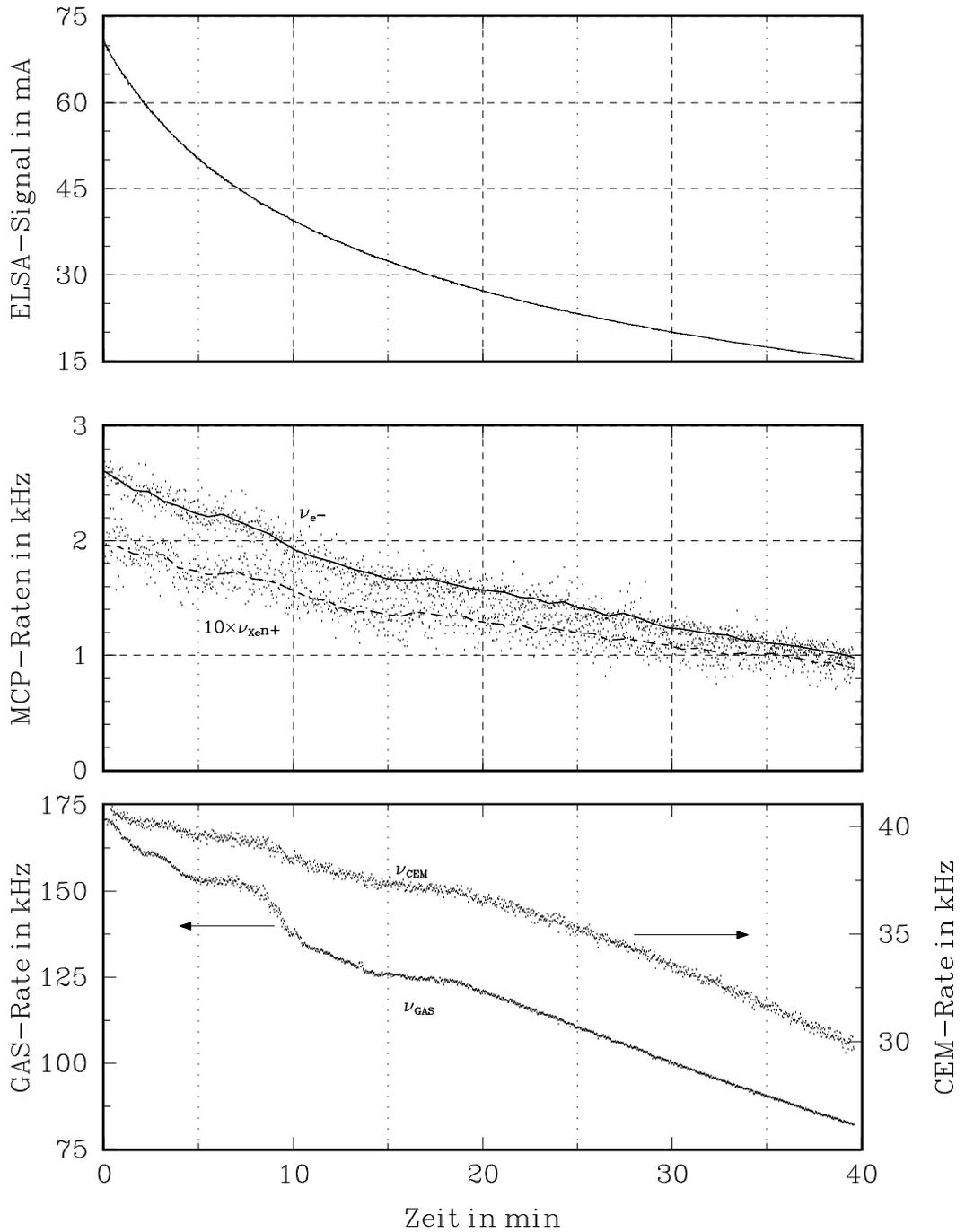


Abb. 18: Eine ELSA-Füllung. Oben: ELSA-Signal. Mitte: Die nicht-koinzidenten Elektronen- und Ionen-detektorsignale. Unten: Die Monitorsignale von Ionisationskammer und CEM

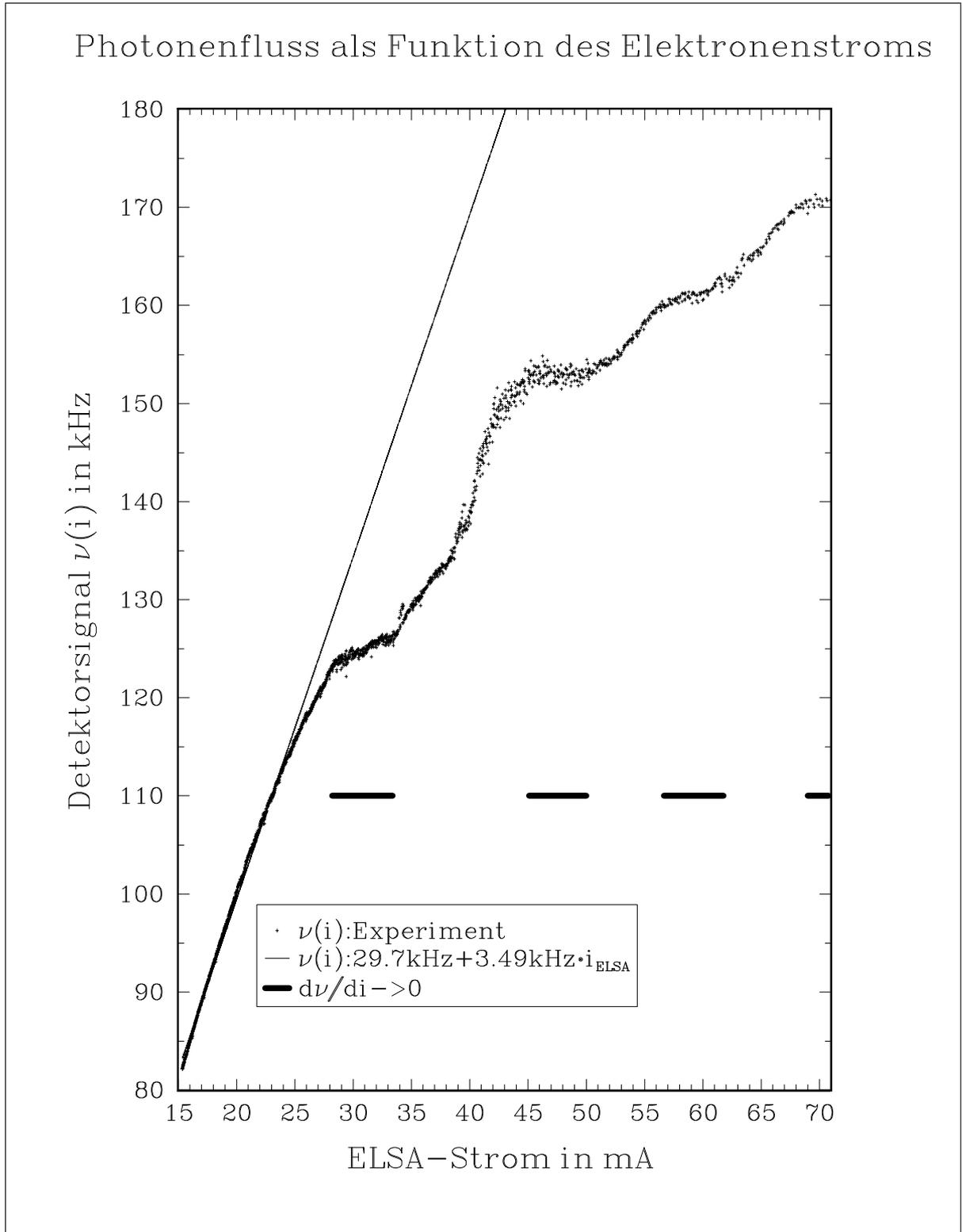


Abb. 19: Der als Funktion des ELSA-Stroms während einer ELSA-Füllung gemessene Photonenfluß (Detektorsignal). Die Energie der Photonen war auf $h\nu = 4.692\text{ keV}$ eingestellt. Der Ringstrom betrug nach der Freigabe 70 mA . Binnen ca. 40 min fiel er auf 15 mA ab. Zu der Anpassung siehe Text. Der einigermaßen lineare Zusammenhang zwischen Detektorsignal ν_{det} und Ringstrom i setzt bei $i \leq 28\text{ mA}$ ein. Das entspricht auf der Zeitskala 20 min nach Freigabe, also nach der Hälfte der Dauer einer Füllung.

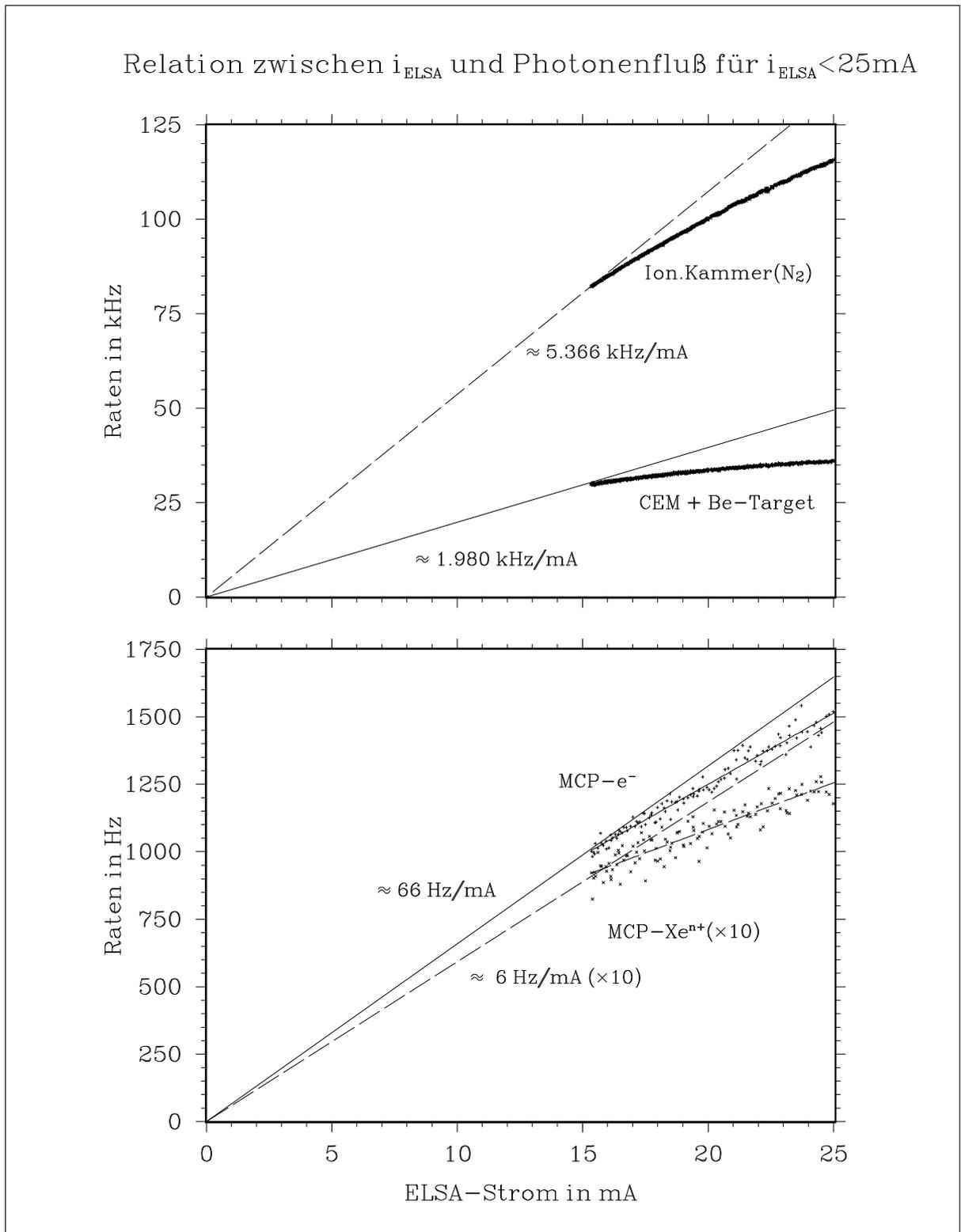


Abb. 20: Ringstrom und monochromatische Intensität im niederstromigen Bereich einer ELSA-Füllung. Oben: CEM- und Stickstoffkammersignal. Unten: Ionen- und Elektronendetektor; Alle in Abhängigkeit des Ringstromes in ELSA. Die Geraden, deren Steigung im Bild angegeben ist, entsprechen direkter Proportionalität.

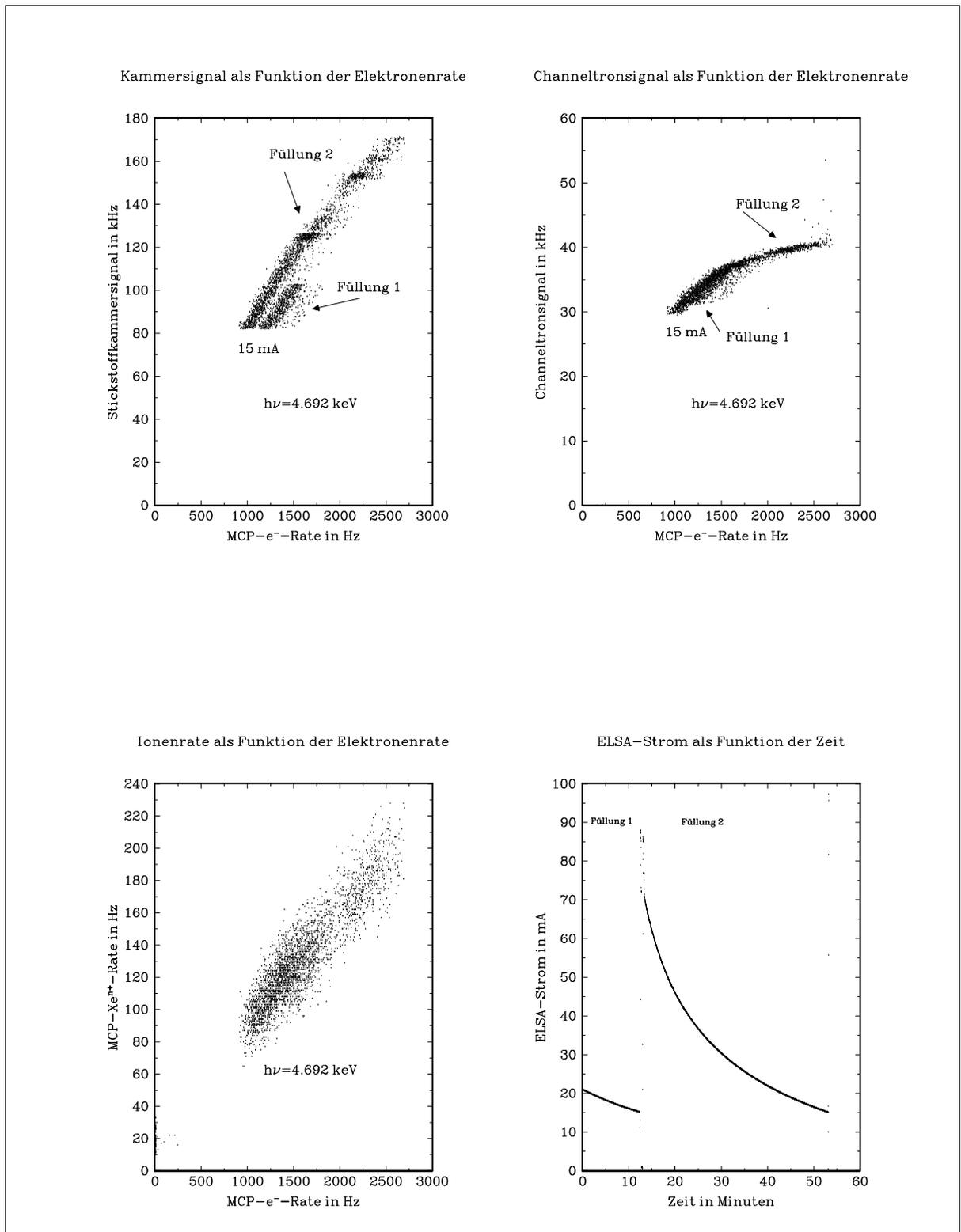


Abb. 21: Ringstrom und monochromatische Intensität während zweier ELSA-Füllungen. Oben links: Stickstoffkammer-Signal, oben rechts: CEM-Signal, unten links: MCP-Ionen-Signal, alle in Abhängigkeit des MCP-Elektronen-Signals. Unten rechts ist der ELSA-Strom als Funktion der Zeit aufgetragen.

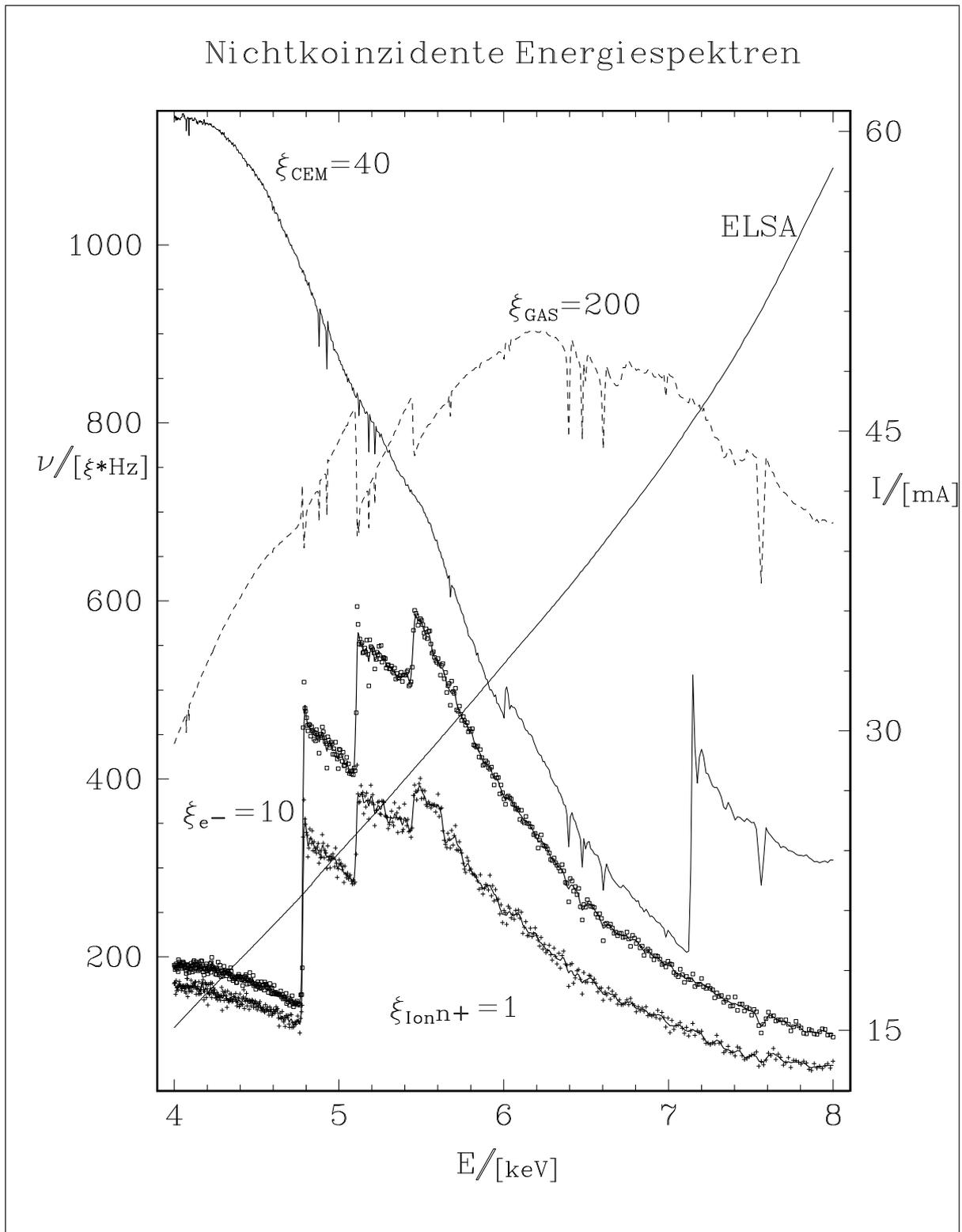


Abb. 22: Absorption und Transmission hinter dem Monochromator am Strahlrohr **BN0**. Die rechte Skala bezieht sich auf den mittleren umlaufenden Elektronen-Strom in **ELSA**. Hier sieht man so ziemlich alles, was den Experimentator ärgert: Glitches (Umweganregungen der $\text{Ge}_{(220)}$ -Kristalle), unerwünschte Kanten: Fe-K, Co-K, etc.

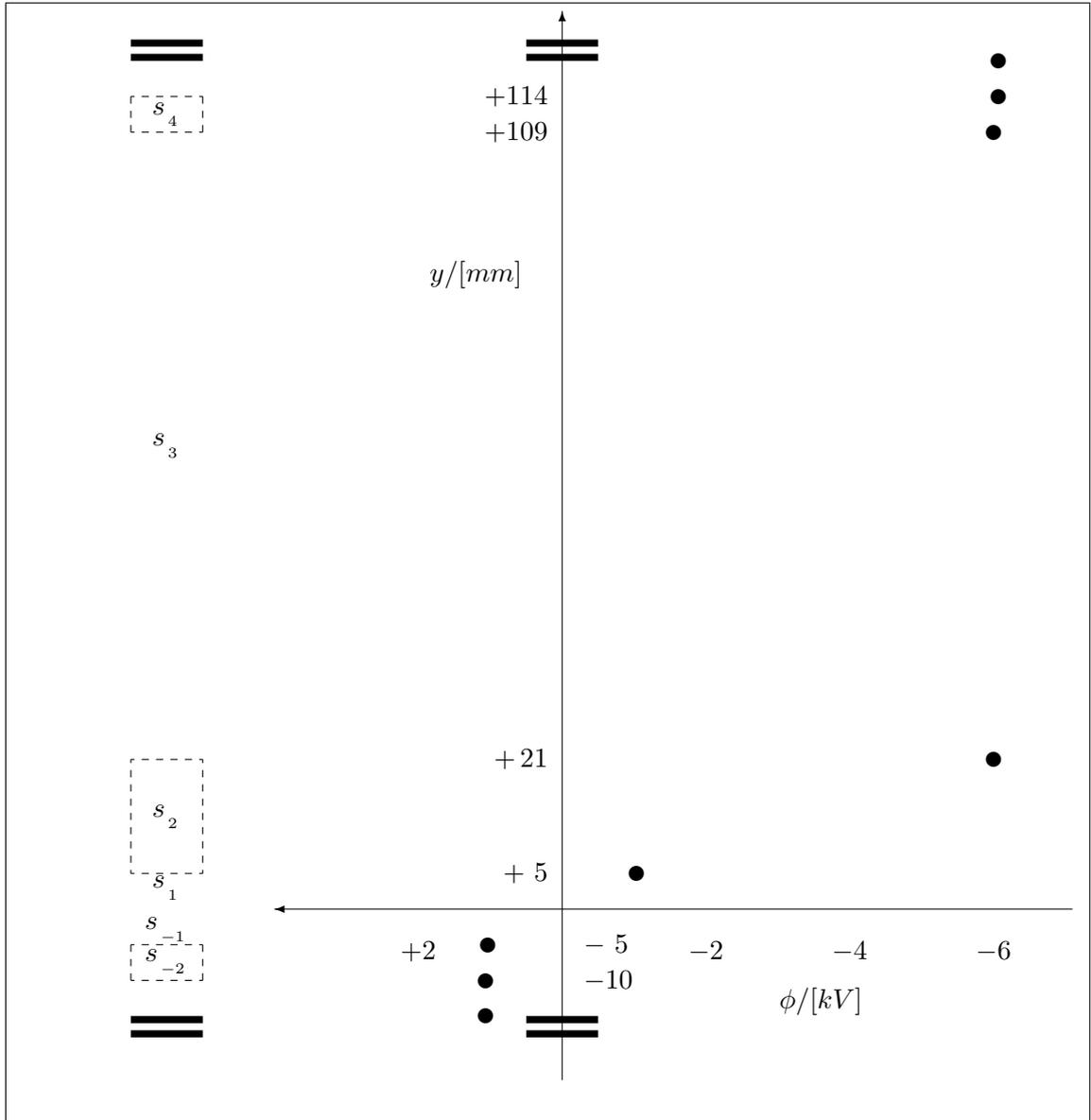


Abb. 23: Das eindimensionale Modell des Flugzeitspektrometers mit den im Text verwendeten Bezeichnungen. Hierbei sind mit N_i und ϕ_i die Orte der Netze respektive der Potentiale bezeichnet. Die $s_{\pm i}$ repräsentieren die betrachteten Strecken (siehe Text). Der Abbildungsmaßstab in der y -Koordinate ist 1:1. Im rechten Teil der Zeichnung ist ein typischer Spannungsverlauf dargestellt.

3 Modell des Flugzeitspektrometers

Zwei Beschleunigungsstrecken (s_1, s_2) geeigneter Dimensionierung erlauben (nahezu) beliebige Ortslage des Zeitfokus. Annahme: homogene elektrische Felder, realisiert durch ebene Netze auf geeigneten elektrischen Potentialen. Die Flugzeit t ist für statische Felder immer proportional $\sqrt{m/q}$, hängt von der Koordinate entlang der Spektrometerachse ab, soll aber von den transversalen Koordinaten unabhängig sein. Die Abhängigkeit von der longitudinalen Startkoordinate im ersten Beschleunigungsfeld wird durch Fokussierung in erster Näherung eliminiert.

In Anlehnung an die Originalarbeit von Wiley und McLaren [Wiley 55] wird die Flugzeitskala in einem eindimensionalen Modell des Spektrometers auf den Quotienten aus Masse und Ladung umgerechnet. Der Durchgriff der Felder durch die Netze wird also nicht berücksichtigt. Die Nota-

tion weicht von der bei [Wiley 55] verwendeten ab, da die im nächsten Abschnitt beschriebenen zweidimensionalen Modellrechnungen das Potential am Sollentstehungsort $x = 0$ und in seiner Umgebung direkt liefern und so der Zugang über die aus den Netzspannungen abgeleiteten Feldstärken verfeinert werden kann. Zur alternativen Formulierung siehe [Wiley 55] und speziell für dieses Spektrometer [Scherer 89].

3.1 Eindimensionales Modell

Die in der folgenden Darstellung benutzten Größen und deren Bezeichnungen sind in Abb. 23 erläutert. Die Flugzeit eines am Sollentstehungsort $x = 0$ ionisierten Atoms berechnet sich bei festen Strecken s_i und konstanten angelegten elektrischen Potentialen ϕ_i aus der Summe der für die Teilstrecken zu berechnenden Terme. Das Prinzip wurde bereits in Kapitel 2.4 dargestellt. Die konkrete Berechnung steht bei [Scherer 89], wo auch die Berechnung der zu verwendenden Potentiale aus den Fokussierungsbedingungen für Variation des Ortes und der Energie im eindimensionalen Modell und in der Notation von [Wiley 55] zu finden sind.

Vernachlässigt man die thermische Energie des Atoms zum Zeitpunkt der Ionisation, so erhält man aus Gleichung (13) für die Flugzeit des Ions mit Masse m und Ladung $q = n \cdot e_0$ für die (festen) Teilbereiche s_1 , s_2 , s_3 und s_4 :

$$t_1(m, q) = \sqrt{\left(\frac{2 \cdot m}{q}\right)} \cdot s_1 \cdot \frac{1}{\sqrt{\phi_{10}}} \quad (26)$$

$$t_2(m, q) = \sqrt{\left(\frac{2 \cdot m}{q}\right)} \cdot s_2 \cdot \frac{\sqrt{\phi_{20}} - \sqrt{\phi_{10}}}{\phi_{21}} \quad (27)$$

$$t_3(m, q) = \sqrt{\left(\frac{2 \cdot m}{q}\right)} \cdot \frac{s_3}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{\phi_{20}}} \quad (28)$$

$$t_4(m, q) = \sqrt{\left(\frac{2 \cdot m}{q}\right)} \cdot s_4 \cdot \frac{\sqrt{\phi_{40}} - \sqrt{\phi_{20}}}{\phi_{43}} \quad (29)$$

Die Gleichung für die Flugzeit, die bei der Skalierung der Flugzeitspektren und als Referenz in den Modellrechnungen benutzt wurde, lautet somit in der in Abb. 23 beschriebenen Notation:

$$t = \sqrt{\left(\frac{2 \cdot m}{q}\right)} \times \left\{ s_1 \cdot \frac{1}{\sqrt{\phi_{10}}} + s_2 \cdot \frac{\sqrt{\phi_{20}} - \sqrt{\phi_{10}}}{\phi_{21}} + \frac{s_3}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{\phi_{20}}} + s_4 \cdot \frac{\sqrt{\phi_{40}} - \sqrt{\phi_{20}}}{\phi_{43}} \right\}, \quad (30)$$

wobei die Potentialdifferenzen ϕ_{ij} gemäß $\phi_{ij} \equiv \phi_i - \phi_j$ definiert sind: Die festen Werte für die Strecken und typische Potentialdifferenzen sind in den Tabellen 4 und 5 aufgelistet. Die so be-

s_1	s_2	s_3	s_4
0.005 m	0.016 m	0.088 m	0.005 m

Tabelle 4: Längen der Teilstrecken.

ϕ_{10}	ϕ_{20}	ϕ_{21}	ϕ_{40}	ϕ_{43}
-1012 V	-6000 V	-5018 V	-6030 V	-30 V

Tabelle 5: Typische Potentialdifferenzen.

rechnete Masse–Ladungs–Skala stimmt gut mit den empirischen Lagen der bekannten Masselinien Überein.

Bezieht man auch die thermische Energie W_0 der Atome vor der Ionisation mit Impuls parallel bzw. antiparallel zur Flugrichtung der Ionen ein, so erhält man (in einer Dimension !):

$$t = \sqrt{\left(\frac{2 \cdot m}{q}\right)} \times \sum_{i=1}^4 t_i$$

$$t_1 = s_1 \cdot \frac{\sqrt{\varepsilon + \phi_{10}} \pm \sqrt{\varepsilon}}{\phi_{10}} \quad (31)$$

$$t_2 = s_2 \cdot \frac{\sqrt{\varepsilon + \phi_{20}} - \sqrt{\varepsilon + \phi_{10}}}{\phi_{21}} \quad (32)$$

$$t_3 = \frac{s_3}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{\varepsilon + \phi_{20}}} \quad (33)$$

$$t_4 = s_4 \cdot \frac{\sqrt{\varepsilon + \phi_{40}} - \sqrt{\varepsilon + \phi_{20}}}{\phi_{43}} \quad (34)$$

Hierbei bezeichnet $\varepsilon \equiv W_0/q$ die durch die ionische Ladung dividierte thermische Anfangsenergie.

3.2 Zweidimensionales Modell

Der Durchgriff der elektrischen Felder durch die spannungsführenden Netze führt zu Abweichungen der wahren Feldstärken von den angelegten, hat also Einfluß auf die Flugzeiten. Ferner bewirken die inhomogenen Felder in den Maschen die Streuung der Ionen, was in die geometrische Detektorakzeptanz eingeht. Um ein Maß für den Durchgriff und die Streuung zu finden, wurde das Programmpaket TOFMODEL konzipiert und geschrieben. Dieses Werkzeug realisiert das Punktgittermodell eines zentralen Längsschnittes durch das Spektrometer auf einem IBM-fähigen Rechenwerk. Es läuft auf einem IBM-kompatiblen PC mit 80486-er Prozessor und 16 MegaByte Hauptspeicher unter OS/2. Die Verwendung der Programmiersprache C zur Erstellung des Programmpaketes stellt die Übertragbarkeit auf andere Rechner wie z.B. Workstations und andere Betriebssysteme wie Unix oder DOS (mit einem Extender versehen) sicher. Unter OS/2 kann der Rechner genutzt werden, während das Programm im Hintergrund arbeitet, so daß Rechenzeit zu einem relativ unkritischen Kriterium wird, im Gegensatz zu Vorversionen, die auf der VAX unter VMS im Stapelbetrieb bzw. auf demselben 486-er unter einem DOS-Extender (EMX) liefen.

Auf dem Punktgitter dieses Längsschnittes können geometrische Veränderungen, Fehleinstellungen der Hochspannungen, die Maschengometrie der Netze etc. und deren Auswirkungen auf die Potentialverteilung simuliert und bewertet werden. Verglichen mit analytischen Abschätzungen hat die Berechnung auf dem Punktgitter mehrere Vorteile:

1. Die Berechnungen sind transparenter, da die Eingabe der Randbedingungen keiner asymptotischen bzw. bezüglich des Durchgriffs korrigierten Werte bedarf.
2. Da jede Lösung der hier zu verwendenden Laplace-Gleichung (s.u.) eine harmonische Funktion ist, kann die gewählte Ortsauflösung bei Bedarf durch einfache Interpolation vergrößert werden.
3. Nach Konvergenz des Modells (s.u.) liegt eine zweidimensionale Matrix von Potentialwerten mit einer Ortsauflösung von ca. 30μ vor. Diese ermöglicht die Berechnung von experimentell im Prinzip zugänglichen Größen, wie z.B. der Flugzeitverbreiterung der (atomaren) Massenlinien bei endlicher Ausdehnung des Quellvolumens.
4. Auch liefert diese Wertematrix die Grundlage für spektrometerspezifische Teilchenverfolgungsrechnungen zwecks Ermittlung der Ortsverteilung der an Netz 2 gestreuten Ionen auf die Detektorebene in sehr naheliegender Weise. Dies ist für die Spektroskopie an Molekülen wesentlich, da nur bei vollständiger geometrischer Nachweiswahrscheinlichkeit eine quantitative Auswertung der beobachteten „Fragmentationsmuster“ überhaupt möglich ist. Die Streuung der Ionen an Netz 2 ist der maximale Beitrag zur Gesamtstreuung auf ihrem Weg zur Detektorebene.

Zum folgenden siehe auch [Schmid 87], [Toernig 88] oder [Toernig 90]. Da der Verlauf statischer elektrischer Felder im Vakuum modelliert werden soll, gilt es die Laplace-Gleichung mit Dirichlet-Randbedingungen zu lösen. Also: $\Delta\Phi = 0$, wobei $\Phi(Rand)$ fest und stetig (Dirichlet). Aus diesem Potentialfeld Φ kann dann das elektrische Feld \vec{E} aus $\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi$ berechnet werden.

Die zweidimensionale Laplace-Gleichung in kartesischen Koordinaten lautet

$$\Delta\Phi(x, y) = (\partial_x^2 + \partial_y^2) \Phi(x, y). \quad (35)$$

Die Diskretisierung der Differentialoperatoren ∂_x^2 und ∂_y^2 läßt sich aus den folgenden Taylorentwicklungen gewinnen:

$$\xi(\kappa \pm a_0) = \xi(\kappa) \pm a_0 \cdot \xi'(\kappa) + \frac{a_0^2}{2} \cdot \xi''(\kappa) \pm \dots \quad (36)$$

Bildet man die Summe, erhält man eine Drei-Punkte-Form für die zweite Ableitung, nämlich:

$$\xi''(\kappa) = \frac{1}{a_0^2} \cdot (\xi(\kappa + a_0) + \xi(\kappa - a_0) - 2 \cdot \xi(\kappa)) + \mathcal{O}(a_0^2). \quad (37)$$

Der Fehler der Diskretisierung ist die Summe der vernachlässigten Restglieder

$$\mathcal{O}(a_0^2) = -\frac{a_0^2}{12} \cdot \xi^{(4)}(\kappa) + \dots \quad (38)$$

Zur numerischen Lösung der Laplace-Gleichung wurde nun die Funktion $\Phi(x, y)$ auf einem zweidimensionalen Punktgitter mit konstantem Gitterabstand $a_0 = 31.25 \mu$ approximiert, also statt der Funktion selbst die Matrix $(\Phi_{i,k})$ der Funktionswerte $\Phi_{i,k} = \Phi(x_i, y_k)$ mit $x_i = i \cdot a_0$ und $y_k = k \cdot a_0$ betrachtet. Nach Vernachlässigung des Rest-Terms $\mathcal{O}(a_0^2)$ und Multiplikation mit a_0^2 erhält man die diskrete zweidimensionale Laplace-Gleichung in kartesischen Koordinaten:

$$\Delta\Phi = (\Phi_{i+1,k} + \Phi_{i-1,k} + \Phi_{i,k+1} + \Phi_{i,k-1} - 4 \cdot \Phi_{i,k}) = 0, \quad (39)$$

die hier verwendet wurde.

Zur Motivation der Wahl des numerischen Lösungsverfahrens für unser Modell seien hier die Randbedingungen dargestellt: Wie in Abb. 24 zu sehen, wird das Gebiet in Flugrichtung der Ionen durch das Netz abgeschlossen, das auf dem Potential ϕ_2 liegt und welches nach Abschätzung der vorhandenen typischen Feldgradienten einen vernachlässigbaren Durchgriff gestattet und deshalb als „ebene Äquipotentialfläche“ angenommen wird. In der Gegenrichtung wird am Ort des Netzes N_{-2} , an dem das Potential φ_{-2} anliegt, eine ebensolche Randbedingung gewählt, da der Durchgriff durch Netz N_{-2} die Quellregion erst in zweiter Näherung beeinflusst. Die Randbedingung auf beiden Seiten längs der Spektrometerachse wird als „Isolator“ angenommen, also linear interpoliert. Somit ist das Potentialproblem eindeutig lösbar.

Die Gitterkonstante a_0 ist die kleinste auflösbare Länge endlicher Größe, so daß die minimale Repräsentation einer inneren (zweidimensionalen) Struktur aus 2×2 Gitterpunkten bestehen muß. Daraus folgen die Gebietsgrenzen. Als maximale Breite x_{max} sollen $37.5 \text{ mm} = 1200 a_0$ berücksichtigt werden, also $x_{max} = 1200$. Die maximale Höhe y_{max} ergibt sich zu $y_{max} = 1056$, da der Abstand zwischen Gegenfeldnetz und Netz 3 im neuen Spektrometer 33 mm und im alten Spektrometer 25 mm beträgt. Damit sind rund 1.3 Millionen lineare Gleichungen (39) zu lösen, die aber nur über die jeweils nächsten Nachbarn miteinander gekoppelt sind.

Eine robuste und schnelle Methode, ein solches System linearer Gleichungen zu lösen, ist das Verfahren der sukzessiven Überrelaxation, im folgenden in Anlehnung an die angelsächsische Sprache SOR abgekürzt ([Vetterling 89], [Schmid 87] und [Toernig 88]).

Das Verfahren läßt sich in drei Schritte unterteilen. Der erste dient allein der Initialisierung, während die beiden anderen Schritte iteriert werden. Kurz: Initialisieren – Neuberechnung – Konvergenztest, oder genauer:

1. Im Initialisierungsschritt wird eine beliebige glatte Potentialbelegung des Gitters vorgenommen. Die Güte dieser nullten Näherung beeinflusst lediglich die Konvergenzgeschwindigkeit, nicht aber die Konfiguration, in welche die Potentialverteilung konvergiert.
2. Im zweiten Schritt wird sukzessive und in beliebiger Reihenfolge auf jeden Punkt des Gitters die diskretisierte Laplace-Gleichung (39) angewendet. Aus den so ermittelten Zwischenwerten

$$U_{i,k} = \frac{1}{4} \cdot (\Phi_{i+1,k} + \Phi_{i-1,k} + \Phi_{i,k+1} + \Phi_{i,k-1}), \quad (40)$$

und den alten Potentialwerten werden die neuen Potentialwerte mittels

$$\Phi_{i,k}^{neu} = \Phi_{i,k}^{alt} + \omega \cdot (U_{i,k} - \Phi_{i,k}^{alt}) \quad (41)$$

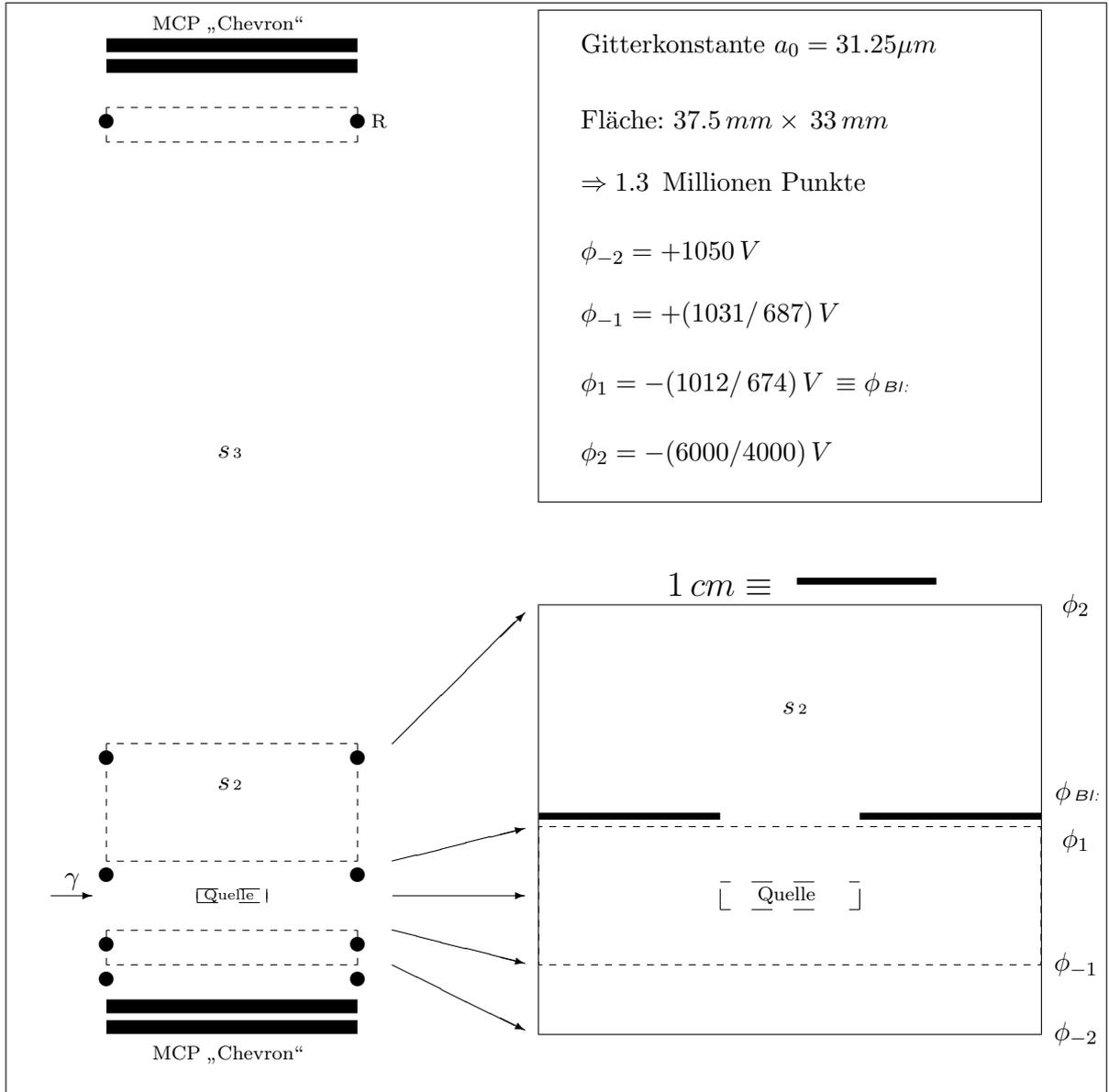


Abb. 24: Das zweidimensionale Modell des Flugzeitspektrometers mit typischen Werten. Die Ionen driften hier von unten nach oben. Die Blende (Gesichtsfeldblende des Ionendetektors) hat eine Höhe von 500μ und ist in der Regel mit Netz N_{-1} kurzgeschlossen. Die Transmission der Netze N_{-1} und N_1 ist frei wählbar. Die Projektion der $10 mm \times 2 mm$ messenden Blende für das einfallende Licht auf den Längsschnitt ist mit „Quelle“ bezeichnet.

berechnet. Der Parameter ω beeinflusst die Relaxation und muß in der Regel für jede Geometrie neu optimiert werden. Es gilt immer: $1 \leq \omega < 2$. Dies ist der wesentliche Teil des Algorithmus [Vetterling 89], weshalb unten noch einmal auf ihn eingegangen wird.

3. Der dritte Schritt ist der Test auf Konvergenz, dessen spezielle Form von der Norm abhängt, in der man die Abweichungen messen will. Das Programm SORMODEL verwendet die Maximum-Norm, d.h. die Rechnung wird beendet, wenn für ein festes ε von z.B. $\varepsilon = 10^{-5}$ und alle i, k einer Iteration gilt:

$$\|\Phi_{i,k}^{alt} - \Phi_{i,k}^{neu}\| \leq \varepsilon \cdot \Phi_{i,k}^{neu} . \quad (42)$$

Der Unterschied zum einfachen Gauß-Seidel-Verfahren besteht in der freien Wahl des Relaxationsparameters ω , der hier zwischen 1 und 2 liegen kann. Im Grenzfall $\omega = 1$ heißt der Algorithmus

Gauß-Seidel-Iteration. Im Fall von $\omega \geq 2$ divergiert das Verfahren stark oszillierend. Die dynamische Neuberechnung von ω nach jedem Iterationsschritt, Tschebyscheff-Beschleunigung genannt [Vetterling 89], ist eine weitere Option des Programms SORMODEL. Diese Berechnung benutzt den Jacobi-Radius ρ_{Jacobi}^2 der Gleichungs-Matrix, der mit Geometrie und Metrik des Gitters abgeschätzt werden kann, sowie das ω der vorherigen Iteration. Hier wird durch eine einfache Skalierung der Jacobi-Radius zu

$$\rho_{Jacobi}^2 = \frac{\cos\left(\frac{\pi}{x_{max}}\right) + \left(\frac{\Delta y}{\Delta x}\right) \cdot \cos\left(\frac{\pi}{y_{max}}\right)}{1 + \left(\frac{\Delta y}{\Delta x}\right)} \quad (43)$$

abgeschätzt, wobei $\Delta x = \Delta y \stackrel{!}{=} 1$ gilt und x_{max} sowie y_{max} die Ausdehnung des Gitters festlegen. Mit diesem gitterspezifischen Parameter wird eine Folge für $\omega^{(i)}$ konstruiert [Vetterling 89]

$$\omega^{(0)} = 1 \quad (44)$$

$$\omega^{(\frac{1}{2})} = \frac{1}{1 - \rho_{Jacobi}^2/2} \quad (45)$$

$$\omega^{(i)} = \frac{1}{1 - \rho_{Jacobi}^2 \cdot \omega^{(i-1)}/4} \quad (46)$$

die für jeden Halbschritt durch das Gitter das optimale ω approximiert. Zu diesem Zwecke wird das Gitter in zwei Teile zerlegt. Beim einen ist die Indexsumme gerade, beim anderen ungerade („odd-even-ordering“).

Bei Hochspannungen von betragsmäßig maximal $|U_3| = 7 \text{ kV}$ wird der numerische Abbruchfehler \mathcal{O}_{num} absolut zu:

$$\|(\varepsilon \cdot \Phi)\|_{max} \approx 10^{-5} \cdot 7 \text{ kV} = 70 \text{ mV} \quad (47)$$

Bei Potentialdifferenzen in der Quellregion von bis zu $\Delta\Phi \approx 700 \text{ V}$ ist der numerische Abbruchfehler in Gebieten von $3 \text{ mm} \times 40 \text{ mm}$ ca. 0.01 %.

Der Diskretisierungsfehler $\mathcal{O}(a_0^2)$, der durch $a_0 = 31.25 \mu\text{m}$ festgelegt ist, liegt in der Größenordnung von $\mathcal{O}(a_0^2) \approx 10 \text{ \AA}$, ist also gegen den Abbruchfehler zu vernachlässigen.

Die festzuhaltenden Randpunkte (innere wie äußere) wie auch die zu relaxierenden Punkte sind in ein und derselben Matrix gespeichert. Das gespeicherte Modell enthält nämlich nicht die direkten, an den Hochspannungsgeräten einzustellenden Spannungen U_i , sondern linear transformierte Potentiale $\tilde{\Phi}_i \geq 0$. Unter der Voraussetzung, daß $U_3 < U_2 < U_1 < U_{-1}$ und $U_{-1} > 0$, lautet die Transformation:

$$U_i \rightarrow \tilde{\Phi}_i \equiv U_i - U_3 + 1V. \quad (48)$$

Die so bestimmten $\tilde{\Phi}_i$ sind echt größer Null. Zur Markierung eines Randpunktes \vec{r}_{Rand} wird nun $\tilde{\Phi}(\vec{r}_{Rand})$ mit -1 multipliziert. Dies reduziert den benötigten Speicherplatz, erhöht die mittlere Iterationsgeschwindigkeit des SOR-Algorithmus und vereinfacht die Implementation und Überprüfung selbst kompliziertester geometrischer Randbedingungen.

Die für die Rücktransformation notwendigen Daten finden wie auch den Status des Modells beschreibende Parameter Platz im Deskriptor der Modell-Dateien.

Die notwendige Gleichung für die Umrechnung eines Gittervektors \vec{r}_{Gitter} in einen Ortsvektor \vec{r} lautet:

$$\vec{r}_{Gitter} \rightarrow \vec{r} = a_0 \cdot \left\{ \begin{pmatrix} x \\ -y \end{pmatrix} - \vec{r}_0 \right\}, \quad (49)$$

mit $a_0 = 31.25 \mu\text{m}$ und

$$\vec{r}_0 = \begin{pmatrix} 599 \\ 671 \end{pmatrix}. \quad (50)$$

Verbesserte Versionen, an denen schon gearbeitet wird, werden die sukzessive Relaxation mit einem Mehrgitterverfahren kombinieren. Dieses bietet erstens weitere Konvergenzbeschleunigung und zweitens die Möglichkeit, lokal unterschiedliche räumliche Auflösung zu realisieren.

3.3 Ergebnisse der Rechnungen

Mit den erzeugten Programmen DEFMODEL, SORMODEL, RAYMODEL, TFOKUS und PXYMODEL wurden verschiedene geometrische und elektrostatische Randbedingungen modelliert und die resultierenden Potentialverteilungen zu Flugzeit-, Linienform- und Streuberechnungen genutzt. Das typische Konvergenzverhalten ist in Abb. 25 dargestellt. Das mit dem Subskript „sub“ bezeichnete Untergitter enthielt meist ein Viertel aller Punkte, zentriert um die Quellregion. Die hier beschriebenen Rechnungen wurden mit festem Relaxationsparameter $\omega = 1.9$ gemacht.

Die Abb. 26 zeigt die größere Homogenität der elektrischen Felder im Quellvolumen (definiert durch die Projektion der Blende) beim neuen Spektrometer (unten), verglichen mit dem alten (oben). Hierbei wurden lediglich die Länge der zweiten Beschleunigungsstrecke, und dem entsprechend die an die Netze angelegten Potentiale verändert. Die Maschenweite der Netze wurde im Modell des alten wie auch des neuen Spektrometers auf etwa 1.2 mm festgesetzt, bei Stegbreiten von $31.25 \mu\text{m}$. Dies sind für das alte Spektrometer typische Werte. Die um einen Faktor 10 verbesserte Homogenität der Potentiale im Quellvolumen, rührt also hier allein von der Abstandsänderung her. Die Durchbiegung der Potentiale auf der Sollentstehungshöhe vom linken bis zum rechten Rand der Blende beträgt im alten $\delta V = V_{Rand} - V_0 \approx 40 \text{ V}$, im neuen hingegen $\delta V \approx 4 \text{ V}$. Aus Speicherplatzgründen haben die den Konturdiagrammen zugrundeliegenden Stützpunkte einen Abstand von einem Millimeter zum jeweils nächsten Nachbarn, sodaß in der Darstellung Welligkeiten der Äquipotentiallinien auftreten, die allein von der Stützpunktauswahl (reguläres, quadratisches Netz) abhängen und bei geeigneter Verfeinerung verschwinden.

Auch wurde der Versuch unternommen, aus den relaxierten zweidimensionalen Potentialverteilungen Linienformen des Massenspektrums abzuleiten. Das Programm TFOKUS überprüft so die Orts- und Energiefokussierung gegebener Randbedingungen. Die Targetdichte in der Projektion auf die Blendenebene ist als Normal- bzw. als Gleichverteilung einsetzbar. Eine auch im eindimensionalen Modell zu berücksichtigende thermische Anfangsenergie der Atome ist bis zu 5 eV wählbar. Die Richtung der thermischen Anfangsimpulse wird einer Gleichverteilung zufällig entnommen.

Erste Resultate, die hier eine Xe^{4+} -Peakgruppe im kurzen Spektrometer mit der gemessenen vergleichen, sind in Abb. 27 dargestellt. Hierbei wurde eine feste Schlitzblende von 3 mm Höhe für das Licht angenommen, mit Mittelpunkt auf der Sollhöhe. Die Ortsverteilung des Gastargets war als Normalverteilung der Standardabweichung 10 mm, und der Lage des Schwerpunktes $x_0 \stackrel{!}{=} x_{Soll}$, so daß die effektive Gasdichte als eine an den Blendenrändern abgeschnittene Normalverteilung einging. Die thermische Anfangsenergie der Ionen wurde zu 0.025 eV angenommen. Die resultierenden Linien wurden durch das Integral geteilt, mit den aus der Karlsruher Isotopentafel entnommenen Häufigkeiten multipliziert, und auf das Maximum der gemessenen Verteilung skaliert. Bei der mit dem neuen Spektrometer gemessenen Verteilung der Isotope in der Xe^{4+} -Peakgruppe wurde zuvor der Untergrund subtrahiert (Das Minimum im betrachteten Flugzeitbereich).

Die Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment ist zufriedenstellend. Die restliche Linienverbreiterung ist auf elektronische Einflüsse zurückzuführen.

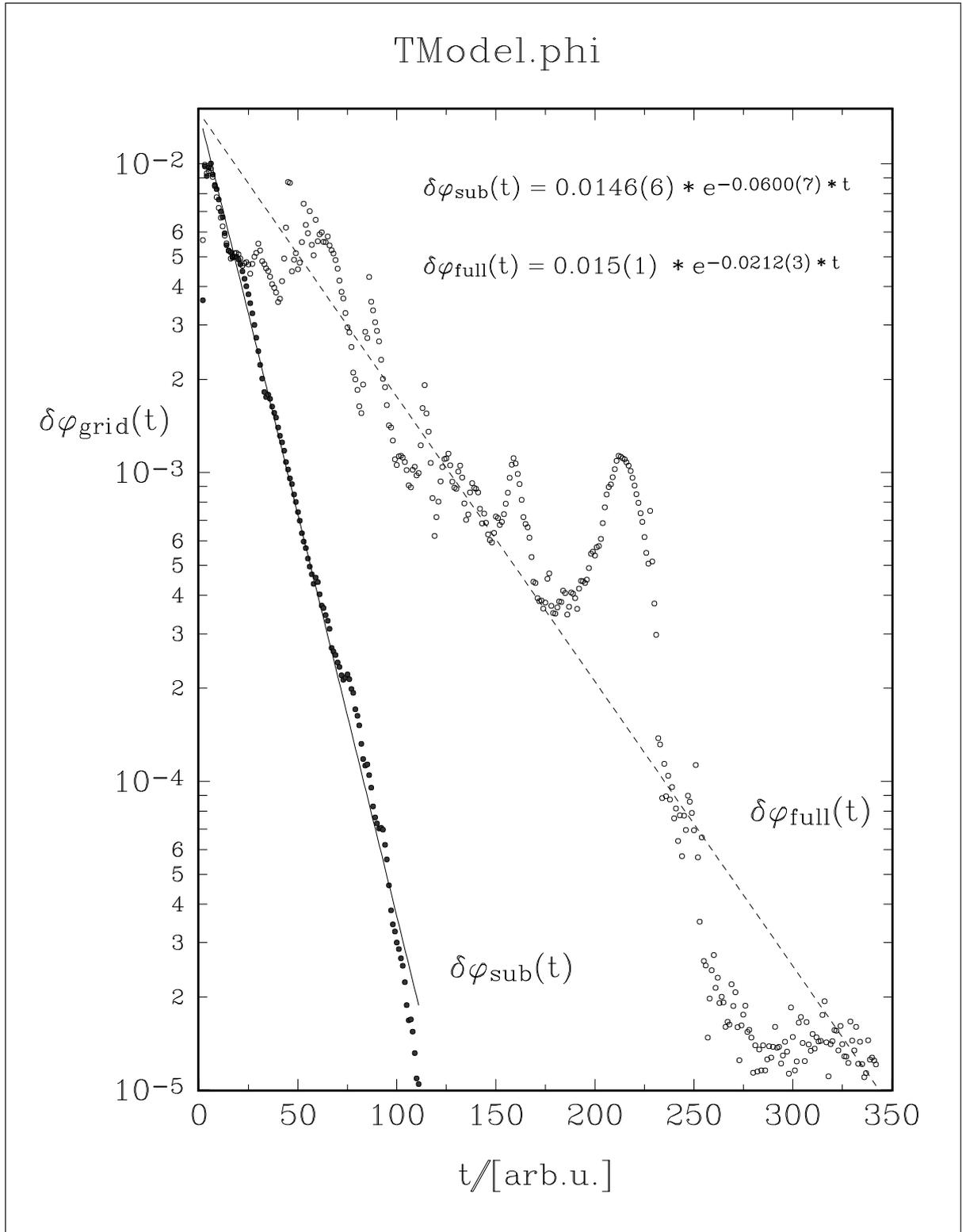


Abb. 25: Konvergenzverhalten des SOR-Algorithmus mit Untergitter und Tschebyscheff-Beschleunigung zur Verbesserung der Konvergenzgeschwindigkeit. Dargestellt ist hier die maximale relative Potentialänderung pro Gesamtschritt durch das Untergitter (Sub) bzw das volle Gitter (Full). Große Änderungen bedeuten natürlich nicht schwache Konvergenz! Die Genauigkeit ist durch die Verwendung des Datentyps von 4 Byte Gleitkommazahl (FLOAT) auf $\delta\phi = 10^{-6}$ begrenzt. Da aber die Laplace-Gleichung immer das Bestreben hat, eine glatte Lösung zu finden, ist dies ausreichend.

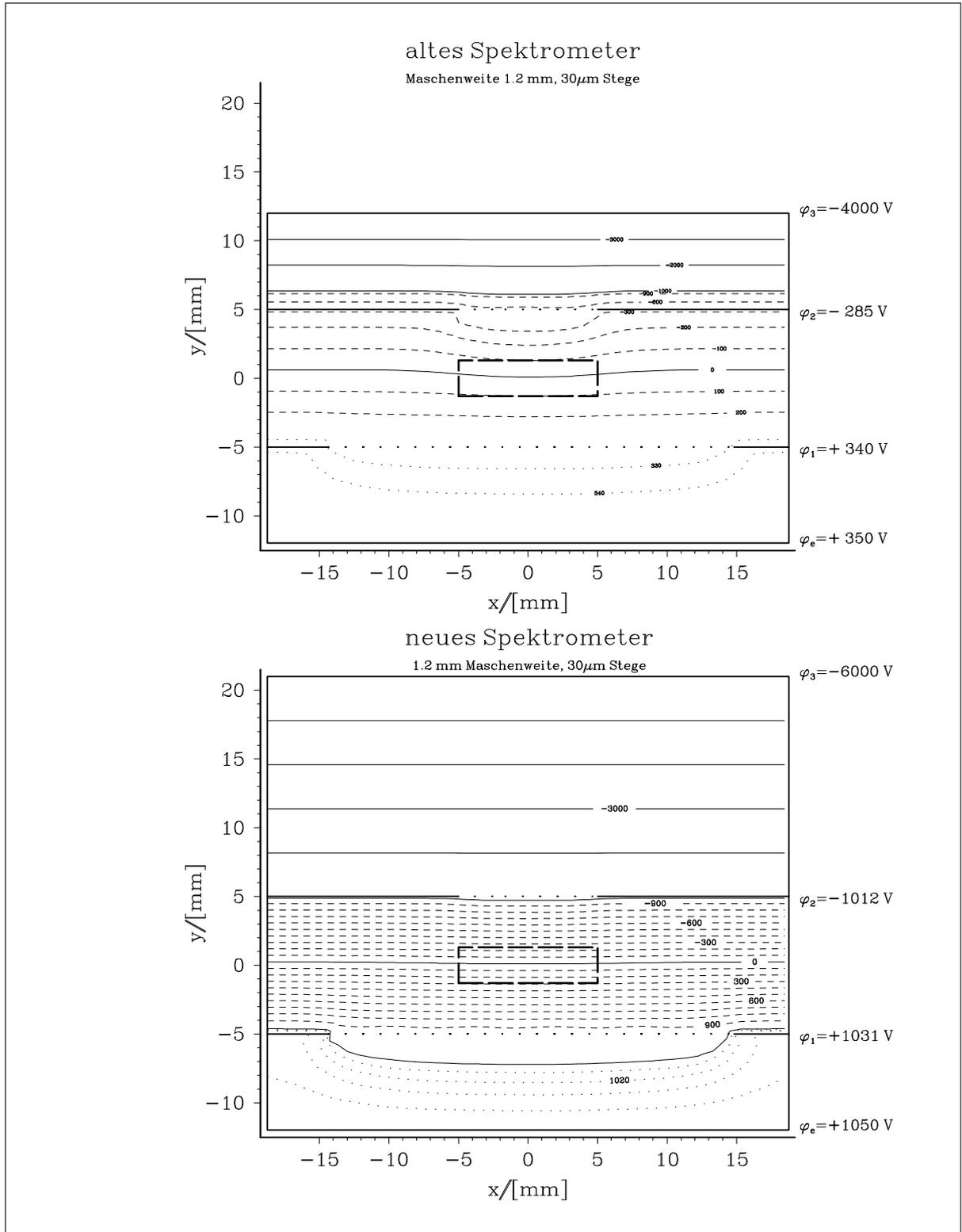


Abb. 26: Relaxierte elektrische Potentiale im Vergleich. Im oberen Teil (altes Spektrometer) sieht man, daß die Forderung nach minimalem Durchgriff der starken Felder zur Beschleunigung der Ionen durch Verwendung eines zweiten Netzes, welches die Quelle abschirmen sollte, nur unvollständig umgesetzt ist. Der Abstand mußte, wie im unteren Teil der Abb. (neues Spektrometer) verifiziert ist, verdoppelt werden, um das Prinzip der „doppelten Beschleunigungsstrecke“ optimal umzusetzen.

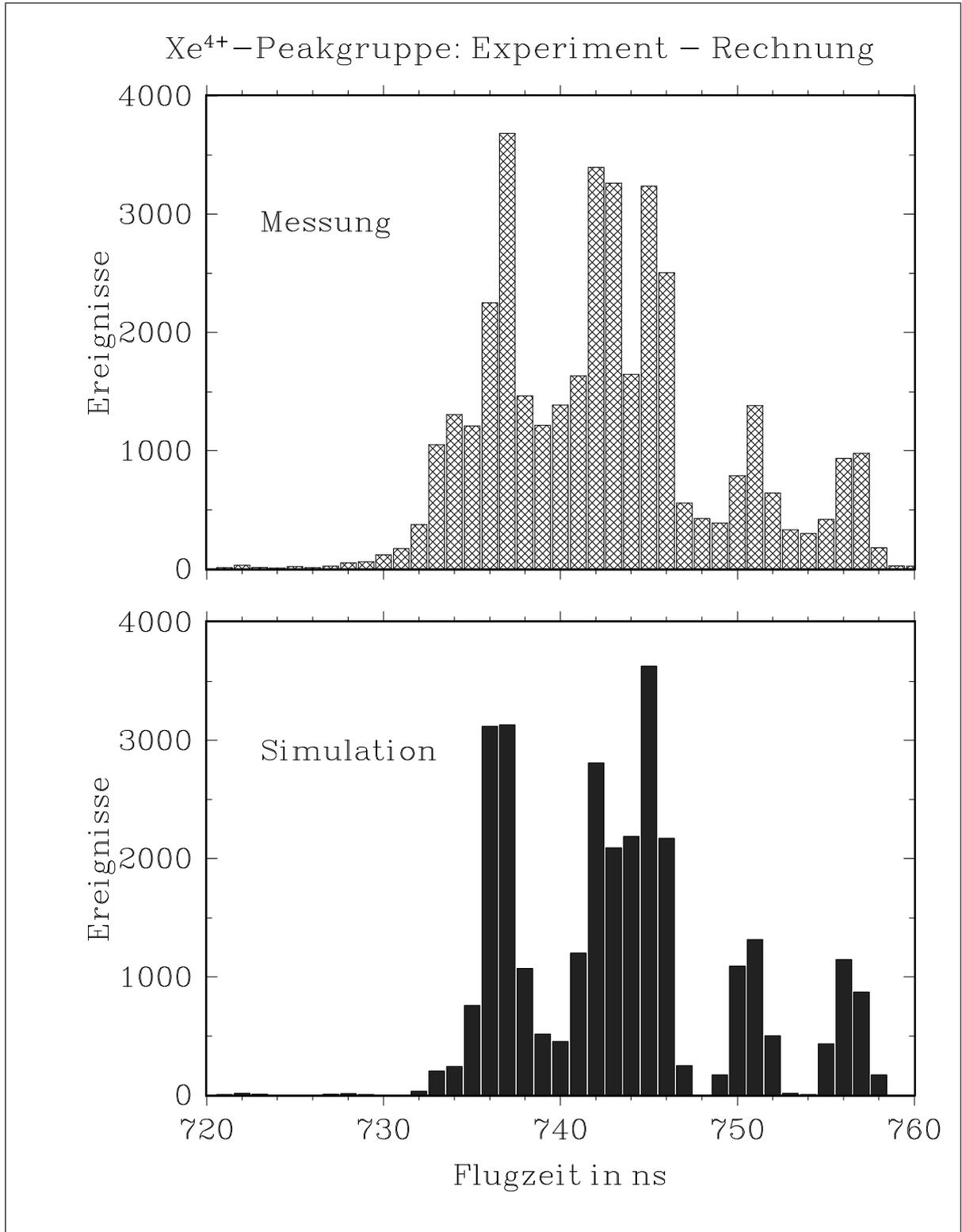


Abb. 27: Vergleich des gemessenen Xe^{4+} -Isotopenspektrums (oben) mit dem berechneten (unten). Zu den Annahmen der Simulation siehe Text.

4 Reduktion und Auswertung der Ladungsstufen-Spektren

Im folgenden werden die verwendeten Methoden zur Reduktion und Auswertung der Rohdaten aus den Flugzeitspektren erläutert. Aus den koinzident aufgenommenen Flugzeitspektren werden die Ereignisse extrahiert, bei denen lediglich ein einzelnes Ion innerhalb des Zeitfensters nachgewiesen wurde (Einzelereignis), und die Xenon-Massenlinien in den derart gefilterten Spektren für jede Ladungsstufe getrennt integriert. Aus der so gewonnenen Häufigkeitsverteilung der einzelnen Ladungsstufen kann durch gewichtete arithmetische Mittelung die mittlere ionische Ladung bestimmt werden. Die Berechnung dieser Größe liefert keine zusätzliche Information an sich, aber die Mittelung ist ein naheliegendes Glättungsverfahren. Zudem bietet sie die Möglichkeit einer Bilanzierung der auftretenden Effekte.

4.1 Koinzidenzinformation und Untergrundereignisse

Eigentlich erwartet man bei der Photoionisation von Edelgasatomen, abgesehen von Zufallskoinzidenzen, pro Ionisation ein einziges Ion, wenn es nicht zu Ion-Atom-Stößen (Gasdichte !) oder anderen von der primären Ionisation unabhängigen Effekten kommt.

Doch auch die durch Streulicht ausgelösten Elektronen sowie etwaige an der Oberfläche des Elektronendetektors adsorbierte Atome tragen zu Zweifach-Koinzidenzen bei. Dies führt zu einer Abhängigkeit der Anzahl an Zweifach-Koinzidenzen a) von der Güte der Justierung des Spektrometers, b) vom momentanen Photonenfluß, und c) von der Bedeckungsdichte der Elektronendetektorfläche.

Als erstes soll der Anteil von zufälligen Koinzidenzen abgeschätzt werden. Fallen zwei „echte“ Ereignisse in das Zeitfenster \mathcal{T} , so ergibt sich deren Rate zu

$$\dot{\mathcal{N}}_Z = \dot{\mathcal{N}}^2 \cdot \mathcal{T}, \quad (51)$$

bei einer wahren Rate von $\dot{\mathcal{N}}$. Mit einer typischen wahren Rate von $\dot{\mathcal{N}} \approx 100$ Hz und einem Zeitfenster $\mathcal{T} = 2 \mu s$ folgt

$$\dot{\mathcal{N}}_Z \approx 0.02 \text{ Hz}. \quad (52)$$

Dies führt zu etwa 30 Ereignissen bei einer Meßzeit von 25 Minuten, welche insgesamt typische 50000 Ereignisse liefert, unabhängig vom Zeitfenster, solange $\mathcal{T} > 2 \mu s$ gilt. Wie in der Legende von Abb. 28 zu sehen, findet sich a) eine deutliche Ungleichverteilung des Untergrundes, sowie b) deutlich mehr Ereignisse (730), als aus der Abschätzung der zufälligen Koinzidenzen zu erwarten. Zieht man aus den gemessenen Paaren der Photoelektron-Photoion-Photoion-Koinzidenzen, im folgenden als Level-2 Ereignisse bezeichnet, jeweils diejenigen Flugzeiten heraus, deren Lage mit Xenon-Massenlinien, also reinen Photoelektron-Xeⁿ⁺-Koinzidenzen (Level-1), identifiziert werden kann, so sollte ein weißes Rauschen verbleiben. Dem ist aber nicht so. Bei Flugzeiten, die kleiner als die kleinstmögliche echte Flugzeit sind, finden sich fast gar keine Ereignisse, während sich die Untergrundereignisse zu längeren Flugzeiten hin häufen. Auch liegen wohldefinierte Strukturen im Untergrund vor, die bei [Doppelfeld 91] mit den Flugzeiten von an der Elektronendetektoroberfläche durch einen Elektronenimpuls losgelösten Ionen identifiziert wurden.

Der Quotient aus Zweifach- zu Einfach-Koinzidenzen $\mathcal{Q} = \kappa(A, A')/\kappa(A)$ ist typisch $\mathcal{Q} = 0.02$. Es ist kein signifikanter Unterschied zwischen den aus gefilterten (nur Level-1) bzw. ungefilterten Flugzeitspektren ermittelten Häufigkeiten der einzelnen Ladungsstufen festzustellen. Deshalb ist eine Korrektur auf zufällige Koinzidenzen aus Einzelraten und Zeitfenster nicht notwendig.

Zufällige Koinzidenzen

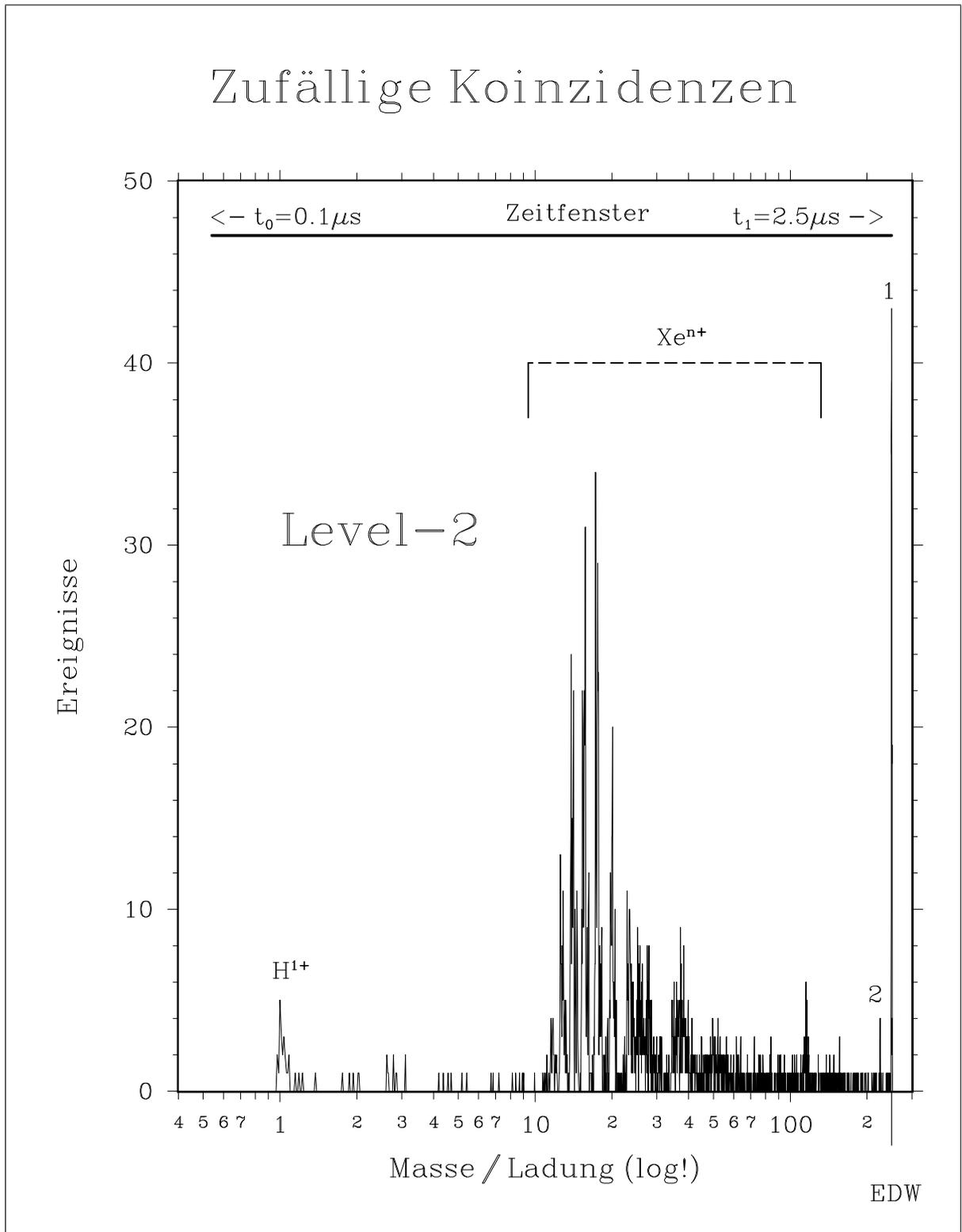


Abb. 28: Das aus einem Xenon-Flugzeitspektrum mit 50000 Ereignissen extrahierte Level-2-Spektrum mit 730 2-Tupeln. Die Anzahl der zufälligen Koinzidenzen sollte der Abschätzung im Text nach a) 30 betragen, und sich b) gleich über alle Massen verteilen. Dies ist nicht der Fall (Die Massenskala ist logarithmisch !).

4.2 Die Integration der Xe^{n+} -Peaks in den Spektren

Die Annahme eines Gaußprofils für die Form der Linien in den Flugzeitspektren ist zwar aufgrund des zentralen Grenzwertsatzes physikalisch sinnvoll, bei einer Pixel-Auflösung von 1 ns und einer typischen Halbwertsbreite (FWHM) von 3 ns wäre aber die Anpassung solcher Profile an die Daten zwecks Integration übertrieben, zumal die Anpassung einer Gaußkurve an 3 bis 6 Datenpunkte übertrieben ist. Die geringe Massenauflösung führt gerade wegen der hohen nachweisbaren Isotopenanzahl bei hohen Ladungsstufen zu einem Überlapp der Massenspektren. Leichte Variation der Integrationsgrenzen führt zu starken Veränderungen in den so ermittelten Häufigkeiten und in der mittleren Ladung, wenn auch über die gewichtete Mittelung gedämpft. Also wurde für jedes Flugzeitspektrum ein eigener Satz von Integrationsgrenzen abgeleitet. Die Integration wurde durch eine einfache Summation ersetzt. Es wurden versuchsweise drei Sätze von Summen pro Spektrum und Ladungsstufe berechnet, die sich nur in der Art der Korrektur auf Untergrundereignisse unterscheiden.

1. Keine Korrektur:

$$\int d\nu \rightarrow \sum_{t=t_{\min}}^{t_{\max}} \nu(t). \quad (53)$$

2. Korrektur durch Subtraktion einer für jede Ladungsstufe spezifischen Rechteckfläche:

$$\int d\nu \rightarrow \sum_{t=t_{\min}}^{t_{\max}} (\nu(t) - a_0), \quad (54)$$

wobei a_0 die minimale Anzahl von Ereignissen innerhalb 3 ns links bzw. rechts der Integrationsgrenzen ist.

3. Subtraktion der Fläche unter einer Geraden $\mathcal{H}(t) \equiv a_0 + a_1 \cdot t$, die jeweils links und rechts jeden Peaks in lokalen Minima fixiert ist:

$$\int d\nu \rightarrow \sum_{t=t_{\min}}^{t_{\max}} (\nu(t) - \mathcal{H}(t)). \quad (55)$$

Die Anwendung selbst des minimalen Hintergrundmodells, das eine Rechteckfläche vom jeweiligen Integral abzieht, scheint nicht an die komplexe Struktur der Flugzeitspektren angepaßt zu sein. Hier führt vor allem der Überlapp der hohen Ladungsstufen zu einer Überkorrektur. Die Ergebnisse sind so vom Ermessen des Auswertenden bzw. der Monotonie in den Profildanken (Rauschen), also der absoluten Zahl der Ereignisse abhängig. Die Verwendung des minimalen bzw. des linearen Hintergrundmodells erhöht die ermittelte mittlere Ladung bezogen auf die unkorrigierte Summation systematisch um ca. $0.03 e_0$ respektive $0.05 e_0$ bei einem Absolutwert von $\bar{Q}_{unkorr.} = 7.54(2) e_0$. Deshalb werden hier nur die unkorrigierten Daten behandelt. Die Verteilung der Untergrundergebnisse hat (Abb. 8) eine komplexe Struktur. Es soll aber hier noch einmal darauf hingewiesen werden, daß Ladungsstufen und nicht Massen aufgelöst und integriert werden mußten.

4.3 Berechnung der physikalischen Parameter aus den reduzierten Rohdaten

Die Häufigkeitsverteilung der Xe^{i+} ist eine Multinomial-Verteilung mit einer Randbedingung. Also:

$$\text{Xe}^{i+} \rightarrow r_i, i = 1, 2, \dots, k \leq N \quad (56)$$

Variablen sind hier die r_i . Parameter der Verteilung sind N, k natürliche Zahlen und die Wahrscheinlichkeiten p_i für das Eintreten der r_i : $p_i \geq 0$, deren Norm $\sum_{i=1}^k p_i = 1$ ist [Eadie 77].

Die Wahrscheinlichkeit für das Eintreten von einem bestimmten Satz der r_i (Wahrscheinlichkeitsfunktion) ist:

$$\mathcal{P}(r_1, r_2, \dots, r_k) = \frac{N!}{r_1! \cdot r_2! \cdot \dots \cdot r_k!} \cdot p_1^{r_1} \cdot p_2^{r_2} \cdot \dots \cdot p_k^{r_k}. \quad (57)$$

Die Erwartungswerte für die r_i sind:

$$\mathcal{E}(r_i) = Np_i, \quad (58)$$

die Varianzen

$$\mathcal{V}(r_i) = Np_i(1 - p_i), \quad (59)$$

und die Kovarianzen

$$\mathcal{COV}(r_i, r_j) = -Np_i p_j, i \neq j. \quad (60)$$

Die erzeugende Funktion, also die Fourier-Transformierte der Wahrscheinlichkeitsfunktion dieser Multinomial-Verteilung lautet:

$$\mathcal{G}(Z_1, \dots, Z_k) = (p_1 + p_2 Z_2 + \dots + p_k Z_k)^N, \quad (61)$$

mit $Z = \exp(it)$. Die Transformation des kontinuierlichen Flugzeitspektrums in ein Histogramm mit k „Bins“ und r_i Ereignissen im i -ten Bin über Integration der Linien-Gruppen ist oben beschrieben. Bei insgesamt N „regulären“ Ereignissen im Flugzeitspektrum ist die Summe aller Ereignisse im Histogramm die Norm! Die Bins entsprechen den k -Ladungsstufen (2+, 3+, ..., 14+). Die Zufallsvariable ist ein k -dimensionaler Vektor, aber der Wertebereich ist auf einen $(k - 1)$ -dimensionalen Unterraum beschränkt, da gilt:

$$\sum_{i=1}^k r_i = N. \quad (62)$$

Da N fest, folgt aus Gleichung (60), daß die Anzahl der Ereignisse in je zwei Bins i und j negativ korreliert sind mit dem Korrelationskoeffizienten:

$$\mathcal{CORR}(r_i, r_j) = -\sqrt{\frac{p_i p_j}{(1 - p_i)(1 - p_j)}}. \quad (63)$$

Die Standardabweichung der Multinomial-Verteilung mit Randbedingung (62) wird zu:

$$\begin{aligned} \sigma(r_i) &= \pm \sqrt{\mathcal{V}(r_i) - \xi(r_i) + \sum_{\substack{j=1 \\ i>j}}^k \mathcal{COV}(r_i, r_j)} \\ \xi(r_i) &= \mathcal{P}^2(r_i) \end{aligned} \quad (64)$$

Zusammenfassend ist der Algorithmus dargestellt, der verwendet wurde, um aus den integrierten Rohspektren die physikalisch interessanten Parameter zu berechnen. Aus den „Integralen“ $h_i = \int r_i(t) dt$ werden die relativen Häufigkeiten der ionischen Ladungsstufen Xe^{i+} ν_i , die mittlere Ladung $\langle q \rangle_{\nu_i}$, sowie die entsprechenden statistischen Unsicherheiten $\sigma(\nu_i)$ und $\sigma(\langle q \rangle_{\nu_i})$ nach

$$\mathcal{N} = \sum_{i=1}^k h_i \quad (65)$$

$$\nu_i = h_i / \mathcal{N} \quad (66)$$

$$\mathcal{V}(\nu_i) = \frac{\nu_i}{\mathcal{N}} \cdot (1 - \nu_i) \quad (67)$$

$$\langle q \rangle_{\nu_i} = \sum_{i=1}^k i \cdot \nu_i \quad (68)$$

$$-\frac{\mathcal{N}}{2} \cdot \mathcal{COV}(\nu_i, \nu_j) = \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^k i \cdot \nu_i \cdot j \cdot \nu_j \quad (69)$$

$$\tilde{\mathcal{V}}(\langle q \rangle_{\nu_i}) = \langle q \rangle_{\nu_i}^2 \cdot \mathcal{V}(\nu_i) \quad (70)$$

$$\sigma(\nu_i) = \sqrt{\mathcal{V}(\nu_i)} \quad (71)$$

$$\sigma(\langle q \rangle_{\nu_i}) = \pm \sqrt{\tilde{\mathcal{V}}(\langle q \rangle_{\nu_i}) + \mathcal{COV}(\nu_i, \nu_j)} \quad (72)$$

ermittelt.

4.4 Mittlere Ladung als Funktion des ELSA-Stroms

Eine Abhängigkeit der mittleren Ladung des Xenon vom Photonenfluß ist nicht feststellbar (Abb. 29). Die der Abbildung zugrundeliegenden 16 Flugzeitmassenspektren wurden im Laufe einer ELSA-Füllung gemessen und zeigen eine hervorragende Übereinstimmung der für die mittlere Ladung berechneten statistischen Unsicherheiten mit den tatsächlichen, wenn man die mittlere Ladung als vom Photonenfluß unabhängig annimmt. Die Spektren wurden bei der Photonenenergie $h\nu = 5.3$ keV aufgenommen. Die Abweichungen, welche zwischen Daten aus verschiedenen Strahlzeiten bzw. Füllungen herrühren, sind etwas größer, sodaß die Unsicherheiten in der Reproduzierbarkeit bei etwa $1.5 \cdot \sigma$ liegen.

Mittlere Ladung während einer ELSA-Füllung

16 Spektren mit je 10000 Ereignissen

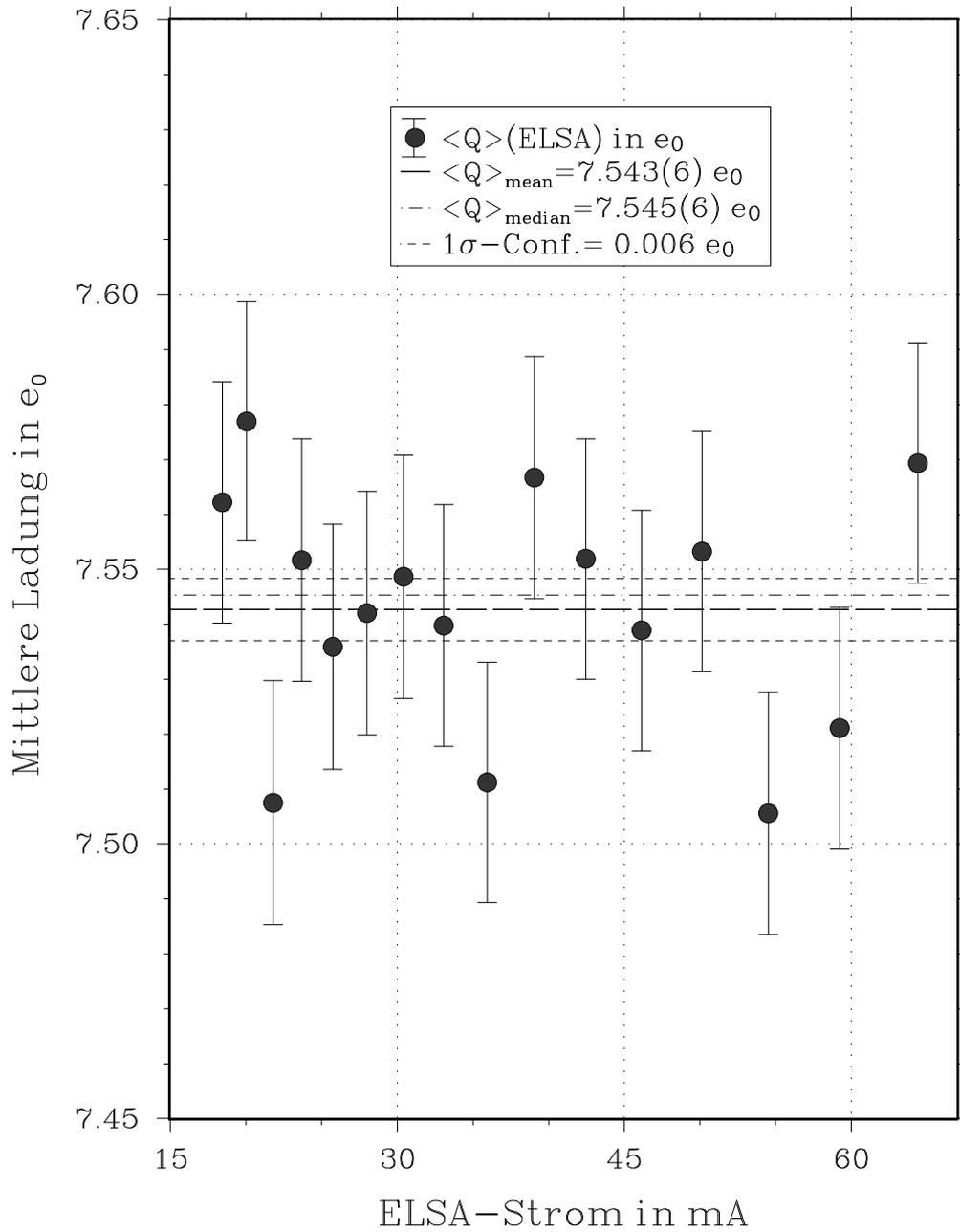


Abb. 29: Test auf Abhängigkeit der mittleren Ladung vom Photonenfluß ($h\nu = 5.3$ keV).

5 Vorstellung und Diskussion der Resultate

In diesem Kapitel werden die mit den beschriebenen Methoden aus den Flugzeitmassenspektren ermittelten Daten vorgestellt. Die Messungen können mit Ergebnissen anderer Autoren verglichen werden. Die Arbeiten dieser Autoren seien im folgenden zusammengefaßt und erläutert.

- [Carlson 66]: **TA Carlson, WE Hunt und MO Krause** nutzten ein magnetisches Massenspektrometer mit einer Röntgenröhre als Strahlungsquelle. Zu dieser Zeit (1966) gab es noch keine nutzbaren spektral kontinuierlichen Röntgenquellen, wie z.B. Speicherringe (Synchrotronstrahlung). Die Verwendung von unterschiedlichen Kombinationen aus Anoden- und Filtermaterialien ermöglichte die Messung der Ladungsstufenverteilungen an einzelnen, verschiedenen Energien. Die Breite des Energiebandpasses nach Kantenfilterung ist deutlich größer als 1 eV. Der Nachweis der ionischen Ladungsstufen mit Hilfe eines magnetischen Massenspektrometers ist unabhängig von der Anzahl der bei der Ionisation emittierten Elektronen und deren Energie. Dies sollte sich beim Vergleich der Daten bemerkbar machen.
- [Tonuma 87]: **T Tonuma, A Yagishita, H Shibata, T Koizumi, K Shima, T Mukoyama und H Tawara** haben am 2.5 GeV-Elektronenspeicherring der „Photon factory“ des KEK in Tokyo hinter einem Doppelkristallmonochromator ($\text{Si}_{(111)}$, $\Delta E/E \approx 2 \cdot 10^{-4}$) mit einem Flugzeitmassenspektrometer Ladungsstufen-Spektren aufgenommen. Als Detektoren wurden Vielkanalplatten verwendet. Die Xenon-Ionenimpulse lieferten die Startsignale für einen Zeit-zu-Amplitude-Wandler, der von den verzögerten Elektronenimpulsen gestoppt wurde. Somit ist hier eine Abhängigkeit der Nachweiswahrscheinlichkeit von der Ladungsstufe möglich. Die Geometrien und Betriebsspannungen dieses Spektrometers sollten die einzige Ursache eventueller Unterschiede in den Daten sein.
Es wurden an einigen Punkten zwischen 4.1 keV und 8.0 keV Ladungsstufen-Spektren aufgenommen. Die daraus ermittelten Häufigkeitsverteilungen der ionischen Ladungsstufen wurden zur mittleren Ladung gemittelt und mit berechneten Werten für die mittleren Ladungen verglichen. Letztere wurden von Mukoyama 1986 durch Monte-Carlo-Berechnung der Relaxationskaskaden aus tabellierten Werten für die Auger- und Shake-Off-Wahrscheinlichkeiten der jeweilig möglichen Prozesse berechnet.
- [Mukoyama 87]: **T Mukoyama, T Tonuma, A Yagishita, H Shibata, T Koizumi, T Matsuo, K Shima und H Tawara** haben lediglich die Daten von [Tonuma 87] bezüglich der relativen Häufigkeitsverteilung der ionischen Ladungsstufen in Abhängigkeit der Energie ausgewertet und mit den berechneten verglichen.
- [Tawara 91]: Auch **H Tawara, T Hayaishi, T Koizumi, T Matsuo, K Shima, T Tonuma und A Yagishita** nutzten dieselbe Apparatur wie [Tonuma 87] für ihre Messungen. Sie nahmen an deutlich mehr Stützpunkten Ladungsstufen-Spektren auf als zuvor, so daß der Vergleich der im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Nahkantenstrukturen in den Ladungsspektren hier möglich ist. Ferner haben sie unter Zuhilfenahme einer mit Stickstoff gefüllten Ionisationskammer hinter dem Spektrometer den monochromatischen Photonenfluß aufgenommen, so daß sie relative Erzeugungsquerschnitte für die einzelnen ionischen Ladungsstufen angeben konnten. Auch hier kann mit den Querschnitten aus dieser Arbeit verglichen werden. Da die Daten dieser Arbeit im wesentlichen graphisch vorliegen, ist nur ein grober Vergleich möglich.
- [Scherer 89]: **H Scherer** hat am 2.3 GeV-Synchrotron mit dem langen Flugzeitmassenspektrometer einige Messungen an Xenon (L_3 -Kante) gemacht. Es wurden baugleiche Vielkanalplatten mit Elektronentrigger wie in dieser Arbeit verwendet, um die Ladungsstufen-Spektren aufzunehmen. Der Doppelkristallmonochromator war mit $\text{InSb}_{(111)}$ -Kristallen ($\Delta E \approx 1.2$ eV)

bestückt. Die Spektren enthielten lediglich 10000 Ereignisse. Die energetische Lage der beiden in der Arbeit verwerteten Messungen ist sehr unsicher, da etwa 1.6 keV unterhalb der L_3 -Kante geeicht wurde. Die Daten sind unzuverlässiger als die der anderen vier Autoren.

Die Berechnung der relativen Erzeugungsquerschnitte für die ionischen Ladungsstufen Xe^{n+} aus den relativen Häufigkeiten und dem in derselben Apparatur aufgenommenen totalen Photoionisationsquerschnitt wird erläutert. Die relativen Erzeugungsquerschnitte werden vorgestellt und mit denen von [Tawara 91] verglichen.

5.1 Mittlere Ladung \bar{Q} des Xenon

Die folgende Tabelle 6 vergleicht die im Rahmen dieser Arbeit ermittelten Werte für die mittlere ionische Ladung von Xenon mit denen anderer Gruppen.

Die am alten, langen Spektrometer von [Scherer 89] bestimmte mittlere Ladung weicht im sel-

Energie in keV	Mittlere Ladung von Xe in e_0			
	diese Arbeit	[Scherer 89]	[Tonuma 87]	[Carlson 66]
0.240	-	-	-	2.8420
0.853	-	-	-	4.3976
1.014	-	-	-	4.6400
1.500	-	-	-	5.1050
4.000	5.92(1)	-	-	-
4.500	5.987(4)	6.33	6.01	-
4.900	7.307(9)	-	7.30	-
4.960	7.29(1)	-	-	6.9527
5.100	7.364(9)	7.70	7.45	-
5.300	7.530(5)	-	7.55	-
5.450	7.581(9)	-	7.65	-
5.800	7.76(2)	-	7.74	-
6.800	7.80(2)	-	7.84	-
8.000	7.80(2)	-	7.97	-
8.400	-	-	-	7.5892

Tabelle 6: Vergleich der in dieser Arbeit ermittelten mittleren Ladung im Bereich der Xe L-Kanten mit den Werten von [Scherer 89] und [Tonuma 87], die auch mit Synchrotronstrahlung aufgenommen wurden, sowie denen von [Carlson 66]. Im Falle von [Carlson 66] war die Quelle eine Röntgenröhre mit verschiedenen Anoden bzw. Filtern.

ben Maß zu höheren Werten ab, wie die von [Carlson 66] ermittelte zu kleineren Werten. Der hier nur an wenigen Stützpunkten gegebene Verlauf der mittlere Ladung als Funktion der Energie aus [Tonuma 87] wird von dem im Rahmen dieser Arbeit aus den Flugzeitspektren bestimmten hervorragend bestätigt, wie auch in der Abb. 30 zu sehen ist. Da bei den Messungen zu dieser Arbeit, sowie bei [Tonuma 87] und [Scherer 89] mit Elektronen-Startsignalen gearbeitet wurde, und die Wahrscheinlichkeit eines Elektronen-Impulses eine Frage von Geometrie und Spannungen ist, kann Übereinstimmung nicht streng exakt erwartet werden. Die gute, reproduzierbare Übereinstimmung mit den Daten der japanischen Gruppen [Tonuma 87] und [Tawara 91] bekräftigt andererseits aber die Annahme von nur schwacher Abhängigkeit der Nachweiswahrscheinlichkeit im Bereich $Xe^{2+} \dots Xe^{14+}$ von der Ladungsstufe. Die Daten von [Scherer 89] fußen auf Spektren mit deutlich weniger Ereignissen (10000 Ereignisse) als die in dieser Arbeit (bis zu 500000 Ereignisse) bzw. bei [Tonuma 87] und [Tawara 91] (allein im Maximum von $Xe^{8+} \approx 10000$ Ereignisse) ermit-

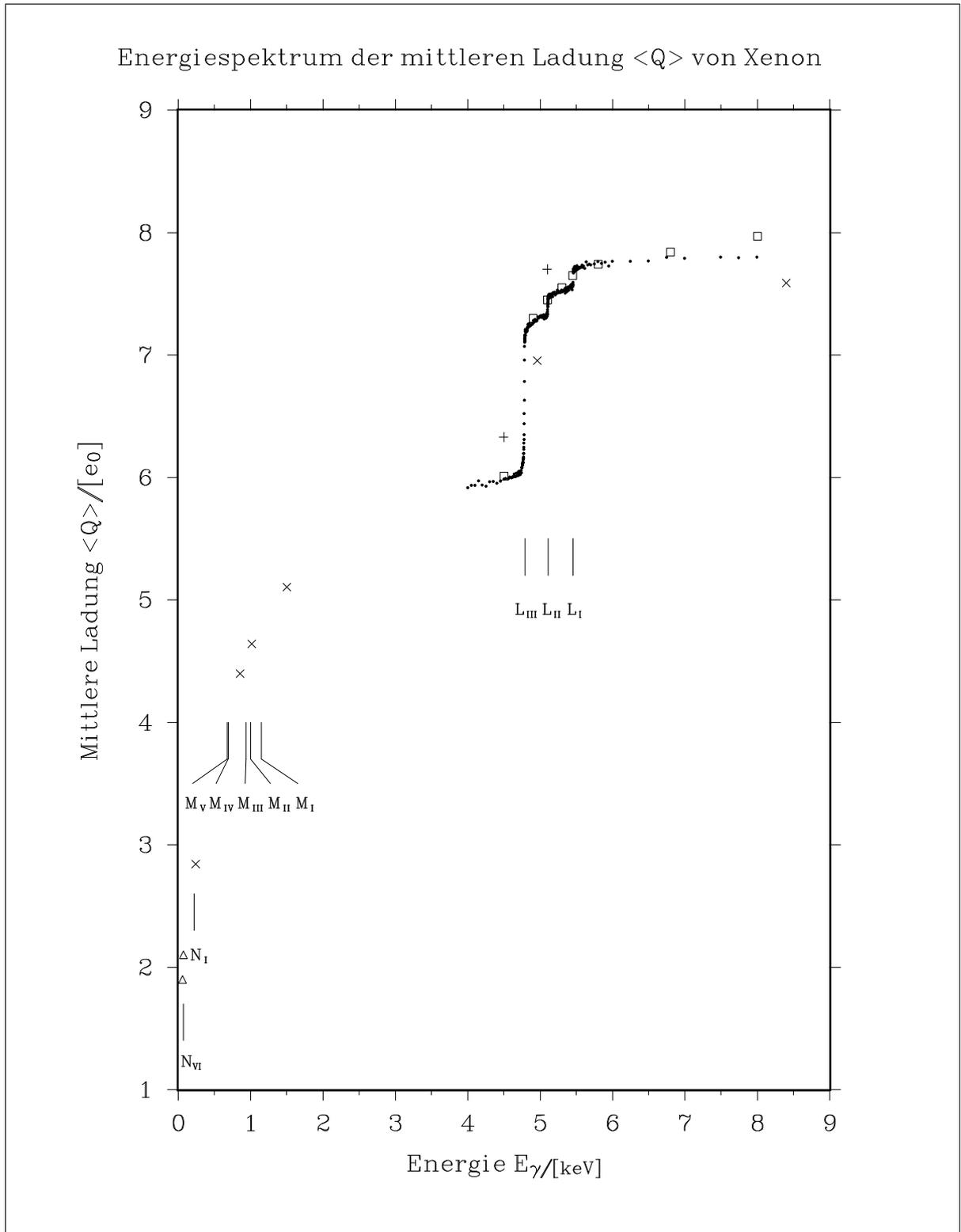


Abb. 30: Energiespektrum der über die ionischen Ladungsstufen Xe^{2+} bis Xe^{14+} gemittelten Ladung. Die mittlere Ladung ist in Einheiten der Elementarladung angegeben. Herkunft der Daten: \times :[Carlson 66], Δ :[Hayashi 84], \square :[Tonuma 87], $+$:[Scherer 89] und \bullet : diese Arbeit

telten. Auch ist die energetische Lage des Meßpunkts kurz vor der L_2 -Kante unsicher, so daß er eventuell auch oberhalb der Kante liegt (Eichung bei 3.203 keV).

Die Ergebnisse der japanischen Gruppe [Tonuma 87], welche die L -Schalen-Vakanz auch mittels

monochromatisierter Synchrotronstrahlung erzeugten, stimmen im Bereich der statistischen Unsicherheit mit den in dieser Arbeit gemessenen überein. Dies soll in den Abb. 30 und 33 verdeutlicht werden. Die genauere Analyse von zum Beispiel durch Doppelanregung verursachten Effekten in den hier betrachteten Parametern ist beim Xenon schwieriger als beim Argon [Doppelfeld 93b], da die energetischen Breiten der Anfangs- und Endzustände deutlich größer sind. Dies wird schon in den Absorptionsspektren bei [Dezarnaud 92] und anderen deutlich. Absorptionsspektren zeigen, da sie eine Bilanz elektrisch neutraler Teilchen (Photonen) messen, potentiell schärfere Strukturen als die gewöhnlich durch PCI „ausgeschmierten“ Strukturen in Energiespektren einzelner ionischer Ladungsstufen bzw. ihrer Mittelwerte, welche eine Bilanz geladener Teilchen darstellen. Das Fehlen scharfer Strukturen in Absorptionsspektren ist somit ein deutlicher Hinweis darauf, daß ein zugrundeliegender Effekt in Ladungsstufenspektren noch schwerer nachzuweisen sein wird.

Auch zeigt sich ein schlechteres Signal-Rausch-Verhältnis verglichen mit den Messungen an Argon [Doppelfeld 93a] trotz umfangreicherer Datensätze. Dies liegt darin begründet, daß sich beim Xenon die aufgenommenen Ereignisse eines Spektrums auf grob 10-mal so viele Einzelpeaks (ca.80) verteilen können wie beim Argon (8).

5.2 Relative Häufigkeiten von Xe^{n+}

Ladungs- stufe n	relative Häufigkeiten von Xe^{n+} in %			
	diese Arbeit	[Scherer 89]	[Mukoyama 87](Exp.)	[Mukoyama 87](Calc.)
1		0.3		0.02
2	1.78(30)	0.9	1.8	4.18
3	4.17(40)	2.7	3.9	8.80
4	16.18(80)	10.4	16.1	14.44
5	15.55(80)	13.0	14.9	11.91
6	21.57(90)	22.2	21.5	10.10
7	21.51(90)	25.7	22.0	12.67
8	14.79(80)	19.4	15.4	22.18
9	3.58(40)	4.5	3.8	10.70
10	0.62(20)	0.7	0.5	3.02
11	0.17(10)		0.1	0.54
12	0.05(05)			0.08
13	0.01(03)			0.01
14	0.01(03)			

Tabelle 7: Vergleich der in dieser Arbeit aus Flugzeitspektren ermittelten relativen Häufigkeiten der einzelnen Ladungsstufen des Xenon unter- und oberhalb der L_3 -Kante mit den Werten von [Scherer 89] und [Mukoyama 87](Exp.), die auch mit Synchrotronstrahlung aufgenommen wurden, sowie den mittels eines Monte-Carlo-Modells berechneten Werten ([Mukoyama 87](Calc.)).

Als Beispiel für die Veränderungen in den Häufigkeitsverteilungen der einzelnen ionischen Ladungsstufen sind in Abb. 31 das Ladungsstufenspektrum weit oberhalb der M -Kanten und ca. 300 eV unterhalb der L -Kanten des Xenon (oben) sowie ca. 15 eV oberhalb der Xe-L_{III} Kante (unten) dargestellt. Das Nebenmaximum der Verteilung oberhalb der M -Kante bei Xe^{4+} rührt wahrscheinlich daher, daß die Relaxation einer M_1 -Vakanz im wesentlichen zu Xe^{4+} ($M - \text{NN-Auger} \dots$) bzw. zu Xe^{6+} ($M_1 - M_{45}\text{N-Coster-Kronig} \dots$) führt. Xe^{5+} ergibt sich nur aus sekundärem $M - \text{NN-Auger}$ mit begleitendem Shake-Off und ist daher nach M -Anregung weniger wahrscheinlich.

Die „Stufe“ in der Verteilung oberhalb der L_3 -Kante von Xe^{8+} auf Xe^{9+} die stärker ausgeprägt ist, als die von Xe^{7+} auf Xe^{8+} , wird durch die Schalenstruktur der Elektronenhülle bedingt. Bis Xe^{8+} werden Elektronen aus der Valenzschale ins Kontinuum befördert, deren Bindungsenergien im Bereich von 10 bis 20 eV (O -Schale) liegen. Der ionische Endzustand Xe^{9+} erfordert die zusätzliche Ionisation eines N -Schalen-Elektrons, wozu weitere 60 bis 200 eV aufzuwenden sind.

In Abb. 32 sind die Histogramme an mehreren Punkten im Energiebereich zwischen 4.5 keV und 5.5 keV dargestellt. Im wesentlichen können hier die Kantenhübe in den relativen Häufigkeiten der einzelnen ionischen Ladungsstufen abgelesen werden.

Zur qualitativen Beschreibung des Verlaufs der Ladungsstufenspektren im Energiebereich der L -Kanten sind in Abb. 33 die gemessenen relativen Häufigkeiten als Funktion der Energie dargestellt. Die Häufigkeiten der Ladungsstufen Xe^{2+} bis Xe^{6+} sowie Xe^{9+} bis Xe^{14+} sind unterhalb der L_3 -Kante konstant. An der Kante wird das Auftreten der niedrig geladenen Ionen weniger wahrscheinlich, verglichen mit dem der Ladungsstufen Xe^{8+} bis Xe^{14+} . Die relative Häufigkeit der Ladungsstufe Xe^{8+} ist oberhalb der L_3 -Kante konstant, steigt bei Erreichen der L_2 -Kante noch einmal leicht an und sinkt an der L_1 -Kante ab. Von da an bleibt ihre relative Häufigkeit, wie auch die der anderen Ladungsstufen, konstant. Die relative Häufigkeit der Ladungsstufe Xe^{7+} steigt schon weit vor der L_3 -Kante an, wie auch die der Ladungsstufe Xe^{8+} . Erstere nimmt aber an der ($2p_{3=2} \rightarrow 5d$)-Resonanz ein Maximum an. Oberhalb der Kante ist der Verlauf ähnlich dem der

Häufigkeiten der anderen niedrig geladenen Xe^{n+} . Das Verhalten der relativen Häufigkeiten aller Ladungsstufen „dicht“ (bis etwa 150 eV) oberhalb der Kanten zeigt graduelle Veränderungen, welche auf die primäre Photoionisation begleitenden Shake-Off hinweisen. Der Verlauf bestätigt den von [Tawara 91] ermittelten. Das Verhalten vor der L_3 -Kante konnte von [Tawara 91] nicht festgestellt werden, da dort lediglich an vier Energien gemessen wurde.

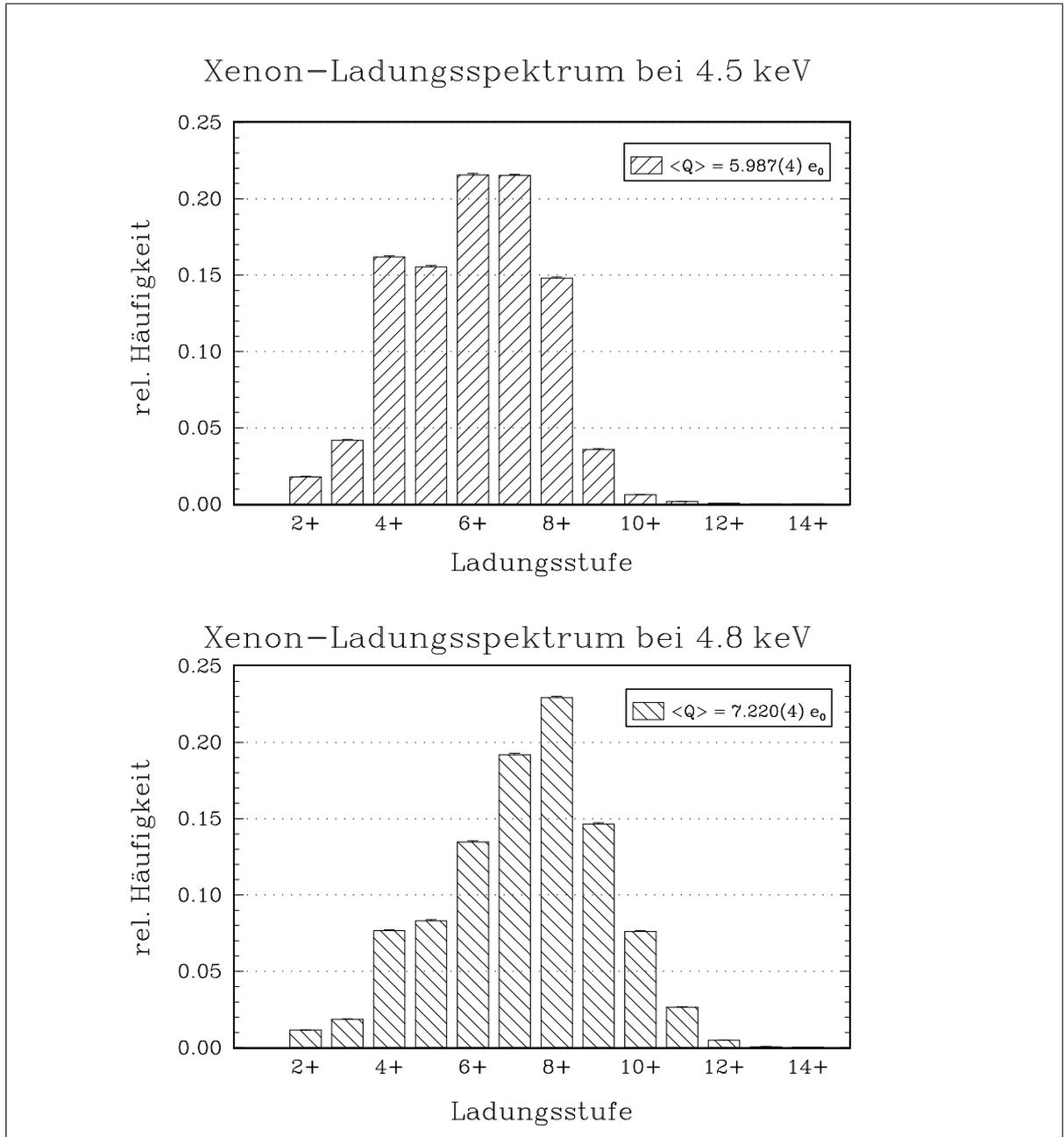


Abb. 31: Relative Häufigkeiten von Xenon unter- und oberhalb der L_{III} -Kante. Das dazugehörige Spektrum wurde bei einer Photonen-Energie von 4.5 keV aufgenommen (oben). Das untere Ladungsstufenspektrum wurde aus einem bei 4.8 keV gemessenen Flugzeitspektrum ermittelt. In beiden Fällen beträgt die Norm 250000 Ereignisse. Die mit \bar{Q} bezeichnete mittlere Ladung stimmt im Rahmen der statistischen Unsicherheit mit der von [Tonuma 87] gemessenen überein.

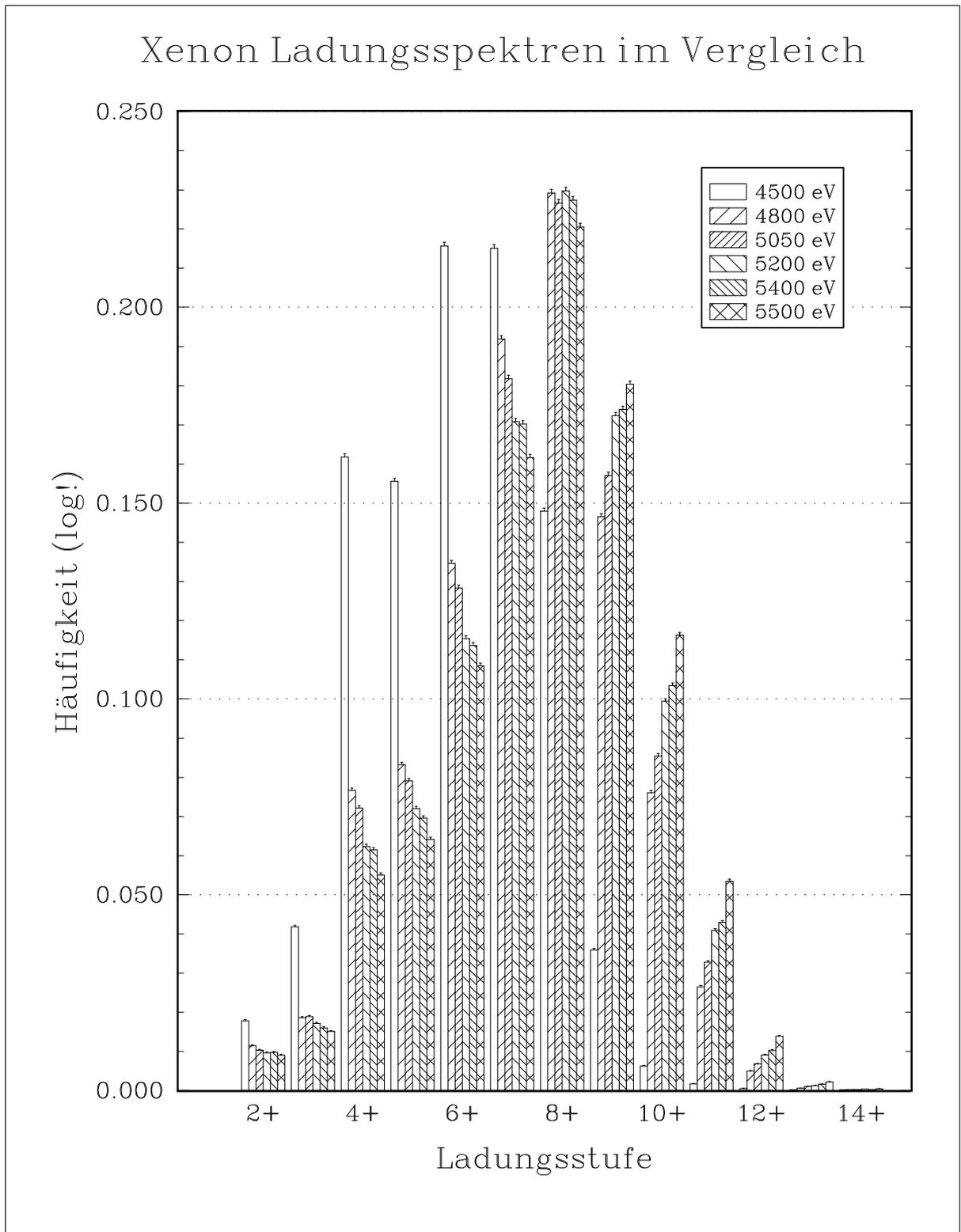


Abb. 32: Relative Häufigkeiten von Xenon an charakteristischen Punkten im Bereich der L -Kanten (L_3 bei 4782 eV, L_2 bei 5104 eV und L_1 bei 5453 eV). Die Norm der dazugehörigen Spektren beträgt jeweils 250000 Ereignisse.

Energiespektrum der Ladungsstufen Xe^{i+}

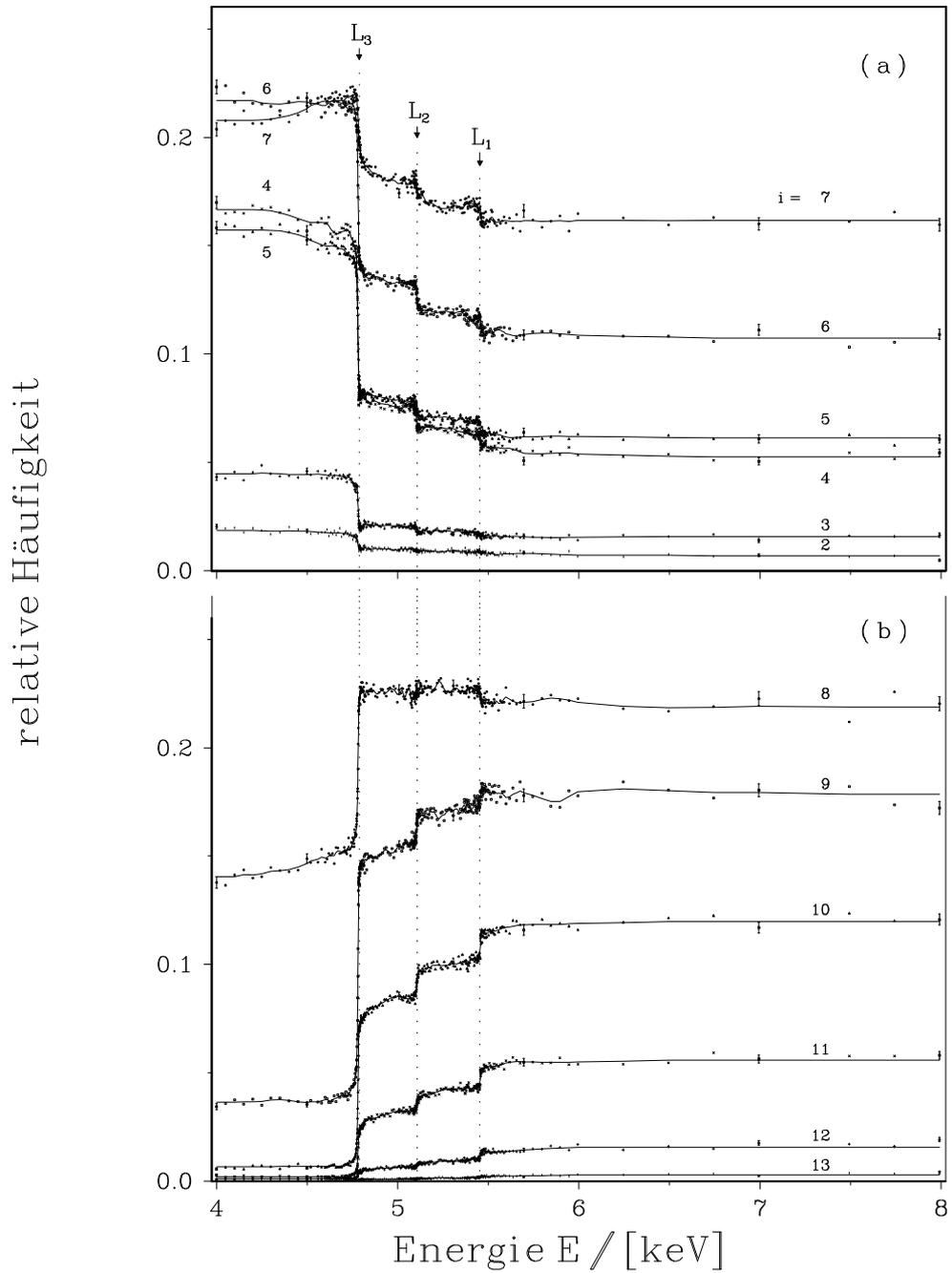


Abb. 33: Energiespektrum der Ladungsstufen Xe^{2+} bis Xe^{13+} . Dargestellt ist die relative Häufigkeit der jeweiligen ionischen Ladungsstufen als Funktion der Energie des eingestrahlt monochromatisierten Synchrotronlichtes. Die Ladungsstufe Xe^{14+} ist zu selten, um auf dieser Skala dargestellt zu werden. Bei ausgewählten Energien sind die $1-\sigma$ -Unsicherheiten als Fehlerbalken eingezeichnet. Die durchgezogenen Kurven repräsentieren lokale Mittelwerte und sollen lediglich den ungefähren Verlauf wiedergeben.

5.3 Nahkantenstrukturen

In der Energieabhängigkeit der mittleren Ladung sowie der einzelnen Ladungsstufen des Xenon manifestieren sich wie bei den Absorptionsspektren viele elektronische Prozesse, die nur durch die Wechselwirkung mehrerer Elektronen zu deuten sind.

Hierzu gehört die Postkollisions-Wechselwirkung, die einen solchen Effekt beschreibt.

Der Energiebereich, in dem Wiedereinfang des Photoelektrons durch PCI noch möglich ist, läßt sich beim Xenon nicht so scharf abgrenzen wie beim Argon an der K-Kante [Doppelfeld 91] (siehe Kap. 1.2.2).

Die Zunahme der relativen Häufigkeiten der Ladungsstufen Xe^{7+} (Abb. 36) und Xe^{8+} (Abb. 35) mit steigender Energie weit vor der L_3 -Kante ist signifikant. (Zur Hubnormierung siehe Legenden der Abbildungen). Die Häufigkeit von Xe^{8+} nimmt von 4 keV bis zur L_3 -Kante um 20(5)% bezogen auf den Hub zu. Das Verhalten der Ladungsstufe Xe^{7+} weist ein Maximum an der L_3 -Kante auf. Die relative Häufigkeit dieser Ladungsstufe steigt von 4 keV bis 4.785 eV um 35(5)% von 55(5)% auf die maximale im betrachteten Energiebereich vorkommende Häufigkeit für diese Ladungsstufe. Bei Erreichen der L_3 -Kante nimmt die relative Häufigkeit ähnlich schnell ab wie die der anderen Ladungsstufen. Durch das unterschiedliche asymptotische Verhalten von Lorentzprofil(Resonanz) $\mathcal{L} \sim 1/\Delta E^2$ und Arkustangens (Kontinuum) $\mathcal{L} \sim 1/\Delta E'^2$ zu erklären ist der Befund über den sehr weit vor den Kanten beginnenden Anstieg in der mittleren Ladung Abb. 34. Dieser Anstieg ist auch im energieabhängigen Verhalten der relativen Häufigkeiten der einzelnen Ladungsstufen (Abb. 35 und 36) zu sehen. Allerdings weichen die Ladungsstufen Xe^{7+} und Xe^{8+} in ihrem Verlauf vor der L_3 -Kante deutlich von dem der benachbarten (Xe^{6+} bzw. Xe^{9+}) ab.

Der Abb. 34 ist auch zu entnehmen, daß die mittlere Ladung an der L_3 - und der L_2 -Kante schon bei der ersten Resonanz, bei der L_1 -Kante wegen des Fehlens einer Resonanz aber erst beim Ionisationspotential ansteigt. Der unterschiedlich starke Anstieg in den relativen Häufigkeiten der Ladungsstufen Xe^{n+} mit $n > 8$ oberhalb der L_3 -Kante deutet darauf hin, daß die primäre Photoionisation begleitende Shake-Prozesse die Verteilung modifizieren.

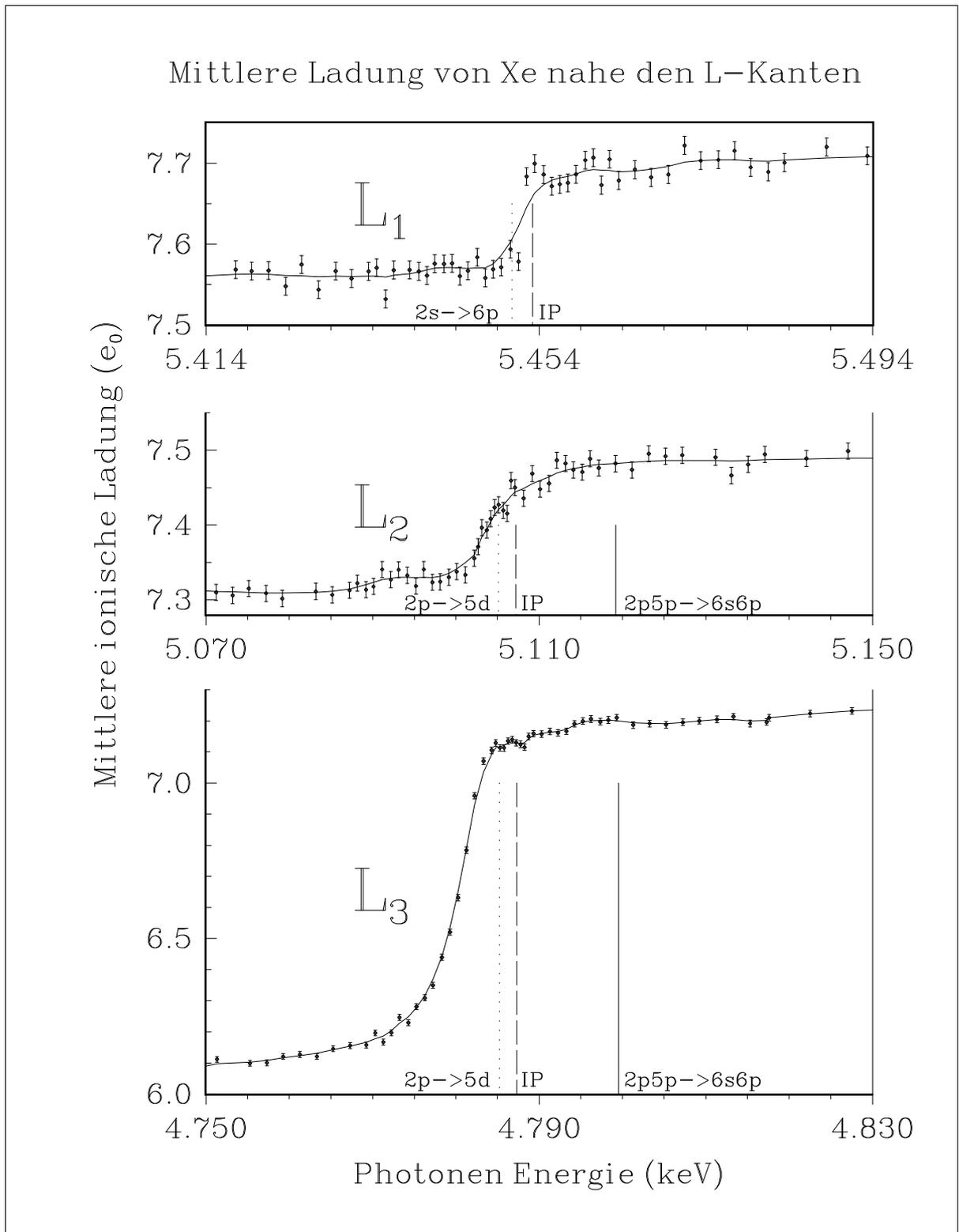


Abb. 34: Nahkantenstrukturen der mittleren Ladung von Xenon. Darstellung analog der von Abb. 11 in Kap. 2.5. Hier ist allerdings nicht das Produkt aus mittlerer Ladung und Photoionisationsquerschnitt, sondern allein der energieabhängige Verlauf der mittleren Ladung in den drei kantennahen Energiebereichen aufgetragen.

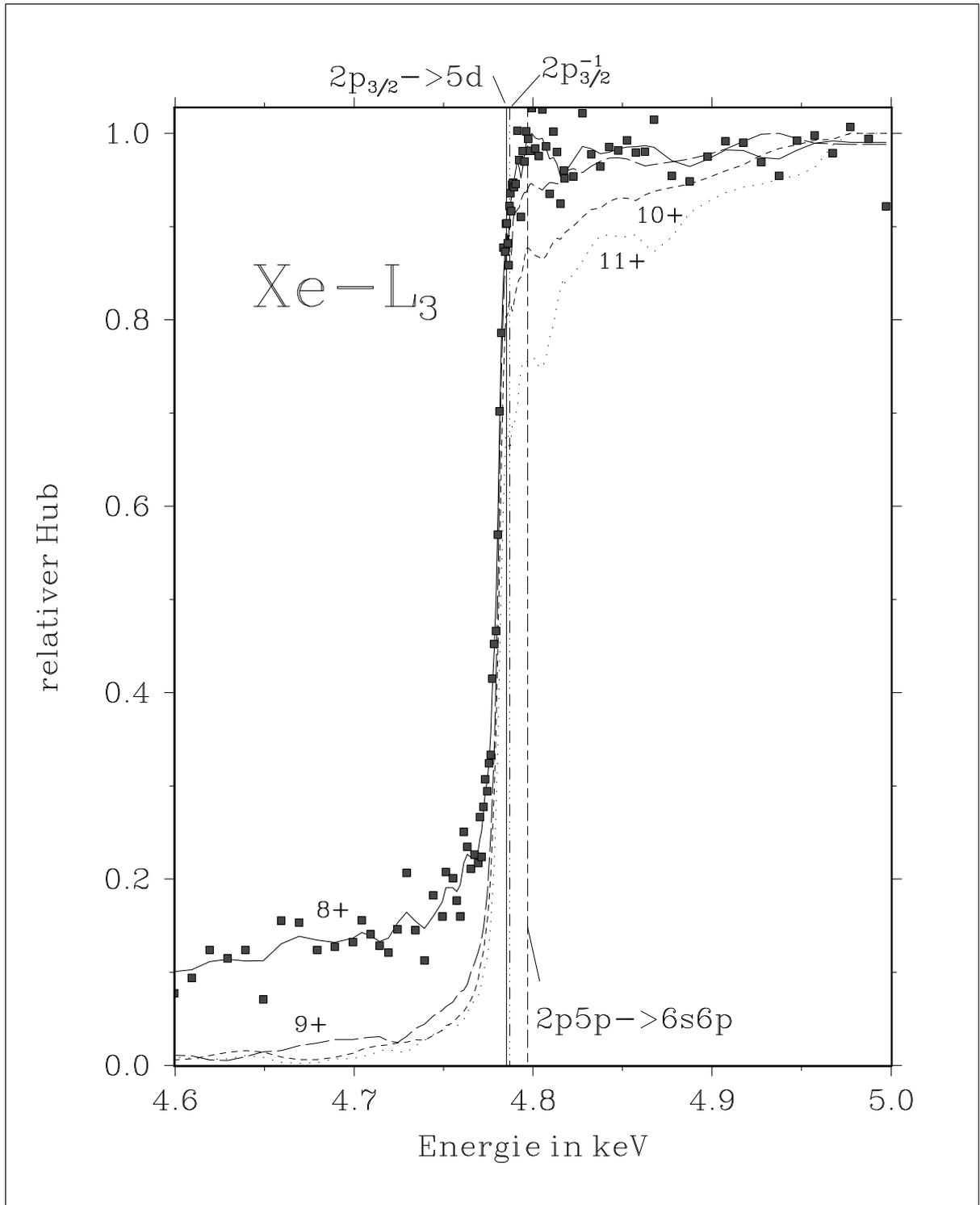


Abb. 35: Unterschiedliches Verhalten einzelner ausgewählter Ladungsstufen an der L_3 -Kante. Alle durchgezogenen Kurven sind lokale Mittelungen (symmetrisches, normiertes 5'er Mittel) über die entsprechenden Häufigkeitsverteilungen, welche auf die Differenz ihrer Maximal- und Minimalwerte zwischen 5 keV und 4 keV normiert sind. Die Symbole sollen ein Maß für die Streuung geben. Es sind die gemessenen, derselben Normierung wie die geglättete Kurve unterworfenen relativen Häufigkeiten für Xe^{8+} . Die Werte für die Resonanzenergien stammen aus [Dezarneau 92]. Deutlich zeigt sich hier der stetige, weit vor der L_3 -Kante einsetzende Anstieg der relativen Häufigkeit für die Reaktion: $\text{Xe} + h\nu \rightarrow \text{Xe}^{8+} + 8 \cdot e^-$.

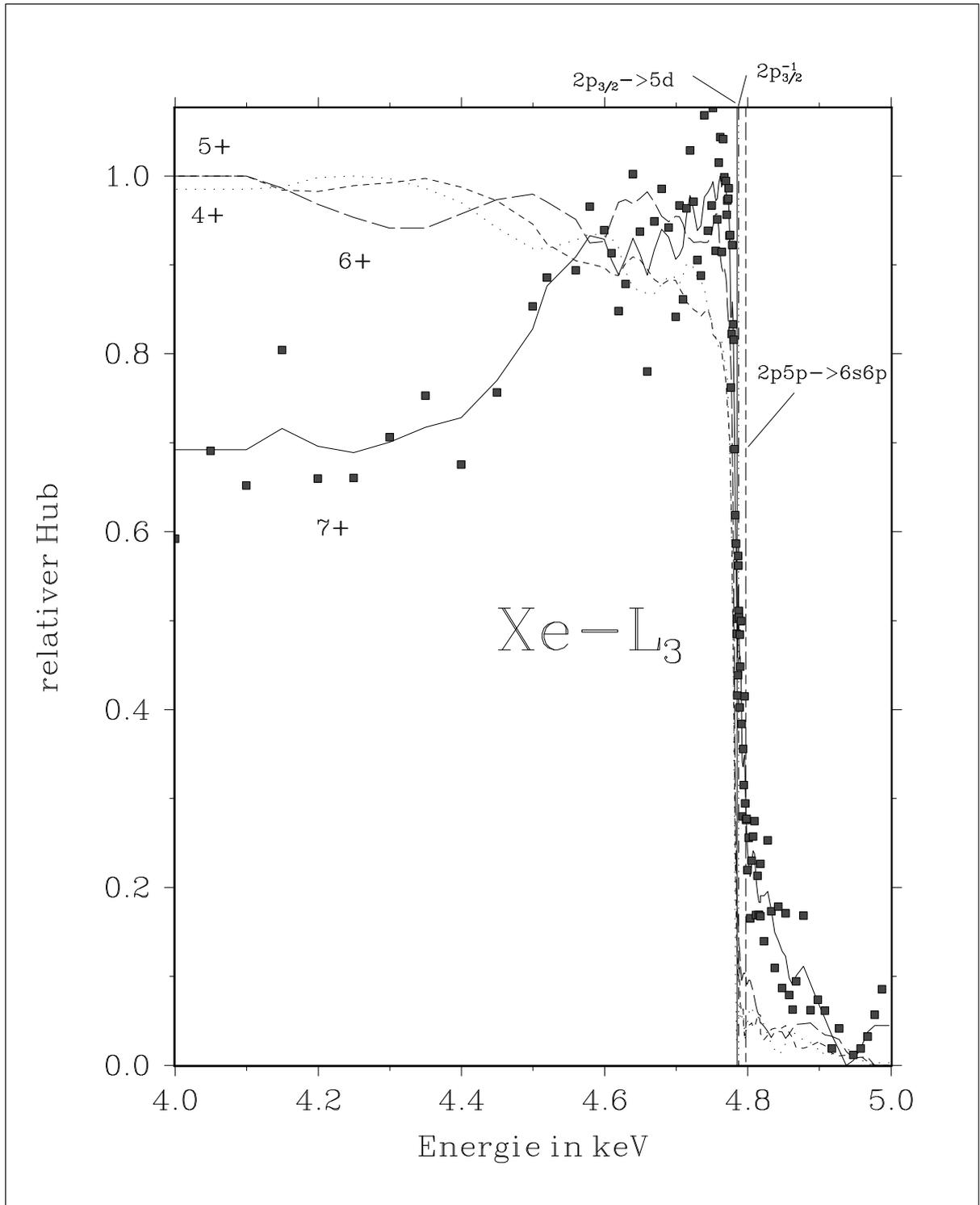


Abb. 36: Unterschiedliches Verhalten einzelner ausgewählter Ladungsstufen an der L_3 -Kante. Alle durchgezogenen Kurven sind lokale Mittelungen (symmetrisches, normiertes 5'er Mittel) über die entsprechenden Häufigkeitsverteilungen, welche auf die Differenz ihrer Maximal- und Minimalwerte zwischen 5 keV und 4 keV normiert sind. Die Symbole sollen ein Maß für die Streuung geben. Es sind die gemessenen, derselben Normierung wie die geglättete Kurve unterworfenen relativen Häufigkeiten für Xe^{7+} . Die Werte für die Resonanzenergien stammen aus [Dezarnaud 92]. Deutlich zeigt sich hier der stetige, weit vor der L_3 -Kante einsetzende Anstieg der relativen Häufigkeit für die Reaktion: $\text{Xe} + h\nu \rightarrow \text{Xe}^{7+} + 7 \cdot e^-$, welche nach der Kante scharf abfällt.

Totaler Photoionisationsquerschnitt $\tau(E)$ von Xenon

Hauptsächlich [West 78]; L-Kanten: [Veigele 73]

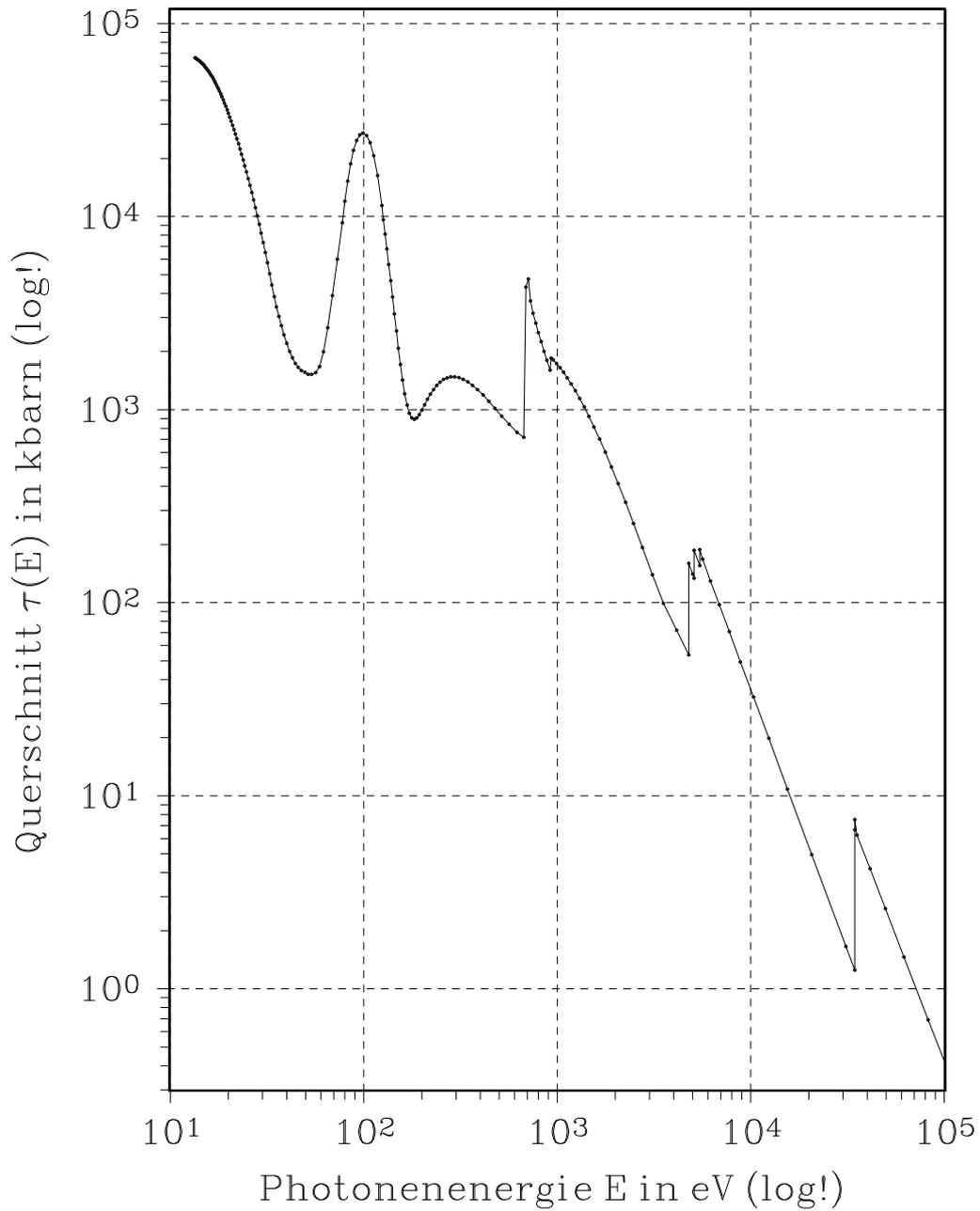


Abb. 37: Photoionisationsquerschnitt von Xenon im Bereich von XUV und weichem Röntgenlicht. Die in [West 78] und [Veigele 73] gegebenen Stützpunkte (●) sind mit Geraden verbunden, was über das Vorhandensein von Autoionisationsprofilen bei kleinen Energien hinwegtäuscht, aber einen groben Überblick über die Größenordnung und den ungefähren Verlauf von $\tau(E)$ vermittelt.

5.4 Relative Erzeugungsquerschnitte der Ladungsstufen Xe^{n+}

Zusätzlich zu den Ladungsstufen-Spektren wurden im selben Spektrometer auch Absorptionsmessungen mit dem Ionendetektor gemacht (nicht-koinzidente Ionenrate). Dieses Signal ist nicht von der mittleren Ladung, sondern allein vom Photoionisationsquerschnitt des Xenon, dem Photonenfluß sowie dem Strahlungsspektrum der Lichtquelle abhängig. Hier wird die Berechnung der relativen Erzeugungsquerschnitte erläutert. Sodann wird die einfachste Korrektur der nicht-koinzidenten Ionen-Raten auf die Intensität des einfallenden Lichtes über das ELSA-Signal und das ELSA-Spektrum beschrieben und diskutiert. Abschließend werden die Ergebnisse vorgestellt, und mit denen von [Tawara 91] verglichen.

5.4.1 Berechnung der relativen Erzeugungsquerschnitte

Schwerpunkt der Auswertung war die Ermittlung relativer Wirkungsquerschnitte für die Erzeugung der einzelnen ionischen Ladungsstufen des Xenon aus ihren gemessenen relativen Häufigkeiten und den Daten eines absoluten Photonenmonitors. Deshalb wurde viel Sorgfalt auf die Überprüfung der Linearität der Photonenflußmessungen verwendet. Beide Monitore zeigen (s.o.) ein in sich konsistentes Verhalten, weisen aber starke sprunghafte Intensitätsschwankungen im monochromatisierten Synchrotronlicht am Strahlrohr BN0 aus. Diese wurden durch Messungen anderer Gruppen an den Strahlrohren BN1 und BN3 auch im weißen Licht nachgewiesen. Erst bei Ringströmen kleiner 30 mA ist der Zusammenhang zwischen dem ELSA-Signal, einer dem Ringstrom proportionalen Gleichspannung und den Signalen der verwendeten Monitore linear. Abhilfe verschafft hier die Tatsache, daß außer den Elektron-Ion-Koinzidenzen immer auch die nicht-koinzidenten Elektronen- und Ionenimpulse gezählt werden. Die so vorhandene „natürliche“ Information über den totalen Photoionisationsquerschnitt kann zur Umrechnung der relativen Häufigkeiten auf die Einheit einer Querschnittsfläche (*barn*) genutzt werden.

Die lineare Maßstabstransformation selbst benutzt die nicht-normierten Absorptionsraten, die weder durch Division des über den Monochromator vermittelten ELSA-Spektrums (da nicht genau bekannt) noch durch Division geeigneter Monitorraten korrigiert wurden (s.Kap.2). Die Umrechnung geschah mittels einer linearen Maßstabstransformation dieser Raten an die bei [West 78] und [Veigele 73] tabellierten Daten für den Photoionisationsquerschnitt $\tau(E_\gamma)$ des Xenon, gemäß

$$\nu(E) \rightarrow \tilde{\tau}(E) = (\nu(E) + (\tau_{min} - \nu_{min})) \cdot \frac{\tau_{max} - \tau_{min}}{\nu_{max} - \nu_{min}}. \quad (73)$$

Hierbei sind die Extrema innerhalb des Energiefensters gesucht worden. Dies war bei den gemessenen Daten direkt möglich, im Gegensatz zu den an nur wenigen Punkten gegebenen Tabellenwerten. Also wurden die tabellierten Werte im Bereich der Xe-L-Kanten, also von 4 keV bis 8 keV mit Polynomen interpoliert, ohne die Kanten zu dämpfen. Hieraus bestimmten sich die Extrema der Tabellenwerte (Gleichung 73).

Berücksichtigt man die Tatsache, daß die Produktbildung im wesentlichen auch die statistischen Unsicherheiten vervielfacht, ist das hier beschriebene Verfahren das Angemessene.

Die so berechneten Querschnitte wurden ohne jede Glättung mit den relativen Häufigkeiten multipliziert, also

$$\sigma_{rel}(E) \approx \tilde{\tau}(E) \cdot h(\text{Xe}^{n+}). \quad (74)$$

Zur Einordnung der absoluten Größe der Erzeugungsquerschnitte für die ionischen Ladungsstufen sind in Abb. 37 die aus der Literatur übernommenen Stützpunkte mit einfachen Geraden verbunden dargestellt.

5.4.2 Korrektur der Absorptionsdaten auf den ELSA–Strom

Das Ionendetektor–Signal S wird als Produktansatz geschrieben zu:

$$S = \zeta_0 \cdot \sigma_{abs}(h\nu) \cdot \mathcal{P}_{spec}(h\nu) \cdot i(t) \quad (75)$$

wobei $\mathcal{P}_{spec}(h\nu)$, die spektrale Verteilung der Synchrotronstrahlung und $i(t)$ den ELSA–Strom bezeichnet. ζ_0 ist ein empirischer Faktor, der das Produkt Targetdichte \times Quellvolumen, und die Umrechnung des Elektronenstroms auf den Photonenfluß erfaßt.

Da zu jedem Meßpunkt ein über das ELSA-Signal gemessener Stromwert $i(t)$ vorlag, konnte die Korrektur durch einfache Division der Ionenrate durch das in Milliampere geeichte ELSA-Signal erfolgen, also:

$$\sigma_{abs}(h\nu) \cdot \mathcal{P}_{spec}(h\nu) \cdot \zeta_0 = \frac{S_{ion}(h\nu)}{i_{ELSA}(t)} \quad (76)$$

Der Effekt dieser Korrektur ist nur im weniger interessanten Bereich für Energien größer als 6 keV merklich, da der engere Energiebereich der L -Kanten bei schwach variierendem ELSA-Strom aufgenommen wurde.

5.4.3 Korrektur der Absorptionsdaten auf das Strahlungsspektrum

Nun ist noch der Einfluß von $\mathcal{P}_{spec}(h\nu)$ zu berücksichtigen, unabhängig von den vorher behandelten Näherungen. Diese spektrale Korrektur kann entweder auf numerischem Wege über eine Simulation der Quelle (Programm: LITOP2 von B.Maid & R.Dany, siehe z.B. Abb. 14) und anschließende Faltung mit der Durchlaßfunktion des Doppelkristallmonochromators oder über die mit dem Channeltron gemessene Charakteristik, welche natürlich auch auf die mit der Dauer der „Quick–Scans“ abfallende Intensität korrigiert werden muß, vorgenommen werden.

Zur Durchführung der empirischen Methode muß allerdings die spektrale Charakteristik des Channeltronsignals in Abhängigkeit der Photonenenergie bekannt sein, was nicht der Fall ist. Beide Wege wurden versuchsweise beschritten. Die Ergebnisse bringen keine größeren Korrekturen, dafür aber erhöhte Unsicherheit über die systematischen Fehler, weshalb sie verworfen wurden.

Nun fällt bei der linearen Maßstabstransformation, mittels derer die Ionenzählrate in den totalen Photoionisationsquerschnitt umgerechnet wird, sowohl ein im betrachteten Energiebereich konstantes, als auch ein lineares Strahlungsspektrum heraus. Also kann auf eine explizite Korrektur im Rahmen der aus der Maßstabstransformation selbst erwachsenen Unsicherheiten verzichtet werden.

5.4.4 Wirkungsquerschnitte für die Erzeugung der Ladungsstufen

Die Werte für die relativen Erzeugungsquerschnitte der Ladungsstufen Xe^{n+} sind in hervorragender Übereinstimmung mit den von der japanischen Gruppe [Tawara 91] ermittelten. Die auf absolute Einheiten transformierte Häufigkeitsinformation betont zwar die Sprungstellen an sich, verdeckt aber, wie im Falle von Xenon hier und bei [Tawara 91] sowie für Ar bei [Ueda 91] zu sehen, alle Effekte, die über die Lokalisierung der Kanten hinausgehen. Ursache dafür ist das schlechte Signal-Rausch-Verhältnis der Monitorrate. Die zur Skalierung verwendete nicht-koinzidente Ionenrate beträgt ca. 100 Hz unter- und maximal 1 kHz oberhalb der Xenon- L_{III} -Kante. Deshalb wurden im Rahmen dieser Arbeit die „absoluten“ Werte für die Wirkungsquerschnitte nur zu diesem Zwecke ermittelt. Die viel subtileren Fragestellungen des Verhaltens der relativen Ionisationsquerschnitte an und oberhalb der Kanten sowie bis zu 20 eV vor den Schwellen wurden mittels der auf 1 normierten Häufigkeiten untersucht. Die in Abb. 38 dargestellten Wirkungsquerschnitte für die einzelnen Ladungsstufen des Xenon wurden durch in Gleichung 74 beschriebene punktweise Multiplikation der relativen Häufigkeiten der einzelnen ionischen Ladungsstufen mit der in *kbarn* umgerechneten nicht-koinzidenten Ionenrate der jeweiligen Energie berechnet. Die Abweichung dieser absoluten

Werte von denen der japanischen Gruppe [Tawara 91] liegt bei ca. 5%. Dies ist verglichen mit den Spitze-zu-Spitze-Abweichungen in der Größenordnung von 15% zu vernachlässigen. Auch rechtfertigt es die einfache Methode, die in dieser Arbeit verwendet wurde.

Erzeugungsquerschnitt von Xe^{i+} -Ionen

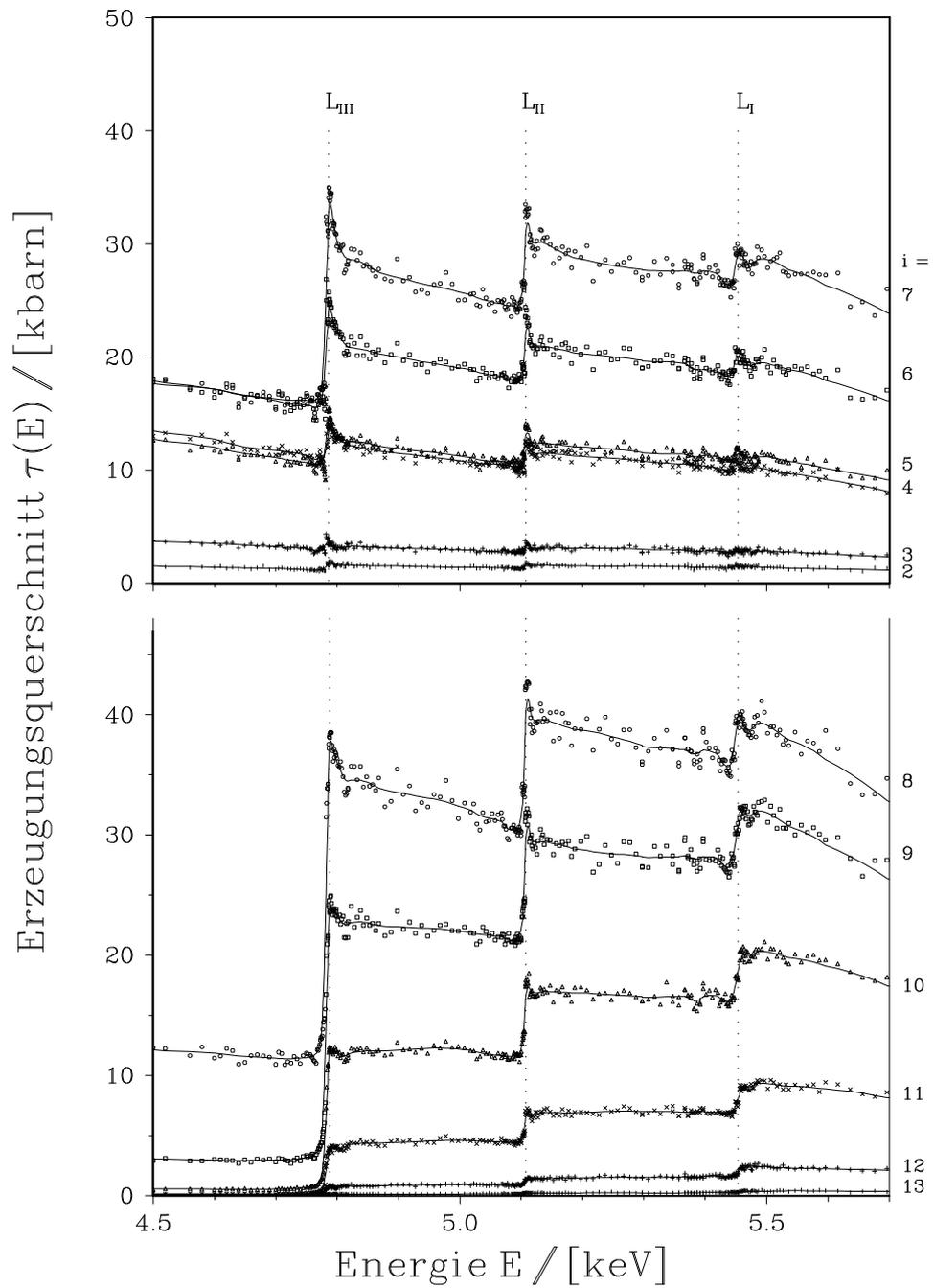


Abb. 38: Erzeugungsquerschnitt der Ladungsstufen Xe^{2+} bis Xe^{13+} . Dargestellt ist das Produkt aus der relativen Häufigkeit der jeweiligen ionischen Ladungsstufe und dem nichtkoinzident gemessenen totalen Photoabsorptionsquerschnitt in $\text{kbarn} (\equiv 10^{-21} \text{cm}^2)$ als Funktion der Energie des eingestrahlten monochromatisierten Synchrotronlichtes. Der Wirkungsquerschnitt für die Reaktion $\text{Xe} \rightarrow \text{Xe}^{14+} + 14e^-$ ist zu klein, um auf dieser Skala dargestellt zu werden. Die durchgezogenen Kurven sollen das Auge führen und sind durch lokale Mittelung gebildet.

6 Zusammenfassung der Ergebnisse

Die Resultate dieser Arbeit lassen sich wie folgt zusammenfassen:

- Es wurden ladungsspektroskopische Messungen an Xe im Bereich der L -Kanten mit einem Flugzeitmassenspektrometer am Strahlrohr BN0 am Elektronenspeicherring ELSA durchgeführt.
- Es wurden Programm-Pakete zur Simulation der elektrostatischen Feldverteilung im Spektrometer erstellt. Die Simulationsprogramme ermöglichten eine realistische Berechnung des tatsächlichen Einflusses des Felddurchgriffs durch die Netze auf die Feldverteilung im Spektrometer. Erste Berechnungen daraus abgeleiteter Linienformen in den Flugzeitspektren lieferten apparative 10%-Breiten von etwa 4 ns, dem Vierfachen der festen Zeitauflösung (eine Nanosekunde).
- Wird der Energie-Bandpaß des Doppelkristallmonochromators als Gaußprofil angenommen, so beträgt seine Halbwertsbreite 1.2 eV für $\text{InSb}_{(111)}$ -Kristalle und 1.5 eV bei Verwendung von $\text{Ge}_{(220)}$ -Kristallen.
- Die Daten der verwendeten Monitore zeigen übereinstimmend, daß für ELSA-Ringströme oberhalb 30 mA der Zusammenhang zwischen der Anzahl der umlaufenden Elektronen einerseits und der Intensität des monochromatisierten Synchrotronlichts andererseits nicht eindeutig ist. Auch unterhalb 25 mA ist der monochromatische Photonenfluß am Strahlrohr BN0 dem Strom der umlaufenden Elektronen nicht direkt proportional.
- Die als Funktion der Energie bestimmte mittlere Ladung bestätigt weitgehend die Daten der japanischen Gruppen ([Tonuma 87] und [Tawara 91]). Dies gilt auch für den energetischen Verlauf der Häufigkeitsverteilungen und Erzeugungsquerschnitte der einzelnen Ladungsstufen.
- Die mittlere Ladung steigt schon weit vor der L_3 -Kante an. Insbesondere die Ladungsstufen Xe^{7+} und Xe^{8+} werden ab etwa 800 eV vor der Kante zunehmend wahrscheinlicher. Dies unterscheidet sich signifikant von dem sprunghaften Verhalten der relativen Häufigkeiten der anderen beobachteten Ladungsstufen an der Kante.

Ausblick:

- Das Verhalten der relativen Häufigkeiten der einzelnen Ladungsstufen vor der L_3 -Kante wird Gegenstand einer Veröffentlichung sein, die in Vorbereitung ist.
- Das realisierte Programmpaket TOFMODEL unterstützt den Entwurf des neuen, geplanten Flugzeitspektrometers und ermöglicht die dynamische Fehleranalyse (Teilchenverfolgungsrechnungen).
- Der Zusammenhang zwischen Photonenfluß und ELSA-Strom wird in naher Zukunft auch in Zusammenarbeit mit der ELSA-Mannschaft experimentell untersucht werden. Erste Treffen zum Informationsaustausch haben schon stattgefunden.

Literaturverzeichnis

- [Aberg 92] **T Åberg:** „*Unified Theory of Auger Electron Emission*“, Physica Scripta T41, (1992), 71-6.
- [Althoff 87] **KH Althoff und G Anton et al.:** „*ELSA, ein neuer Beschleuniger der Mittelenergiephysik.*“, BONN-IR-87-30, (1992).
- [Althoff 90] **KH Althoff, W von Drachenfels, A Dreist, D Husmann, M Neckenig et al.:** „*ELSA – One year of experience with the Bonn electron stretcher accelerator*“, Particle Accelerators 27, (1990), 101-6.
- [Amusia 90] **MY Amusia:** „*Atomic Photoeffect*“, Plenum, New York, (1990).
- [Amusia 92] **MY Amusia:** „*Radiative Semi-Auger Decay in Atoms*“, Physica Scripta, T41, (1992), 23-7.
- [Anders 92] **N Anders:** „*Innerschalen-Photofragmentation von CS₂, OCS, H₂S und SF₆ nach Anregung mit monochromatischer Röntgenstrahlung variabler Energie nahe der 1s-Ionisationsgrenze des Schwefels*“, Dissertation, BONN-IR-92-30, (1992).
- [Bauchspiess 84] **KR Bauchspiess und ED Crozier:** „*Crystal Glitches of X-Ray Monochromators*“, in: KO Hodgson, B Hedman und JE Penner-Hahn (Hrsg.): „*EXAFS and Near Edge Structures III*“, Springer Proceedings in Physics 2, (1984), 514-6.
- [Bergmann 89] **T Bergmann, TP Martin und H Schaber:** „*High-resolution time-of-flight mass spectrometers: Part I. Effects of field distortions in the vicinity of wire meshes*“, Rev Sci Instrum 60(3), (1989), 347-9.
- [Breinig 80] **M Breinig, MH Chen, GE Ice, F Parente und B Crasemann:** „*Atomic inner-shell level energies determined by absorption spectrometry with synchrotron radiation*“, Phys Rev A 22(2), (1980), 520-8.
- [Carlson 65] **TA Carlson und MO Krause:** „*Atomic Readjustment to Vacancies in the K and L Shells of Argon*“, Phys Rev 137(6A), (1965), A 1655-62.
- [Carlson 66] **TA Carlson, WE Hunt und MO Krause:** „*Relative Abundances of Ions Formed as the Result of Inner-Shell Vacancies in Atoms*“, Phys Rev 151(1), (1966), 41-7.
- [Chauvistre 87] **R Chauvistré:** „*Absorptionsspektroskopie an Atomen und kleinen Molekülen im weichen Röntgengebiet*“, Diplomarbeit, BONN-IR-87-37, (1987).
- [Dezarnaud 92] **C Dezarnaud, F Guillot und M Tronc:** „*Near L-edge (4.7 – 5.5keV) photoionization in Xenon*“, J Phys B 25, (1992), L123-6.
- [Doppelfeld 91] **J Doppelfeld:** „*Ladungsstufenspektroskopie der Relaxation einer Argon K-Vakanz.*“, Diplomarbeit, BONN-IR-91-34, (1991).
- [Doppelfeld 93a] **J Doppelfeld, N Anders, B Esser, H Scherer, F von Busch und S Zinz:** „*A close look at Ar photoion spectra around the K edge: non-diagram transitions and double photoionisation*“, J Phys B 26, (1993), 445-56.

- [Doppelfeld 93b] **J Doppelfeld, F von Busch, B Esser, U Ankerhold und S Zinz:** „Anomales Verhalten der Photoionisation von Argon dicht unterhalb der $1s \rightarrow 4p$ Resonanz“, Verh d DPG 3/93, Frühjahrstagung Berlin, (1993), 308.
- [Eadie 77] **WT Eadie, D Drijard, FE James, M Roos und B Sadoulet:** „Statistical methods in experimental physics“, 2nd Edition, North-Holland, Amsterdam, (1977), 46-7.
- [Felfli 92] **Z Felfli und ST Manson:** „Photoionization of Inner Shells of Excited Atoms: Dominance of Two-Electron Transitions“, Phys Rev A 68(11), (1992), 1687-9.
- [Fraser 91] **GW Fraser, MT Pain, JE Lees und JF Pearson:** „The operation of microchannel plates at high count rates“, Nucl Instr and Methods in Phys Res A306, (1991), 247-60.
- [Fraser 91b] **GW Fraser, MT Pain und JE Lees:** „Microchannel plates operation at high count rates: further studies“, Nucl Instr and Methods in Phys Res A327, (1993), 328-36.
- [Grosser 89] **J Grosser und H Schulz:** „Electrostatic screening by a plane grid“, J Phys D 22, (1989), 723-9.
- [Hayaishi 90] **T Hayaishi, A Yagishita, E Shigemasa, E Murakami und Y Morioka:** „Coincidence Spectra of Threshold Electrons and Ions Around the Kr 3d and Xe 4d Delayed Onset Regions“, Physica Scripta 41, (1990), 35-7.
- [Hayaishi 84] **T Hayaishi, Y Morioka, Y Kageyama, M Watanabe, IH Suzuki, A Mikuni, G Isoyama, S Asaoka und M Nakamura:** „Multiple photoionisation of the rare gases in the XUV region“, J Phys B 17, (1984), 3511.
- [Husmann 88] **D Husmann et al.:** „ELSA – The continuous beam accelerator at bonn“, Proc of the European Particle Accelerator Conference, Rom, p.356, (Juni 1988).
- [Huwer 91] **W Huwer:** „Aufbau und Test von Nachweissystemen für Elektronenausbeutemessungen in der Röntgenabsorptionsspektroskopie“, Diplomarbeit, BONN-IR-91-20, (1991).
- [Ishii 86] **T Ishii und G Isoyama:** „SOR-Ring at ISSP and its Activity“, Technical Report of ISSP, August 1986.
- [Jackson 75] **JD Jackson:** „Classical Electrodynamics“, 2nd Edition, John Wiley & Sons Inc New York, (1962,1975).
- [Jitschin 87] **W Jitschin, U Werner, G Materlik und GD Doolen:** „Electron correlations in the L-shell photoionization of heavy elements“, Phys Rev A 35, (1987), 5038-45.
- [Kaemmerling 93] **B Kämmerling, B Krässig und V Schmidt:** „Angle-dependent post collision interaction in inner-shell photoionization of xenon“, J Phys B 26, (1993), 261-70.
- [Kim 55] **KH Kim, MI Bell, CM Dozier, RK Freitag und CE Bouldin:** „Correcting for x-ray energy calibration error caused by misalignment of a right-angle linkage monochromator“, Rev Sci Instr 62(4), (1991), 982-5.

- [Kohra 78] **K Kohra, M Ando, T Matsushita und H Hashizume:** „*Design of high resolution X-ray optical system using dynamical diffraction for synchrotron radiation*“, Nucl Instr and Methods 152, (1978), 161-6.
- [Kossmann 93] **H Kossmann:** „*Counting statistics for non-coincident and coincident particle registration using finite production intervals*“, Meas Sci Technol 4, (1993), 16-21.
- [Krause 79a] **MO Krause:** „*Atomic Radiative and Radiationless Yields for K and L Shells*“, J Phys Chem Ref Data 8(2), (1979), 307-27.
- [Krause 79b] **MO Krause und JH Oliver:** „*Natural Widths of Atomic K and L Levels, $K\alpha$ X-Ray Lines and Several KLL Auger Lines*“, J Phys Chem Ref Data 8(2), (1979), 329-38.
- [Kuetsgens 90] **U Kuetsgens:** „*Systematische Untersuchung der K-Schalen-Absorptionsspektren der kubisch und pyramidal koordinierten Elemente Titan und Vanadium in komplexen Molekülen und Festkörpern*“, Dissertation, BONN-IR-90-43, (1990).
- [Lemonnier 78] **M Lemonnier, O Collet, C Depautex, JM Esteva und D Raoux:** „*High vacuum two crystal soft X-ray monochromator*“, Nucl Instr Meth 152, (1978), 109-11.
- [Lindgren 82] **I Lindgren und J Morrison:** „*Atomic Many-Body Theory*“, Springer Series in Chemical Physics 13, (1982).
- [Mukoyama 87] **T Mukoyama, T Tonuma, A Yagishita, H Shibata, T Koizumi, T Matsuo, K Shima und H Tawara:** „*Charge distribution of Xe ions as a result of multiple photoionisation of Xe atoms between 4.1 and 8.0 keV*“, J Phys B 20, (1987), 4453-60.
- [Nagata 90] **T Nagata, M Yoshino, T Hayaishi, Y Itikawa, Y Itoh, T Koizumi, T Matsuo, Y Sato, E Shigemasa, Y Takizawa und A Yagishita:** „*Ad-Shell Photoionization of Xe, Cs, Ba, Sm, Eu and Yb Atoms Studied by Photoion-Yield Spectra*“, Physica Scripta 41, (1990), 47-50.
- [Omar 91a] **G Omar und Y Hahn:** „*Cascade decays of hollow ions*“, Phys Rev A 43(9), (1991), 4695-701.
- [Omar 91b] **G Omar und Y Hahn:** „*Photo-Auger-ionization and charge-state distribution*“, Phys Rev A 44(1), (1991), 483-8.
- [Pantelouris 93] **M Pantelouris:** „*Mündliche Mitteilung*“, (1993).
- [Perera 84] **RCC Perera und RE LaVilla:** „*Molecular x-ray spectra: S-K β emission and K absorption spectra of SCO and CS₂*“, J Chem Phys 81(8), (1984), 3375-3382.
- [Pulm 93] **F Pulm:** „*Zirkulardichroismus - Messungen am Carbonylchromophor in Kampferverbindungen mit Synchrotronstrahlung*“, Diplomarbeit, BONN-IR-93-19.
- [Rek 84] **ZU Rek, GS Brown und T Troxel:** „*Analysis and Application of Multiple Diffraction Phenomena in Perfect Crystal Monochromators*“, in: KO Hodgson, B Hedman und JE Penner-Hahn (Hrsg.): „*EXAFS and Near Edge Structures III*“, Springer Proceedings in Physics 2, (1984), 511-3.

- [Renninger 37] **M Renninger:** „Umweganregung‘, eine bisher unbeachtete Wechselwirkungserscheinung bei Raumgitterinterferenzen“, Z Phys 106, (1937), 141-76.
- [Schaphorst 93] **SJ Schaphorst, AF Kodre, J Ruscheinski, B Crasemann, T Åberg, J Tulkki, MH Chen, Y Azuma und GS Brown:** „Multielectron inner-shell photoexcitation in absorption spectra of Kr: Theory and experiment“, Phys Rev A 47(3), (1993), 1953-66.
- [Scherer 89] **H Scherer:** „Messung ionischer Ladungsstufenverteilung nach Innerschalen-Photoionisation von Edelgasen“, Diplomarbeit, BONN-IR-89-39, (1989).
- [Schmid 87] **EW Schmid, G Spitz und W Lösch:** „Theoretische Physik mit dem Personal Computer“, Springer Verlag Berlin Heidelberg, (1987), 97-102.
- [Slater 93] **DC Slater und JG Timothy:** „Microchannel plate modal gain variations with temperature“, Rev Sci Instr 64(2), (1993), 430-5.
- [Smith 78] **D Smith:** „Improved correction formulae for coincidence counting“, Nucl Instr Meth 152, (1978), 505-19.
- [Sobelman 79] **II Sobelman:** „Atomic Spectra and Radiative Transitions“, Springer Series in Chemical Physics 1, (1979).
- [Tawara 91] **H Tawara, T Hayaishi, T Koizumi, T Matsuo, K Shima, T Tonuma und A Yagishita:** „Production of multiply charged Xe^{i+} ions via photoionization and excitation in the L-edge region“, J Phys B 25, (1992), 1467-73.
- [Tonuma 87] **T Tonuma, A Yagishita, H Shibata, T Koizumi, K Shima, T Mukoyama und H Tawara:** „Multiple photoionisation of Xe atoms between 4.1 and 8.0keV: mean charge of Xe ions“, J Phys B 20, (1987), L31-6.
- [Toernig 88] **W Törnig und P Spellucci:** „Numerische Mathematik für Ingenieure und Physiker. Band1: Numerische Methoden der Algebra“, Springer Verlag Berlin, 2. Auflage, (1988), 170-83.
- [Toernig 90] **W Törnig und P Spellucci:** „Numerische Mathematik für Ingenieure und Physiker. Band2: Numerische Methoden der Analysis“, Springer Verlag Berlin, 2. Auflage, (1990), 371-93.
- [Ueda 91] **K Ueda, E Shigemasa, Y Sato, A Yagishita, M Ukar, H Maezawa, T Hayaishi und T Sasaki:** „Threshold behaviour of the multiply-charged photoion yields near the Ar K edge“, J Phys B 24, (1991), 605-13.
- [Veigele 73] **WM J Veigele:** „Photon cross section from 0.1 keV to 1 MeV for elements $Z = 1$ to $Z = 94$ “, Atomic Data 5(1), (1973), 51-111.
- [Vetterling 89] **WT Vetterling, S Teukolsky, WH Press und BP Flannery:** „Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing“ Cambridge University Press, Cambridge, (1988,1992), 866-70.
- [Volkel 83] **M Völkel und W Sandner:** „Optimization of electron energy analysers for application in coincidence experiments“, J Phys E 16, (1983), 456-62.

- [vonBusch 91] **F von Busch:** „Über den Einfluß von Justierfehlern auf die Funktion der Doppelkristall-Monochromatoren“, Interner Bericht, BONN-MS-9107, (1991).
- [Werner 88] **U Werner und W Jitschin:** „Lvacancy decay in heavy elements ($72 \leq Z \leq 82$) by the synchrotron photoionization method“, Phys Rev A 38(8), (1988), 4009-18.
- [West 78] **JB West und J Morton:** „Absolute photoionization crosssection tables for Xenon in the VUV and the soft X-ray regions“, At Data Nucl Data Tables 22(2), (1978), 103-7.
- [Whitfield 92] **SB Whitfield, CD Caldwell, DX Huang und MO Krause:** „Near threshold 4d photoexcitation and photoionization of Xe“, J Phys B 25, (1992), 4755-71.
- [Wiemann 91] **T Wiemann:** „Aufbau und Test eines Toroidgittermonochromators“, Diplomarbeit, BONN-IR-91-63, (1991).
- [Wiley 55] **WC Wiley und IH McLaren:** „Time-of-Flight Mass Spectrometer with Improved Resolution“, Rev Sci Instr 26(12), (1955), 1150-7.
- [Wiza 79] **JL Wiza:** „Microchannel plate detectors“, Nucl Instr Meth 162, (1979), 587-601.