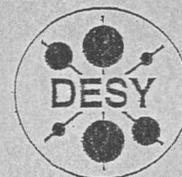


A
DEUTSCHES ELEKTRONEN-SYNCHROTRON

DESY-THESIS-1999-009

März 1999



X1999-00596

Photoionenspektroskopie der
 $^2P^0$ -Doppel- und Dreifachanregungen
an Lithiumatomen

von



M. K. Lee

ISSN 1435-8085

NOTKESTRASSE 85 - 22607 HAMBURG

DESY behält sich alle Rechte für den Fall der Schutzrechtserteilung und für die wirtschaftliche Verwertung der in diesem Bericht enthaltenen Informationen vor.

DESY reserves all rights for commercial use of information included in this report, especially in case of filing application for or grant of patents.

To be sure that your reports and preprints are promptly included in the
HEP literature database
send them to (if possible by air mail):

DESY
Zentralbibliothek
Notkestraße 85
22603 Hamburg
Germany

DESY
Bibliothek
Platanenallee 6
15738 Zeuthen
Germany

Photoionenspektroskopie der $^2P^0$ -Doppel- und Dreifachanregungen an Lithiumatomen

DISSERTATION

zur Erlangung des Doktorgrades
des Fachbereiches Physik
der Universität Hamburg

vorgelegt von

Lee, Min Kyu ✓

aus Kwangju in Süd-Korea

Hamburg

1998

Photoionenpektroskopie der
2p-Doppel- und Dreifachanregungen
an Lithiumatomen

DISSERTATION

zur Erlangung des Doktorgrades
des Fachbereiches Physik
der Universität Hamburg

Gutachter der Dissertation: Prof. Dr. B. Sonntag
Prof. Dr. W. Neuhauser

Gutachter der Disputation: Prof. Dr. B. Sonntag
Prof. Dr. G. Materlik

Datum der Disputation: 22. Januar 1999

Sprecher des Fachbereichs
Physik und Vorsitzender
des Promotionsausschusses: Prof. Dr. B. Kramer

Photoion spectroscopy of double and triple exciting of lithium atoms

Abstract

Using a highly monochromatized high flux VUV photon beam, the photoion yield spectra of lithium atoms were measured in the energy range of the double and triple excitations. The narrow and complicated resonant structures of double excitations could be well resolved in the Li^+ -photoion yield spectra. The measured photoionization cross sections of the double excitations agree with theoretical cross sections obtained by the saddle-point method and the R-matrix method. Numerous resonances, caused by the simultaneous excitation of three electrons by the absorption of one photon, were observed in the spectra of the Li^+ - and Li^{2+} -photoion yield in the energy range of the triple excitations. The spectra of the Li^+ -photoion yield show that the strong interactions of the numerous open and closed channels prevent the appearance of well developed Rydberg series. The intensity ratio of Li^{2+} - to Li^+ -photon ion yield changes markedly with photon energy, it increases strongly near the $2l/2l'$ -thresholds.

Im Energiebereich der Doppel- und Dreifachanregungen des Lithiumatoms wurden die Photoionenausbeutespektren unter Benutzung eines sehr gut monochromatisierten VUV-Lichtstrahls mit hohem Photonenfluß gemessen. Die schmalen und komplizierten resonanten Strukturen der Doppelanregungen konnten in der Li^+ -Photoionenausbeute gut aufgelöst werden. Die gemessenen Photoionisationsquerschnitte der Doppelanregungen werden durch Rechnungen mit Hilfe der Sattelpunkt-Methode und der R-Matrix-Methode gut wiedergegeben. Im Energiebereich der Dreifachanregungen wurden in den Spektren der Li^+ - und Li^{2+} -Photonionenausbeute zahlreichen Resonanzen, die durch die simultane Anregung der drei Elektronen durch Absorption eines Photons hervorgerufen werden, beobachtet. Die Spektren der Li^+ -Photonionenausbeute zeigen, daß die starken Wechselwirkungen der zahlreichen offenen und geschlossenen Kanäle das Auftreten von Rydbergserien weitgehend verhindern. Das Intensitätsverhältnis der Li^{2+} - zur Li^+ -Photonionenausbeute ändert sich in Abhängigkeit der Photonenergie, es nimmt nahe den $2l/2l'$ -Schwellen stark zu.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	2
2	Theoretische Grundlagen	4
2.1	Das Energieniveauschema des Lithiums	4
2.2	Autoionisation	7
2.3	Quantendefekt-Theorie für Rydbergserien	11
2.4	Die Berechnung der Wellenfunktion für das Lithiumatom	13
3	Die Grundlagen des Experimentes	19
3.1	Einleitung	19
3.2	Lichtquelle	20
3.3	Monochromator	23
3.4	Atomstrahlquelle und Druckstufe	26
3.5	Flugzeitspektroskopie	28
3.6	Experimentelle Durchführung und Datenaufnahme.	29
3.7	Monochromatoreichung	36
4	Diskussion der Ergebnisse	40
4.1	Li-Doppelanregungen	40
4.1.1	Einleitung	40
4.1.2	Doppelanregungen unterhalb der $1s2s\ ^3S$ -Schwelle	43
4.1.3	Zwischen $1s2s\ ^3S$ - und $1s2p\ ^1P$ -Schwelle.	57
4.1.4	In der Nähe der $1s3l$ -Schwellen	71
4.2	Dreifachanregungen	80
4.2.1	Die Dreifachanregungen des Dreielektronensystems	80
4.2.2	Die $^2P^o$ -Dreifachanregungen des Lithium-Atoms	86
5	Zusammenfassung	111
	Literaturverzeichnis	113

1 Einleitung

Seit vielen Jahren ist die Beschreibung von Vielteilchensystemen Gegenstand intensiver Forschung. Schon das Dreikörperproblem kann weder in der makroskopischen durch die klassische Mechanik beschriebenen Welt, noch in der mikroskopischen durch die Quantenmechanik beschriebenen Welt analytisch gelöst werden. Eine Lösung ist nur näherungsweise möglich. Wie bereits in der klassischen Mechanik gezeigt wurde, liegt die grundsätzliche Schwierigkeit für eine mathematisch analytische Lösung in den Korrelationseffekten, die sich aus den Wechselwirkungen eines Teilchen mit den anderen Teilchen ergeben.

Das Heliumatom ist ein ideales System für die Untersuchung des mikroskopischen Dreikörperproblems. Die $2l2l'$ -Doppelanregungszustände des Heliumatoms sind in diesem Zusammenhang von besonderem Interesse, da Korrelationseffekte hier eine große Rolle spielen. Zudem sind sie theoretischen Näherungen zugänglich. Die 1P -Doppelanregungszustände des Heliums wurden zum ersten Mal im Jahre 1963 beobachtet [Mad63]. Durch Berücksichtigung von Elektron-Elektron-Korrelationseffekten im Rahmen des Modells der Konfigurationswechselwirkung konnte eine anschauliche Erklärung für die bei Doppelanregungen beobachteten Phänomene gefunden werden [Coo63]. Seitdem sind Doppelanregungen mit verschiedenen experimentellen Methoden und mit weiterentwickelten Ansätzen experimentell und theoretisch untersucht worden. Domke et al haben das Spektrum des gesamten 1P -Doppelanregungsbereiches des Heliums mittels hochauflösender Absorptionsspektroskopie gemessen [Dom92b, 95]. Die komplizierten Resonanzen der hohen Doppelanregungen wurden vollständig klassifiziert, indem drei neue Korrelationsquantenzahlen, die in [Her75, Lin86] vorgestellt wurden, verwendet wurden. Diese beschreiben die Winkelkorrelation zwischen den zwei Elektronen und deren Radialkorrelation. Die partiellen Wirkungsquerschnitte und die Winkelverteilung der Photoelektronen wurden durch Photoelektronenspektroskopie mit sehr hoher Auflösung an einer Synchrotronstrahlungsquelle der dritten Generation gemessen [Men95]. Die sehr genauen und zahlreichen Meßergebnisse tragen zur Entwicklung besserer Modelle für die Beschreibung der Mehrfachanregungen, die sich auch auf andere Mehrelektronen-Atome und -Ionen übertragen lassen, bei.

Das einfachste offenschalige Mehrelektronenatom ist das Vier-Körper-Couloumb-System Lithium. Obwohl Lithium nur ein Elektron mehr als Helium besitzt, ist die korrelierte Dynamik der Elektronen in Lithium deutlich komplizierter. In Lithium existieren zusätzlich zu den Doppelanregungen wie in Helium auch Dreifachanregungen.

Im doppelt angeregten Lithiumatom ist die K-Schale durch ein Elektron besetzt anders als im doppelt angeregten Heliumatom, dessen K-Schale unbesetzt ist. Seit Ederer et al 1970 erstmals das Photoabsorptionsspektrum der Li-Doppelanregungen gemessen haben [Ede70], dienen die Doppelanregungen des Lithiums zusammen mit denen des Heliums als Modellsystem für das

Studium der Vielteilcheneffekte. Deshalb sind die Li-Doppelanregungen mit Hilfe verschiedener experimenteller und theoretischer Methoden intensiv untersucht worden (siehe Übersichtsartikel in [Son92]). Die Spektren der 2P -Doppelanregung zeigen sehr komplizierte resonante Strukturen aufgrund von Interferenzeffekten zwischen den eng liegenden diskreten Anregungen und den Kontinua. Deutliche Diskrepanzen zwischen den experimentellen und berechneten Ergebnissen in einigen Bereichen der Li-Doppelanregungen waren der Anlaß für genaue Messungen zur Photoabsorption der Li-Doppelanregungen mit hoher Auflösung.

Etwa 140 eV oberhalb des $1s^2 2s \ {}^2S$ -Grundzustandes des Lithiums befindet sich die Gruppe der dreifach angeregten Zustände $(nl n' l' n'' l'', n, n', n'' \geq 2)$: alle drei Elektronen werden hier gleichzeitig angeregt. Rødbro et al konnten die Augerlinien beobachten, die aus dem Zerfall der dreifach angeregten Li-Atome stammen [Rød79]. In dem gemessenen Elektronenstoß-Ionisationsquerschnitt des Li^+ -Ions wurden die dreifach angeregten $2s^2 2p \ {}^2P$ - und $2s^2 2p^2 \ {}^2D$ -Zustände beobachtet [Mül89]. Kürzlich wurde das erste Photoabsorptionsexperiment zur Li-Dreifachanregung unter Benutzung der Dual-Laser-Plasma Technik durchgeführt [Kie94]. Bei diesem Experiment wurde das Photoabsorptionsspektrum in der Nähe der $2s^2 2p$ -Resonanz gemessen. Diese Messung regte weitere Messungen zu den zahlreichen resonanten Strukturen im Bereich der Li-Dreifachanregungen an.

In dieser Arbeit wird ein Experiment zur Photoabsorption von Lithiumatomen im Bereich der Doppel- und Dreifachanregungen vorgestellt. Dieses Experiment wurde am Meßplatz BW3 (HASYLAB), an dem ein hoher Photonenfluß aus einer sehr gut monochromatisierten VUV-Lichtquelle zur Verfügung steht, durchgeführt. Die Dipolübergangswahrscheinlichkeiten zwischen dem Grund- und den Dreifachanregungszuständen sind sehr klein. Um eine gute Nachweiswahrscheinlichkeit zu erzielen wurde ein Ionenflugzeitspektrometer benutzt.

Zunächst werden in Kapitel 2 die theoretischen Grundlagen zum Verständnis des Lithium-Energieniveauschemas und der Autoionisation vermittelt. Dazu werden die wichtigsten Methoden zur Berechnung der Mehrfachanregungen des Dreielektronensystems vorgestellt. Danach folgen in Kapitel 3 Ausführungen zu den experimentellen Aspekten dieser Arbeit, die im wesentlichen den Meßplatz BW3 bei HASYLAB und die bei dem Experiment verwendete Ionenflugzeitspektroskopie betreffen. Das nachfolgende Kapitel 4 ist den experimentellen Ergebnissen und ihrer Diskussion gewidmet. Schließlich gibt Kapitel 5 eine Zusammenfassung.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 Das Energieniveauschema des Lithiums

Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Photoabsorption von Li-Atomen mit Synchrotronstrahlung untersucht, die sich im $1s^2 2s \ ^2S_{\frac{1}{2}}$ -Grundzustand befinden. Die $^2P^o$ -Zustände, die durch die Dipolübergänge aus dem Li-Grundzustand $1s^2 2s \ ^2S$ erreicht werden können, werden mit Hilfe des Energieniveauschemas in Abb. 1 diskutiert.

Die valenzangeregten Zustände $1s^2 nl$, in die das 2s-Valenzelektron angeregt wird, befinden sich ab 1.85 eV oberhalb des Grundzustandes. Ihre Serie konvergiert gegen die $\text{Li}^+ 1s^2 \ ^1S$ -Ionisationsschwelle bei 5.39 eV.

Zwischen 58 eV und der $\text{Li}^{2+} 1s \ ^2S$ -Ionisationsschwelle bei 81.01 eV gibt es die $1s nl n' l'$ ($n, n' \geq 2$)-Zustände. Dabei gibt es zwei Möglichkeiten. Eine Möglichkeit ist einfach angeregte Zustände $1s 2s nl$, bei denen ein 1s-Innenschalenelektron angeregt wird. Die $1s 2s nl$ -Serien konvergieren gegen $\text{Li}^{+*} 1s 2s \ ^3,1S$ -Ionisationsschwellen. Die andere Möglichkeit ist doppelt angeregte Zustände $1s nl n' l'$, bei denen ein 1s-Innenschalenelektron und ein 2s-Valenzelektron gleichzeitig angeregt werden. Die Rydbergserien der $1s nl n' l'$ -Zustände konvergieren gegen die $\text{Li}^{+*} 1s nl$ -Ionisationsschwellen (siehe Energieniveauschema von Li_{II} in Abb. 1).

Von 142 eV bis zur Li^{3+} -Ionisationsschwelle bei 203 eV befindet sich die Gruppe der dreifach angeregten Zustände ($n l n' l' n'' l''$, $n, n', n'' \geq 2$), bei denen alle drei Elektronen gleichzeitig angeregt werden. Die Rydbergserien der $n l n' l' n'' l''$ -Zustände konvergieren gegen die Ionisationsschwellen, die den $n l n' l'$ -doppelt angeregten Zuständen von Li^+ entsprechen.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden die doppelt und dreifach angeregten Zustände mit VUV-Synchrotronstrahlung untersucht. Die untersuchten Zustände liegen energetisch über der Ionisationsschwelle (siehe Abb. 1). Bei diesen Niveaus ist nicht nur der strahlende Zerfall, sondern auch die Autoionisation möglich, die in Abb. 1 mit horizontalen Pfeilen bezeichnet ist. Die Autoionisation stellt für leichte Atome (He, Li und Na) den dominierenden Zerfallskanal dar, sofern die Autoionisation nicht durch Auswahlregeln verboten ist [Åbe82]. Durch die Autoionisation entstehen ein oder mehrere freie Elektronen und das zurückbleibende Ion. Die Zustände für diese Ionen sind in den Spalten von Li_{II} und Li_{III} in Abb. 1 gezeigt. Im Energiebereich der Doppel- und Dreifachanregungen gibt es verschiedene Zustände für Li^+ und Li^{2+} wie in Abb. 1 gezeigt. Im folgenden wird die Photoionisation im Bereich der Doppelanregungen und Dreifachanregungen diskutiert.

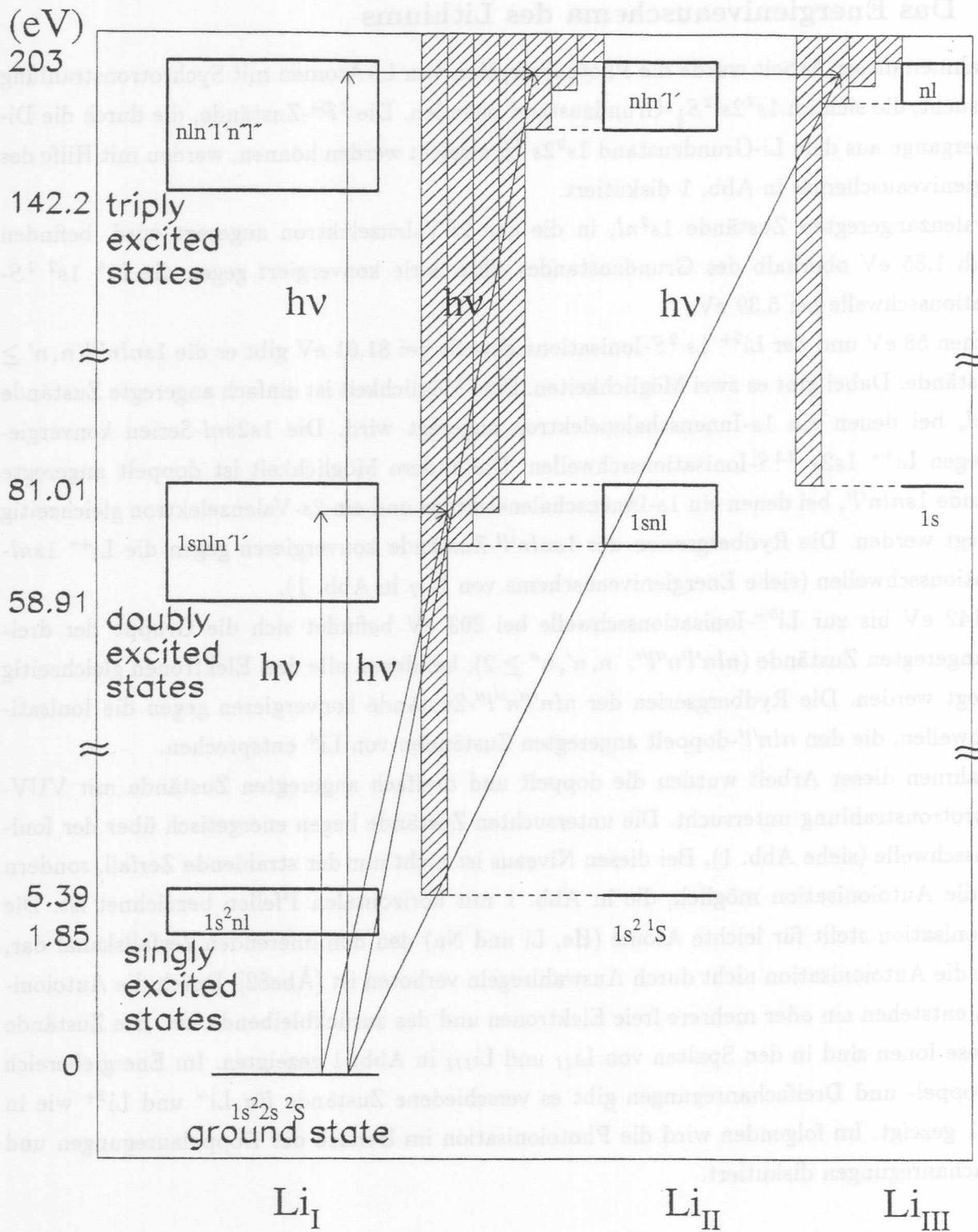
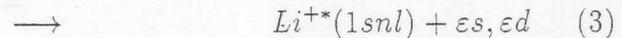
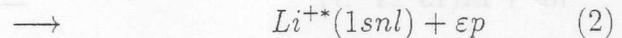


Abbildung 1: Energieniveauschema von Lithium.

Absorbiert das Li-Atom im Grundzustand ein Photon, das der Energie der Doppelanregung entspricht, werden die Photonisationsprozesse durch folgende Reaktionsgleichung beschrieben:



Die Reaktionsgleichung in (1) beschreibt die direkte Photoionisation eines $2s$ -Valenzelektrons. Dies ist der einfachste Photoionisationsprozeß, der ähnlich dem des Wasserstoffs beschrieben werden kann. Die Reaktionsgleichungen in (2) und (3) zeigen die Innerschalenionisation. Bei der Innerschalenionisation gibt es zwei Möglichkeiten: *Shake-Up* in (2) und *Conjugate-Shake-Up* in (3). Bei *Shake-Up* Prozessen wird ein Anteil der Energie des Photoelektrons auf das Li^+ -Ion übertragen und das Ion wird angeregt. Wenn sich dabei die Parität des Ions ändert, handelt es sich um einen *Konjugate-Shake-Up* Prozeß.

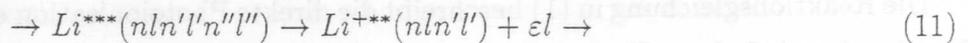
Es kann kurzlebige Zwischenzustände (die doppelt angeregten Zustände $(1s nl n' l')$ in (4)) bei bestimmter Energie geben. Wenn das Loch des doppelt angeregten Lithiumatoms von einem Elektron wieder aufgefüllt wird, wird die überschüssige Energie auf ein äußeres Elektron übertragen, so daß es das Atom verläßt, ein einfach geladenes Ion entsteht. Der Endzustand entspricht zum Schluß denen in den Prozessen (1), (2) und (3). Dieser Prozeß heißt Autoionisation. Da ein diskreter Zwischenzustand im Kontinuumszustand existiert, wird beim Durchstimmen der Photonenenergie die Photoionisation resonant verstärkt. Dieser Prozeß wird manchmal als *Resonante Photoionisation* bezeichnet. In dieser Arbeit wurden die resonanten Verstärkungen der Photoionisationen durch Doppel- und Dreifachanregungen untersucht.

Die Dreifachanregung liegt sogar oberhalb der Zweifachionisationsschwelle. Dreifach angeregte Lithiumatome bilden hohle Atome, deren K-Schale unbesetzt ist. Deshalb gibt es sowohl die Einfachionisations- (wie bei den Doppelanregungen) als auch Doppelsonisationsprozesse. Die Zerfallsprozesse des dreifach angeregten Lithiums sind vielfältiger und komplizierter als die des doppelt angeregten.

Die Einfachionisationsprozesse im Energiebereich der Dreifachanregungen können auch durch die Reaktionsgleichungen in (1), (2), (3) und (4) beschrieben werden, wenn man $1s nl n' l'$ in Reaktionsgleichung (4) durch $nl n' l' n'' l''$ ersetzt. Die Kontinua, die zu doppelt angeregten Ionen gehören, überlappen energetisch mit den Dreifachanregungen. Somit sind auch die folgenden Einfachionisationen möglich:



Bei der Doppelionisation gibt es die folgenden Reaktionen:



In Reaktionsgleichung (7) laufen die zwei Photoelektronen gleichzeitig aus. In Reaktionsgleichung (8) wird zusätzlich das 1s-Rumpfelektron angeregt. Befindet sich das Ion nach der Einfachionisation in einem doppelt angeregten Zustand $nl n'l'$, der oberhalb der Ionisationsschwelle des Ions liegt, so kann es strahlungslos zerfallen. Ein Elektron aus einer höher liegenden Schale füllt das tiefer liegende Loch auf und die freigesetzte Energie wird an das andere Elektron abgegeben, das dadurch das Li^+ -Ion, wie in Reaktionsgleichung (9) beschrieben, verlassen kann. In Reaktionsgleichung (10) füllt ein Elektron das Loch in der K-Schale auf und die zwei äußeren Elektronen des dreifach angeregten Zustandes $nl n'l' n'' l''$ laufen gleichzeitig aus (Ein-Stufen-Zerfall). In Reaktionsgleichung (11) zerfällt der dreifach angeregte Zustand durch zwei nachfolgende Augerprozesse (Zwei-Stufen-Zerfall). Letztlich bleiben infolge von Ein- oder Zwei-Stufen-Zerfällen ein zweifach geladenes Lithiumion Li^{2+} und zwei Photoelektronen zurück wie in den Reaktionsprozessen (7) und (8). Die Reaktionsgleichungen (10) und (11) bezeichnen die Doppelautoionisation der Dreifachanregung. Die Wahrscheinlichkeit für den Ein-Stufen-Zerfall ist dabei wesentlich kleiner als die für den Zwei-Stufen-Zerfall.

Dagegen hängt der Verhältnis von Einfach- zu Zweifachionisation der Dreifachanregung stark von den jeweiligen Energieniveaus der $Li^{+**} nl n'l'$ -Zustände ab.

Mit Ausnahme der valenzangeregten Zustände überlappen alle innerschalenangeregte Zustände mit Ionisationskontinua, was zur Autoionisation führt. Dies wird im folgenden Abschnitt diskutiert.

2.2 Autoionisation

Wenn der diskrete Zustand und die Kontinuumszustände die gleiche Parität und den gleichen Gesamtdrehimpuls besitzen, dann gibt es Interkonfigurationswechselwirkungen der Zustände. Ein Formalismus dazu wurde von Fano angegeben [Fan61, Fan65a und Fan65b]. In Störungstheorie

der ersten Ordnung erhält man einen Gesamtzustand $|\Psi(E)\rangle$, der sich aus der Linearkombination eines diskreten Zustandes $|\varphi\rangle$ und eines Kontinuums $|\psi(E)\rangle$ ergibt:

$$|\Psi(E)\rangle = a(E)|\varphi\rangle + \int b(E')|\psi(E')\rangle dE' \quad (12)$$

wobei $a(E)$ und $b(E')$ energieabhängige Koeffizienten sind, die durch die Diagonalisierung der entsprechenden Matrix des Hamilton-Operators bestimmt werden. Das Kopplungsmatrixelement $\langle\psi(E)|H|\varphi\rangle = V(E)$ ist dabei ein Maß für die Stärke der Mischung zwischen dem diskreten Zustand und dem Kontinuum. Bei der Berechnung des Matrixelementes $V(E)$ läßt sich in guter Näherung der Hamiltonoperator durch den Coulomboperator ersetzen. Der Coulomboperator vermittelt die *Autoionisation*, durch die der diskrete Zustand in den Kontinuumszustand zerfällt.

Der im Experiment beobachtete Photoabsorptionswirkungsquerschnitt läßt sich mit der nun bekannten Wellenfunktion des angeregten Zustands über das Quadrat des Übergangsmatrixelementes vom Grundzustand $|\phi\rangle$ ausgehend berechnen.

$$\begin{aligned} \sigma(h\nu) &= \frac{4\pi}{3}\alpha E |\langle\Psi(E)|d|\phi\rangle|^2 = \frac{4\pi}{3}\alpha E (D^{kon})^2 \left(\frac{q+\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2+1}}\right)^2 \\ &= \sigma_c \frac{(q+\varepsilon)^2}{\varepsilon^2+1} \quad (\sigma_c \equiv \frac{4\pi}{3}\alpha E (D^{kon})^2) \end{aligned} \quad (13)$$

Folgende Abkürzungen wurden dabei verwendet.

$$\varepsilon = \frac{E - E_R}{\pi|V(E)|^2}, \quad D^{dis} = \langle\Phi|d|\phi\rangle, \quad D^{kon} = \langle\psi(E)|d|\phi\rangle, \quad q = \frac{D^{dis}}{\pi|V_E|D^{kon}} \quad (14)$$

σ_c ist der direkte Ionisationsquerschnitt in das Kontinuum $\psi(E)$. d bezeichnet den Dipoloperator und ε die reduzierte Energie mit der Resonanzenergie E_R . q ist der charakteristische Parameter für die Linienform. $|\Phi\rangle$ repräsentiert den durch die Kopplung an das Kontinuum $\psi(E)$ modifizierten gebundenen Zustand. In Abb. 2 ist beispielhaft für unterschiedliche q -Werte die Funktion aus Gleichung (13), die man *Fanoprofil* nennt, dargestellt. Man beachte, daß man die Kurven für negative q -Werte durch Spiegelung der reduzierten ε -Achse am Nullpunkt erhält. Die Profile der Absorptionslinien in der Nähe der Resonanz sind nicht symmetrisch, sondern werden durch den Parameter q in Gleichung (14) asymmetrisch. Dies ist eine direkte Folge der Interferenz zwischen der diskreten Anregung und der Kontinuumsanregung. Der Asymmetrieparameter q gibt deshalb auch das Verhältnis der Anregungsstärke in den diskreten Zustand zur Anregung in das Kontinuum an. Das Fanoprofil hat ein Maximum bei $\varepsilon = 1/q$ mit dem Funktionswert $\sigma_c(q^2+1)$, das Minimum mit dem Funktionswert 0 liegt bei $\varepsilon = -q$. Man erkennt, daß der Photoabsorptionswirkungsquerschnitt von einem Wechsel zwischen destruktiver und konstruktiver Interferenz zwischen der Anregung des diskreten und des kontinuierlichen Teils von $|\Psi(E)\rangle$ geprägt ist. Die Linienbreite der durch Gleichung (13) gegebenen Fano-Resonanz ist

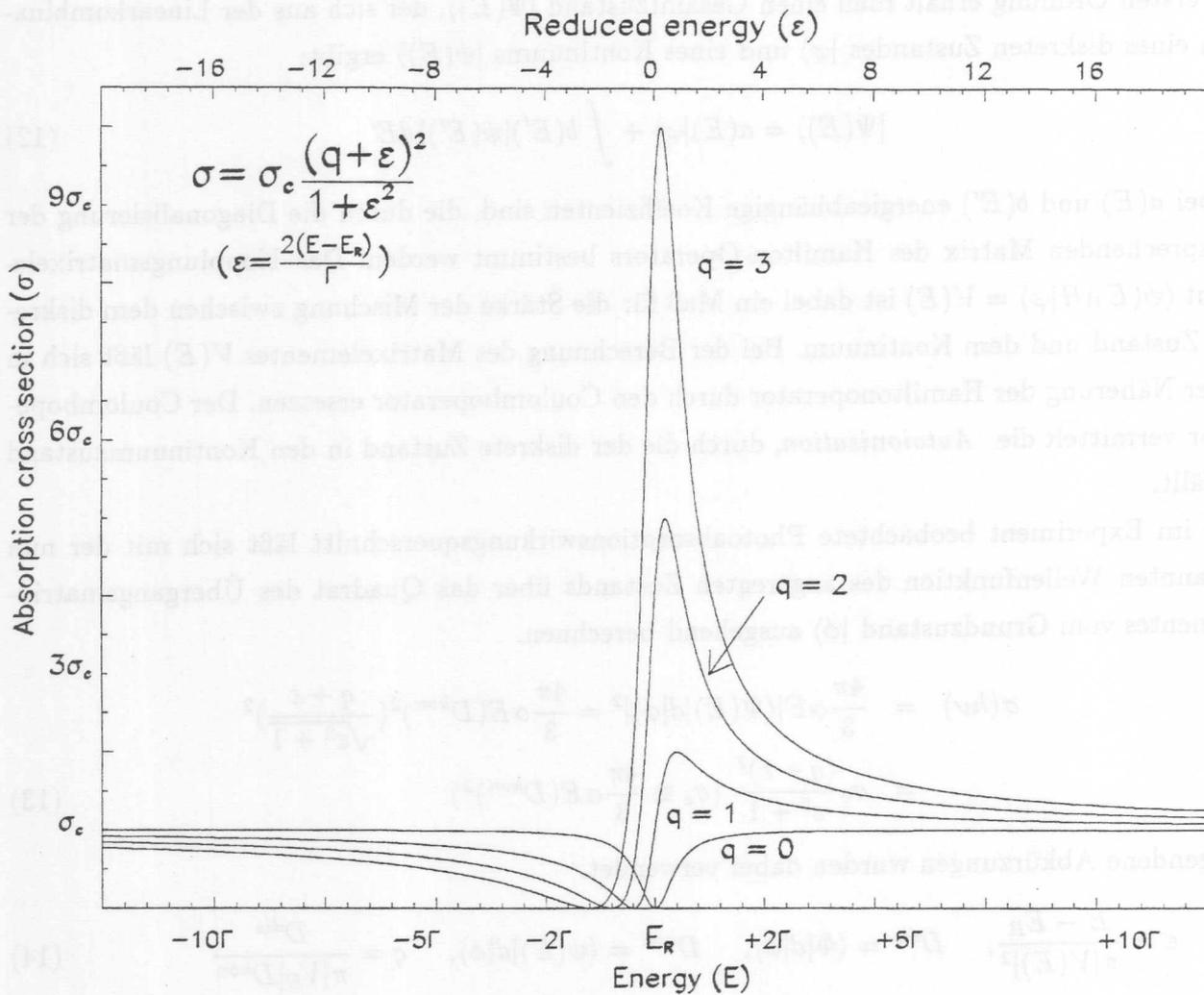


Abbildung 2: Fanprofile mit verschiedenen Werte für den Asymmetrieparameter q . E_R : Resonanzenergie und Γ : Linienbreite.

$\Gamma = 2\pi|V_E|^2$, d.h. die Lebensdauer des diskreten Zustandes, bestimmt durch die Autoionisation ins Kontinuum, beträgt $\hbar/2\pi|V_E|^2$. Zur Verdeutlichung der Effekte ist es sinnvoll, eine etwas andere mathematische Formulierung der Gleichung (13) zu wählen:

$$\sigma_c \frac{(q + \varepsilon)^2}{\varepsilon^2 + 1} = \sigma_c \left(1 + \frac{q^2}{1 + \varepsilon^2} - \frac{1}{1 + \varepsilon^2} + \frac{2q\varepsilon}{1 + \varepsilon^2} \right) \quad (15)$$

Der erste Term auf der rechten Seite der Gleichung (15) stellt die ungestörte Absorption ins Kontinuum dar, der zweite Term ist das reine Lorentzprofil einer resonanten Absorption in einen diskreten Zustand. Der dritte Term repräsentiert die Verringerung der Absorption ins Kontinuum in der Nähe der diskreten Resonanz, ein Effekt der als *spektrale Abstoßung* bekannt ist. Der letzte Term kann als Interferenzeffekt interpretiert werden. Man beachte, daß der Interferenzterm ein unterschiedliches Vorzeichen oberhalb und unterhalb der diskreten Resonanz

hat.

Für die Grenzfälle des q -Wertes ist entweder der Übergang ins Kontinuum oder in den diskreten Zustand verboten.

Ist das Kontinuum $\psi(E)$ für die angeregten Elektronen nicht erreichbar oder ist die Stärke des Überganges in das Kontinuum sehr schwach, so gilt $D^{kon} = \langle \psi(E) | d | \phi \rangle \rightarrow 0$, d.h. $|q| \rightarrow \infty$ nach Gleichung (14). Es bleibt für den Absorptionswirkungsquerschnitt in Gleichung (15) der zweite Term dominant erhalten. In diesen Grenzen ergibt sich ein symmetrisches Linienprofil, genannt Lorentzprofil, d.h. das Absorptionsspektrum zeigt einen Verlauf, als sei lediglich ein diskreter Zustand vorhanden.

Im anderen Fall, in dem der diskrete Zustand nicht erreichbar ist, gilt $D^{dis} = \langle \Phi | d | \phi \rangle \rightarrow 0$, d.h. $|q| \rightarrow 0$. Der erste und dritte Term in Gleichung (15) bleiben erhalten. Im Unterschied zum ersten Fall merkt hier das Kontinuum die Anwesenheit des verbotenen diskreten Zustandes, was durch die spektralen Abstoßung in Gleichung (15) deutlich wird. Für den Wirkungsquerschnitt ergibt sich ein Lorentzprofil, das in der Resonanz ein Minimum aufweist (siehe Abb. 2 für $q = 0$) und als Fensterresonanz bekannt ist. In der Nähe der Fensterresonanz wird das Licht nicht absorbiert.

Abb. 3 zeigt das Photoionisationsspektrum der $2s2p(+)$ -Resonanz des Heliums. Die Resonanz ist ein gutes Beispiel für ein Fanoprofil, das durch die Interferenz einer $2s2p$ diskreten Anregung mit einer $1s + \varepsilon p$ -Kontinuumsanregung hervorgerufen wird. Das Ionenflugzeitsspektrum wurde im Rahmen dieser Arbeit gemessen. Die durgezogene Linie durch die gepunkteten Daten in Abb. 3 ist durch Gleichung (13) mit $E_R = 60.15$ eV, $q = -2.6$ sowie $\Gamma = 38.5$ meV gegeben. Die Anpassung ist exzellent. Man kann beobachten, daß das Minimum wegen der destruktiven Interferenz Null ist, wie schon oben erwähnt. Man beachte, daß die Resonanzenergie E_R nicht die Stelle des Maximums ist sondern zwischen der Spitze und dem Nullpunkt der Resonanz liegt. Bei der Resonanzenergie E_R ist die Steigung des Wirkungsquerschnittes der Photoionisation maximal.

Der gesamte Wirkungsquerschnitt für die Photoionisation im Bereich einer Autoionisationsresonanz, die in mehrere Kontinuumszustände eingebettet ist, erhält man, indem ein weiterer Term σ'_c , der sich aus den mit der Autoionisationsresonanz nicht wechselwirkenden Kontinua ergibt, in Gleichung (13) hinzufügt. Der gesuchte gesamte Wirkungsquerschnitt für die Photoionisation im Bereich einer Autoionisationsresonanz bei Anwesenheit mehrerer Kontinua lautet damit:

$$\sigma(h\nu) = \sigma_c \frac{(q + \varepsilon)^2}{\varepsilon^2 + 1} + \sigma'_c \quad (16)$$

Wir erwarten also bei Messung des totalen Wirkungsquerschnitts, wie beispielweise Photoabsorptionsmessungen, Linienprofile mit einer Energieabhängigkeit entsprechend (16).

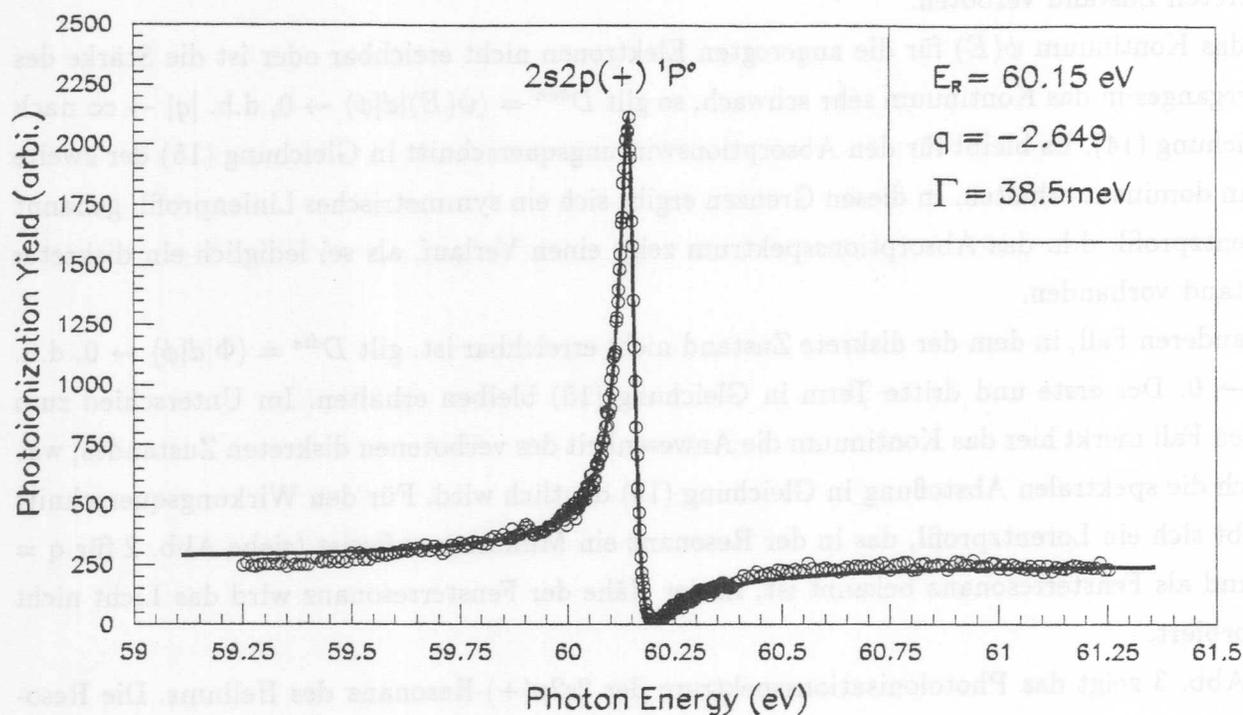


Abbildung 3: Das Photoionisationsspektrum der $2s2p(+)$ -Resonanz des Heliums ist ein Beispiel für Fanoprofil. Die durchgezogene Linie durch die gepunkteten Daten ist das Ergebnis einer Kurvenanpassung des Fanoprofiles.

In dieser Arbeit wurden gemessene Resonanzen durch die Anpassung der Gleichung (16) analysiert.

2.3 Quantendefekt-Theorie für Rydbergserien

Die Spektren der Rydbergserien für die Mehrelektronen-Atome lassen sich analog zum Wasserstoff systematisch verstehen, wenn sich höchstens ein Elektron in einem hoch angeregten Zustand befindet, während sich die übrigen Elektronen nahe am Kernort befinden. Da jedoch die Innerschalen-Elektronen die Kernladung nicht vollständig abschirmen, bewegt sich ein äußeres angeregte Elektron im modifizierten Coulompotential, das bei kurzen Abständen von der reinen Coulomb-Form für das Elektron im Wasserstoff abweicht. Demnach lassen sich die Energieeigenwerte der Rydbergserien analog zur Form des Wasserstoffs schreiben, wobei die Quantenzahl n durch eine effektive Quantenzahl n^* ersetzt wird:

$$E_n = I - \frac{R}{(n^*)^2} = I - \frac{R}{(n - \mu_n)} \quad (17)$$

R ist die Rydbergkonstante für Mehrelektronen-Atome, I die Kontinuumsschwelle, gegen die die Rydbergserie konvergiert. Die Korrekturgrößen μ_n heißen Quantendefekte. Der praktische Nutzen der Rydberg-Formel (17) ergibt sich daraus, daß die Quantendefekte μ_n für genügend große Quantenzahl n nur schwach von n abhängen und insbesondere im Grenzfall $n \rightarrow \infty$ gegen einen endlichen Grenzwert μ konvergieren. Die empirisch bestimmten Zahlwerte der Quantendefekte μ sind für angeregte s -Elektronen am größten und nehmen mit steigender Bahndrehimpulsquantenzahl l ab. Diese Quantendefekte erfassen empirisch die unterschiedliche Abschirmung, die die s , p , d ...-Elektronen durch die Elektronen der Inneren Schalen erfahren. Die Resonanzen einer Rydbergserie sind wegen der ähnlich Eigenschaften der Zustände im allgemeinen durch eine gleichartige Linienform (einen konstanten q -Parameter) und einen konstanten Quantendefekte μ gekennzeichnet. Die Resonanzen einer Rydbergserie haben eine Linienbreiten, die sich proportional zu n^{*-3} mit steigendem n verringern. Das diskrete Spektrum unterhalb der Schwelle geht nahtlos in das kontinuierliche Photoabsorptionsspektrum über.

In der Quantendefekttheorie (QDT) wird jede Rydbergserie einschließlich des anschließenden Kontinuums als ein Kanal bezeichnet. Unterhalb der Kontinuumsschwelle wird eine kurzreichweitige Abweichung des tatsächlichen Potentials vom reinen Coulombpotential durch die Quantendefekte μ_n beschreiben. Oberhalb der Kontinuumsschwelle äußert sich diese Abweichung in der asymptotischen Phase der Kontinuumswellenfunktion. Den quantitativen Zusammenhang zwischen Quantendefekten μ_n und den Phasen δ_h an der Kontinuumsschwelle beschreibt das Theorem von Seaton [Fri90]:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mu_n = \mu(E = I) = \frac{1}{\pi} \lim_{E \rightarrow I} \delta_h(E) \quad (18)$$

Eine Verschiebung des asymptotischen Teils einer Kontinuumsschwellenfunktion um genau eine Halbwelle an der Schwelle bedeutet demnach eine Verschiebung um 1 in der effektiven Quantenzahl bzw. im Quantendefekt.

Durch QDT wird auch die Auswirkung einer störenden Resonanz auf eine Rydbergserie beschrieben. Man kann die Wirkung einer fremden autoionisierenden Resonanz (Störer) im Rahmen der QDT durch eine zusätzlichen asymptotischen Phasenverschiebung δ_R gegen der Phase δ_h an der Kontinuumsschwelle erfassen (siehe S. 35 in [Fri90]):

$$\delta_R = -\arctan\left(\frac{\Gamma/2}{E - E_R}\right) \quad (19)$$

wobei E_R der Resonanzenergie und Γ die Linienbreite des Störers sind. Die gesamten Phasenverschiebung δ der Kontinuumswellenfunktion ist:

$$\delta = \delta_h + \delta_R = \delta_h - \arctan\left(\frac{\Gamma/2}{E - E_R}\right) \quad (20)$$

Ähnlich zur gesamten Phasenverschiebung δ oberhalb der Schwelle wird die neue Quantendefektfunktion unterhalb der Schwelle ausgedrückt:

$$\begin{aligned}\mu &= \frac{1}{\pi} = \frac{1}{\pi}\delta_h + \frac{1}{\pi}\delta_R \\ &= \mu_n - \frac{1}{\pi}\arctan\left(\frac{\Gamma/2}{E - E_R}\right)\end{aligned}\quad (21)$$

Wenn der Störer sich oberhalb der Kontinuumsschwelle befindet, wird der Quantendefekt nicht viel verändert und die Rydbergserie nicht stark beeinflusst. Wenn der Störer unterhalb der Kontinuumsschwelle liegt, gibt es einen starken Einfluß. Unterhalb der Resonanzenergie E_R des Störers sind die Quantendefekte schwach energieabhängig. In der Nähe von E_R nehmen die Quantendefekte zu, so daß die effektive Quantenzahl $n^* = n - \mu_n$ und folglich auch die Energie dichter liegen als ohne Störer. Somit werden die Resonanzen durch die Effekt des Störers nach unten verschoben. Oberhalb des Störers sind die Quantendefekte gerade um 1 im Vergleich zur ungestörten Rydbergserie verschoben. Das ändert ihre Numerierung: der n -te Zustand der ungestörten Serie bei Resonanzenergie in (17) ist nun der $(n+1)$ -te Zustand der gestörten Serie bei annähernd derselben Energie. Eine Störung der Rydbergserie der gebundene Zustände macht sich nicht nur in einer Verschiebung der Energie bemerkbar, sondern auch in anderen observalen Größen wie z.B. dem Photoabsorptionsquerschnitt bzw. den Oszilltorstärken (siehe S. 146 in [Fri90]).

2.4 Die Berechnung der Wellenfunktion für das Lithiumatom

Die Resonanzenenergie, die Linienbreite, der Wirkungsquerschnitt und weitere Größen lassen sich durch die Messung bestimmen. Durch diese Größen werden Prozesse charakterisiert, bei denen die Atome durch Photonanregung aus einem Anfangszustand in einen Endzustand übergehen. Zur quantenmechanischen Berechnung der Meßgrößen werden in einem ersten Schritt die Wellenfunktion der atomaren Zustände berechnet. Die Wellenfunktion für Mehrelektronenatome werden im allgemeinen näherungsweise durch ein Variationsverfahren, das *Hartree-Fock-Verfahren*, berechnet. Diese Methode eignet sich für die Beschreibung des Grundzustandes sowie einfachangeregter Zustände, in denen ein Valenzelektron angeregt ist. Ein innerschalenangeregter Zustand ist in Ionisationskontinua eingebettet, gegen deren Schwellen Rydbergserien konvergieren. Dies erschwert die Berechnung eines innerschalenangeregten Zustandes mit Hilfe des Hartree-Fock-Verfahrens. Deshalb sind für die Beschreibung angeregter Mehrelektronensystems mit einem Innerschalenloch verschiedene spezielle Methoden entwickelt worden. Davon eignen sich für die leichten Atome im besondere für Helium und Lithium die *R-Matrix-Methode* und *Sattelpunkt-Methode*.

Im folgenden werden die R-Matrix- und Sattelpunkt-Methode knapp dargestellt.

R-Matrix-Methode

Die R-Matrix Theorie wurde ursprünglich zur Beschreibung von Nuklearreaktionen entwickelt. Burke et al. haben die R-Matrix Theorie auf atomare Reaktionen, insbesondere die Beschreibung der atomaren Photoionisation angewendet ([Bur75] und [Sta82]). Mit der R-Matrix-Methode haben Lis und Voky kürzlich die 1s-Innerschalenphotoionisation des Lithiumatoms berechnet [Lis90 und Vok95].

Bei der *R-Matrix-Methode* wird der Konfigurationsraum in einen Innenraum und einen Außenraum aufgeteilt. In den Innenraum mit $0 < r < a$, in dem kurzreichweitige Korrelationseffekte wichtig sind, und in den Außenraum, in dem nur das Multipolpotential betrachtet wird. Im Innenraum sind die Wellenfunktionen für Anfangs- und Endzustand gegeben durch:

$$\Psi_k(x_1, \dots, x_{N+1}) = A \sum_{ij} c_{ijk} \phi_i(x_1, \dots, x_N, \hat{r}_{N+1}) r_{N+1}^{-1} u_{ij}(r_{n+1}) + \sum_j d_{jk} \varphi_j(x_1, \dots, x_{N+1}) \quad (22)$$

wobei A der Antisymmetrisierungsoperator ist. ϕ_i beschreibt den ionischen Endzustand (den Targetzustand) d.h. das Ion in der Photoionisation. ϕ_i koppelt mit der Spin- und Winkel-Funktion des (N+1)-ten Elektrons (Photoelektron), was zu einem Eigenzustand für L , S und π führt. Für die Berechnung der 1s-Innerschalenphotoionisation im Energiebereich der Doppelanregungen ($1s n l n' l'$) wurden die 19 Ionenzustände ($1s^2$ und $1s n l$ mit $n = 2, 3, 4$ und $l = s, p, d, f$) berücksichtigt. Für die Berechnung der Photoionisation im Energiebereichs 140 eV – 165 eV der ($2s 2 l n l'$)-Dreifachanregungen wurden 10 Ionenzustände zusätzlich eingeschlossen: 6 Zustände ($2s^2$, $2s 2 p$ und $2p^2$) und 4 Zustände ($2s 3 s$, $2s 3 p$ und $2p 3 s$) [Jou95]. Die linearen Koeffizienten c_{ijk} und d_{jk} in (22) werden durch die Diagonalisierung des Hamiltonianoperators des (N+1)-Elektronensystems bestimmt.

φ_j ist die antisymmetrische Wellenfunktion, die durch Einelektronenwellenfunktionen Wellenfunktion der (N+1)-Elektronen gebildet wird. Sie beschreibt den geschlossenen Kanal mit den gleichen L , S und π wie der erste Term in (22). Die Radial-Anteile der Einelektronenwellenfunktion in ϕ_i und φ_j sind vom Slater-Typ:

$$P_{nl}(r) = \sum_{j=1}^k C_{jnl} \chi_{jnl}(r) \quad (23)$$

in der Clementi-Roetti Form

$$\chi_{jnl}(r) = \left[\frac{(2\zeta_{jnl})^{2I_{jnl}+1}}{(2I_{jnl}!)^2} \right]^{1/2} r^{I_{jnl}} \exp(-\zeta_{jnl} r) \quad (24)$$

Die Radial-Funktion $P_{nl}(r)$ erfüllt die Orthonormalitätsbedingung:

$$\int_0^\infty P_{nl}(r) P_{n'l}(r) dr = \delta_{n,n'} \quad (25)$$

Die Koeffizienten C_{jnl} in (23) werden durch die Orthonormalitätsbedingung in (25) bestimmt. I_{jnl} sind ganze Zahlen. Die Koeffizienten ζ_{inl} in (23) werden durch Variation sorgfältig optimiert. Der Koeffizient ζ_{inl} für das $1s$ -Orbital wird durch die Minimalisierung der Energie des $1s^2S$ -Zustandes von Li^{2+} bestimmt, der für das $2s$ -Orbital durch die Minimalisierung der Energie des $1s2s^1S$ -Zustandes von Li^+ sowie die für die $2p$ -, $3s$ -, $3p$ -, $3d$ -Orbitale durch die Minimalisierung der Energie der $1snl$ -Zustände. Die Wellenfunktion u_{ij} für den Kontinuumszustand in (22) ergeben sich aus der Lösung der radialen Differentialgleichung in atomaren Einheiten:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l_i(l_i + 1)}{r^2} + V(r) + k_j\right)u_{ij} = \sum_n \lambda_{ijn} P_{nl_i}(r) \quad (26)$$

mit der Erfüllung der Randbedingungen bei $r = 0$ und $r = a$:

$$u_{ij}(0) = 0, \quad \frac{a}{u_{ij}(a)} \frac{du_{ij}}{dr} \Big|_{r=a} = b \quad (27)$$

wobei $V(r)$ ein statisches Potential ist, das vom Photoelektron gesehen wird. a ist der R-Matrix-Radius. Für Li wurde $a=30.2a_0$ (a_0 =Bohrradius) in [Vok95] angenommen. λ_{ijn} ist ein Lagrange-Multiplikator, der sicherstellt daß:

$$\int_0^a u_{ij}(r) P_{nl}(r) dr = 0 \quad (28)$$

wobei P_{nl} die Radial-Funktion in (23) ist.

Der partielle und der totale Photoabsorptionswirkungsquerschnitt sowie der β -Asymmetrie-Parameter wurden mit den durch R-Matrix-Methode bestimmten Wellenfunktionen berechnet [Vok95 und Jou95]. Dabei wurden die Dipolmatrixelemente in der Geschwindigkeitsform und der Längenform eingesetzt. Der spektrale Verlauf der berechneten Photoionisationsquerschnitte stimmt mit der des gemessenen im Bereich der Doppelanregung und Dreifachanregung gut überein. Die Energieposition der Resonanzen in den berechneten Spektren sind gegen die gemessenen leicht verschoben.

Sattelpunkt-Methode

Chung hat die Sattelpunkt-Methode für Innerschalenanregungen in Mehrelektronensystemen vorgeschlagen [Chu79] und kontinuierlich weiterentwickelt. Die Ergebnisse der Sattelpunkt-Methode zeigen besonders gute Übereinstimmungen mit den experimentellen Ergebnissen der in Innerschalen angeregten Zustände von Dreielektronensystemen (He^- , Li sowie Be^+) [Chu80, 81a, 81b, 82a, 82b]. Der Ansatz für diese Methode ist, daß das Loch in einem Mehrelektronensystem durch eine Wellenfunktion $\phi_o(\vec{r})$ repräsentiert werden kann, die dem Einteilchen-Orbital entspricht. Die Wellenfunktion für das Mehrelektronensystem mit Innerschalenloch wird gebildet, indem das Loch $\phi_o(\vec{r})$ in eine Multikonfigurations-Wellenfunktion ψ direkt eingesetzt wird:

$$\Psi = A[1 - P_0(\vec{r}_j)]\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_n) \quad (29)$$

mit

$$P_0(\vec{r}) = |\phi_0(\vec{r})\rangle\langle\phi_0(\vec{r})| \quad (30)$$

wobei A Antisymmetrisierungsoperator ist.

Im folgenden wird das Verfahren zur Berechnung der Wellenfunktion besprochen, die zwei Löcher in der 1s-Schale für das Dreielektronensystem aufweist. Die Multikonfiguration-Wellenfunktion ψ für ein Dreielektronensystem ist das Produkt von Radial- (ϕ), Winkel- (Y) und Spin-Anteil (χ):

$$\phi_{mnk}(r_1, r_2, r_3) = r_1^m r_2^n r_3^k e^{-\alpha r_1} e^{-\beta r_2} e^{-\gamma r_3} \quad (31)$$

$$Y_{l_1 l_2; l_12}^{l_3, LM}(\hat{r}_1, \hat{r}_2, \hat{r}_3) = \sum_{m_1 m_2 m_3 \mu} \langle l_1 l_2 m_1 m_2 | l_{12} \mu \rangle \langle l_{12} l_3 \mu m_3 | LM \rangle Y_{l_1}^{m_1}(\hat{r}_1) Y_{l_2}^{m_2}(\hat{r}_2) Y_{l_3}^{m_3}(\hat{r}_3) \quad (32)$$

$$\chi(1, 2, 3) = [\chi_+(1)\chi_-(2) \mp \chi_+(2)\chi_-(1)]\chi_+(3) - (1 \mp 1)\chi_+(1)\chi_+(2)\chi_-(3) \quad (33)$$

wobei $\langle l_1 l_2 m_1 m_2 | l_{12} \mu \rangle$ und $\langle l_{12} l_3 \mu m_3 | LM \rangle$ Clebsch-Gordan-Koeffizienten sind. Der Radial-Anteil ϕ_{mnk} ist das Produkt der Ortswellenfunktionen vom Slater-Typ. $Y_{l_i}^{m_i}$ ist die Kugelflächenfunktion. χ_+ und χ_- repräsentieren Spin-up und Spin-down Zustände. Das Vorzeichen \mp in Gleichung (33) wird so gewählt, daß die gesamte Wellenfunktion das Pauli-Prinzip erfüllt. α, β, γ sind nichtlineare Parameter.

Wenn die Gleichungen (31), (32) und (33) kombiniert werden, ergibt sich

$$\psi_{mnk}^{l_1 l_2 l_3} = \phi_{mnk}(r_1, r_2, r_3) Y_{l_1 l_2; l_12}^{l_3, LM}(\hat{r}_1, \hat{r}_2, \hat{r}_3) \chi(1, 2, 3) \quad (34)$$

Der Projektions-Operator P für das 1s-Loch ist gegeben durch:

$$P_{1s}(\vec{r}_i) = |\phi_0(\vec{r}_i)\rangle\langle\phi_0(\vec{r}_i)| \quad (35)$$

wobei das Orbital für das Loch lautet

$$\phi_0(\vec{r}) = N e^{-qr} Y_0^0(\theta, \phi) \quad (36)$$

mit einer Normierungskonstanten N . q ist der Parameter, der optimiert wird.

Die gesamte Wellenfunktion mit zwei Löchern im 1s-Orbital wird durch eine Linearkombination beschrieben [Chu80, Chu95]:

$$\Psi = A \sum C_{mnk}^{l_1 l_2 l_3} [1 - P_{1s}(\vec{r}_1)][1 - P_{1s}(\vec{r}_2)][1 - P_{1s}(\vec{r}_3)] \psi_{mnk}^{l_1 l_2 l_3}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) \quad (37)$$

Durch diesen Ansatz wird verhindert, daß Elektronen aus anderen n s-Orbitalen die 1s-Orbitale auffüllen. Mit der gesamten Wellenfunktion Ψ in Gleichung (37) wird das Rayleigh-Ritz Variationsverfahren durchgeführt:

$$\delta E = \delta \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = 0 \quad (38)$$

Das Variationsverfahren des Eigenwertes E in Bezug auf die linearen Parameter $C_{mnk}^{l_1 l_2 l_3}$ führt auf die Säkular determinante, deren Eigenwerte eine Funktion der nichtlinearen Parametern α , β und γ sowie q ist. Wenn dieser Eigenwert nach dem Verfahren in [Chu79] in Bezug auf α , β und γ minimiert und in Bezug auf q maximiert wird, erhält man die Resonanzenergie. Die Position für die Resonanzenergie ist also ein Sattelpunkt im $(\alpha, \beta, \gamma, q)$ -Raum.

Die Kopplung zwischen einem geschlossenen und einem offenen Kanal ruft eine Verschiebung der Resonanzenergie hervor [Fan61]. Die Linienbreite der Resonanz ist das Result der Wechselwirkung des geschlossenen und des offenen Kanals. Die oben diskutierte Sattelpunkt-Methode bestimmt die Wellenfunktion und die Resonanzenergie für den geschlossenen Kanal. Die Wechselwirkung mit offenen Kanälen bleibt unberücksichtigt. Um dieses Problem der Sattelpunkt-Methode zu überwinden, hat Chung die Sattelpunkt-Methode mit der Komplexen Rotation-Methode kombiniert [Chu82b, Dav85]. In dieser Näherung ist die gesamte Wellenfunktion als Summe der Wellenfunktion des geschlossenen Kanals Ψ_d (diskreter Zustand) und der des offenen Kanals Ψ_c (Kontinuumszustand) wie folgt gegeben:

$$\begin{aligned}\Psi(r_1, r_2, r_3) &= \Psi_d(r_1, r_2, r_3) + \Psi_c(r_1, r_2, r_3) \\ &= \Psi_d(r_1, r_2, r_3) + \sum_i A \phi_i(r_1, r_2) U_i(r_3)\end{aligned}\quad (39)$$

mit

$$U_i(r_3) = \sum_i d_{i,n} r_3^n \exp(-\alpha_i r_3) \quad (40)$$

Die Wellenfunktion $\Psi_d(r_1, r_2, r_3)$ in (39) ist die in (37) angegebene Wellenfunktion, die mit der Sattelpunkt-Methode berechnet wird. $\phi_i(r_1, r_2)$ beschreibt den ionischen Endzustand (Zustand) eines offenen Kanals. Chung hat $1s^2 \ ^1S$ -, $1s2s \ ^1,3S$ -, $1s2p \ ^1,3P$ -, $1s3s \ ^1,3S$ - und $1s3p \ ^1,3P$ -Ionenzustände für die Berechnung der $^2P^0$ -Dreifachanregungszustände des Lithiums berücksichtigt. $U_i(r_3)$ repräsentiert die Wellenfunktion des auslaufenden Elektrons. Mit dieser Wellenfunktion wird das Rayleigh-Ritz Variationsverfahren durchgeführt. Die Eigenwerte der Säkular determinante sind nicht mehr reelle sondern ein komplexe Werte $E - i\Gamma/2$. Der reelle Anteil E des komplexen Eigenwerts gibt die Resonanzenergie an und der komplexe Anteil Γ , bestimmt durch die Kopplung an die offenen Kanäle, die Linienbreite.

Die Verschiebung der Resonanzenergie, die aus der Wechselwirkung des geschlossenen (diskreten Anregung) und des offenen Kanals (Kontinuumsanregung) kommt, beträgt 19.94 meV für $2s^2 2p \ ^2P^0$ und 27.98 meV für $2p^3 \ ^2P^0$ im Lithium [Chu95]. Die Linienbreite beträgt 117.47 meV für $2s^2 2p \ ^2P^0$ und 52.14 meV für $2p^3 \ ^2P^0$.

Darüber hinaus wird die Resonanzenergie durch die störungstheoretisch Berücksichtigung des Massenspaltungsterms und relativistischer Terme verbessert. Die resultierenden Beiträge sind 6.1 meV für $2s^2 2p \ ^2P$ und 3.6 meV für $2p^3 \ ^2P$.

Die Feinstrukturaufspaltung der Energieniveaus wurde ebenfalls berechnet, indem die Spin-Bahn-, die Spin- andere Bahn und die Spin- andere Spin-Kopplungen berücksichtigt wurden. Die Aufspaltung zwischen ${}^2P_{3/2}$ und ${}^2P_{1/2}$ ist 1.9 meV für $2s^22p\ {}^2P$ und 0.4 meV für $2p^3\ {}^2P$. Die Feinstrukturaufspaltung ist somit fast fünfmal kleiner als die natürliche Linienbreite der Resonanzen. Daher überlappen die Zustände ${}^2P_{3/2}$ und ${}^2P_{1/2}$ und bilden eine Resonanz. T.K. Chung hat den Photoionisationsquerschnitt im Energiebereich der Doppelanregung mit Hilfe der durch die Sattelpunkt-Komplex-Methode berechneten Wellenfunktion berechnet [Chu97a und 97b]. Die Ergebnisse der Satellitpunkt-Methode (Resonanzenergie, Linienbreite und Photoionisationswirkungsquerschnitt) zeigen beste Übereinstimmung mit verschiedenen experimentellen Ergebnissen für die Mehrfachanregungen von Lithium.

3 Die Grundlagen des Experimentes

3.1 Einleitung

In der vorliegenden Arbeit wurden mehrfach angeregte Zustände von Lithium-Atomen in Photoabsorptionsexperimenten untersucht. Durch Messung des Verhältnisses von einfallender I_0 und transmittierter Lichtintensität I kann der atomare Absorptionsquerschnitt σ gemäß des Lambert-Gesetzes

$$\frac{I}{I_0} = e^{-\sigma n l}$$

ermittelt werden. Dabei ist n die Atomzahldichte und l die Absorptionslänge. Die in dieser Arbeit ermittelten rumpfangeregten Zustände von neutralem atomarem Lithium befinden sich zwischen 55 eV und 170 eV oberhalb des Grundzustandes. Sie können durch Photonen aus dem VUV (Vakuum-Ultra-Violett)-Bereich durch Dipolübergänge erreicht werden. Theoretiker haben vorausgesagt, daß die Doppelanregungen sehr schmale Resonanzen hervorrufen [Che94], während die Dreifachanregungen einen geringen Absorptionsquerschnitt haben aufweisen [Chu82a]. Um dieses Experiment durchführen zu können, müssen die folgenden Anforderungen an das Licht gestellt werden.

- **Ein kontinuierliches Spektrum, das den VUV Energiebereich abdeckt.**

Zur Zeit eignet sich die Synchrotronstrahlung anbieten für spektroskopische Untersuchungen im VUV-Bereich.

- **Ein hoher Photonenfluß, der eine gute Statistik in schwachen Resonanzen ergibt.**

Periodische magnetische Strukturen (Undulatoren) in Elektronen- oder Positronen-Speicherringen erzeugen diese hohe Intensität (siehe Abb. 4).

- **Monochromatoren mit hohem Auflösungsvermögen, mit dem die schmalen Resonanzen aufgelöst werden können.**

Neu entworfene Plangitter-Monochromatoren filtern aus dem kontinuierlichen Spektrum der Synchrotronstrahlung ein sehr schmalen Band heraus.

Der Meßplatz BW3 am Hamburger Synchrotronstrahlungslabor (HASYLAB) diene in dieser Arbeit als Lichtquelle, da er alle obigen Bedingungen sehr gut erfüllt.

Die mehrfachangeregten Zustände liegen energetisch oberhalb der niedrigsten Li-Ionisationschwelle. Der elektronische (nichtstrahlende) Zerfall (Autoionisation und Augerzerfall) überwiegt weitaus den den Fluoreszenzzerfall [Son92]. Deshalb kann der VUV-Absorptionsquerschnitt

σ in sehr guter Näherung wie folgt beschrieben werden:

$$\sigma = \sum_n \sigma_{ion}(A^{n+}) \quad (41)$$

wobei $\sigma_{ion}(A^{n+})$ der Wirkungsquerschnitt für die Produktion eines Ions mit einer positiven Ladung n ist. Im VUV-Energiebereich gibt es verschiedene experimentelle Methoden, mit denen man die in Gleichung (41) angegebenen Photoionisationsquerschnitt experimentell bestimmen kann (siehe Übersichtsartikel [Son92]). In dieser Arbeit wurde der relative Wirkungsquerschnitt der Photoionisation mit Hilfe eines massenspektroskopischen Verfahrens (Ionenflugzeitspektrometer) gemessen, indem die Zahl der Ionen (A^{n+}) gezählt wird.

Der obere Teil in Abb. 9 auf Seite 29 zeigt schematisch den Meßplatz BW3 und das Ionenflugzeitspektrometer. Die Meßanordnung wird an der Ultrahochvakuum (Meßplatz BW3) bzw Hochvakuum (Ionenflugzeitspektrometer) betrieben, da das VUV-Licht von jeder Materie stark absorbiert wird.

In folgenden Abschnitten werden verschiedene Teile des experimentellen Aufbaus ausführlich beschrieben.

3.2 Lichtquelle

Wenn relativistische Elektronen- oder Positronenpakete sich im Speicherring radial beschleunigt bewegen, emittieren sie ein enges Strahlbündel, das ein sehr intensives Kontinuumspektrum vom Infraroten bis zum Röntgenbereich enthält. Aufgrund der hohen erreichbaren Photonenflußdichten, Kollimation, Polarisation sowie der gepulsten Zeitstruktur ist die Synchrotronstrahlung die ideale Lichtquelle für VUV-Experimente. Für die Anregung von freien Metallatomen mit Photonen braucht man einen hohen Photonenfluß, da die erreichbaren Teilchendichten von Atomstrahlen auf maximale Werte von $10^{12}/\text{cm}^3$ eingeschränkt und die Absorptionquerschnitte klein sind. In modernen Synchrotronstrahlungsanlagen für hohen Photonenfluß werden periodische Magnetstrukturen in gerade Stücke des Speicherrings eingebaut, die man als Wiggler bzw, Undulatoren bezeichnet (Abb. 4). Wiggler und Undulatoren werden durch die dimensionslose Größe K charakterisiert. Man nennt die Magnetanordnung Wiggler, wenn $K > 1$, und Undulator, wenn $K \leq 1$. Es gilt,

$$K = \alpha\gamma = \left(\frac{\lambda_0 e B}{2\pi m_0 c}\right) \left(\frac{1}{\gamma}\right) \quad (42)$$

wobei α der maximale Ablenkwinkel der Elektronenbahn, λ_0 die Periode der Magnetfeldanordnung, $\gamma = \frac{E}{m_0 c^2}$ und B die Amplitude des periodisch verlaufenden magnetischen Feldes auf der Strahlachse sind. Die Magnetanordnung ruft eine sinusförmige Bewegung des elektrisch geladenen Teilchens auf der Bahn im Speicherring hervor, so daß sich das in den einzelnen Perioden

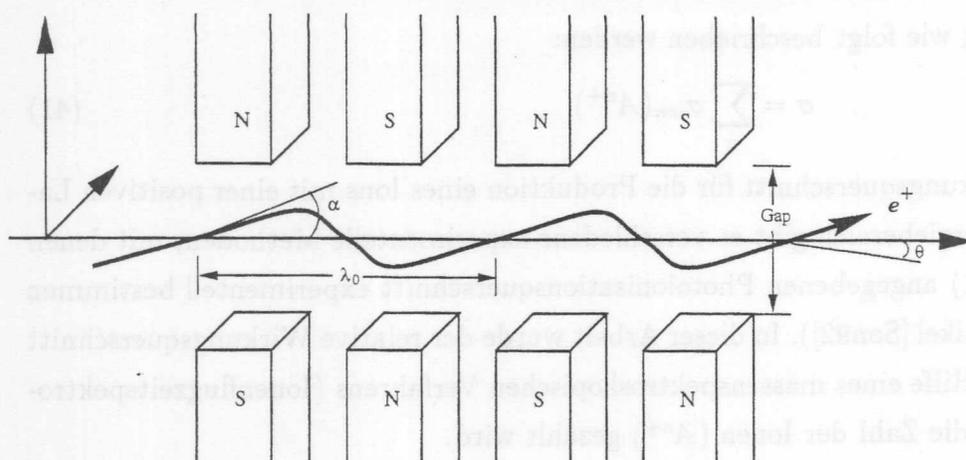


Abbildung 4: Prinzip des aus einer periodischen Anordnung (Periodenlänge λ_0) von kurzen Ablenkmagneten ($\alpha =$ Ablenkwinkel des e^+ -Strahls) mit abwechselnder Polarität bestehenden Wigners oder Undulators. Mit dieser Magnetanordnung können hohe Photonendichten und eine starke horizontale Bündelung ($\theta =$ Emissionswinkel der Photonen) der Strahlung erreicht werden.

abgestrahlte Licht Vorwärtsrichtung inkohärent (Wiggler) bzw. kohärent (Undulator) überlagert. Bei kleinen Auslenkungswinkeln α der Teilchen im Undulator überlagert sich die von den einzelnen Bögen ausgesendete Strahlung so, daß je nach Wellenlänge und Beobachtungsrichtung θ konstruktive oder destruktive Interferenz auftritt. Die Wellenlängen λ_i der Maxima sind gegeben durch (siehe S. 262 in [Wil92]):

$$\lambda_i = \frac{\lambda_0}{2i\gamma^2} \left(1 + \frac{K^2}{2} + \gamma^2 \theta^2 \right). \quad (43)$$

Dabei ist θ der Winkel gegen die Strahlachse und i die Ordnungszahl. Abb. 5a zeigt das Spektrum der von einem Undulator am Meßplatz BW3 ermittelten kohärenten Strahlung bei einem bestimmten Polabstand. Am Experiment muß man die höheren Harmonischen (Abb. 5a) beachten, deren Auftreten darauf beruht, daß sich die geladenen Teilchen in der Realität nicht auf exakten Sinusbahnen bewegen. Wenn nötig, wurde bei unserem Experiment die oberhalb der Al-Kante liegende zweite Harmonische durch das Einbringen einer Al-Folie in den Strahlengang unterdrückt. Durch die Veränderung des Polabstandes des Undulators kann man das Maximum der ersten Harmonische auf die gewünschte Energieposition einstellen. Der Undulator liefert Licht niedriger (bzw hoher) Photonenergie bei einem kleinen (bzw großen) Polabstand. Man kann einen kontinuierlich durchstimmbaren, monochromatischen und hoch intensiven Lichtstrahl erhalten (Abb. 5b), indem man die erste Harmonische durch die kontinuierliche Veränderung des Polabstandes verschiebt und gleichzeitig die optischen Komponenten der Strahlführung und des Monochromators optimal anpaßt. Am Meßplatz BW3 sind, um einen großen Spektralbereich

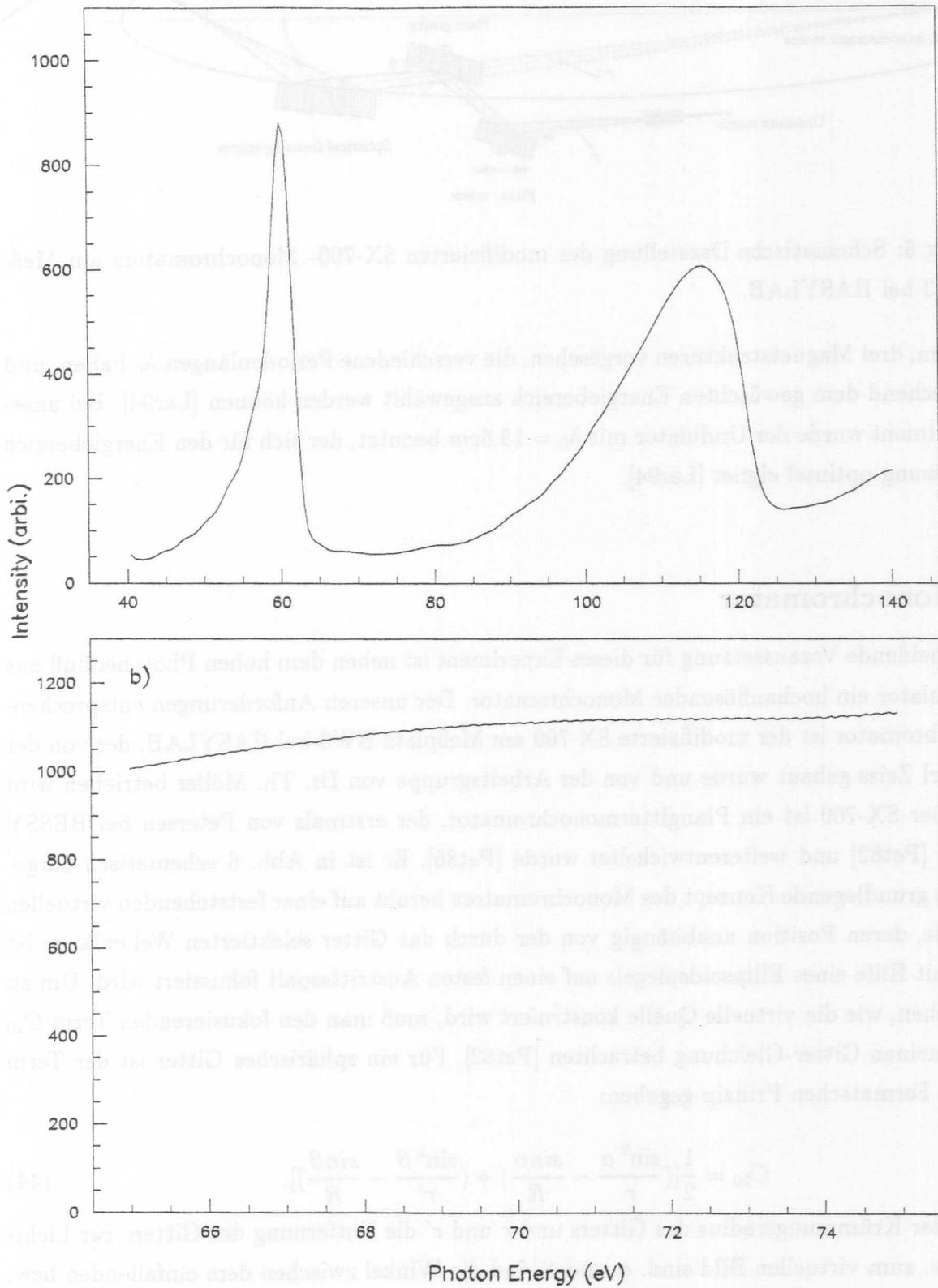


Abbildung 5: Das Undulatorspektrum am Meßplatz BW3. a) Bei festem Polabstand, b) bei kontinuierlicher Veränderung des Polabstandes im Maximum der ersten Harmonischen.

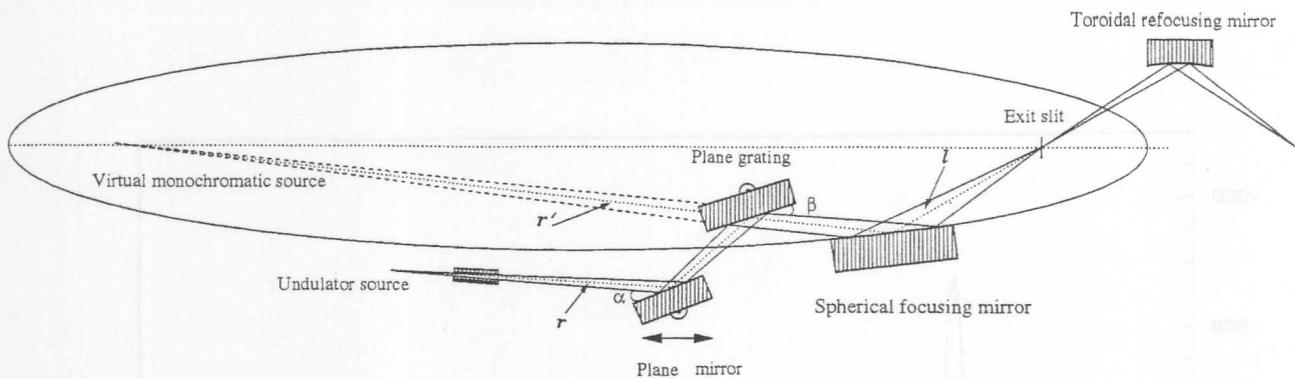


Abbildung 6: Schematische Darstellung des modifizierten SX-700- Monochromators am Meßplatz BW3 bei HASYLAB.

abzudecken, drei Magnetstrukturen vorgesehen, die verschiedene Periodenlängen λ_0 haben, und die entsprechend dem gewünschten Energiebereich ausgewählt werden können [Lar94]. Bei unserem Experiment wurde der Undulator mit $\lambda_0 = 18.6\text{cm}$ benutzt, der sich für den Energiebereich unserer Messung optimal eignet [Lar94].

3.3 Monochromator

Die entscheidende Voraussetzung für dieses Experiment ist neben dem hohen Photonenfluß aus dem Undulator ein hochauflösender Monochromator. Der unseren Anforderungen entsprechende Monochromator ist der modifizierte SX-700 am Meßplatz BW3 bei HASYLAB, der von der Firma Carl Zeiss gebaut wurde und von der Arbeitsgruppe von Dr. Th. Möller betrieben wird [Lar94]. Der SX-700 ist ein Plangittermonochromator, der erstmals von Petersen bei BESSY entworfen [Pet82] und weiterentwickelt wurde [Pet86]. Er ist in Abb. 6 schematisch dargestellt. Das grundlegende Konzept des Monochromators beruht auf einer feststehenden virtuellen Lichtquelle, deren Position unabhängig von der durch das Gitter selektierten Wellenlänge ist und die mit Hilfe eines Ellipsoidspiegels auf einen festen Austrittsspalt fokussiert wird. Um zu verdeutlichen, wie die virtuelle Quelle konstruiert wird, muß man den fokussierenden Term C_{20} der allgemeinen Gitter-Gleichung betrachten [Pet82]. Für ein sphärisches Gitter ist der Term nach dem Fermatschen Prinzip gegeben:

$$C_{20} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\sin^2 \alpha}{r} - \frac{\sin \alpha}{R} \right) + \left(\frac{\sin^2 \beta}{r'} - \frac{\sin \beta}{R} \right) \right]. \quad (44)$$

wobei R der Krümmungsradius des Gitters und r und r' die Entfernung des Gitters zur Lichtquelle bzw. zum virtuellen Bild sind. α und β sind die Winkel zwischen dem einfallenden bzw. ausfallenden Strahl und der Gitteroberfläche. Setzt man für ein ebenes Gitter $R = \infty$ und die

Fokussierungsbedingung $C_{20} = 0$ in (44) ein, erhält man:

$$r' = -r \frac{\sin^2 \beta}{\sin^2 \alpha} = -rC^2, \quad C \equiv \frac{\sin \beta}{\sin \alpha}. \quad (45)$$

r' ist negativ. Dies bedeutet, daß die Abbildung virtuell ist. Außerdem gibt Gleichung (45) an, daß r' konstant ist, wenn der C -Wert konstant bleibt, das heißt, daß sich das virtuelle Bild immer an einem festen Ort befindet. Die Lichtwellenlänge λ läßt sich aus der allgemeinen Gittergleichung bestimmen:

$$m\lambda = D(\cos \alpha - \cos \beta). \quad (46)$$

Dabei sind m die Beugungsordnung und D die Gitterkonstante. Setzt man den C -Wert in Gleichung (46) ein, wird der Zusammenhang zwischen Wellenlänge λ und Austrittswinkel β gegeben durch:

$$\lambda = \frac{D}{m} [\cos(\arcsin(\frac{\sin \beta}{C})) - \cos \beta] \quad (47)$$

$$\frac{d\lambda}{d\beta} = \frac{D}{m} [\sin \beta - \frac{\sin \beta \cos \beta}{\{1 - (\frac{\sin \beta}{C})^2\}^{1/2}}]. \quad (48)$$

Wenn $C \neq 1$, ergibt sich eine Energiedispersion in Abhängigkeit des Austrittswinkels β . Sowohl die gewünschte Wellenlänge als auch die Fixierung der virtuellen Lichtquelle können gleichzeitig erreicht werden, indem das Gitter bei konstantem C -Wert bei zusätzlicher Rotation und Translation des Planspiegels gedreht wird. Ein idealer elliptischer Spiegel bildet die in einem Brennpunkt befindliche Lichtquelle auf den im anderen Brennpunkt stehenden Austrittspalt ab (s. Abb. 6). Die Beschränkung des Auflösungsvermögens des SX-700 Monochromators aufgrund optischer Fehler wurde bereits eingehend untersucht. Dabei stellte sich die technologisch schwierige Herstellung hochgenauer Oberflächen von Ellipsoidspiegeln als entscheidend heraus. Deshalb ist er im Aufbau am Meßplatz BW3 durch einen sphärischen Spiegel ersetzt worden. Allerdings müssen dessen optische Aberrationen berücksichtigt werden. Der, durch den sphärischen Spiegel bedingte optische Fehler ist jedoch kleiner als die Beiträge der anderen optischen Komponenten aufgrund der großen Fokallänge von $6m$, und des großen Krümmungsradius des sphärischen Spiegels von $329.9m$. Durch lineare Entwicklung der trigonometrischen Funktionen in Gleichung (47) für kleine Winkel erhält man für den Zusammenhang zwischen der Wellenlänge λ und dem Austrittswinkel β :

$$\lambda = \frac{D}{m} (1 - \frac{1}{C^2}) \beta^2 \equiv k \frac{D}{m} \beta^2. \quad (49)$$

und somit

$$\Delta \lambda = \frac{2kD\beta}{m} \Delta \beta. \quad (50)$$

Aus dem Zusammenhang zwischen Energie und Lichtwellenlänge $E = hc/\lambda$ ergibt sich mit Gleichung (50):

$$\Delta E = 2 \frac{\Delta\beta}{\beta} E = \left(\frac{4kDE^3}{hcm} \right)^{1/2} \Delta\beta. \quad (51)$$

Berücksichtigt man zusätzlich die Beziehung $\Delta\beta = \Delta z'/l$, wobei l die Entfernung zwischen Austrittsspalt und Gitter und $\Delta z'$ die vertikale Lichtfleckgröße in der Austrittsspaltebene sind, stellt $\Delta z'$ die vernünftige minimale Spaltgröße dar. Die vertikale Lichtfleckgröße $\Delta z'$ ist gegeben durch [Lar94]:

$$\Delta z' = \Delta z \frac{l}{rC}, \quad \Delta\beta = \frac{\Delta z}{rC}. \quad (52)$$

wobei Δz die vertikale Lichtfleckgröße der Lichtquelle (Dimension des e^+ Strahls im Undulator) ist. Durch Einsetzen von Gleichung (52) in Gleichung (51) findet man die folgende Relation für die Bandbreite des Monochromators ΔE :

$$\Delta E = \left(\frac{4kDE^3}{hcm} \right)^{1/2} \frac{\Delta z}{rC}. \quad (53)$$

Nach Gleichung (53) läßt sich das Auflösungsvermögen durch die Wahl eines großen C-Wertes, einer hohen Beugungsordnung sowie durch eine kleinen Elektronstrahldimension verbessern. Aber je größer der C-Wert ist, desto kürzer ist die Entfernung l zwischen dem sphärischen Spiegel und dem Austrittsspalt. Daraus ergeben sich größere optische Abberationen des sphärischen Spiegels, die das Auflösungsvermögen des Monochromators und die Lichtintensität verringern. Für optimale Bedingungen des Monochromators muß ein Kompromiß in der Wahl des C-Wertes gefunden werden. Bei dem Gitter mit 1221 Strichen *pro mm* wird im Normalfall $C=2.25$ gewählt, da dann die Leistung des Monochromators im bezug auf Auflösung und Intensität maximal ist. In der vorliegenden Arbeit sind Messungen bei den beiden Werten $C=2.25$ und 4.5 durchgeführt worden. Abb. 7 stellt die Ergebnisse für die Messungen der $1s(2s2p^3P)^2P^0$ -Resonanz des Lithiumatoms bei beiden Werten dar. Die Messung bei $C=4.5$ in Abb. 7b ergibt ein gutes Lorenzprofil und eine kleinere Linienbreite als bei $C=2.25$ in Abb. 7a. Das bestätigt, daß die Auflösung bei dem höheren C-Wert deutlich besser ist. Bei dem Gitter mit 1221 Strichen *pro mm* und $C=4.5$ konnte das hohe Auflösungsvermögen von $E/\Delta E = 10000$ in der ersten Beugungsordnung erreicht werden.

Die Doppelanregungen von Lithium, deren Wirkungsquerschnitt noch relativ groß sind (Mb-Bereich), die jedoch eine sehr schmale natürliche Linienbreite aufweisen, wurden hochauflösend bei $C=4.5$ trotz der Verringerung des Photonenflusses durchgeführt. Die Messungen der Dreifachanregungen fanden in den meisten Fällen bei $C=2.25$ mit hohem Photonenfluß statt, weil die Wirkungsquerschnitte hier sehr klein sind (kb-Bereich). Die Energieeichung des Monochromators wurde mittels bekannter Absorptionslinien verschiedener Edelgase durchgeführt. In Kapitel 3.7 wird die Eichung ausführlich erläutert.

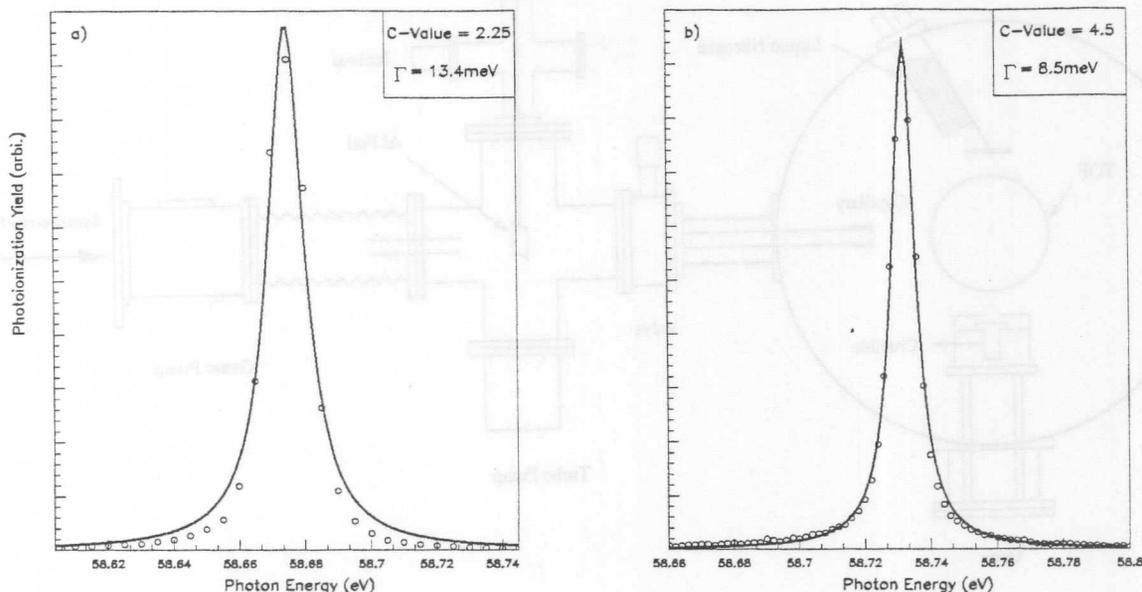


Abbildung 7: Die Messergebnisse der Li $1s(2s2p\ ^3P)\ ^2P$ -Resonanz bei den beiden C-Werten 2.25 und 4.5. Die durchgezogenen Linien in a) und b) zeigen die, an die Meßdaten (o o o) angepaßten, Lorenzprofile.

3.4 Atomstrahlquelle und Druckstufe

Um den Wirkungsquerschnitt zu messen, braucht man neben dem Licht die zu untersuchenden Atome in der Gasphase. Zur Erzeugung der freien Lithiumatome wurde das feste Probenmaterial in einem Ofen verdampft, der sich innerhalb der Experimentierkammer zusammen mit einem Ionenflugzeitspektrometer (Time Of Flight Spektrometer, TOF) befand. Die Verdampfung erfolgte, indem die Probe in einem Tiegel aus Edelstahl durch einen über eine Keramikhalterung gewickelten Wolframdraht erhitzt wurde, der durch einen Heizstrom zum Glühen gebracht wurde. Schon bei geringer Leistung kann der benötigte Dampfdruck erreicht werden. Gemäß der Verdampfungskurve von Lithium beträgt der Dampfdruck im Tiegel bei einer Temperatur von 500 K ca. 10^{-2} Torr, was einer Teilchendichte im Reaktionsraum in der Größenordnung von $10^{10} \sim 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ entspricht. Eine höhere Teilchendichte ist mit einer höheren Leistung erreichbar. Doch um die Teilchendichte während der langen Meßzeiten stabil und den Druck in der Experimentierkammer bei weniger als 10^{-6} mbar zu halten, wurde der Ofen bei niedriger Leistung betrieben. Außerdem wird bei einem hohen Dampfdruck der Strahlmonitor durch Lithium verunreinigt und das Ultrahochvakuum des Strahlrohres (10^{-10} mbar) wird verschlechtert. Abb. 8 zeigt schematisch den Aufbau der Experimentierkammer und der Druckstufe. Der Atomstrahl wird, nachdem er die Wechselwirkungszone durchquert hat, auf einem mit flüssi-

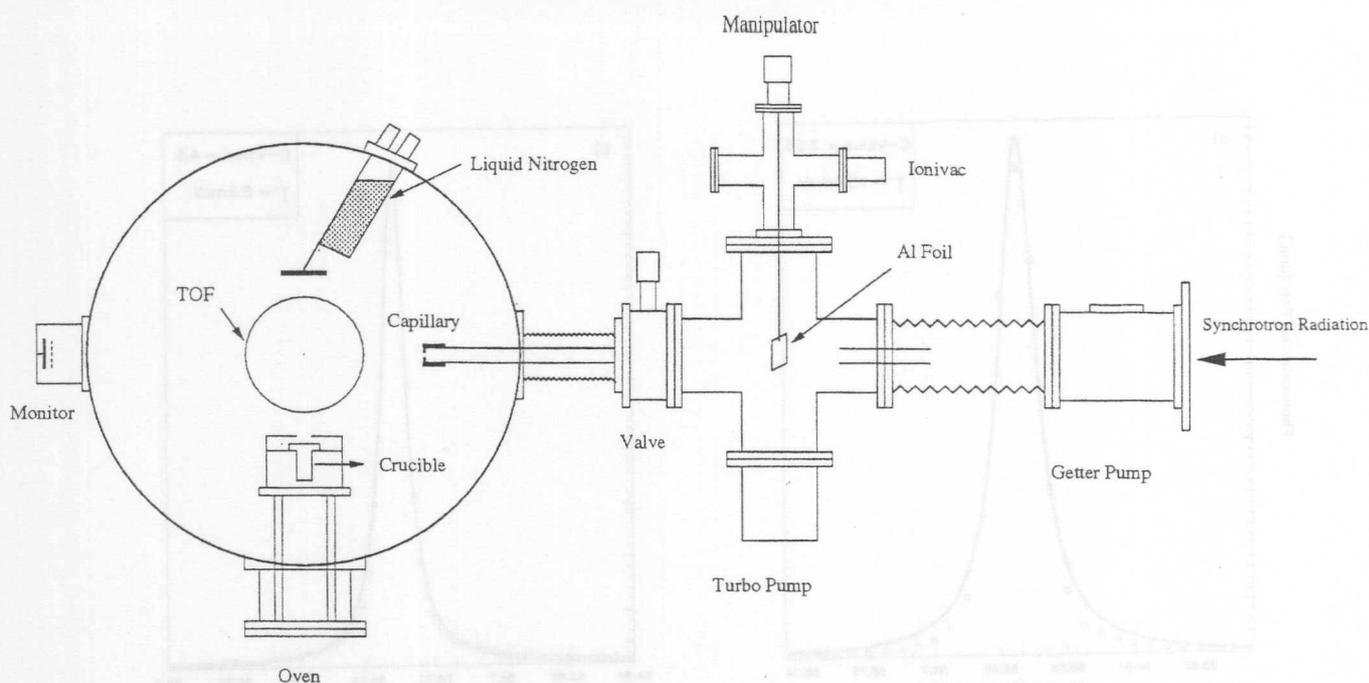
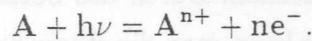


Abbildung 8: Aufbau der Experimentierkammer und der Druckstufe. Die differentiell gepumpte Druckstufe erhält das Druckgefälle von 10^{-10} mbar in Strahlrohr und Meßplatz BW3 zu 10^{-6} mbar in der Kammer aufrecht.

gem Stickstoff gekühlten Kondensationsschild aufgefroren. So kann ein besserer Druck in der Kammer erreicht werden. Zwischen die Experimentierkammer und das Strahlrohr wurde eine differentiell gepumpte Druckstufe eingebaut, damit die optischen Elemente vor Kontamination bewahrt werden. In der Druckstufe befinden sich zwei lange Röhren. Auf der Seite der Experimentierkammer wird das eine mit einem Deckel mit einer Durchlaßöffnung von ca. 1 mm abgeschlossen. In der Mitte der Druckstufe befindet sich in einem Kreuzstück eine Aluminium-Folie von ca. 1000 Å Dicke, die auf einem Kupfernetz (70% Transmission) aufgebracht ist, und die dazu dient, die zweite Ordnung des Monochromators zu unterdrücken. Außerdem eignet sich die Energie der Aluminium-L-Absorptionskante zur Eichung des Monochromators. Die Strecke wird durch eine Turbomolekularpumpe und eine Getterpumpe gepumpt. Bei der Messung wurde die Druckdifferenz (Kammer: 10^{-6} mbar, Kreuzstück: 10^{-7} mbar, Ende der Druckstufe: 10^{-8} mbar, Strahlrohr: 10^{-9} — 10^{-10} mbar) aufrecht erhalten, wobei die Experimentierkammer von einer hochleistungsfähigen Turbomolekularpumpe gepumpt wurde. Hinter der Kammer befindet sich ein Strahlmonitor, der aus einem mit Gold beschichteten (Schichtdicke 1000 Å) Kupferplättchen besteht, vor dem ein Kupfernetz (Transmission von 70%) angebracht ist. Durch Messung des Photoelektronenstroms aus der Goldschicht wird die Intensität der Synchrotronstrahlung bestimmt, um das Meßsignal zu normieren.

3.5 Flugzeitspektroskopie

Nachdem ein freies Atom ein VUV-Photon absorbiert hat, können verschiedene physikalische Prozesse stattfinden. Als Folge von Umordnungsprozessen der Elektronen wird das Atom in nahezu allen Fällen ionisiert. Diese Photoionisation kann durch folgende Reaktionsgleichung symbolisch dargestellt werden:



Bei Photoionisationsexperimenten werden Zahl und Ladung der erzeugten Ionen sowie Energie und Winkelverteilung der Elektronen durch verschiedene spektroskopische Methoden bestimmt. In dieser Arbeit wurden die Photoionen mittels eines Flugzeit-Massenspektrometers nachgewiesen. Dieses separiert verschiedene Ionen nach ihrer Flugzeit, die proportional zur Wurzel des Verhältnisses von Masse zu Ladung $\sqrt{\frac{m}{q}}$ ist. Das Prinzip des Ionenflugzeitsspektrometers ist in Abb. 9 dargestellt. Der Atomstrahl aus dem Ofen wird mit monochromatisierter Synchrotronstrahlung in der Mitte des Wechselwirkungsraums gekreuzt, in dem positive Ionen und Elektronen erzeugt werden. Diese positiven Ionen lassen sich durch den kurzen auf eine Metallplatte (Repeller) gegebenen positiven Puls in das Fokussier- und Beschleunigungssystem bewegen. Dieses wird mit Molybdännetzen auf beiden Seiten versehen, um die einzelnen Räume elektrisch voneinander zu trennen und um die elektrischen Felder zu homogenisieren. Die Ionen werden zwischen beiden Netzen fokussiert und nachbeschleunigt, danach treten sie in die feldfreie Driftstrecke ein. Unterschiedlich geladene Ionen durchqueren sie mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten v , die sich aus der durchlaufenen Potentialdifferenz U ergeben:

$$qU = \frac{1}{2}mv^2, \quad v = \sqrt{\frac{2Uq}{m}}, \quad t = \frac{s}{v} \propto \sqrt{\frac{m}{q}},$$

wobei s die Länge der feldfreien Driftstrecke ist. Nach einer charakteristischen Dauer t kommen die verschiedenen Ionen zu verschiedenen Zeiten am Ende der Driftstrecke an und lassen sich so zeitlich separieren. Durch zwei MCP (Micro Channel Plates) werden die Ionen nachgewiesen [Sch86, Sla95]. Hierzu werden die Ionen nach dem Durchlaufen der Driftstrecke beschleunigt.

Die Vorteile eines in dieser Arbeit verwendeten Ionenflugzeitsspektrometers im Vergleich zu anderen Nachweisgeräten bei der Untersuchung der Mehrfachanregungen im Lithiumatom werden im folgenden beschrieben.

1) Die Nachweiswahrscheinlichkeit ist fast 1,

da fast alle bei der Photoionisation erzeugten Ionen detektiert werden. Die Dipolübergänge des Grundzustands zu den dreifachangeregten Zuständen im Lithiumatom haben sehr kleine Wirkungsquerschnitte. Um die seltenen Ereignisse nachzuweisen, ist daher die Methode der

Ionenausbeute geeignet.

2) Störungen durch Restgasteilchen und Probenverunreinigungen sind unterdrückt.

In einem Hochvakuum 10^{-7} mbar, wie es bei Messungen an freien Atomen im VUV üblich ist, sind verschiedene Restgasteilchen (Wasserstoff, Stickstoff, Wasser etc.) vorhanden. Die Signale aus der Photoionisation dieser Restgase und der Probenverunreinigungen können das Photoabsorptionsspektrum der Lithiums verfälschen. Durch das Setzen eines Zeitfensters mittels eines Diskriminators bei der Datenaufnahme kann man die störenden Signale drastisch unterdrücken. In einem Massenspektrum von Atmosphäregasen erscheint das leichteste Atom d.h., Wasserstoff, als erstes, danach folgen He, N, O, O-H-Verbindungen, etc. entlang der Zeitachse. Die lange Strecke auf der Zeitachse im Massenspektrum zwischen He und N, die sich für das Lithiumatom anbietet, wird nur durch wenige andere Atome besetzt (s. Abb. 10). Die N^{2+} - und N_2^{4+} -Ionen haben das gleiche Verhältnis von Masse zu Ladung wie Li^+ . Sie liegen deshalb im gleichen Bereich der Zeitachse. Aber die Erzeugungswahrscheinlichkeit der störenden Ionen N^{2+} , N_2^{4+} sind in dem in dieser Arbeit betrachteten Photonenenergiebereich sehr klein und die Störung ist daher vernachlässigbar. Deshalb gibt es eine besonders gute Trennung der Lithiumsignale von Restgassignalen.

3) Die relativen partiellen Wirkungsquerschnitte der Einfach- und Mehrfachphotoionisation können bestimmt werden.

Die dreifachangeregten Zustände zerfallen durch verschiedene komplizierte Prozesse in ein- oder zweifach geladene ionische Endzustände. Durch die Messung der Li^+ - und Li^{2+} -Ausbeuten können die relativen Wirkungsquerschnitte für die Einfach- und Zweifachphotoionisation gemessen werden.

Das Li^+ -Signal aus der Autoionisation der schwachen Resonanzen kann durch den kontinuierlichen Untergrund, der durch direkte Li^+ -Photoionisation erzeugt wird, überdeckt werden. Zwar ist die Zählrate beim Nachweis von Li^{2+} -Ionen aus der Autoionisation kleiner als beim Nachweis von Li^+ -Ionen, da aber der Wirkungsquerschnitt für die direkte Zweifachionisation wesentlich kleiner ist, als der für die direkte Einfachionisation, erhält man beim Nachweis von Li^{2+} -Ionen ein deutlicher resonanter Signal als beim Nachweis von Li^+ -Ionen. Durch die Messung der Zählrate der Li^{2+} -Ionen können die schwachen Resonanzen gemessen werden.

3.6 Experimentelle Durchführung und Datenaufnahme.

Der Meßvorgang Durchführung und Datenaufnahme mittels elektronischer Meßtechnik sind in Abb. 9 schematisch dargestellt. Zur Einstellung der gewünschten Photonenenergie werden mit Hilfe eines Programms am Meßplatzrechner Mikro-Vax der Undulator und der Rechner PC,

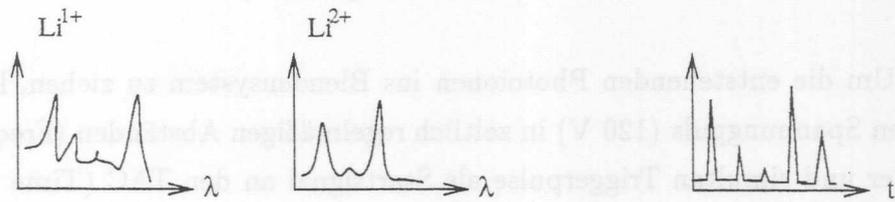
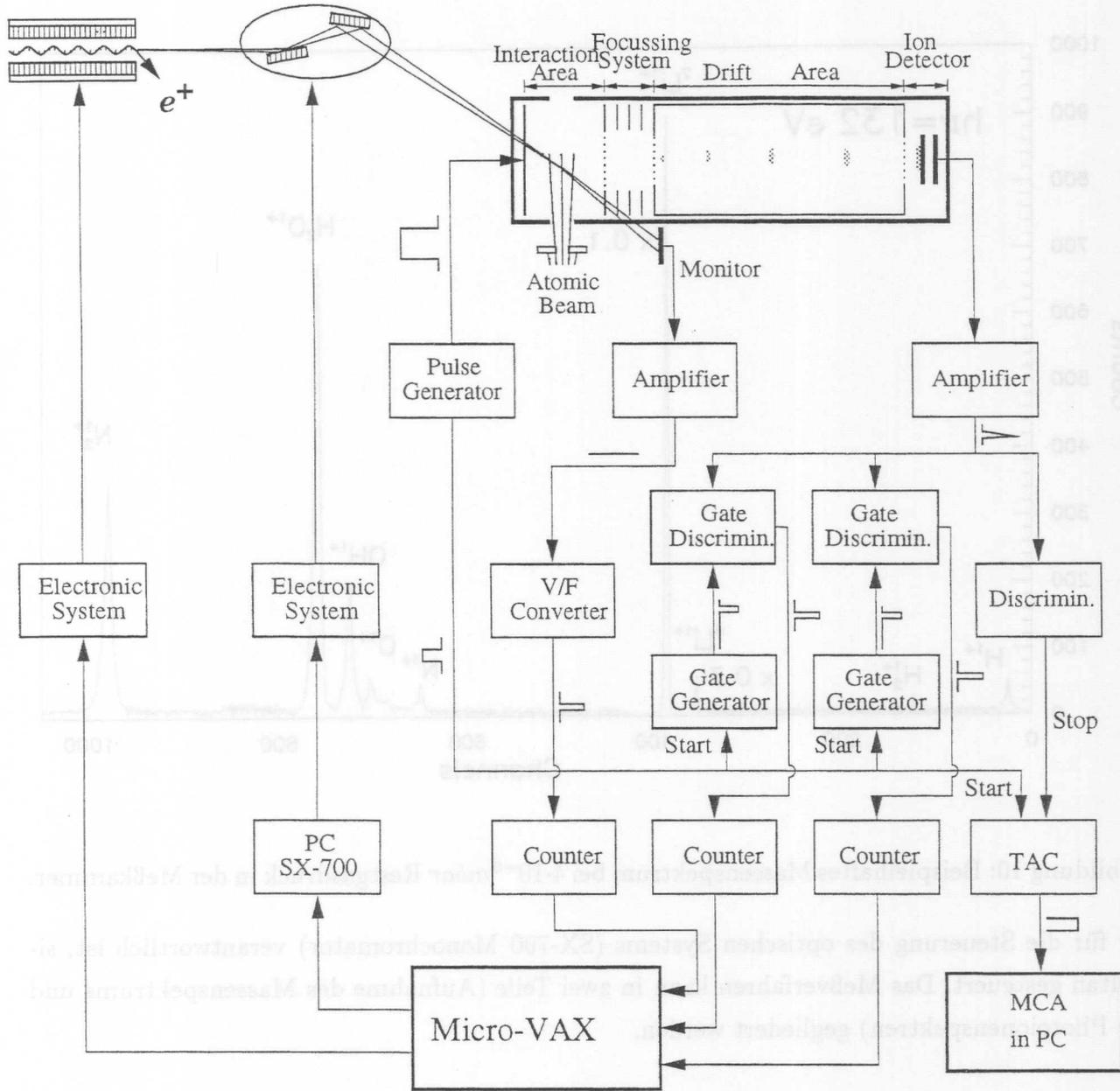


Abbildung 9: Schema der Datenaufnahme und Datenverarbeitung des Ionenflugzeitspektrometers, das mit dem Meßplatz BW3 kombiniert wurde.

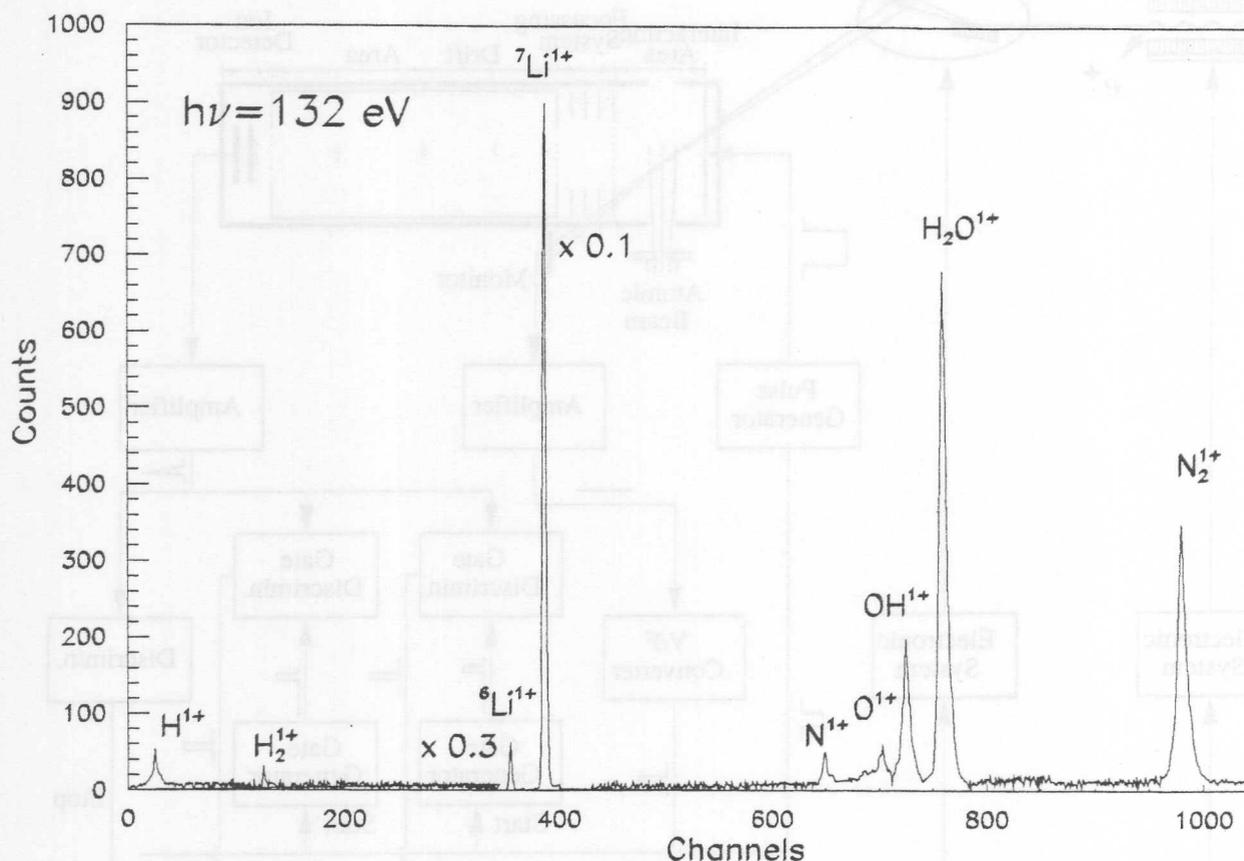


Abbildung 10: Beispielhaftes Massenspektrum bei $4 \cdot 10^{-6} \text{ mbar}$ Restgasdruck in der Meßkammer.

der für die Steuerung des optischen Systems (SX-700 Monochromator) verantwortlich ist, simultan gesteuert. Das Meßverfahren kann in zwei Teile (Aufnahme des Massenspektrums und der Photoionenspektren) gegliedert werden.

Massenspektrum

Um die entstehenden Photoionen ins Blendensystem zu ziehen, liefert der Pulsegenerator einen Spannungspuls (120 V) in zeitlich regelmäßigen Abständen (Frequenz 40 kHz) an den Repeller und simultan Triggerpulse als Startsignal an den TAC (Time to Amplitude Converter) und zwei Gategeneratoren [Sla95]. Die von dem Repeller getriebenen Ionen treffen auf dem Detektorsystem am Ende des TOF auf und das Signal der MCP wird von einem zweistufigen Verstärker verstärkt. Dieses verstärkte Signal wird an einen Diskriminator weitergegeben und in Rechteckpulse verwandelt. Das Signal aus dem Diskriminator wird als Stoppsignal an

den TAC gesendet. Der TAC erzeugt eine Ausgangsspannung, deren Höhe proportional zum zeitlichen Abstand zwischen Start- und Stoppuls und damit proportional zum Betrag $\sqrt{\frac{m}{q}}$ des Photoions ist. Dieser Puls wird mit einem MCA (Multi-Channel Analyzer) aufgenommen. Die verschiedenen Amplituden der Pulse werden je einem Kanal des MCA zugeordnet und dort aufsummiert. Trägt man die Zählrate über den Kanälen auf, erhält man ein Massenspektrum. Abb. 10 zeigt als Beispiel ein Massenspektrum, das Linien enthält, die Lithium zugeordnet werden. Mittels schon bekannter Ionen oder Edelgase kann man die Ionen im Massenspektrum gemäß $\sqrt{\frac{m}{q}}$ einfach identifizieren. In dem in Abb. 10 gezeigten Spektrum erscheinen viele verschiedene Restgase. Außerdem lassen sich die Isotope (6 amu und 7 amu) von Lithium deutlich separieren. Der Anteil der Isotope, der sich aus dem Verhältnis der Flächen der Linien bestimmen läßt, beträgt 5.3% ${}^6\text{Li}$ und 94.7% ${}^7\text{Li}$. Im Vergleich zur natürlichen Häufigkeit 7.42% ${}^6\text{Li}$ und 92.58% ${}^7\text{Li}$ ist der Anteil von ${}^7\text{Li}$ etwas höher. Dies folgt wahrscheinlich aus einem Beitrag der Doppelionisation von Stickstoff.

Photoionenspektren

In einem zweiten Strang erzeugen die Triggerpulse in den Gategeneratoren einen Puls, der gegen das Triggersignal verzögert ist und eine voreingestellte Breite hat. Verzögerung und Breite entsprechen im Massenspektrum Lage und Breite der Linie eines Ions, das untersucht werden soll. Der verzögerte Puls wird an einen Gate Diskriminator weitergegeben, so daß dieser das Signal aus dem Verstärker zu einem Zähler durchläßt. Die Signale werden dort eine bestimmte Zeit lang gezählt und in der Mikro-Vax gespeichert. Gleichzeitig wird das Monitorsignal aus der Golddiode, das proportional zur Intensität der Synchrotronstrahlung ist, verstärkt, durch einen Spannungsfrequenzumwandler in eine Pulsfolge umgewandelt und danach wie die TOF-Signale aufgenommen. Die Ionensignale werden mit Hilfe des Monitorsignals auf konstanten Photonenfluß normiert. Die Photoionenspektren werden in Abhängigkeit der Photonenenergie aufgenommen, indem die oben erläuterten Vorgänge bei jeder Photonenenergie durchgeführt werden.

Die Einfach- und Zweifachphotoionisation verschiedener Edelgase wurden als Test des TOF und zur Eichung des Monochromators gemessen. Zahlreiche Meßergebnisse für Edelgase aus vielseitigen experimentellen Methoden (Photoabsorption, Elektron-Energieverlust-Spektroskopie, Photoelektronenspektroskopie und Ionenausbeute, etc.) bieten einen idealen Vergleich, um zu entscheiden, ob die Flugzeitspektroskopie erfolgversprechend ist.

Abb. 11a zeigt das Photoionisationsspektrum von Helium unterhalb der ($N=2$)-Ionisationsschwelle, während Abb. 11b den hochenergetischen Teil des Spektrums vergrößert darstellt. Das Spektrum zeigt die Doppelanregungen von Helium $1s^2 \rightarrow (sp, 2n\pm)$, die als deutlich asymme-

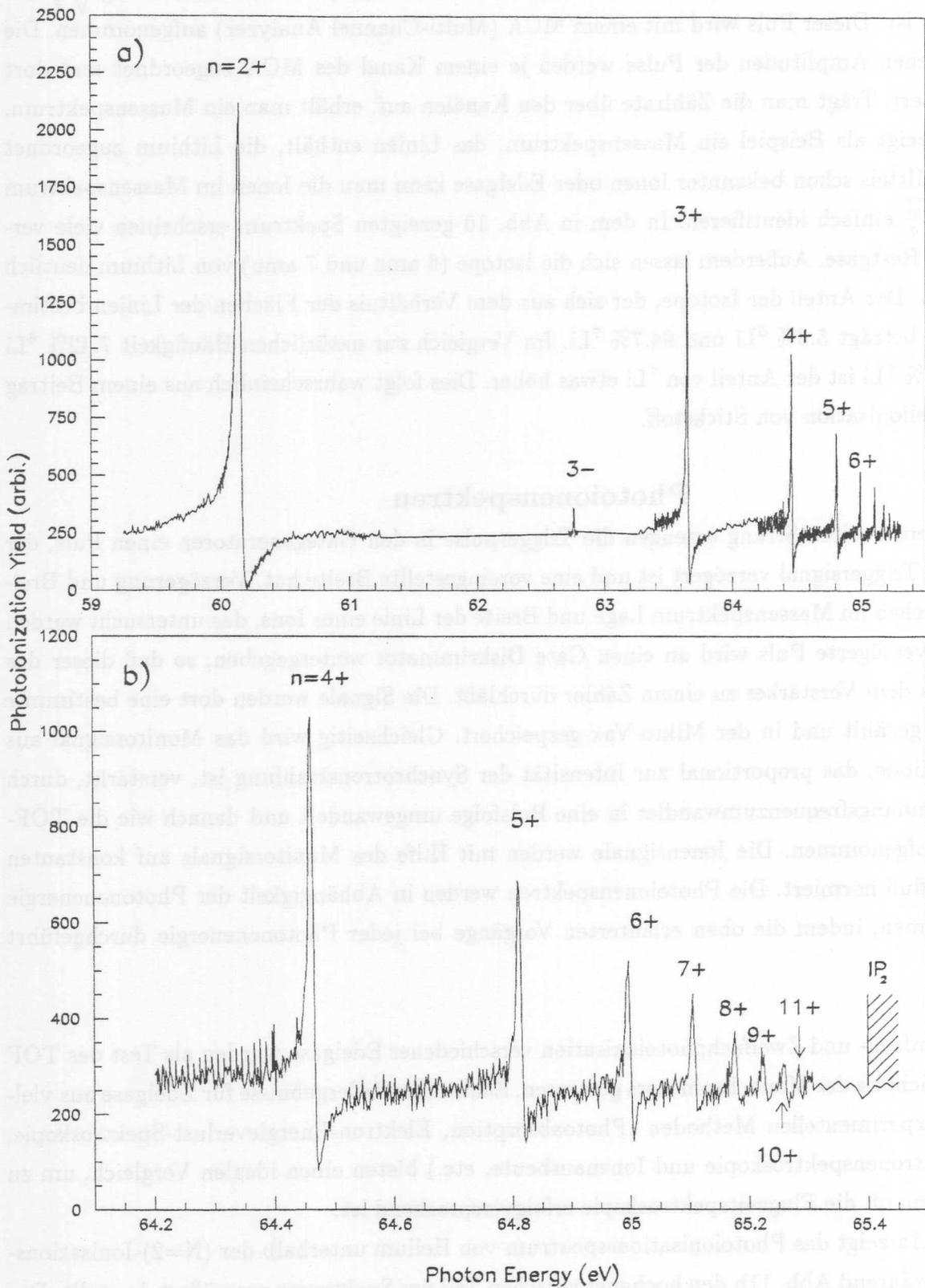


Abbildung 11: Photoionisationsspektrum von He unterhalb der (N=2)-Ionisationsschwelle.

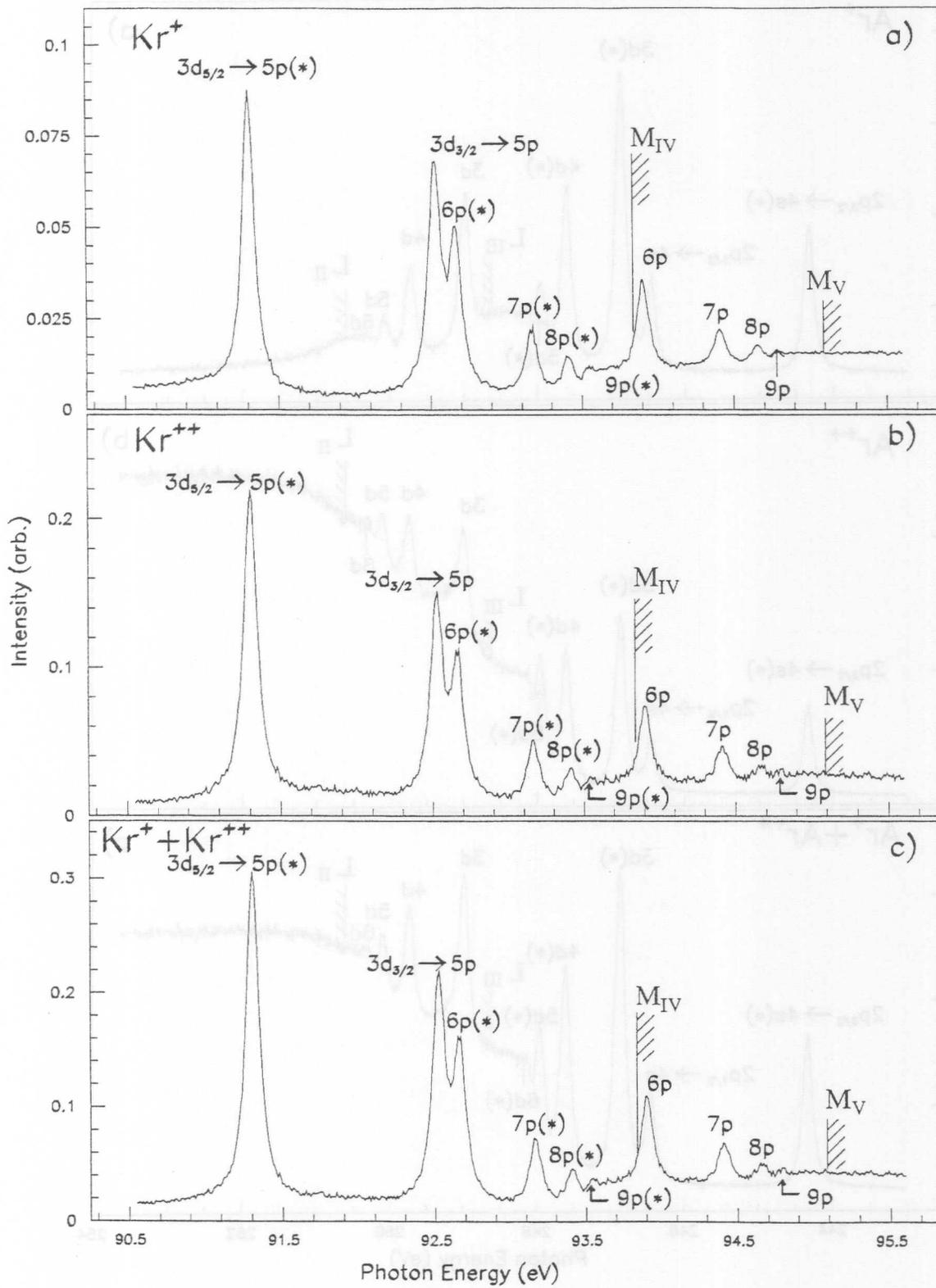


Abbildung 12: Einfach- (a) und Zweifachphotoionisationsspektrum (b) im Bereich der 3d-Innerschalenanregung von Krypton.

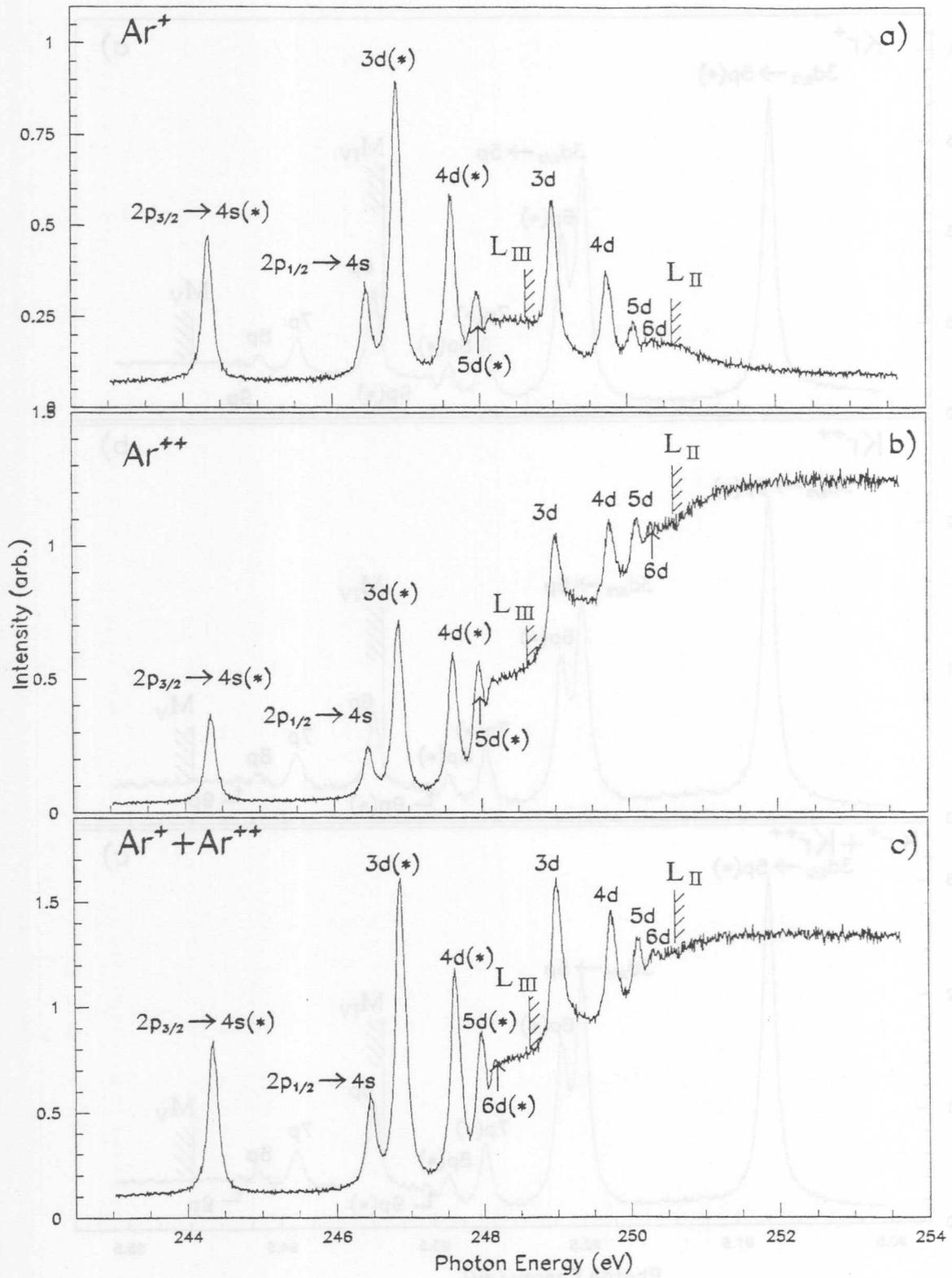


Abbildung 13: Rydbergserien $2p_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} \rightarrow ns, nd$ in Ar.

rische Fanprofile bekannt sind. Die schwache Resonanz ($sp, 3n-$) wurde ebenfalls beobachtet. Aufgrund des guten Auflösungsvermögens des Monochromators konnten wir das Spektrum bis zum schmalen elften Mitglied ($11+$) der Rydbergserien ($sp, 2n+$) auflösen. Das Verhältnis der Intensitäten und die Gestalt der Resonanzen stimmen mit den Ergebnissen aus der Photoabsorption [Mad63] und der Photoionenausbeute [Dom92a] gut überein.

Abb. 12 zeigt das Einfach- (a) und Zweifachphotoionisationsspektrum (b) im Bereich der 3d-Innerschalenanregungen von Krypton, deren Rydbergserien $3d_{\frac{5}{2}, \frac{3}{2}} \rightarrow np(n \geq 5)$ gegen die 3d-Ionisationsschwellen konvergieren. Einfach- und Zweifachionisationsspektrum sehen sehr ähnlich aus.

Abb. 13 zeigt die Rydbergserien $2p_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} \rightarrow ns, nd$ in Ar. Das Spektrum in Abb. 13c, das sich aus der Summe der Ar^+ (Abb. 13a) und Ar^{++} (Abb. 13b) Spektren ergibt, zeigt gute Übereinstimmung mit den Spektren aus der Photoabsorption [Gib81] und der Ionenausbeute [Dom92a]. In der Nähe der 2p-Ionisationsschwellen (L_{III} und L_{II}) verläuft das Spektrum der Einfachionisation in Abb. 13a deutlich anders als das der Zweifachionisation in Abb. 13b. Kurz oberhalb der 2p-Ionisationsschwellen (L_{II}) nimmt die Ausbeute von Ar^+ allmählich ab, gleichzeitig jedoch nimmt die von Ar^{++} zu.

Die Spektren der Edelgase in dieser Arbeit sind in sehr guter Übereinstimmung mit den von Domke et al. mit Hilfe einer Gaszelle und hoher Auflösung gemessenen Spektren [Dom92a]. Die Funktionstüchtigkeit des in dieser Arbeit verwendeten experimentellen Aufbaus konnte für die Messung der Innerschalenanregungen deutlich gezeigt werden.

3.7 Monochromatoreichung

Um die Spektren genau aufnehmen zu können, ist neben der guten Auflösung des Monochromators (Kapitel 3.3) auch eine genaue Energiekalibrierung notwendig. Die eingestellte Photonenenergie des Monochromators stimmt nicht mit der wahren Photonenenergie überein. Der Monochromator wurde beim C-Wert 4.5 für die Doppelanregungen und dem C-Wert 2.25 für die Dreifachanregungen des Lithiums in dieser Arbeit geeicht.

Die Eichung für die Doppelanregungen beim C-Wert=4.5.

Die Autoionisationszustände des He, über die zahlreiche theoretische und experimentelle Untersuchungen durchgeführt und veröffentlicht wurden, sind besonders geeignet für Eichungen im VUV-Bereich [Ho91]. Rydbergserien der Doppelanregung $1s^2 \rightarrow \frac{1}{2}(2snp + ns2p)$ in Abb. 11 haben sich in dieser Arbeit für eine sehr genaue Eichung im Energiebereich um 60 eV, in dem sich die Doppelanregungen des Lithiumatoms befinden, geeignet. Um im Energiebereich von 70 eV \sim 80 eV zu eichen, in dem sich die höheren Doppelanregungen befinden, wurde die

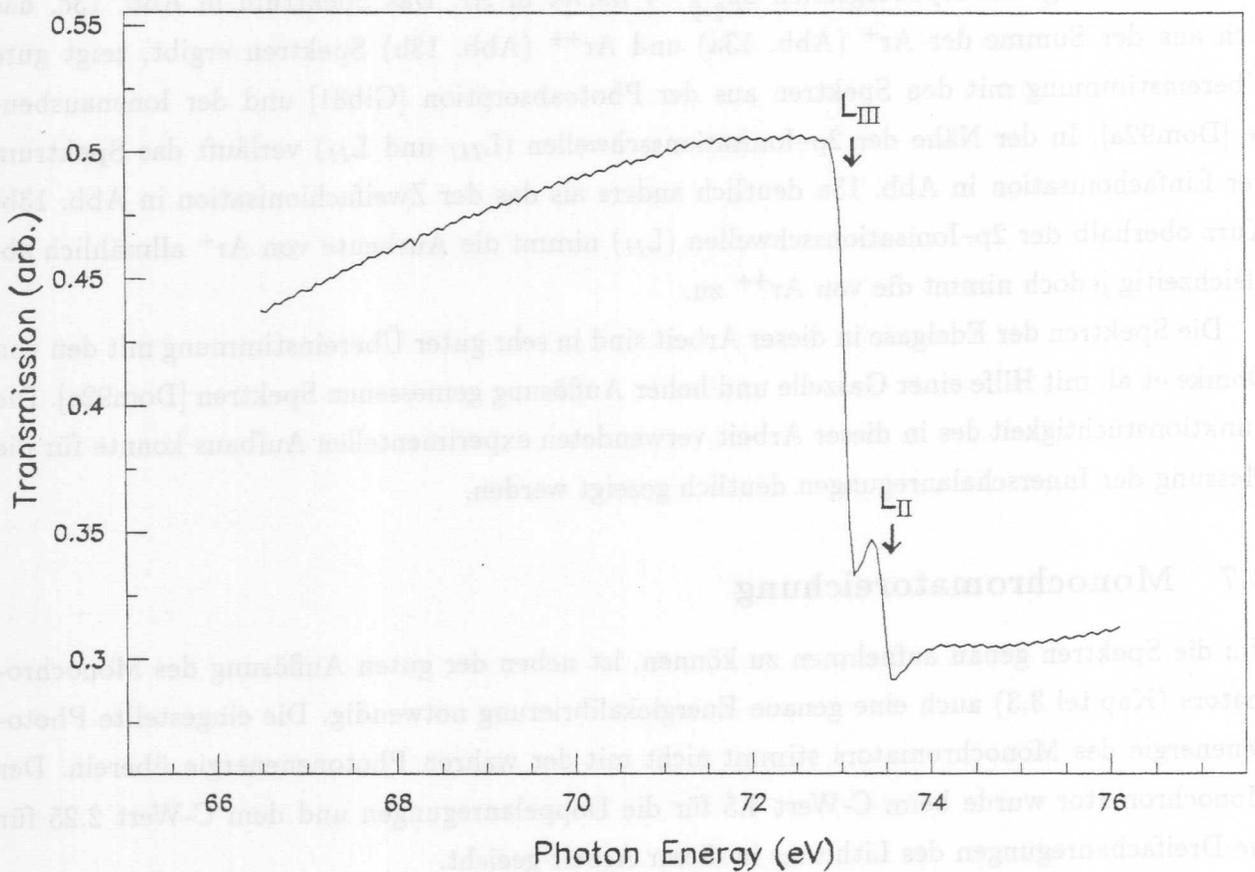


Abbildung 14: Transmission von Al nahe der L-Kante.

Absorption der Al-Kante (L_{II} , L_{III}) aufgenommen. Dazu wurde die Al-Folie in der Mitte der Druckstufe benutzt. Abb. 14 zeigt die Transmission des Aluminiums in der Nähe der Kante. Die Punkte mit maximalem Abfall im Absorptionsspektrum wurden als Lage der Kante bestimmt und gekennzeichnet (Pfeile in Abb. 14). Die Abweichung des Monochromators ist in Abb. 15a als Funktion der eingestellten Energie aufgetragen. Sie ist bei der Bestimmung mit Hilfe der Al-Kante mit einem größeren Fehler behaftet, der durch die begrenzte Auflösung der Referenz [Cod68] verursacht wird. Mittels eines kommerziellen Programms wurden Kurven an die Abweichungen $\Delta E'$ angepaßt. Die daraus resultierende Funktion ist in Abb. 15a eingezeichnet:

$$\Delta E' = 2.22549 - 0.069568 * E' + 0.0005926 * E'^2 \quad (54)$$

$$E = \Delta E' + E' = 2.22549 + 0.930432 * E' + 0.0005926 * E'^2 \quad (55)$$

wobei E' die eingestellte Monochromatorenergie und E die, durch die Eichung bestimmte, Photonenenergie sind.

Die Eichung für die Dreifachanregungen beim C-Wert=2.25.

Es gibt keine Edelgase, die eine spektrale Struktur zwischen 140—170 eV haben, wo sich die Li-Dreifachanregungen befinden. Um die in diesem Energiebereich aufgenommenen Spektren zu eichen, wurden außer Spektren von He auch solche von Xe bei 67 eV, von Kr bei 93 eV (in Abb. 12) und von Ar bei 248 eV (in Abb. 13) als Eichpunkte benutzt. Mit diesen Daten unterhalb und oberhalb des interessanten Energiebereichs kann die Abweichung des Monochromators dazwischen abgeleitet werden. Die Eichpunkte stammen aus King et al. [Kin77] und wurden mittels der Methode der Elektronen-Energieverlust-Spektroskopie mit einer Auflösung von $\Delta E = 70$ meV aufgenommen. So kann man die Energielagen der Resonanzen mit einer Unsicherheit von etwa 10 meV bestimmen. Für die Eichung wurden die drei deutlich getrennten und starken Kr-Resonanzen der $3d_{5/2} \rightarrow 5p$ und $3d_{3/2} \rightarrow 5p, 6p$ verwendet (s. Abb. 12). Aus Abb. 13 wurden die Ar-Resonanzen der $2p_{3/2} \rightarrow 4s, 3d$ und $2p_{1/2} \rightarrow 3d$ bei 250 eV zur Eichung benutzt. Für die Kalibrierung bei niedrigen Energien bieten sich die Xe-Resonanzen $4d_{5/2} \rightarrow 6p$ und $4d_{3/2} \rightarrow 6p$ Resonanzen an. In Abb. 15b sind die Abweichung und die beste Anpassungskurve als Funktion der eingestellten Monochromatorenergie aufgetragen mit

$$\Delta E' = -0.054 + 0.00376 * E' + 0.00002098 * E'^2 \quad (56)$$

$$E = \Delta E' + E' = -0.054 + 1.00376 * E' + 0.00002098 * E'^2 \quad (57)$$

und E' und E wie in den Gleichungen (54, 55).

Gleichung (57) eignet sich für die Eichung der gemessenen Dreifachanregungen

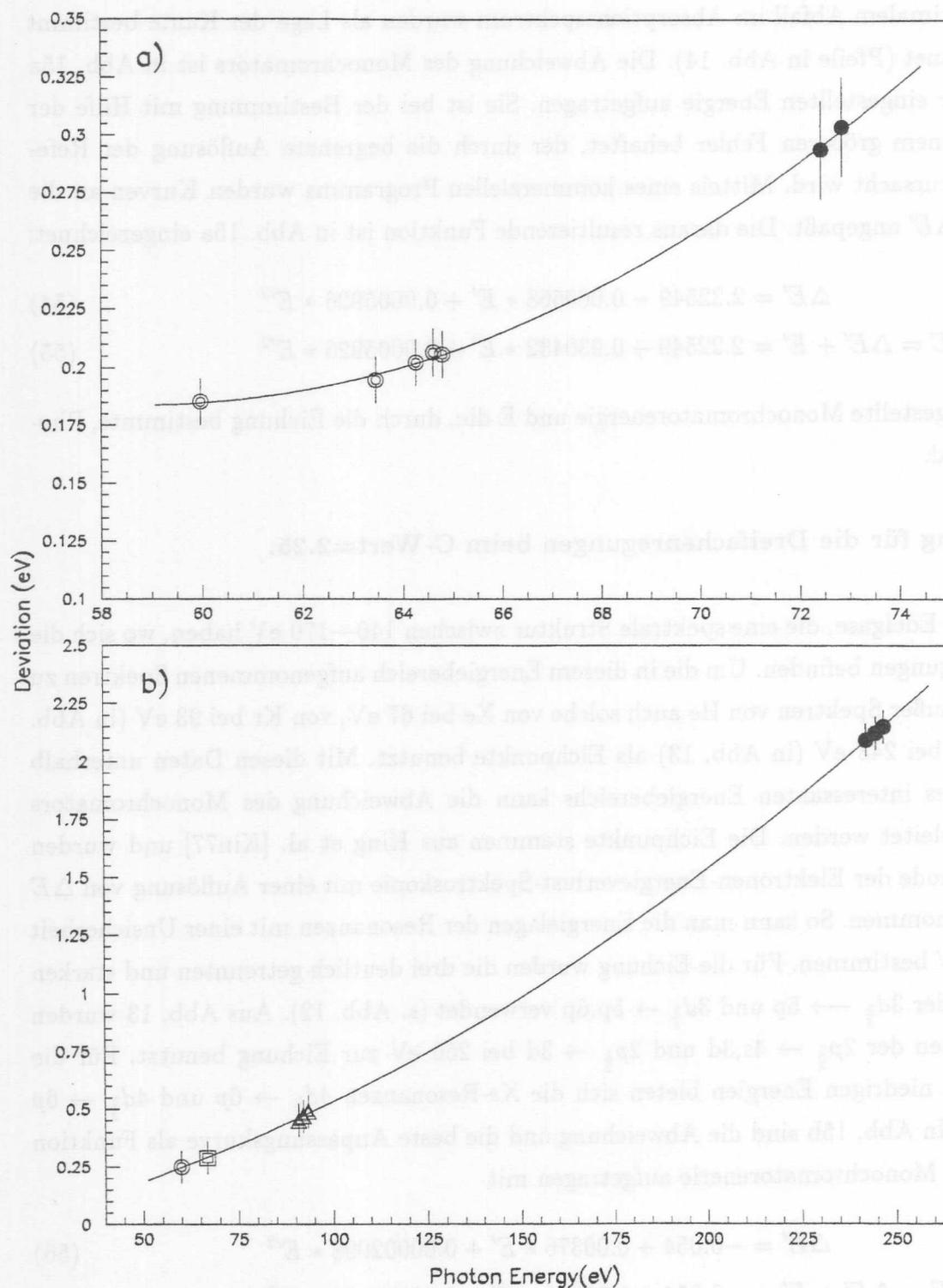


Abbildung 15: Abweichung der wahren Photonenenergie von der am Monochromator eingestellten Energie: a) Für C-Wert 4.5. o:He, ●:Al. b) Für C-Wert 2.25. o:He, □:Xe, △:Kr, ●:Ar.

4 Diskussion der Ergebnisse

Die Diskussion der, für die Mehrfachanregungen erhaltenen, Meßergebnisse gliedert sich entsprechend dem Energieniveauschema von Lithium in Abb. 1 in zwei Teile. Zunächst werden die Doppelanregungen diskutiert. Anschließend werden wir die im Bereich der Dreifachanregungen gewonnenen Ergebnisse vorstellen.

4.1 Li-Doppelanregungen

4.1.1 Einleitung

Das von Ederer et al. 1970 erstmals gemessene Spektrum der Doppelanregungen des Lithiums [Ede70] dient zusammen mit dem des Heliums als grundlegendes Modellsystem zum Studium der Vielteilcheneffekte in Mehrelektronensystemen. Der Vergleich der Doppelanregung des Heliums und des Lithiums eignet sich zur Vertiefung des Verständnisses der korrelierten Bewegung der Elektronen im Atom.

Die Doppelanregungen des Lithiums sind mit Hilfe verschiedener experimenteller Methoden intensiv untersucht worden (siehe Übersichtsartikel [Son92]). Mehlman et al. haben den absoluten Absorptionswirkungsquerschnitt von Li-Metalldämpfen in einer *Heat Pipe* mit Hilfe der Synchrotronstrahlung gemessen [Meh82]. In den letzten Jahren wurden die Photoabsorptionsspektren im Bereich der He-Doppelanregungen mit Hilfe der Synchrotronstrahlung mit sehr hoher Energieauflösung gemessen [Dom92b und 95]. Das Absorptionsspektrum der He-Doppelanregungen zeigt ein anderes Verhalten als das der Li-Doppelanregungen. Der Hauptgrund liegt darin, daß das Lithiumatom ein Elektron mehr als das Helium besitzt. Im Zwei-Elektronensystem, d.h. im He, sind die Ionisationsschwellen He^{+*} , gegen die die Rydbergserien der Doppelanregungen konvergieren, wasserstoffähnliche Ein-Elektronen-Zustände. In der nicht-relativistischen Näherung sind sie bezüglich der Bahndrehimpulsquantenzahl l entartet. Für die Li-Doppelanregungen verbleibt ein Elektron in der K-Schale, während die K-Schale bei der He-Doppelanregungen leer ist. Deshalb sind die Ionisationsschwellen, gegen die die Serien der Li-Doppelanregungen konvergieren, die $\text{Li}^{+*} 1snl (n \geq 2)$ -Zustände, die den Konfigurationen des angeregten Heliums He^* entsprechen. Aufgrund der Spineinstellung der beiden Elektronen und des Bahndrehimpulses des äußeren Elektrons sind die $\text{Li}^{+*} 1snl$ -Zustände energetisch aufgespalten. Diese $\text{Li}^{+*} 1snl$ -Ionisationsschwellen mit gleichen Hauptquantenzahlen n liegen energetisch dicht zusammen. Somit sollten die Resonanzserien, die zu verschiedenen Ionisationsschwellen konvergieren, im gleichen Energiebereich liegen und sich teilweise überlappen. Abhängig von der Energieposition und der Stärke der Kopplungen, kann dies zu teilweise stark gemischten Zuständen führen. Folglich sollte das daraus resultierenden Spektrum sehr kompliziert sein.

Die doppelt angeregten Lithiumatome können, wie man Abb. 1 entnehmen kann, in Li^+ -Ionen zerfallen. Abb. 16 zeigt das Li^+ -Photoionenspektrum im Bereich der $^2P^o$ -Doppelanregungen, das mit hoher Auflösung (Bandbreite von 6 meV) gemessen wurde. Über dem Spektrum sind einige wesentliche Li^{+*} -Ionisationsschwellen ($1snl, n \geq 2$) als vertikale Striche markiert und bezeichnet. Die Energien der Linien wurden durch eine Kalibration anhand der Gleichung (55) bestimmt. Die zunächst nur relativen Intensitäten im Spektrum wurden in absolute Einheit (Mb) für den Photoionisationsquerschnitt angegeben, indem Bereiche, in den sich keine resonanten Strukturen befinden, an die gemessenen absoluten Absorptionswirkungsquerschnitt von Mehlman et al. [Meh82] angeglichen wurden. Der absolute Fehler des so erhaltenen Wirkungsquerschnittes beträgt über 15 %. Dies ist zum Teil durch Unsicherheiten der Referenzmessungen von [Meh82] bedingt. In den folgenden Abbildungen sind nur die statistischen Fehler aufgetragen.

Wenn man das Übersichtsspektrum in Abb. 16 betrachtet, fallen die schmalen sehr starken Resonanzen unterhalb der $1s2s\ ^3S$ -Ionisationsschwelle auf. Zwischen der $1s2s\ ^3S$ -Ionisationsschwelle und der $1s2p\ ^1P$ -Ionisationsschwelle zeigt das Spektrum komplizierte resonante Strukturen. Oberhalb der $1s2p\ ^1P$ -Ionisationsschwelle sind Serien kleiner asymmetrischer Strukturen zu erkennen, die zu den $1s3l$ -Ionisationsschwellen konvergieren. Aufgrund dieser charakteristischen Unterschiede betrachten wir diese drei Bereiche getrennt und diskutieren sie im Vergleich zu anderen experimentellen und theoretischen Ergebnissen.

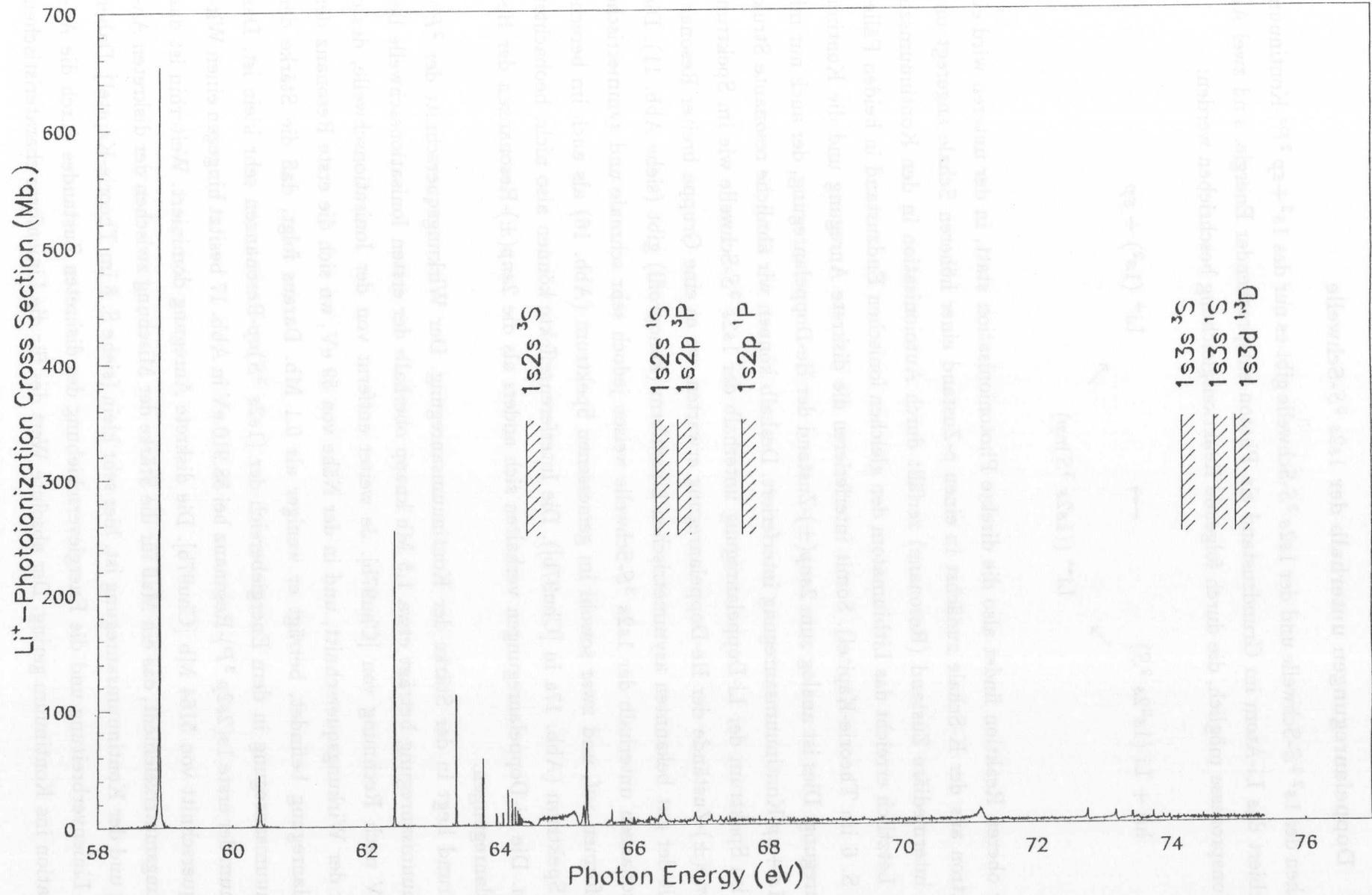
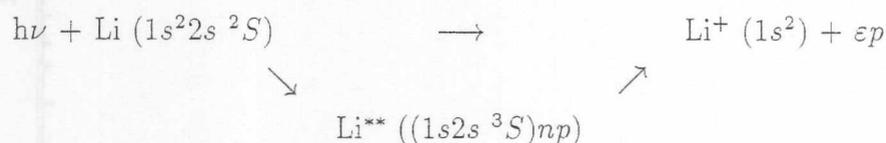


Abbildung 16: Li^+ -Photoionenausbeute im Bereich der $1s^2 2s^2 S \rightarrow 1s n l n' l' ^2 P$ -Doppelanregungen des Lithiumatoms.

4.1.2 Doppelanregungen unterhalb der $1s2s\ ^3S$ -Schwelle

Zwischen der $1s^2\ ^1S$ -Schwelle und der $1s2s\ ^3S$ -Schwelle gibt es nur das $1s^2 + \varepsilon p\ ^2P^\circ$ -Kontinuum. Absorbiert das Li-Atom im Grundzustand ein Photon entsprechender Energie, sind zwei Absorptionsprozesse möglich, die durch folgende Reaktionsgleichung beschrieben werden:



In der oberen Reaktion findet also die direkte Photonionisation statt, in der unteren wird ein s-Elektron aus der K-Schale zunächst in einen p-Zustand einer höheren Schale angeregt und dieser intermediäre Zustand (Resonanz) zerfällt durch Autoionisation in den Kontinuumszustand. Letztlich erreicht das Lithiumatom den gleichen ionischen Endzustand in beiden Fällen (siehe S. 6 im Theorie-Kapitel). Somit interferieren die diskrete Anregung und die Kontinuumsanregung. Dies ist analog zum $2snp(\pm)$ -Zustand der He-Doppelanregung, der auch nur mit einer $1s + \varepsilon p$ -Kontinuumsanregung interferiert. Deshalb können wir ähnliche resonante Strukturen im Spektrum der Li-Doppelanregung unterhalb der $1s2s\ ^3S$ -Schwelle wie im Spektrum der $2snp(\pm)$ -Zustände der He-Doppelanregung erwarten, wo es eine Gruppe breiter Resonanzen mit der gut bekannten asymmetrischen Linienform (Fanoprofil) gibt (siehe Abb. 11). Die Li-Resonanzen unterhalb der $1s2s\ ^3S$ -Schwelle weisen jedoch sehr schmale und symmetrische Linienformen auf, und zwar sowohl im gemessenen Spektrum (Abb. 16) als auch im berechneten Spektrum (Abb. 17a in [Chu97b]). Die Interferenzeffekte können also nicht beobachtet werden. Die Li-Doppelanregungen verhalten sich anders als die $2snp(\pm)$ -Resonanzen der He-Doppelanregungen.

Der Grund liegt in der Stärke der Kontinuumsanregung. Der Wirkungsquerschnitt der $^2P^\circ$ -Kontinuumsanregung beträgt etwa 1.5 Mb knapp oberhalb der ersten Ionisationschwelle bei 5.41 eV nach Rechnung von [Chu97b]. Je weiter entfernt von der Ionisationschwelle, desto kleiner der Wirkungsquerschnitt, und in der Nähe von 59 eV, wo sich die erste Resonanz der Doppelanregung befindet, beträgt er weniger als 0.1 Mb. Daraus folgt, daß die Stärke der Kontinuumsanregung in dem Energiebereich der $(1s2s\ ^3S)np$ -Resonanzen sehr klein ist. Das Maximum der erste $1s(2s2p\ ^3P)$ -Resonanz bei 58.910 eV in Abb. 17 besitzt hingegen einen Wirkungsquerschnitt von 5164 Mb [Chu97b]. Die diskrete Anregung dominiert. Weiterhin ist das Kopplungsmatrixelement, das ein Maß für die Stärke der Mischung zwischen der diskreten Anregung und der Kontinuumsanregung ist, hier sehr klein (siehe S. 8 im Theorie-Kapitel). Daher ist die Linienverbreiterung und die Energieverschiebung des diskreten Zustandes durch die Autoionisation ins Kontinuum gering. Der absolute Wert des für die Linienform charakteristischen

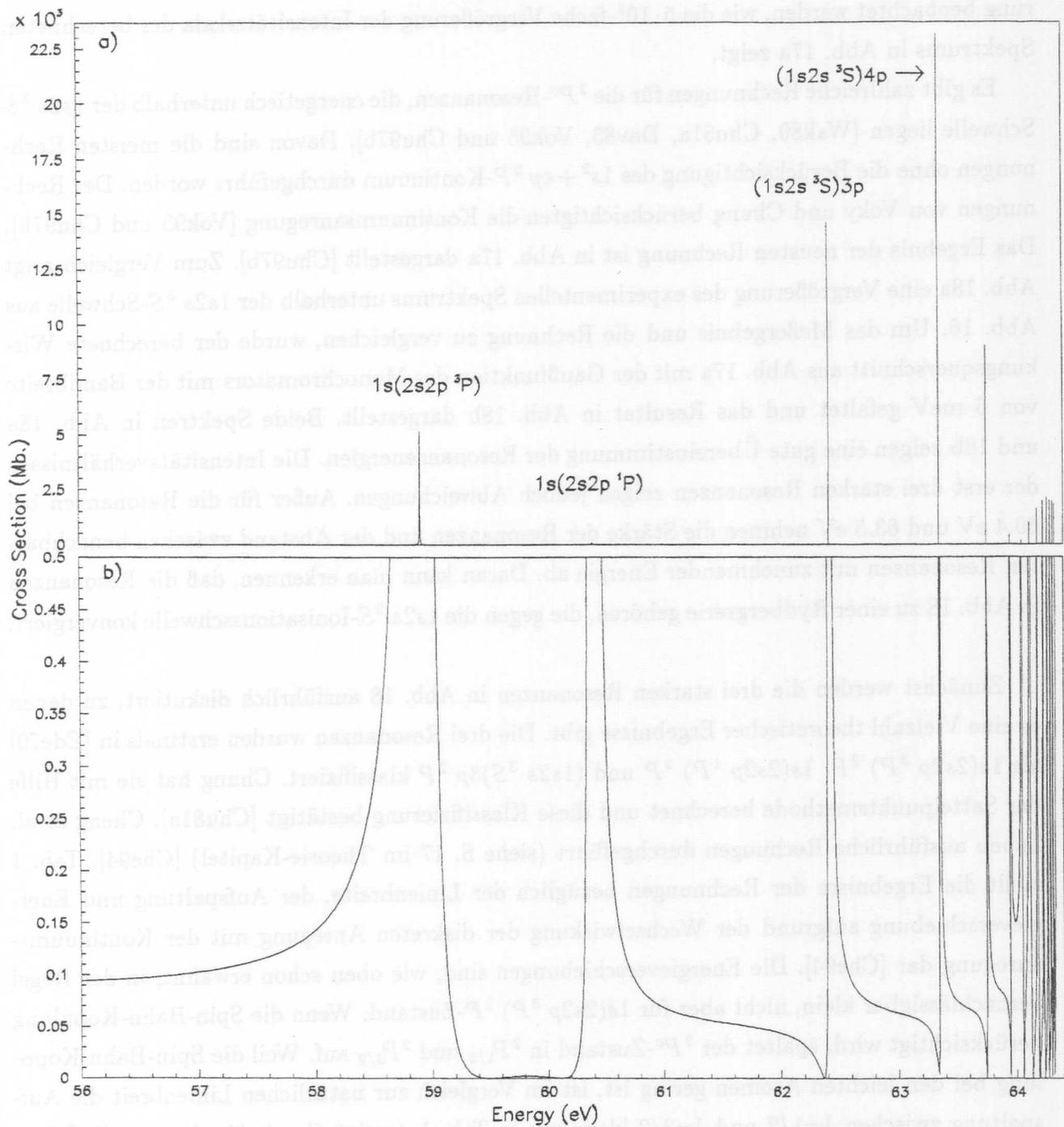


Abbildung 17: a) Berechneter Photoionisationsquerschnitt von Lithium unterhalb der $1s2s \ ^3S$ -Schwelle [Chu97b]. b) Dasselbe mit $5 \cdot 10^5$ -facher Vergrößerung der Intensitätsskala des oberen Spektrums.

q-Parameters ist sehr groß. In diesem Fall ergibt sich ein Lorentz-Profil, d.h. das Absorptionsspektrum zeigt den Verlauf einer diskreten Anregung (siehe S. 10 im Theorie-Kapitel). Der sehr schwache Interferenzeffekt kann, wie in Abb. 17b gezeigt, nur bei sehr starker Vergrößerung beobachtet werden, wie die $5 \cdot 10^5$ -fache Vergrößerung der Intensitätsskala des berechneten Spektrums in Abb. 17a zeigt.

Es gibt zahlreiche Rechnungen für die $^2P^o$ -Resonanzen, die energetisch unterhalb der $1s2s\ ^3S$ -Schwelle liegen [Wak80, Chu81a, Dav85, Vok95 und Chu97b]. Davon sind die meisten Rechnungen ohne die Berücksichtigung des $1s^2 + \epsilon p\ ^2P$ -Kontinuum durchgeführt worden. Der Rechnungen von Voky und Chung berücksichtigten die Kontinuumsanregung [Vok95 und Chu97b]. Das Ergebnis der neusten Rechnung ist in Abb. 17a dargestellt [Chu97b]. Zum Vergleich zeigt Abb. 18a eine Vergrößerung des experimentellen Spektrums unterhalb der $1s2s\ ^3S$ -Schwelle aus Abb. 16. Um das Meßergebnis und die Rechnung zu vergleichen, wurde der berechnete Wirkungsquerschnitt aus Abb. 17a mit der Gaußfunktion des Monochromators mit der Bandbreite von 6 meV gefaltet und das Resultat in Abb. 18b dargestellt. Beide Spektren in Abb. 18a und 18b zeigen eine gute Übereinstimmung der Resonanzenergien. Die Intensitätsverhältnissen der erst drei starken Resonanzen zeigen jedoch Abweichungen. Außer für die Resonanzen bei 60.4 eV und 63.5 eV nehmen die Stärke der Resonanzen und der Abstand zwischen benachbarten Resonanzen mit zunehmender Energie ab. Daran kann man erkennen, daß die Resonanzen in Abb. 18 zu einer Rydbergserie gehören, die gegen die $1s2s\ ^3S$ -Ionisationsschwelle konvergiert.

Zunächst werden die drei starken Resonanzen in Abb. 18 ausführlich diskutiert, zu denen es eine Vielzahl theoretischer Ergebnisse gibt. Die drei Resonanzen wurden erstmals in [Ede70] als $1s(2s2p\ ^3P)\ ^2P$, $1s(2s2p\ ^1P)\ ^2P$ und $(1s2s\ ^3S)3p\ ^2P$ klassifiziert. Chung hat sie mit Hilfe der Sattelpunktmethode berechnet und diese Klassifizierung bestätigt [Chu81a]. Cheng et al. haben ausführliche Rechnungen durchgeführt (siehe S. 17 im Theorie-Kapitel) [Che94]. Tab. 1 stellt die Ergebnisse der Rechnungen bezüglich der Linienbreite, der Aufspaltung und Energieverschiebung aufgrund der Wechselwirkung der diskreten Anregung mit der Kontinuumsanregung dar [Che94]. Die Energieverschiebungen sind, wie oben schon erwähnt, in der Regel vernachlässigbar klein, nicht aber für $1s(2s2p\ ^3P)\ ^2P$ -Zustand. Wenn die Spin-Bahn-Kopplung berücksichtigt wird, spaltet der $^2P^o$ -Zustand in $^2P_{1/2}$ und $^2P_{3/2}$ auf. Weil die Spin-Bahn-Kopplung bei den leichten Atomen gering ist, ist im Vergleich zur natürlichen Linienbreite die Aufspaltung zwischen $J=1/2$ und $J=3/2$ klein, wie in Tab. 1 gezeigt. Somit überlappen die $^2P_{1/2}$ - und $^2P_{3/2}$ -Zustände und sind nicht aufzulösen.

Die berechneten Linienbreiten der ersten zwei Resonanzen sind einige meV, die durch den SX-700 Monochromator in hoher Auflösung gemessen werden können. Abb. 19 zeigt experimentelle Spektren der $1s(2s2p\ ^3P)\ ^2P$ - und $1s(2s2p\ ^1P)\ ^2P$ -Resonanzen und die daran angepaßten

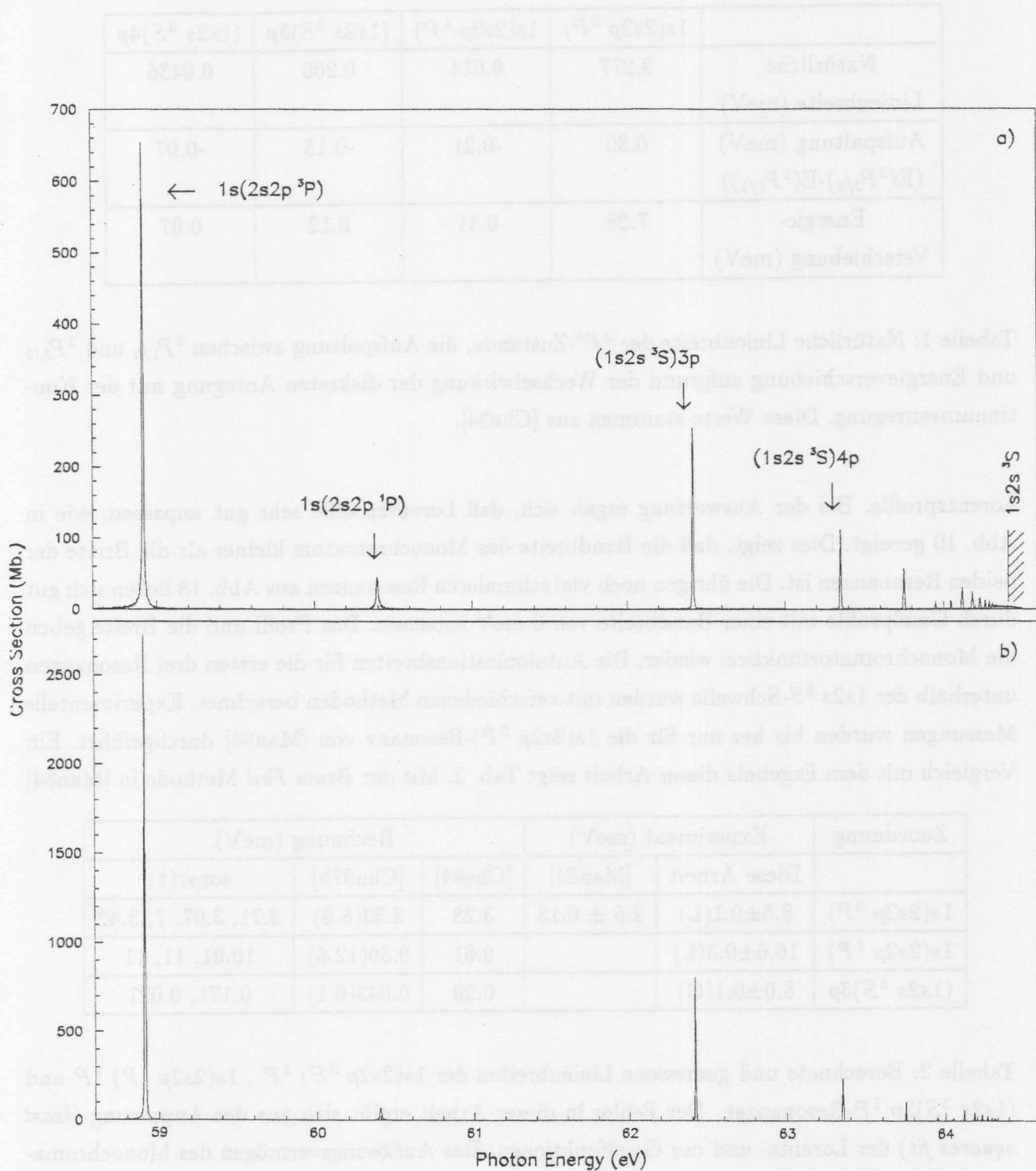


Abbildung 18: Das Spektrum unterhalb der $1s2s\ ^3S$ -Schwelle. a) Vergrößerter Ausschnitt aus dem experimentellen Spektrum aus Abb. 16b. Das Ergebnis aus der Faltung des theoretischen Spektrums von Abb. 17 mit der Gaußfunktion des Monochromators mit der Bandbreite von 6 meV.

	$1s(2s2p\ ^3P)$	$1s(2s2p\ ^1P)$	$(1s2s\ ^3S)3p$	$(1s2s\ ^3S)4p$
Natürliche Linienbreite (meV)	3.277	9.614	0.200	0.0436
Aufspaltung (meV) ($E(^2P_{3/2})-E(^2P_{1/2})$)	0.30	-0.21	-0.15	-0.07
Energie- Verschiebung (meV)	7.28	0.41	0.12	0.07

Tabelle 1: Natürliche Linienbreite der $^2P^o$ -Zustände, die Aufspaltung zwischen $^2P_{1/2}$ und $^2P_{3/2}$ und Energieverschiebung aufgrund der Wechselwirkung der diskreten Anregung mit der Kontinuumsanregung. Diese Werte stammen aus [Che94].

Lorentzprofile. Bei der Auswertung ergab sich, daß Lorentzprofile sehr gut anpassen, wie in Abb. 19 gezeigt. Dies zeigt, daß die Bandbreite des Monochromators kleiner als die Breite der beiden Resonanzen ist. Die übrigen noch viel schmalere Resonanzen aus Abb. 18 ließen sich gut durch Gaußprofile mit einer Bandbreite von 6 meV anpassen. Das Profil und die Breite geben die Monochromatorfunktion wieder. Die Autoionisationsbreiten für die ersten drei Resonanzen unterhalb der $1s2s\ ^3S$ -Schwelle wurden mit verschiedenen Methoden berechnet. Experimentelle Messungen wurden bis her nur für die $1s(2s2p\ ^3P)$ -Resonanz von [Man84] durchgeführt. Ein Vergleich mit dem Ergebnis dieser Arbeit zeigt Tab. 2. Mit der *Beam Foil* Methode in [Man84]

Zuordnung	Experiment (meV)		Rechnung (meV)		
	Diese Arbeit	[Man84]	[Che94]	[Chu97b]	sonst(†)
$1s(2s2p\ ^3P)$	$8.5 \pm 0.1(L)$	2.6 ± 0.13	3.28	3.33(8.0)	3.71, 3.07, 7, 3.42
$1s(2s2p\ ^1P)$	$16.6 \pm 0.3(L)$		9.61	9.56(12.6)	10.01, 11, 11
$(1s2s\ ^3S)3p$	$8.0 \pm 0.1(G)$		0.20	0.043(6.1)	0.171, 0.021

Tabelle 2: Berechnete und gemessene Linienbreiten der $1s(2s2p\ ^3P)\ ^2P$, $1s(2s2p\ ^1P)\ ^2P$ und $(1s2s\ ^3S)3p\ ^2P$ -Resonanzen. Der Fehler in dieser Arbeit ergibt sich aus der Anpassung (*least squares fit*) der Lorentz- und der Gaußfunktionen. Das Auflösungsvermögen des Monochromators geht nicht in den angegebenen Fehler ein, deshalb soll der Fehler größer als der in Tabelle sein. L: aus der Lorentz-anpassung und G: aus der Gauß-anpassung. Die Zahlen in Klammern in der Spalte von [Chu97b] stellen das Ergebnis einer Faltung der Rechnung mit einer Gaußfunktion der Breite 6 meV dar. †: Die Referenzen für die Daten sind in TABLE IV in [Che94] angegeben.

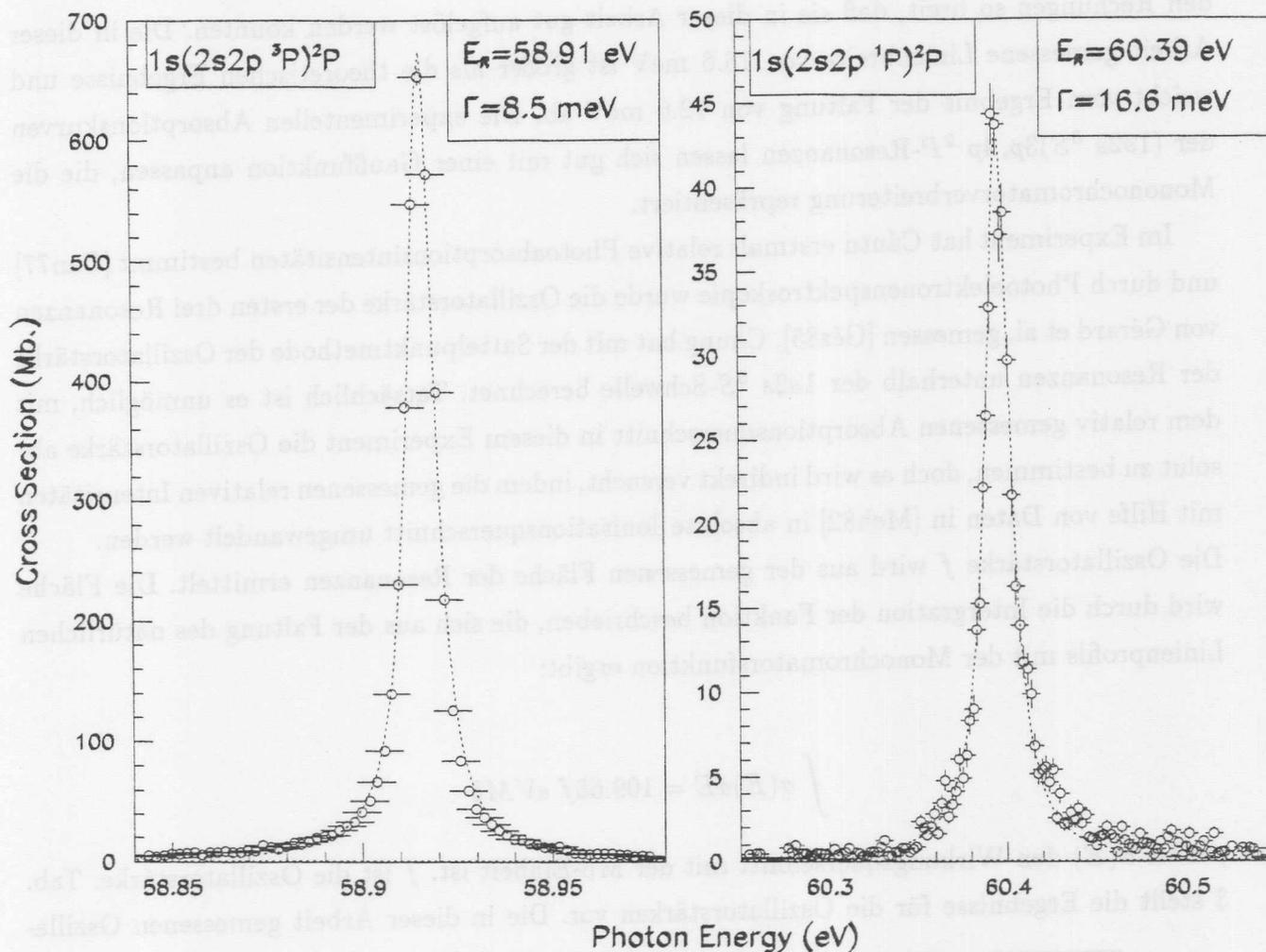


Abbildung 19: a) $1s(2s2p\ ^3P)^2P$ -Resonanz. b) $1s(2s2p\ ^1P)^2P$ -Resonanz. Die gestrichelten Linien geben die Anpassung von Lorentz-Profilen an die Meßdaten wieder.

ist erstmals der $1s2p^2\ ^2P$ -Zustand erzeugt worden, der im $1s^2 + \epsilon p\ ^2P$ -Kontinuum liegt. Obwohl der $1s2p^2\ ^2P$ -Zustand gemäß der LS-Kopplung den gleichen Spin und Bahndrehimpuls wie das $1s^2 + \epsilon p\ ^2P$ -Kontinuum hat, kann dieser Zustand nicht ins Kontinuum autoionisieren und ist metastabil, da die Parität des $1s2p^2\ ^2P$ -Zustandes gerade ist, aber die des Kontinuumszustandes dagegen ungerade. Dieser metastabile Zustand zerfällt durch Fluoreszenzemission in den autoionisierenden $1s(2s2p\ ^3P)^2P$ -Zustand. Die Linienbreite der Photoemissionslinie ist daher durch die Lebensdauer des $1s(2s2p\ ^3P)^2P$ -Zustandes bestimmt. Die in [Man84] erhaltene Linienbreite von 2.6 meV ist kleiner als alle berechneten Ergebnisse, die je nach Rechenmethode stark unterschiedlich, wie in Tab. 2 gezeigt, sind. Die in dieser Arbeit gemessene Linienbreite von 8.5 meV ist größer als die Ergebnisse der Rechnungen. Dies stimmt mit dem Ergebnis von 8.0 meV überein, das sich aus der Faltung der neuesten Rechnung mit einer Gaußfunktion der Bandbreite 6.0 meV ergibt [Chu97b]. Die Linienbreite der $1s(2s2p\ ^1P)^2P$ -Resonanz ist nach

den Rechnungen so breit, daß sie in dieser Arbeit gut aufgelöst werden konnten. Die in dieser Arbeit gemessene Linienbreite von 16.6 meV ist größer als die theoretischen Ergebnisse und weicht vom Ergebnis der Faltung von 12.6 meV ab. Die experimentellen Absorptionskurven der $(1s2s\ ^3S)3p, 4p\ ^2P$ -Resonanzen lassen sich gut mit einer Gaußfunktion anpassen, die die Monochromatorverbreiterung repräsentiert.

Im Experiment hat Cántu erstmals relative Photoabsorptionsintensitäten bestimmt [Can77] und durch Photoelektronenspektroskopie wurde die Oszillatorstärke der ersten drei Resonanzen von Gérard et al. gemessen [Gér85]. Chung hat mit der Sattelpunktmethode der Oszillatorstärke der Resonanzen unterhalb der $1s2s\ ^3S$ -Schwelle berechnet. Tatsächlich ist es unmöglich, mit dem relativ gemessenen Absorptionsquerschnitt in diesem Experiment die Oszillatorstärke absolut zu bestimmen, doch es wird indirekt versucht, indem die gemessenen relativen Intensitäten mit Hilfe von Daten in [Meh82] in absolute Ionisationsquerschnitt umgewandelt werden. Die Oszillatorstärke f wird aus der gemessenen Fläche der Resonanzen ermittelt. Die Fläche wird durch die Intergration der Funktion beschrieben, die sich aus der Faltung des natürlichen Linienprofils mit der Monochromatorsfunktion ergibt:

$$\int \sigma(E)dE = 109.65f\ eVMb$$

,wobei $\sigma(E)$ den Wirkungsquerschnitt mit der Mb-Einheit ist. f ist die Oszillatorstärke. Tab. 3 stellt die Ergebnisse für die Oszillatorstärken vor. Die in dieser Arbeit gemessenen Oszilla-

Zuordnung	Experiment			Rechnung	
	Diese Arbeit	[Pre88]	[Gér85]	[Chu81a]	[Amu76]
$1s(2s2p\ ^3P)$	0.08(†)	0.270	0.240 ± 0.04	0.2797	0.342
$1s(2s2p\ ^1P)$	0.01	0.014	0.007 ± 0.001	0.0075	
$(1s2s\ ^3S)3p$	0.02(†)	0.053	0.053 ± 0.008	0.0466	0.0526

Tabelle 3: Die Oszillatorstärken für die drei ersten Resonanzen unterhalb der $1s2s\ ^3S$ -Schwelle. †: Diese Daten sind aufgrund von Sättigungseffekten mit großen Unsicherheiten behaftet.

torstärken weichen stark von den theoretischen Ergebnissen ab, während die beiden anderen experimentellen Ergebnisse, die mit Hilfe der Photoelektronenspektroskopie für die $1s(2s2p\ ^3P)$ - und $(1s2s\ ^3S)3p$ -Resonanzen gemessen wurden [Gér85 und Pre88], relativ gut mit dem theoretischen Ergebnis übereinstimmen. Die Oszillatorstärken der beiden starken $1s(2s2p\ ^3P)$ - und $(1s2s\ ^3S)3p$ -Resonanzen sind fast drei- bzw. zweimal kleiner als die anderen Ergebnissen, obwohl die Oszillatorstärke für die schwache $1s(2s2p\ ^1P)$ -Resonanz wenig von den anderen Werten

abweicht. Die Ursache der Abweichungen unserer Ergebnisse könnte sich aus Sättigungseffekten ergeben, nämlich daß das gemessene Spektrum der beiden starken $1s(2s2p\ ^3P)$ - und $(1s2s\ ^3S)3p$ -Resonanzen in der Nähe des Maximums stark gesättigt ist.

Zuordnung	Experiment (eV)			Rechnungen (eV)				
	A	B	C	D	E	F	G	H
$1s(2s2p\ ^3P)$	58.910(10)	58.910(11)	58.909	58.931	58.925	58.866	58.914	58.910
$1s(2s2p\ ^3P)$	60.395(10)	60.396(8)	60.392	60.437	60.438	60.393	60.351	60.398
$(1s2s\ ^3S)3p$	62.420(10)	62.419(8)	62.417	62.436	62.437	62.373	62.427	62.417

Tabelle 4: Die gemessenen und berechneten Resonanzenergien für die $1s(2s2p\ ^3P)$, $1s(2s2p\ ^1P)$ und $(1s2s\ ^3S)3p$ -Zustände. A: diese Arbeit, B: [Ede70], C: [Can77], D: [Chu81a], E: [Dav85], F: [Che94], G: [Wak80], H: [Chu97b]. Die Zahlen in Klammern stellen die Unsicherheiten dar.

Zuletzt sollen die Resonanzenergien diskutiert werden. Sie sind in Tab. 4 dargestellt. Zunächst wenden wir uns der von Chung et al. entwickelten Sattelpunktmethode (Spalte D, E, F und H in Tab. 4) zu. Sie wurde seit vielen Jahren ständig verfeinert, und zur Erprobung wurden jeweils die Resonanzenergien der drei besprochenen Resonanzen berechnet. Die berechneten Resonanzenergien der ersten Rechnung in [Chu81a] (Spalte D) sind etwas zu höheren Energien verschoben. In einer kürzlichen Rechnung [Che94] (Spalte E) werden zudem Beiträge aus der Quantenelektrodynamik berücksichtigt: die entsprechenden Werte sind etwas kleiner als die theoretischen Ergebnisse von [Dav85] und die gemessenen Werte dieser Arbeit. Die neuesten berechneten Ergebnisse in [Chu97b] stimmen am besten mit dem gemessenen Ergebnis überein.

Die Datenpunkte in Abb. 20 geben den Bereich von 63.2 eV bis zur $1s2s\ ^3S$ -Schwelle im gemessenen Spektrum aus Abb. 18a wieder. Es zeigt die Resonanzen der $(1s2s\ ^3S)np$ -Serie, die dank des hohen Auflösungsvermögens bis zur Hauptquantenzahl $n = 14$ knapp unterhalb der $1s2s\ ^3S$ -Schwelle aufgelöst werden konnte.

Die gestrichelte Linie in Abb. 20 gibt das von Chung berechnete Spektrum aus Abb. 18b wieder [Chu97b]; es wurde durch Multiplikation mit einem konstanten Faktor an das experimentellen Spektrum angepaßt. Man erkennt die exzellente Übereinstimmung nicht nur der Energiepositionen sondern auch der relativen Intensitäten der Resonanzen. Dies bestätigt, daß die Rechnung von Chung sehr genau ist.

Das Spektrum in Abb. 20 stellt ein gutes Beispiel für einen nahtlosen Übergang der diskreten Zustände einer Rydbergserie in das Kontinuum dar. Man kann weiterhin beobachten, daß die

Theoretische Werte (eV)					Experiment (eV)			Zustände
H	G	F	E	D	C	B	A	
58.910	58.914	58.905	58.910	58.911	58.909	58.910(11)	58.910(10)	$1s2s^2P^o$
60.305	60.301	60.305	60.305	60.305	60.305	60.305(8)	60.305(10)	$1s2s^2P^o$
62.417	62.417	62.417	62.417	62.417	62.417	62.419(5)	62.420(10)	$1s2s^2S$

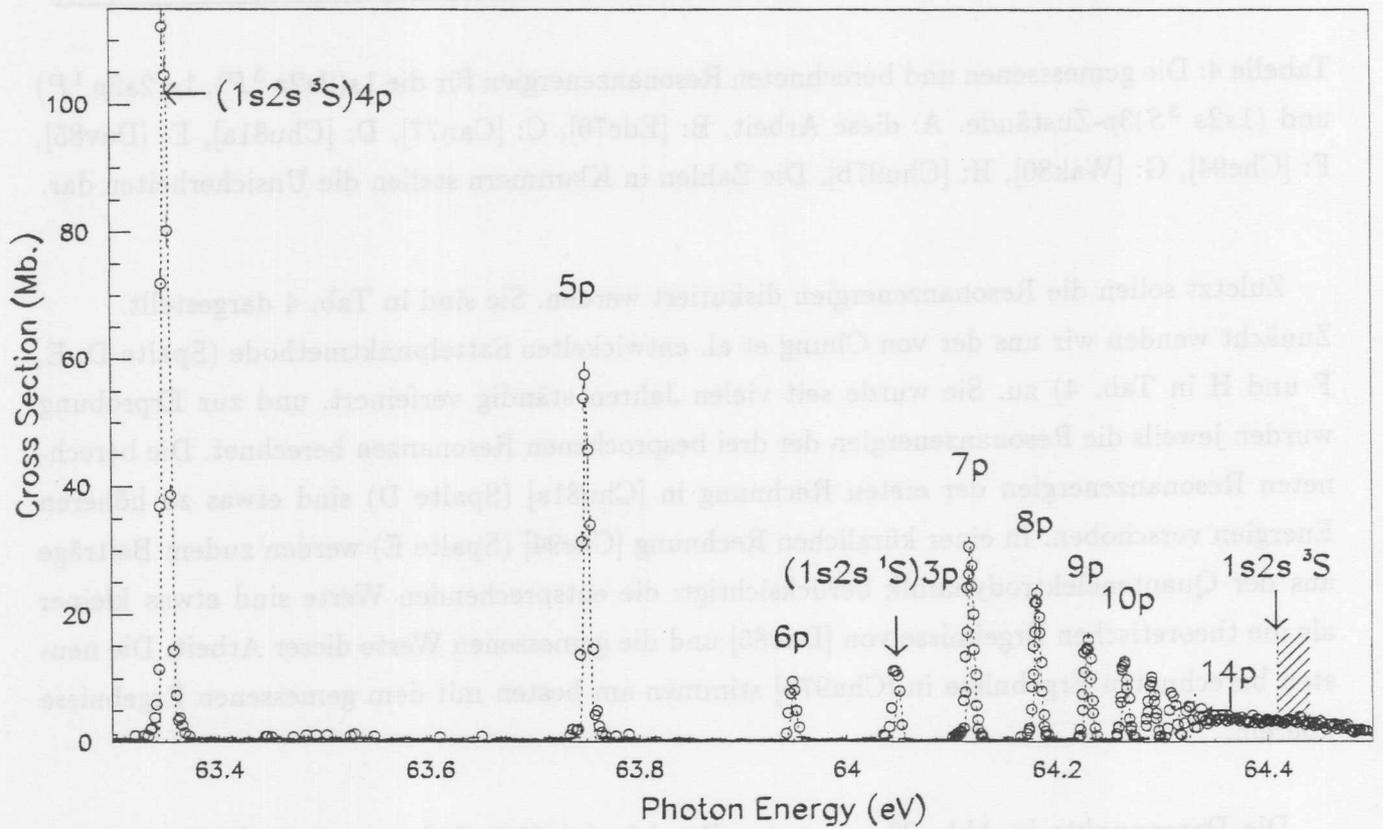


Abbildung 20: Das Spektrum der $2P^o$ -Resonanzen von 63.2 eV bis zur $1s2s^3S$ -Schwelle. Die gestrichelte Linie durch die gemessenen Datenpunkte stellt das berechnete Ergebnis aus Abb. 18b von [Chu97b] dar.

Rydbergserie zwischen der $(1s2s\ ^3S)5p$ - und der $7p$ -Resonanz gestört wird. Die Stärke dieser Resonanzen sind kleiner als die der benachbarten Serienmitglieder, die das normale Verhalten einer Rydbergserie zeigen. Die erste der beiden kleinen Resonanzen bei 63.95 wird dem $6p$ -Zustand der $(1s2s\ ^3S)np$ -Rydbergserie zugeordnet. Die zweite Resonanz bei 64.050 eV kann nicht einer Resonanz der $(1s2s\ ^3S)np\ ^2P$ -Rydbergserie zugeordnet werden. Ederer et al. haben den Vorschlag gemacht, daß diese Resonanz zu einer anderen Rydbergserie zugehört und die $(1s2s\ ^3S)np\ ^2P$ -Rydbergserie stört [Ede70]. Diese Resonanz wurde von [Chu81a] theoretisch untersucht und dem $(1s2s\ ^1S)3p\ ^2P$ -Zustand zugeordnet, der die erste Resonanz der $(1s2s\ ^1S)np\ ^2P$ -Rydbergserie ist.

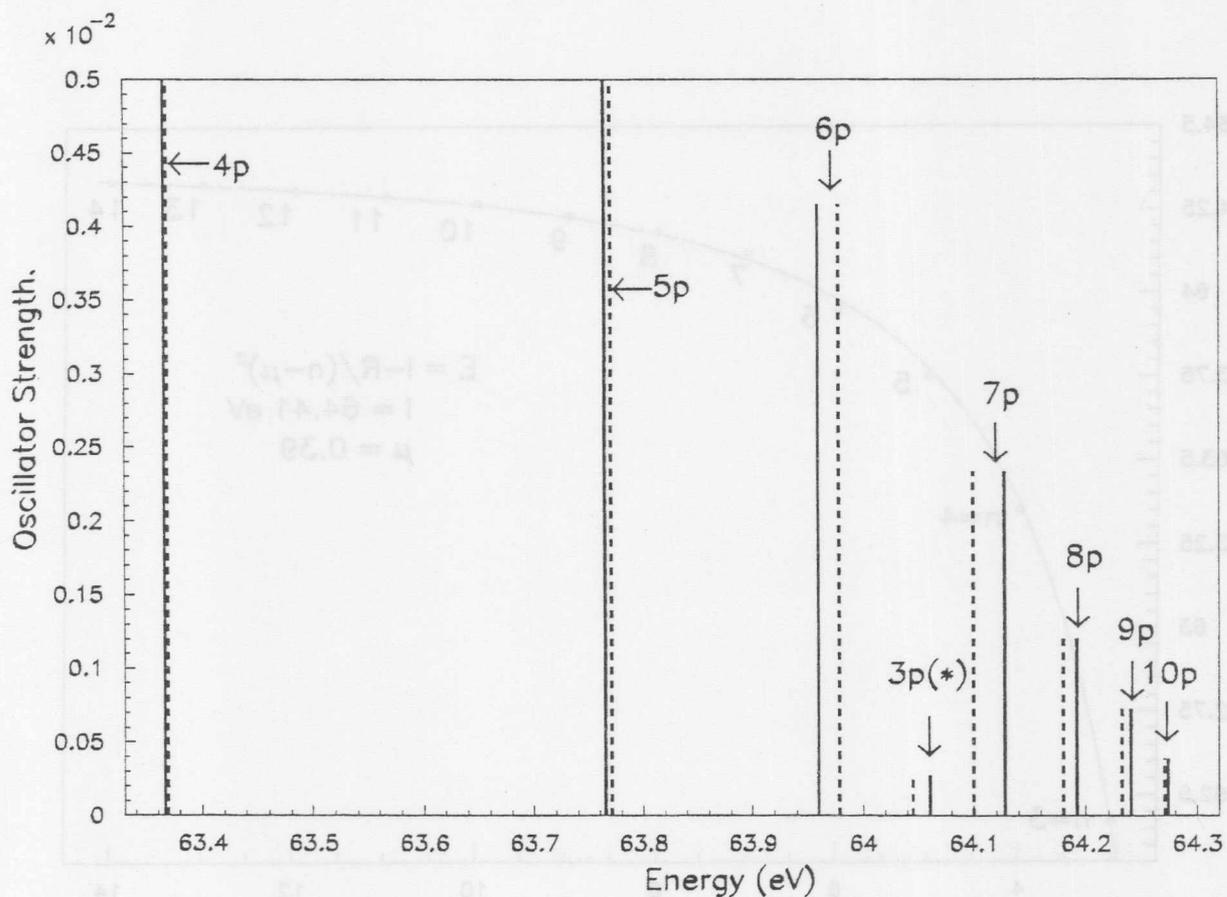


Abbildung 21: Die berechneten Resonanzenergien. Die gestrichelten Linien zeigen die berechneten Resonanzenergien ohne die Störungseffekte, die durchgezogenen Linien unter der Berücksichtigung der Störungseffekte [Chu81a].

Chung hat sich besonders mit der Berechnung der Energien unter Vernachlässigung von Konfigurationswechselwirkungen zwischen dem $(1s2s\ ^1S)3p$ -Störer und den Zuständen der

($1s2s\ ^3S$) np -Rydbergserie beschäftigt [Chu81a]. Die berechneten Resonanzenergien liegen zu hoch für den $6p$ -Zustand und zu niedrig für den $7p$ -Zustand im Vergleich zum experimentellen Ergebnis [Ede70]. Werden Konfigurationswechselwirkungen berücksichtigt, ergibt sich eine wesentlich bessere Übereinstimmung. Abb. 21 stellt die berechneten Resonanzenergien ohne die Berücksichtigung der Konfigurationswechselwirkungen (gestrichelte Linien) und mit der Berücksichtigung der Konfigurationswechselwirkungen (durchgezogene Linien) dar. Die Zustände ($np\ ^2P, n \leq 6$) unterhalb des Störers ($3p^*$) sind nach unten verschoben. Demgegenüber werden die Zustände ($np\ ^2P, n \geq 7$) oberhalb des Störers zu höheren Energien verschoben. Wie man sieht, ist die Verschiebung desto größer, je kleiner der Energieabstand zum Störer ist. Daraus kann man ersehen, daß die Zustände vom Störer abgestoßen werden (Spektrale Repulsion).

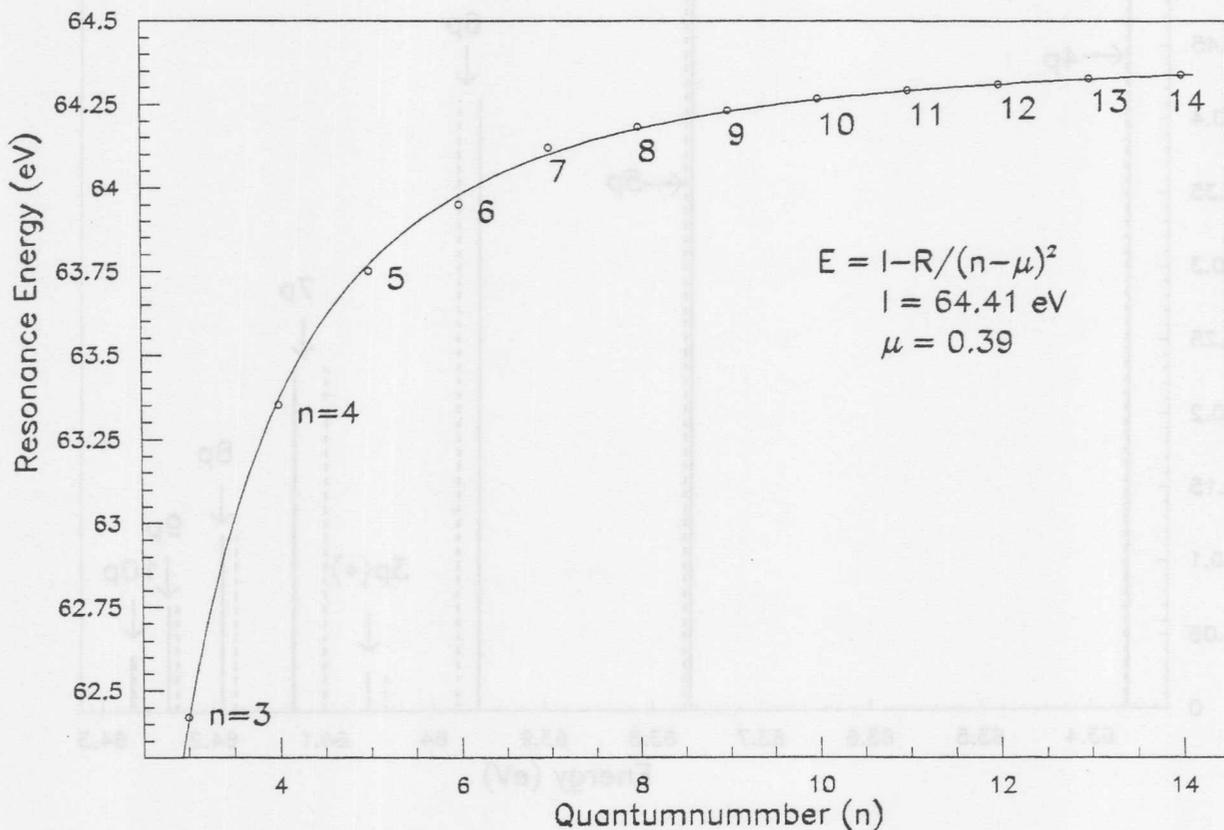


Abbildung 22: Durchgezogene Kurve: Anpassung der Rydberg-Formel an die gemessenen Resonanzenergien (o). Die Fehlerbalken haben maximal die Größe der Punkte.

Im folgenden soll die Störung mit Hilfe der Quantendefekt-Analyse untersucht werden. Abb. 22 stellt die in dieser Arbeit gemessenen Resonanzenergien der ($1s2s\ ^3S$) np -Rydbergserie (Krei-

se) in Abhängigkeit der Hauptquantenzahl n dar. Die durchgezogene Linie gibt die Anpassung der Daten an eine modifizierte Rydberg-Formel wieder, in der die Quantenzahl n durch eine effektive Quantenzahl n^* ersetzt wurde;

$$E_n = I - \frac{R}{(n^*)^2} = I - \frac{R}{(n - \mu)^2} \quad (58)$$

wobei I die Energie der $1s2s\ ^3S$ -Schwelle ist, gegen die die $(1s2s\ ^3S)np$ -Rydbergserie konvergiert. Tab. 5 zeigt die Ergebnisse für die Ionisationsschwelle I und den Quantendefekt μ .

Abb. 22 zeigt im Überblick, daß die Rydberg-Formel gut an die gemessenen Daten angepaßt

	Ionisationsenergie (eV)	Quantendefekt
Diese Arbeit ^E	64.411 ± 0.004	0.39 ± 0.01
[Ede70] ^E	64.408 ± 0.007	0.39 ± 0.01
[Can77] ^E	64.407 ± 0.006	0.39 ± 0.01
[Moo71] ^E	64.412	
[Chu81a] ^T	64.417	0.384
[Lis92] ^T	64.312	

Tabelle 5: Die Ergebnisse aus der Anpassung der Rydberg Formel mit Gleichung (58) an die veröffentlichten Daten. Energie der $1s2s\ ^3S$ -Ionisationsschwelle und Quantendefekt der $(1s2s\ ^3S)np$ -Rydbergserie. E: Experiment. T: Theorie.

werden kann. Die Punkte der Hauptquantenzahlen $n = 6$ und $n = 7$ weichen von der angepaßten Kurve ab. Der Quantendefekt μ_6 für die 6-te Resonanz beträgt 0.50, was deutlich größer ist als 0.39 (der durchschnittliche Quantendefekt μ der Rydbergserie). Für die 7-te Resonanz ist der Quantendefekt μ_7 0.16 jedoch kleiner als μ . Diese Werte weichen von der folgenden allgemeinen Regel für Quantendefekte ab: Quantendefekte hängen nur schwach von der Hauptquantenzahl n ab und konvergiere mit zunehmendem n gegen einen endlichen Grenzwert (siehe S. 12 im Theorie-Kapitel). Die Abweichungen der Quantendefekte der $6p$ - und $7p$ -Resonanzen ergibt sich aus der Störung durch den $(1s2s\ ^1S)3p$ -Zustand

Die Auswirkung des Störers auf die Linienbreite der $(1s2s\ ^3S)np$ -Zustände konnte in unserem Experiment nicht beobachtet werden, da die natürliche Linienbreite wesentlich schmäler als die Bandbreite des Monochromators ist. Die berechneten Ergebnisse für die Linienbreiten in Tab. 6 zeigen allerdings, daß die Auswirkungen des Störers auf die Linienbreite stark sein sollten. Die Linienbreiten nehmen mit zunehmender Hauptquantenzahl zu Beginn der $(1s2s\ ^3S)np$ -Rydbergserie wie erwartet ab. Doch die Linienbreite der $5p$ -Resonanz ist fast gleich groß, die der $6p$ -Resonanz breit dreimal als die Linienbreite der $4p$ -Resonanz. Die Linienbreite der $7p$ -Resonanz ist mehr als doppelt so groß wie die der $6p$ -Resonanz und beträgt zwei Drittel der

Linienbreite des Störers. Mit zunehmender Hauptquantenzahl oberhalb des Störers nehmen die Linienbreiten der Resonanzen allmählich wieder ab. Die Linienbreite der $10p$ -Resonanz ist sogar fast gleich der Linienbreite der $4p$ -Resonanz. Folglich ist ihre Linienbreite desto größer und sie kommt der Linienbreite des Störers desto näher, je näher die Resonanz am Störer liegt.

Die Intensitäten der Resonanzen der $(1s2s\ ^3S)np$ -Rydbergserie nehmen regelmäßig mit zunehmender Hauptquantenzahl im gemessenen Absorptionsspektrum in Abb. 20 mit Ausnahme der $6p$ -Resonanz ab. Aber den berechneten Wirkungsquerschnitten zufolge, die in Abb. 17 und in Tab. 6 dargestellt werden, werden die Stärke der $(1s2s\ ^3S)np$ -Resonanzen im ganzen Bereich gestört. Die berechnete Stärke der ersten $3p$ -Resonanz ist kleiner als die der zweiten $4p$ -Resonanz in Abb. 17. Dies deutet an, daß die kleine $1s(2s2p\ ^1P)$ -Resonanz bei 60.395 eV auch die danebenliegende $3p$ -Resonanz stört. Die Intensität der $6p$ -Resonanz ist sehr schwach. Sie beträgt nur etwa 5 % von der Intensität der $5p$ -Resonanz. Oberhalb des $(1s2s\ ^1S)3p$ -Störers nehmen die Intensitäten der Resonanzen allmählich zu. Ab der $10p$ -Resonanz nehmen die Intensitäten ab und konvergieren endlich gegen das Kontinuum. Wegen des begrenzten Auflösungsvermögens des Monochromators kann man die von dem Störer gestörten Wirkungsquerschnitte der Rydbergserie jedoch nur teilweise im gemessenen Spektrum beobachten. Vor allem spielt die Veränderung der Linienbreite eine wichtige Rolle für die Modulation der Intensitäten im gemessenen Spektrum unterhalb der $1s2s\ ^3S$ -Schwelle.

Nach der Rechnung in [Chu81a] ist die Oszillatorstärke $f=4.2 \cdot 10^{-3}$ der $6p$ -Resonanz stärker als die $f=2.3 \cdot 10^{-3}$ der $7p$ -Resonanz in der ungestörten Rydbergserie. Der Störer verbreitert die $7p$ -Resonanz ($\Gamma = 0.255$ meV) mehr als die $6p$ -Resonanz ($\Gamma = 0.140$ meV) (siehe Tab. 6). Bei der Rechnung ist jedoch das Maximum (975 Mb) der $7p$ -Resonanz größer als das (425 Mb) der $6p$ -Resonanz. Das heißt, daß die Oszillatorstärke der gestörten $7p$ -Resonanz größer als die der gestörten $6p$ -Resonanz ist und somit die Oszillatorstärken der Resonanzen durch eine Störung stark beeinflusst werden.

Die zwei $1s(2s2p\ ^1P)$ - und $(1s2s\ ^1S)3p$ -Störer haben eine große Linienbreite und eine sehr kleine Intensität im Meßergebnis und in der Rechnung. Die beiden Störer verbreitern die nahe liegenden Resonanzen der $(1s2s\ ^3S)np$ -Rydbergserie und erniedrigen die Intensität hin zu ähnlichen Werten wie die des Störers selbst. Daher weiß man, daß die Resonanzen der $(1s2s\ ^3S)np$ -Rydbergserie nicht mehr reine Zustände sondern mit dem Störer gemischte Zustände sind. Die nahe dem Störer liegenden Resonanzen haben allerdings einen höheren Anteil des Zustandes des Störers, damit verhalten sie sich ähnlicher wie der Störer und sie weichen stark von dem normalen Verhalten der Rydbergserie ab.

Es gibt viele verschiedene Meßergebnisse und Rechnungen für die Resonanzen unterhalb der $1s2s\ ^3S$ -Schwelle (siehe Tab. 3. in [Kie96]). Davon zeigt Tab. 6 einige vollständige Meßergebnisse und Rechnungen für die Resonanzen unterhalb der $1s2s\ ^3S$ -Schwelle. Nach Tab. 6 sind die

Zuordnungen	Experiment					Rechnung		
	Diese Arbeit			[Ede70]	[Can77]	[Chu97b]		
	$E_R(\text{eV})$ (± 0.01)	Q_{Rel}	μ (± 0.01)	$E_R(\text{eV})$	$E_R(\text{eV})$ (± 0.03)	$E_R(\text{eV})$	Γ (meV)	σ (Mb)
$1s(2s2p\ ^3P)$	58.910	100.0	0.43	58.910(11)	58.909	58.910	3.33	5164
$1s(2s2p\ ^1P)$	60.395	6.8		60.396(8)	60.392	60.398	9.56	84.3
$(1s2s\ ^3S)3p$	62.420	39.0	0.39	62.419(3)	62.417	62.417	0.203	14630
$(1s2s\ ^3S)4p$	63.354	17.2	0.41	63.356(8)	63.358	63.351	0.0445	23160
$(1s2s\ ^3S)5p$	63.752	8.9	0.45	63.753(3)	63.755	63.750	0.0445	9064
$(1s2s\ ^3S)6p$	63.951	1.5	0.56	63.951(3)	63.956	63.950	0.140	425
$(1s2s\ ^1S)3p$	64.050	1.7		64.046(8)	64.052	64.050	0.391	173
$(1s2s\ ^3S)7p$	64.120	4.7	0.16	64.121(3)	64.118	64.119	0.255	975
$(1s2s\ ^3S)8p$	64.183	3.6	0.28	64.184(3)	64.181	64.182	0.107	1600
$(1s2s\ ^3S)9p$	64.231	2.5	0.31	64.232(6)	64.228	64.230	0.061	1956
$(1s2s\ ^3S)10p$	64.266	1.9	0.32	64.260(6)	64.258	64.265	0.041	2131
$(1s2s\ ^3S)11p$	64.292	1.6	0.31			64.293	0.033	1981
$(1s2s\ ^3S)12p$	64.311	1.2	0.34			64.313	0.027	1946
$(1s2s\ ^3S)13p$	64.326	0.9	0.36			64.329	0.020	1847
$(1s2s\ ^3S)14p$	64.339	0.8	0.36					

Tabelle 6: Die Werte der Resonanzen unterhalb der $1s2s\ ^3S$ -Schwelle. Resonanzenergie (E_R), relative Stärke im Maximum der Linie (Q_{Rel}), Wirkungsquerschnitt im Maximum der Linie (σ), Linienbreite (Γ) und Quantendefekte (μ).

gemessenen Resonanzenergien dieser Arbeit sehr gut mit den gemessenen von [Ede70] und den berechneten von [Chu97b] in Übereinstimmung.

4.1.3 Zwischen $1s2s\ ^3S$ - und $1s2p\ ^1P$ -Schwelle.

Abb. 23 zeigt gemessene und berechnete Spektren zwischen der $1s2s\ ^3S$ - und der $1s2p\ ^1P$ -Schwelle. Abb. 23a gibt den absolute Absorptionswirkungsquerschnitt, der von Mehlman et al. gemessen wurde [Meh78]. Abb. 23c zeigt die gemessene Li^+ -Photoionenausbeute dieser Arbeit. Abb. 23d und Abb. 23e stellen Photoionisationsquerschnitte dar, die mit Hilfe der R-Matrix und der Sattelpunktmethode berechnet wurden [Vok95 und Chu97a]. Die Spektren in Abb. 23 zeigen eine komplizierte Form. Seit der absolut gemessene Absorptionsquerschnitt erstmals von Mehlman et al. publiziert wurde [Meh78], blieb dieses komplizierte Spektrum rätselhaft. Das Meßergebnis dieser Arbeit in Abb. 23c stimmt exzellent mit dem berechneten Spektrum von Abb. 23e in Bezug auf Form und Energieposition überein, wenn die begrenzte Auflösung im Experiment berücksichtigt wird. Das berechnete Spektrum in Abb. 23d von Voky ist in Bezug auf die Form in guter Übereinstimmung mit den Ergebnissen von Abb. 23c und e. Aber die Energieposition des Spektrums von Voky ist im Vergleich zum gemessenen Spektrum um etwa 0.2 eV verschoben.

Weil die resonanten Strukturen sehr dicht liegen, schmal sind und eine ungewöhnliche Form haben, sind für die genaue Messung des Spektrums die hohe Auflösung des Monochromators und ein empfindliches Detektorsystem erforderlich. So wurden für diese Arbeit die Messungen des Spektrums in der Nähe der $1s2l$ -Schwellen unter Variation der verschiedenen experimentellen Faktoren (Auflösung, Photonenfluß und Atomdichte) durchgeführt.

Das in Abb. 23a wiedergegebene Spektrum weicht teilweise dramatisch von den Spektren in Abb. 23c, 23d, 23e ab. Man kann besonders die starke Abweichung des Intensitätsverhältnisses der drei deutlichen Linien beobachten, die in Abb. 23a als A, B und C bezeichnet werden. Das Intensitätsverhältnis dieser drei Linien ist in den Abb. 23a und 23c umgekehrt.

Da die Linie C in Abb. 23a sehr schmal und scharf ist und die drei Linien A, B und C nahe beieinander liegen, könnten die Meßergebnisse abhängig vom Auflösungsvermögen verschieden sein. Abb. 23b zeigt das Meßergebnis dieser Arbeit gefaltet mit einer Auflösung von $\frac{E}{\Delta E} = 1500$, die aus dem Experiment von Mehlman et al. als Auflösungsvermögen des Monochromators abgeschätzt wurde. Obwohl die Intensität der scharfen Linie C stärker verkleinert wird durch die Faltung als die Intensität der Linien A und B, ist die Linie C in Abb. 23b immer noch die größte von den drei Linien wie in Abb. 23c. Im Spektrum der Photoelektronenspektroskopie mit einer schlechteren Auflösung von [Pre88], ist die Linie C auch die größte von den drei Linien anders als in Abb. 23a. Unterschiedliche Auflösungsvermögen sind nicht die Ursache für die Diskrepanzen zwischen das Spektrum dieser Arbeit und von Mehlman et al.

Im Energiebereich zwischen der $1s2s\ ^3S$ -Schwelle und der $1s2p\ ^1P$ -Schwelle gibt es fünf $^2P^o$ -Rydbergserien, $(1s2s\ ^1S)np$, $(1s2p\ ^3P)ns$, $(1s2p\ ^3P)nd$, $(1s2p\ ^1P)ns$ und $(1s2p\ ^1P)nd$, die gegen ihre Ionisationsschwellen konvergieren, die sich im Energiebereich von 66.31 eV bis 67.6

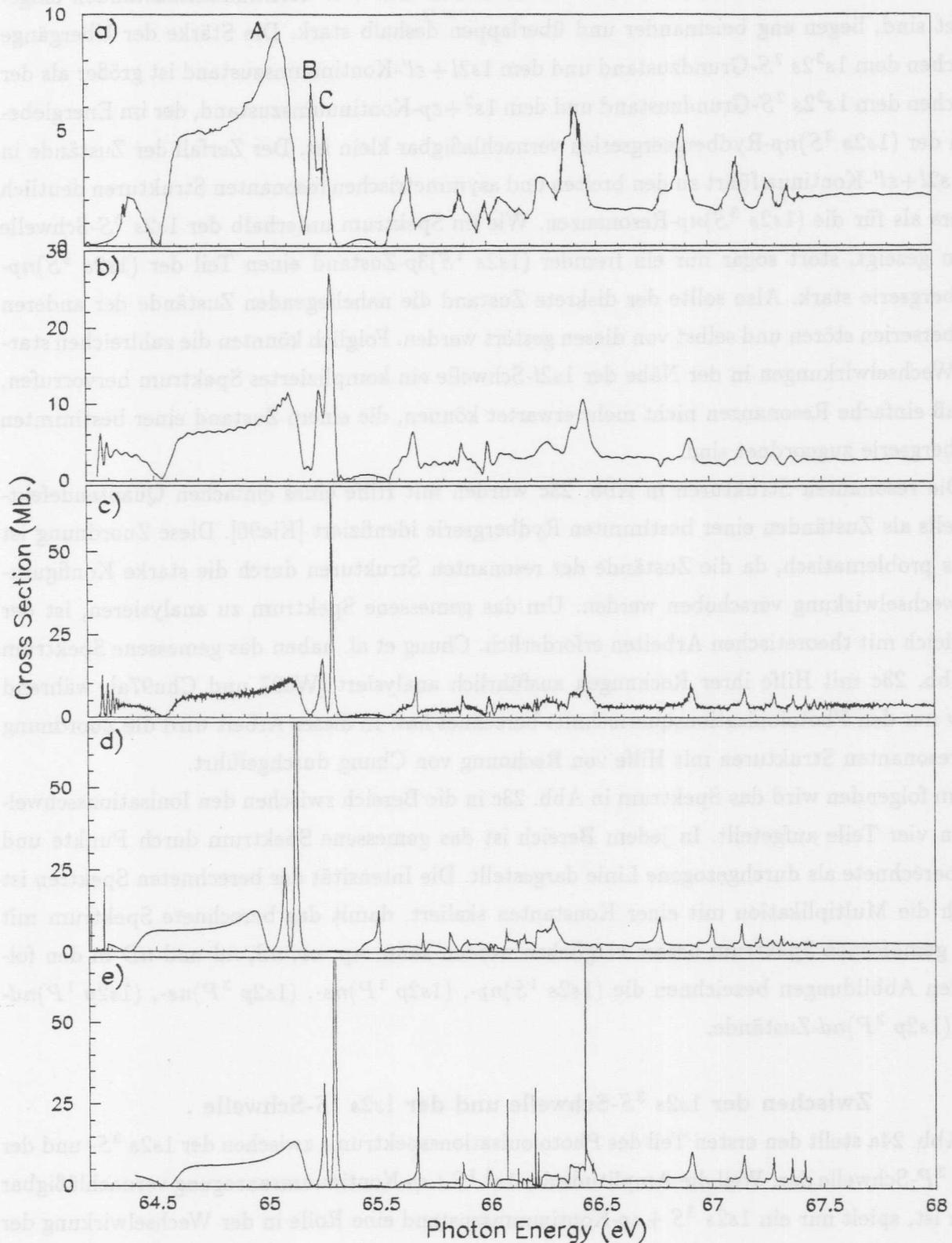


Abbildung 23: Das Photonabsorptionsspektrum der ${}^2P^\circ$ -Doppelanregungen zwischen der $1s2s\ {}^3S$ - und der $1s2p\ {}^1P$ -Schwelle. a) Das absolut gemessene Spektrum [Meh78], b) Das Ergebnis aus der Faltung des gemessenen Spektrums von Abb. 23c mit der Auflösung 1500. c) Li^+ -Photoionenausbeute dieser Arbeit. d) Der berechnete Photoionisationsquerschnitt [Vok95]. e) Der berechnete Photoionisationsquerschnitt [Chu97a].

eV befinden. Die Zustände, die in den verschiedenen $1s2l + \epsilon l'$ -Kontinuumszuständen eingebettet sind, liegen eng beieinander und überlappen deshalb stark. Die Stärke der Übergänge zwischen dem $1s^2 2s^2 S$ -Grundzustand und dem $1s2l + \epsilon l'$ -Kontinuumszustand ist größer als der zwischen dem $1s^2 2s^2 S$ -Grundzustand und dem $1s^2 + \epsilon p$ -Kontinuumszustand, der im Energiebereich der $(1s2s^3 S)np$ -Rydbergserien vernachlässigbar klein ist. Der Zerfall der Zustände in die $1s2l + \epsilon l'$ -Kontinua führt zu den breiten und asymmetrischen resonanten Strukturen deutlich anders als für die $(1s2s^3 S)np$ -Resonanzen. Wie im Spektrum unterhalb der $1s2s^3 S$ -Schwelle schon gezeigt, stört sogar nur ein fremder $(1s2s^1 S)3p$ -Zustand einen Teil der $(1s2s^3 S)np$ -Rydbergserie stark. Also sollte der diskrete Zustand die naheliegenden Zustände der anderen Rydbergserien stören und selbst von diesen gestört werden. Folglich könnten die zahlreichen starken Wechselwirkungen in der Nähe der $1s2l$ -Schwelle ein kompliziertes Spektrum hervorrufen, so daß einfache Resonanzen nicht mehr erwartet können, die einem Zustand einer bestimmten Rydbergserie zugeordnet sind.

Die resonanten Strukturen in Abb. 23c wurden mit Hilfe eines einfachen Quantendefektmodells als Zuständen einer bestimmten Rydbergserie identifiziert [Kie96]. Diese Zuordnung ist etwas problematisch, da die Zustände der resonanten Strukturen durch die starke Konfigurationswechselwirkung verschoben werden. Um das gemessene Spektrum zu analysieren, ist der Vergleich mit theoretischen Arbeiten erforderlich. Chung et al. haben das gemessene Spektrum in Abb. 23c mit Hilfe ihrer Rechnungen ausführlich analysiert [Wu97 und Chu97a], während Voky nur den Photoionisationsquerschnitt berechnet hat. In dieser Arbeit wird die Zuordnung der resonanten Strukturen mit Hilfe von Rechnung von Chung durchgeführt.

Im folgenden wird das Spektrum in Abb. 23c in die Bereich zwischen den Ionisationsschwellen in vier Teile aufgeteilt. In jedem Bereich ist das gemessene Spektrum durch Punkte und das berechnete als durchgezogene Linie dargestellt. Die Intensität der berechneten Spektren ist durch die Multiplikation mit einer Konstanten skaliert, damit das berechnete Spektrum mit dem gemessenen Spektrum besser verglichen werden kann. np , ns , nS , nd und nD in den folgenden Abbildungen bezeichnen die $(1s2s^1 S)np$ -, $(1s2p^1 P)ns$ -, $(1s2p^3 P)ns$ -, $(1s2p^1 P)nd$ - und $(1s2p^3 P)nd$ -Zustände.

Zwischen der $1s2s^3 S$ -Schwelle und der $1s2s^1 S$ -Schwelle .

Abb. 24a stellt den ersten Teil des Photoionisationsspektrums zwischen der $1s2s^3 S$ - und der $1s2s^3 P$ -Schwelle dar. Weil die Amplitude der $1s^2 1S + \epsilon p$ -Kontinuumsanregung vernachlässigbar klein ist, spielt nur ein $1s2s^3 S + \epsilon p$ -Kontinuumszustand eine Rolle in der Wechselwirkung der Kontinuumsanregung mit den diskreten Anregungen. Trotzdem sind die Intensitäten und die Formen der resonanten Strukturen in Abb. 24a verschieden. Dies deutet an, daß die meisten resonanten Strukturen zu verschiedener Rydbergserien gehören.

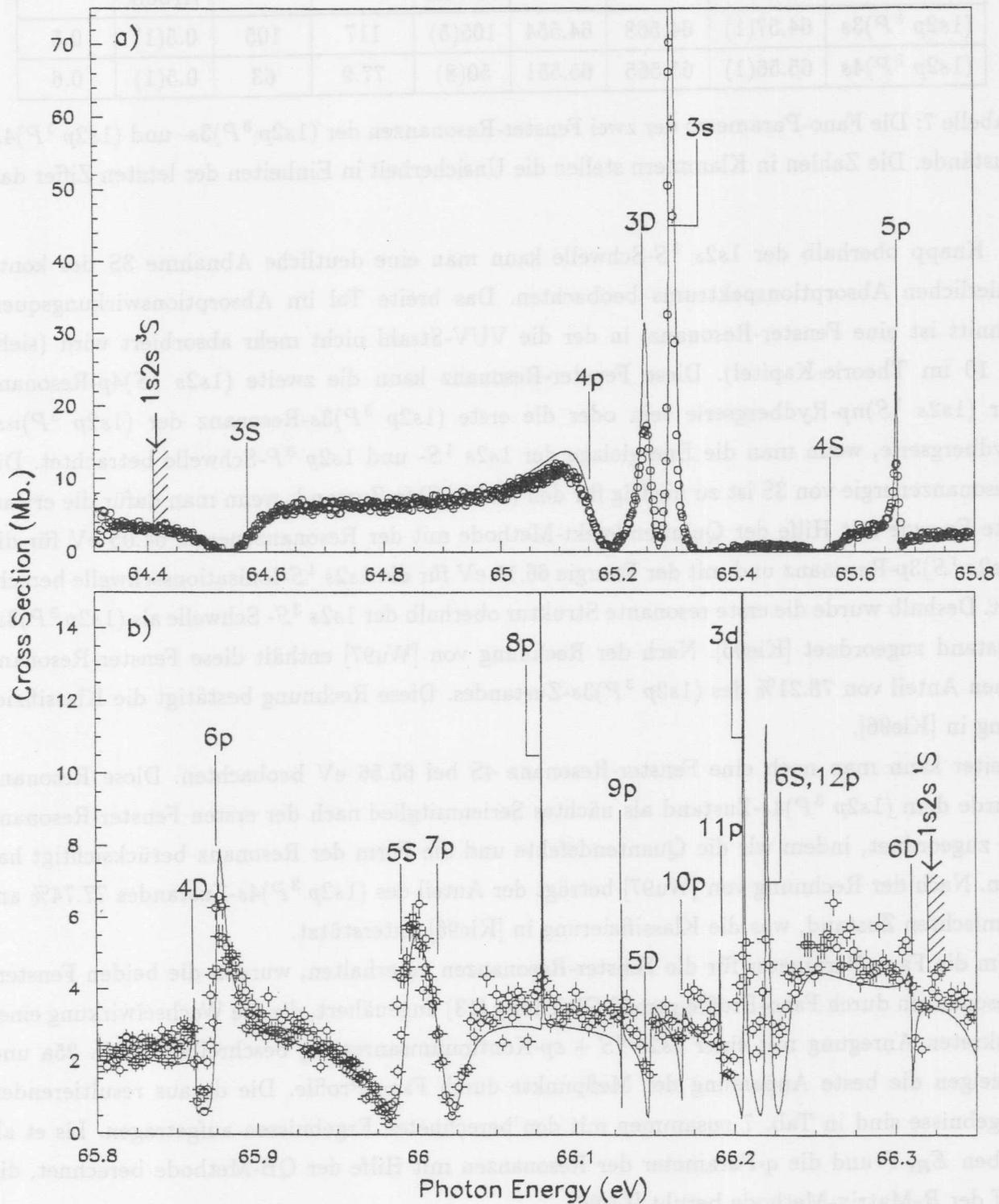


Abbildung 24: Das Photoionenausbeutespektrum des $2P^{\circ}$ -Zustandes zwischen der $1s2s\ ^3S$ - und $1s2s\ ^1S$ -Schwelle. $\circ \circ \circ$: die gemessenen Datenpunkte dieser Arbeit, —: das berechnete Spektrum von [Chu97a].

Zuordnung	$E_R(\text{eV})$			$\Gamma(\text{meV})$			q	
	Diese Arbeit	[Wu97]	[Lis96]	Diese Arbeit	[Wu97]	[Lis96]	Diese Arbeit	[Lis96]
$(1s2p\ ^3P)3s$	64.57(1)	64.568	64.554	105(5)	117	105	0.5(1)	0.5
$(1s2p\ ^3P)4s$	65.56(1)	65.565	65.551	50(8)	77.9	63	0.5(1)	0.6

Tabelle 7: Die Fano-Parameter der zwei Fenster-Resonanzen der $(1s2p\ ^3P)3s$ - und $(1s2p\ ^3P)4s$ -Zustände. Die Zahlen in Klammern stellen die Unsicherheit in Einheiten der letzten Ziffer dar.

Knapp oberhalb der $1s2s\ ^3S$ -Schwelle kann man eine deutliche Abnahme 3S des kontinuierlichen Absorptionsspektrums beobachten. Das breite Tal im Absorptionsspektrum ist eine Fenster-Resonanz, in der die VUV-Strahlung nicht mehr absorbiert wird (siehe S. 10 im Theorie-Kapitel). Diese Fenster-Resonanz kann die zweite $(1s2s\ ^1S)4p$ -Resonanz der $(1s2s\ ^1S)np$ -Rydbergserie sein oder die erste $(1s2p\ ^3P)3s$ -Resonanz der $(1s2p\ ^3P)ns$ -Rydbergserie, wenn man die Energielage der $1s2s\ ^1S$ - und $1s2p\ ^3P$ -Schwelle betrachtet. Die Resonanzenergie von 3S ist zu niedrig für den $(1s2s\ ^1S)4p$ -Zustand, wenn man dafür die erwartete Energie mit Hilfe der Quantendefekt-Methode mit der Resonanzenergie 64.05 eV für die $(1s2s\ ^1S)3p$ -Resonanz und mit der Energie 66.15 eV für die $1s2s\ ^1S$ -Ionisationsschwelle berechnet. Deshalb wurde die erste resonante Struktur oberhalb der $1s2s\ ^3S$ -Schwelle als $(1s2p\ ^3P)3s$ -Zustand zugeordnet [Kie96]. Nach der Rechnung von [Wu97] enthält diese Fenster-Resonanz einen Anteil von 78.21% des $(1s2p\ ^3P)3s$ -Zustandes. Diese Rechnung bestätigt die Klassifizierung in [Kie96].

Weiter kann man noch eine Fenster-Resonanz 4S bei 65.56 eV beobachten. Diese Resonanz wurde dem $(1s2p\ ^3P)4s$ -Zustand als nächstes Serienmitglied nach der ersten Fenster-Resonanz 3S zugeordnet, indem wir die Quantendefekte und die Form der Resonanz berücksichtigt haben. Nach der Rechnung von [Wu97] beträgt der Anteil des $(1s2p\ ^3P)4s$ -Zustandes 77.74% am gemischten Zustand, was die Klassifizierung in [Kie96] unterstützt.

Um die Fano-Parameter für die Fenster-Resonanzen zu erhalten, wurden die beiden Fenster-Resonanzen durch Fano-Profile gemäß Gleichung (13) angenähert, die die Wechselwirkung einer diskreten Anregung mit einer $1s2s\ ^3S + \epsilon p$ -Kontinuumsanregung beschreiben. Abb. 25a und b zeigen die beste Anpassung der Meßpunkte durch Fano-Profile. Die daraus resultierenden Ergebnisse sind in Tab. 7 zusammen mit den berechneten Ergebnissen aufgetragen. Lis et al. haben E_R , Γ und die q-Parameter der Resonanzen mit Hilfe der QB-Methode berechnet, die auf der R-Matrix-Methode beruht [Lis96].

Das Meßergebnis und die Rechnungen für den $(1s2p\ ^3P)3s$ -Zustand zeigen eine gute Übereinstimmung. Der kleine Wert des Asymmetrieparameters (q) 0.5 und die große Linienbreite 105

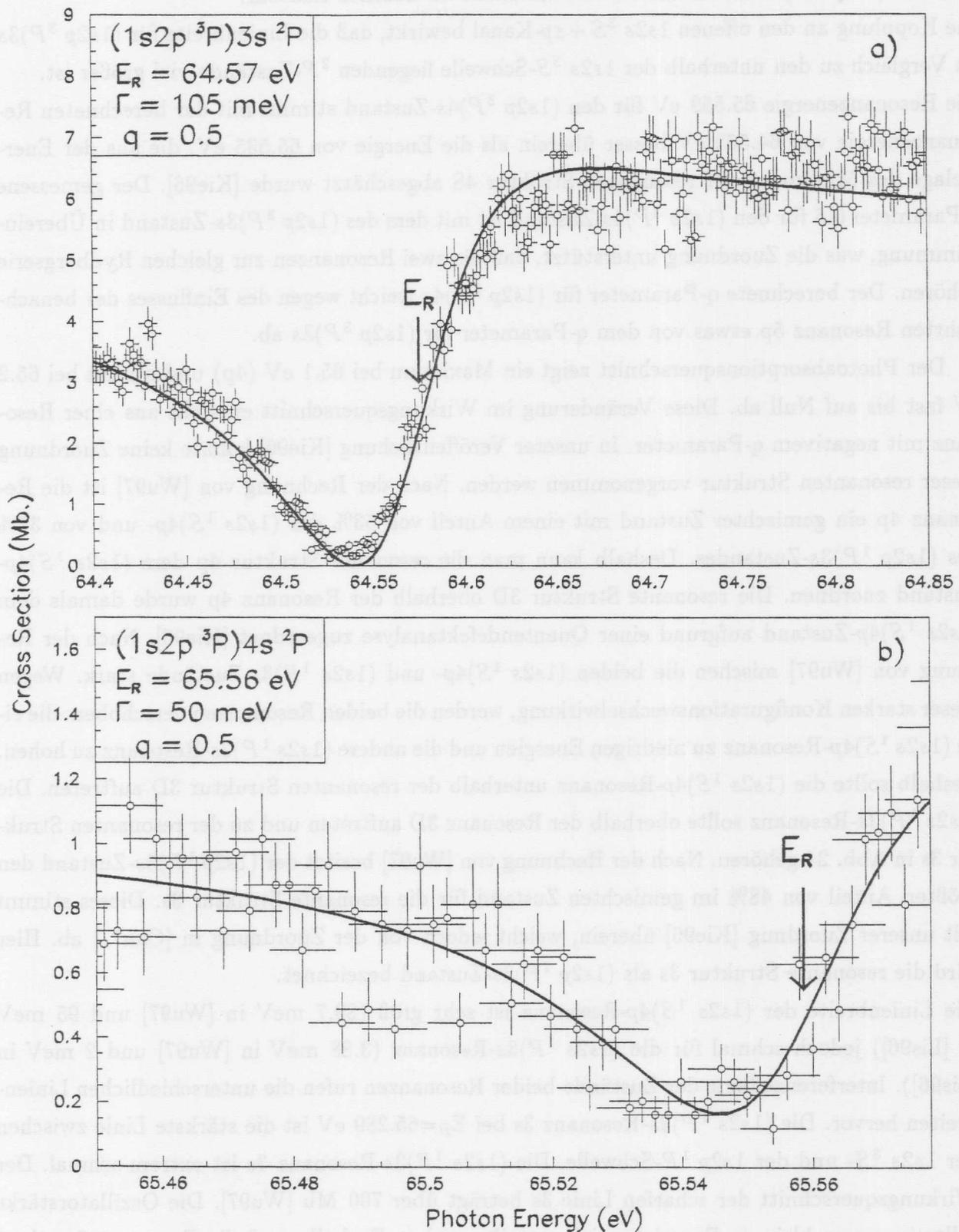


Abbildung 25: Die Fenster-Resonanz. a) $(1s2p\ ^3P)3s$. b) $(1s2p\ ^3P)4s$. Die durchgezogene Linie gibt die Anpassung des Fano-Profiles gemäß Gleichung (13) an die Datenpunkte($\circ\circ\circ$) wieder.

meV für $(1s2p\ ^3P)3s$ macht die Fenster-Resonanz 3S deutlich sichtbar.

Die Kopplung an den offenen $1s2s\ ^3S + \varepsilon p$ -Kanal bewirkt, daß die Linienbreite für $(1s2p\ ^3P)3s$ im Vergleich zu den unterhalb der $1s2s\ ^3S$ -Schwelle liegenden 2P -Zustände viel größer ist.

Die Resonanzenergie 65.559 eV für den $(1s2p\ ^3P)4s$ -Zustand stimmt mit der berechneten Resonanzenergie von 64.565 eV besser überein als die Energie von 65.535 eV, die aus der Energielage des Minimums der resonanten Struktur 4S abgeschätzt wurde [Kie96]. Der gemessene q-Parameter 0.5 für den $(1s2p\ ^3P)4s$ -Zustand ist mit dem des $(1s2p\ ^3P)3s$ -Zustand in Übereinstimmung, was die Zuordnung unterstützt, daß die zwei Resonanzen zur gleichen Rydbergserie gehören. Der berechnete q-Parameter für $(1s2p\ ^3P)4s$ weicht wegen des Einflusses der benachbarten Resonanz 5p etwas von dem q-Parameter für $(1s2p\ ^3P)3s$ ab.

Der Photoabsorptionsquerschnitt zeigt ein Maximum bei 65.1 eV (4p) und nimmt bei 65.2 eV fast bis auf Null ab. Diese Veränderung im Wirkungsquerschnitt entsteht aus einer Resonanz mit negativem q-Parameter. In unserer Veröffentlichung [Kie96] konnte keine Zuordnung dieser resonanten Struktur vorgenommen werden. Nach der Rechnung von [Wu97] ist die Resonanz 4p ein gemischter Zustand mit einem Anteil von 53% des $(1s2s\ ^1S)4p$ - und von 37% des $(1s2p\ ^1P)3s$ -Zustandes. Deshalb kann man die resonante Struktur 4p dem $(1s2s\ ^1S)4p$ -Zustand zuordnen. Die resonante Struktur 3D oberhalb der Resonanz 4p wurde damals dem $(1s2s\ ^1S)4p$ -Zustand aufgrund einer Quantendefektanalyse zugeordnet [Kie96]. Nach der Rechnung von [Wu97] mischen die beiden $(1s2s\ ^1S)4p$ - und $(1s2s\ ^1P)3s$ -Zustände stark. Wegen dieser starken Konfigurationswechselwirkung, werden die beiden Resonanzen verschoben: die eine $(1s2s\ ^1S)4p$ -Resonanz zu niedrigen Energien und die andere $(1s2s\ ^1P)3s$ -Resonanz zu hohen. Deshalb sollte die $(1s2s\ ^1S)4p$ -Resonanz unterhalb der resonanten Struktur 3D auftreten. Die $(1s2s\ ^1P)3s$ -Resonanz sollte oberhalb der Resonanz 3D auftreten und zu der resonanten Struktur 3s in Abb. 24 gehören. Nach der Rechnung von [Wu97] besitzt der $(1s2p\ ^1P)3s$ -Zustand den größten Anteil von 48% im gemischten Zustand für die resonante Struktur 3s. Dieses stimmt mit unserer Zuordnung [Kie96] überein, weicht jedoch von der Zuordnung in [Can77] ab. Hier wird die resonante Struktur 3s als $(1s2p\ ^1P)3s$ -Zustand bezeichnet.

Die Linienbreite der $(1s2s\ ^1S)4p$ -Resonanz ist sehr groß (89.7 meV in [Wu97] und 95 meV in [Lis96]) jedoch schmal für die $(1s2s\ ^1P)3s$ -Resonanz (3.88 meV in [Wu97] und 2 meV in [Lis96]). Interferenzeffekte der Zustände beider Resonanzen rufen die unterschiedlichen Linienbreiten hervor. Die $(1s2s\ ^1P)3s$ -Resonanz 3s bei $E_R=65.289$ eV ist die stärkste Linie zwischen der $1s2s\ ^3S$ - und der $1s2p\ ^1P$ -Schwelle. Die $(1s2s\ ^1P)3s$ -Resonanz 3s ist extrem schmal. Der Wirkungsquerschnitt der scharfen Linie 3s beträgt über 700 Mb [Wu97]. Die Oszillatorstärke sollte in einem kleinem Energiebereich verteilt werden. Deshalb muß die Resonanz 3s scharf sein.

Zwischen den resonanten Strukturen 4p und 3s befindet sich die Resonanz 3D bei 65.244

eV. Dies stimmt gut mit dem anderem experimentellen Ergebnis von 65.250 eV in [Ede70] und dem theoretischen Ergebnis von 65.255 eV in [Wu97] überein. Die $(1s2s^1S)4p$ -Zuordnung für die resonante Struktur 3D in [Kie96] weicht von der $(1s2p^3P)3d$ -Zuordnung in [Wu97] ab. Nach der Rechnung in [Wu97] besteht die resonante Struktur 3D zu einem Anteil von 71.62% aus dem $(1s2p^3P)3d$ -Zustand und zu einem Anteil von 21.21% aus dem $(1s2s^1S)4p$ -Zustand. In dieser Arbeit wird die resonante Struktur 3D dem $(1s2p^3P)3d$ -Zustand zugeordnet wie in [Wu97]. Die gemessene Linienbreite von 20 meV in dieser Arbeit ist etwas breiter als die 15.7 meV von [Wu97] und weicht noch stärker von den 9 meV aus [Lis96] ab.

Die resonante Struktur 5p hat eine asymmetrische Linienform mit einem negativen q-Parameter wie die $(1s2s^1S)4p$ -Resonanz. Deshalb und aufgrund einer Quantendefektanalyse wird die resonante Struktur 5p dem $(1s2s^1S)5p$ -Zustand als nächstes Serienmitglied der $(1s2s^1S)4p$ -Resonanz zugeordnet. Die Resonanzenergie von 65.67 eV für den $(1s2s^1S)5p$ -Zustand stimmt mit der von 65.664 eV aus [Wu97] überein.

Die resonante Struktur 6p in Abb. 24b bei 65.87 eV wurde dem $(1s2s^1S)6p$ -Zustand zugeordnet [Kie96], was in Übereinstimmung mit dem theoretischen Ergebnis in [Wu97] ist. An der linken Seite der $(1s2s^1S)6p$ -Resonanz erscheint ein kleines Tal. Wu et al. haben die linke Flanke 4D des Tals bei 65.858 eV dem $(1s2p^3P)4d$ -Zustand zugeordnet [Wu97]. Doch da diese Resonanz im gemessenen Spektrum sehr schwach ist, und nah der $(1s2s^1S)6p$ -Resonanz liegt, wurde keine Zuordnung für diese Struktur in [Kie96] vorgenommen. Auch in dieser Arbeit wird nach dem Vorschlag in [Wu97] die kleine Struktur 4D bei 65.86 eV dem $(1s2p^3P)4d$ -Zustand zugeordnet.

Die symmetrische und deutliche resonante Struktur bei 66 eV wurde dem $(1s2s^1S)7p$ -Zustand in [Kie96] zugeordnet. Doch wie schon in [Wu97] erwähnt, ist die Linienform anders als das asymmetrische Fanoprofil der $(1s2s^1S)5p$ - und $(1s2s^1S)6p$ -Resonanzen. Außerdem ist die Linienbreite größer als die Linienbreite der $(1s2s^1S)5p$ - und der $(1s2s^1S)6p$ -Resonanz. Daß die resonante Struktur dem $(1s2s^1S)7p$ -Zustand allein zugehört, ist zweifelhaft. Nach der Rechnung in [Wu97] wird die Struktur bei 66 eV durch das Auftreten von zwei Resonanzen gebildet: als die lineare Kombination der $(1s2s^1S)7p$ - und $(1s2p^3P)5s$ -Zustände, ähnlich wie die zwei Resonanzen 4p, 3s in Abb. 24a. Doch da beide Konfigurationen zu fast gleichen Teilen zu den gemischten Zuständen der beiden Resonanzen beitragen, können die beiden Resonanzen keinem bestimmten Zustand zugeordnet werden. Deshalb haben Wu et al. die linke Seite 5S von der Struktur als $(1s2s^1S)7p - (1s2p^3P)5s$ und die rechte Seite 7p als $(1s2s^1S)7p + (1s2p^3P)5s$ wie bei der $2snp \pm ns2p$ -Zuordnung für die Doppelanregung des Heliums zugeordnet. Die gemessene Linie bei 66.0 eV könnte als die Summe eines Fanoprofil mit positivem q-Parameter auf der linken Seite 5S und einem anderen Fanoprofil mit negativem q auf der rechten Seite 7p näherungsweise angesehen werden. Weil die $(1s2p^3P)3s, 4s$ -Resonanzen 3S und 4S Fenster-

Resonanzen mit positivem q -Parameter sind und die $(1s2s\ ^1S)4p, 5p$ -Resonanzen $4p$ und $5p$ asymmetrische Fanprofile mit negativem q -Parameter haben, wird in dieser Arbeit konsequenterweise die linke Seite $5S$ bei 65.99 eV dem $(1s2p\ ^3P)5s$ -Zustand und die rechte Seite $7p$ bei 66.012 eV dem $(1s2p\ ^1S)7p$ -Zustand zugeordnet.

Bei der berechneten Photoionisation erscheint bei 66.074 eV eine scharfe Linie, die dem $(1s2s\ ^1S)8p$ -Zustand zugeordnet wurde [Wu97]. Im Vergleich zu dem Auflösungsvermögen des Monochromators, ist die Resonanz so schmal, daß sie in unserem gemessenen Spektrum im Untergrund verschwindet.

Im berechneten Spektrum gibt es zu höhere Energien hin zahlreiche schmale und klein resonante Strukturen von 66.12 eV bis 66.25 , die bei dem gemessenen Spektrum wegen des begrenzten Auflösungsvermögens des Monochromators und der begrenzten Meßstatistik nicht klar identifiziert werden konnten.

Die scharfe Linie $3d$ bei 66.207 eV in Abb. 24b wurde dem $(1s2p\ ^1P)3d$ -Zustand zugeordnet in [Wu97]. Kieran et al. hat jedoch die resonante Struktur $7S$ in Abb. 26a bei 66.379 eV oberhalb der $1s2s\ ^1S$ -Schwelle dem $(1s2p\ ^1P)3d$ -Zustand zugeordnet [Kie96]. Berücksichtigt man die Linienform der $(1s2p\ ^1P)nd$ -Resonanzen $4d, 5d, \dots$ in Abb. 26b, könnte die Zuordnung für $(1s2p\ ^1P)3d$ in [Kie96] vernünftig erscheinen. Nach dem gemessenen Spektrum in Abb. 26b konvergieren $(1s2p\ ^1P)(n-1)d$ und $(1s2p\ ^1P)ns$ als Paare zur $1s2p\ ^1P$ -Schwelle. Je größer die Quantenzahl n ist, desto geringer ist der Abstand zwischen $(1s2p\ ^1P)(n-1)d$ und $(1s2p\ ^1P)ns$ in einem Paar. Doch in der Zuordnung in [Kie96] ist die Energieabstand von $(1s2p\ ^1P)3d$ und $(1s2p\ ^1P)4s$ kleiner als der zwischen $(1s2p\ ^1P)4d$ und $(1s2p\ ^1P)5s$. In der Zuordnung in [Wu97] ist der Energieabstand (0.227 eV) zwischen $(1s2p\ ^1P)3d$ und $(1s2p\ ^1P)4s$ größer als der (0.1 eV) zwischen $(1s2p\ ^1P)4d$ und $(1s2p\ ^1P)5s$, wie es aus obigen Überlegungen zu erwarten war. Wenn die $(1s2p\ ^1P)3d$ -Resonanz wie nach [Kie96] oberhalb der $1s2s\ ^1S$ -Schwelle existieren sollte, sollte diese Resonanz die Konfigurationen der $(1s2s\ ^1S)np$ -Zustände nicht enthalten. Um dies zu bestätigen, haben Wu et al. die Sattelpunktmethode ohne die Beimischungen der $(1s2s\ ^1S)np$ -Konfigurationen zu der Wellenfunktion für $(1s2p\ ^1P)3d$ durchgeführt. Trotzdem liegt die berechnete Resonanzenergie unterhalb der $1s2s\ ^1S$ -Schwelle. Weiter wurden anschließend die Konfigurationen der $(1s2s\ ^1S)np$ -Zustände in den Rechnungen wieder berücksichtigt. Die neue berechnete Energieposition für die $(1s2p\ ^1P)3d$ -Resonanz ist bei 66.21 eV $3d$ fast unverändert geblieben. In dieser Arbeit wird die Linie $3d$ bei 66.207 eV in Abb. 24b dem $(1s2p\ ^1P)3d$ -Zustand zugeordnet, obwohl die Linienform der Resonanz $3d$ anders ist als die der nachfolgenden Resonanzen $4d, 5d, \dots$ in Abb. 26b. Wegen der Konfigurationswechselwirkungen mit den naheliegenden $(1s2s\ ^1S)np$ -Resonanzen mit den hohen Quantenzahlen n ist die Linienbreite der $(1s2p\ ^1P)3d$ -Resonanz $\Gamma = 0.78\text{ meV}$ kleiner als die Linienbreite der $(1s2p\ ^1P)4d, 5d$ -Resonanz.

Die Linie 6S, 12p bei 66.22 eV im berechneten Spektrum wird durch die mischenden $(1s2p^3P)6s$ - und $(1s2s^1S)12p$ -Zustände ähnlich wie die Linie bei 66.0 eV gebildet [Wu97].

Knapp unterhalb der $1s2s^1S$ -Schwelle in Abb. 24b gibt es ein kleines Tal, das nach der Rechnung [Wu97] von dem Vorhandensein der $(1s2p^3P)6d$ -Resonanz bei 66.31 eV veranlaßt wird.

Zwischen der $1s2s^1S$ - und der $1s2p^1P$ -Schwelle.

Das Spektrum in Abb. 26a zeigt den Energiebereich von 0.38 eV zwischen der $1s2s^1S$ - und der $1s2p^3P$ -Schwelle. Es sollte $(1s2p^3P)ns$ - und $(1s2p^3P)nd$ -Rydbergserien geben, die gegen die $1s2p^3P$ -Schwelle konvergieren. Deshalb liegen die $(1s2p^3P)ns$ - und $(1s2p^3P)nd$ -Resonanzen mit hohen Hauptquantenzahlen n sehr dicht.

Der Wirkungsquerschnitt im experimentellen und berechneten Spektrum zeigt ein Plateau oberhalb der $1s2s^1S$ -Schwelle. Nach der Rechnung wird es durch das Vorhandensein der zwei $(1s2p^3P)7s$ -Resonanz 7S bei 66.36 eV und $(1s2p^3P)7d$ -Resonanz 7D bei 66.40 eV gebildet [Wu97].

Die Linienform der resonanten Struktur 7S ist die einer Fenster-Resonanz mit positivem q -Parameter, ähnlich wie die $(1s2p^3P)3s, 4s, 5s$ -Resonanzen. Es ist vernünftig, daß die Resonanz 7S dem $(1s2p^3P)7s$ -Zustand als nächstes Serienmitglied der $(1s2p^3P)ns$ -Rydbergserie in [Wu97] zugeordnet wird. Somit bildet die $(1s2p^3P)ns$ -Rydbergserie eine Serie von Fenster-Resonanzen. Durch Anpassung eines Fano-profils für die Resonanz 7S, ergeben sich die Resonanzenergie 66.360 eV, die Linienbreite 17 meV und der q -Parameter 0.8.

Obwohl das schmale Tal 7D im gemessenen Spektrum wegen der Grenzen des Auflösungsvermögens nicht beobachtet werden kann, wird mit Hilfe des berechneten Wirkungsquerschnittes die Energieposition der $(1s2p^3P)7d$ -Resonanz zu 66.434 eV angegeben.

Bei 66.430 eV befindet sich eine scharfe Resonanz 4s, deren Wirkungsquerschnitt im Maximum nach der Rechnung über 163 Mb beträgt. Der $(1s2p^1P)4s$ -Zustand besitzt nach der Rechnung einen Anteil von 84.3% der Wellenfunktion für die Resonanz 4s. Dieses Ergebnis bestätigt die Zuordnung in [Kie96]. Die Linienbreite der $(1s2p^1P)4s$ -Resonanz 4s ist so schmal, daß es nicht gelungen ist, sie zu berechnen [Wu97].

An der rechten Seite der $(1s2p^1P)4s$ -Resonanz sollten eng aufeinander folgend die $(1s2p^3P)ns$ und $(1s2p^3P)nd$ -Rydbergserien auftreten, die gegen die $1s2p^3P$ -Schwelle konvergieren. Die Resonanzen, die in dem berechneten Spektrum als kleine Täler auftreten, konnten im gemessenen Spektrum nicht identifiziert werden. Mit Hilfe des berechneten Wirkungsquerschnittes werden die Lagen der $(1s2p^3P)8d, 9d, 10d$ -Resonanzen und $(1s2p^3P)8s, 9s, 10s$ -Resonanzen in Abb. 26 gezeigt.

Abb. 26b stellt das Spektrum zwischen der $1s2p^3P$ - und der $1s2p^1P$ -Schwelle dar. Sowohl die Form als auch die Energielagen der Resonanzen des Spektrums sind in exzellenter

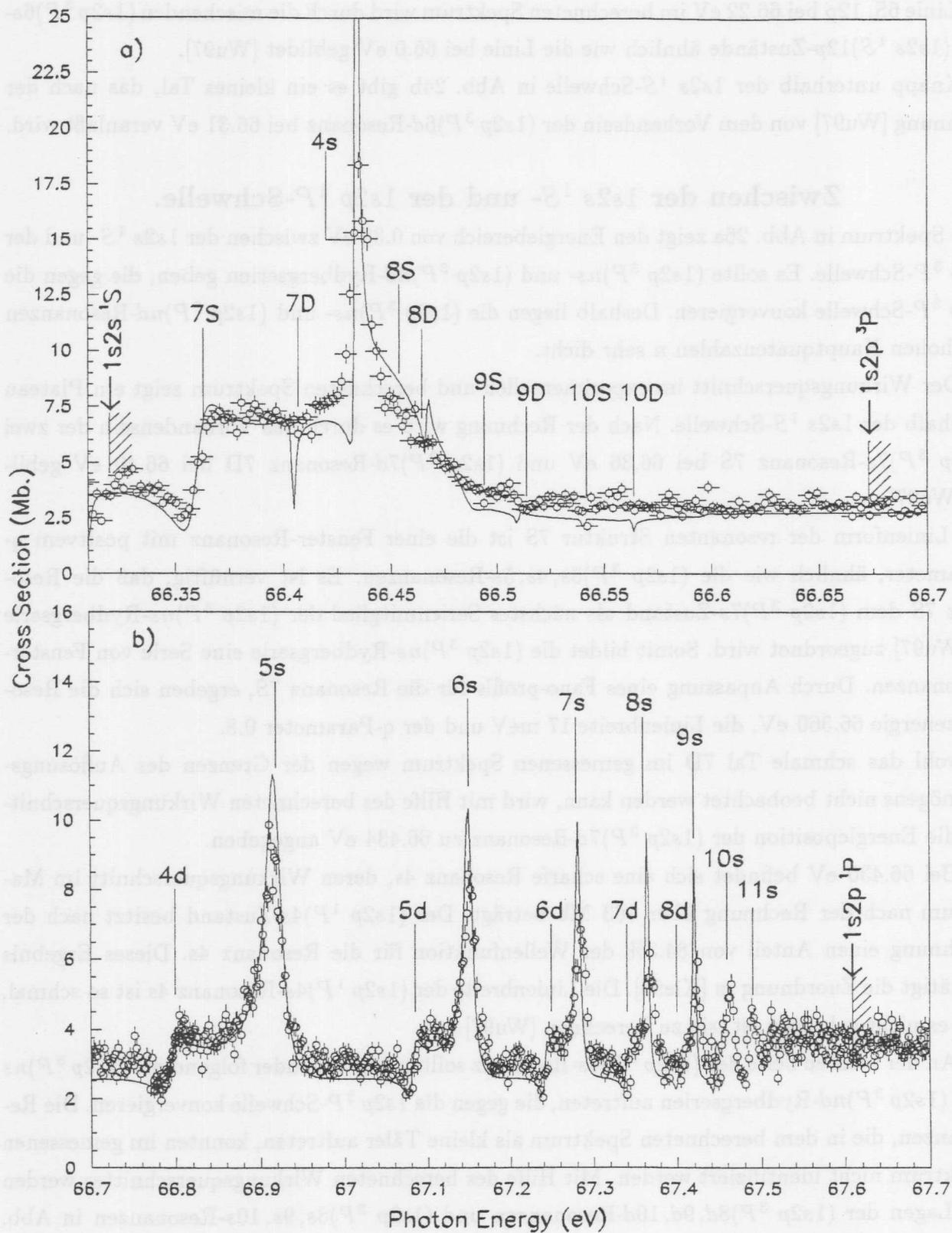


Abbildung 26: Das Photoionenausbeutespektrum der $2P^o$ -Zustände zwischen der $1s2s\ ^1S$ - und der $1s2s\ ^1P$ -Schwelle. $\circ \circ \circ$: die gemessenen Datenpunkte dieser Arbeit, — : das berechnete Spektrum von [Chu97a].

Übereinstimmung mit der Rechnung. Die Resonanzen bilden Paare, in denen eine Resonanz eine kleine Fenster-Resonanz mit positivem q -Parameter und die andere eine Spitze mit negativem q -Parameter ist. Die Paare konvergieren gegen die $1s2p\ ^1P$ -Schwelle. Die Resonanzen der Rydbergserien werden anders als die Resonanzen unterhalb der $1s2p\ ^3P$ -Schwelle nicht gestört und behalten bis zur Ionisationsschwelle ihre Linienform bei. In diesem Spektrum sollten also zwei Rydbergserien $(1s2p\ ^1P)ns, nd$ existieren, die gegen die $1s2p\ ^1P$ -Schwelle konvergieren. Wenn man die großen Intensitäten der $(1s2p\ ^1P)3s, 4s$ -Resonanzen und die kleine Intensität der $(1s2p\ ^1P)3d$ -Resonanz betrachtet, kann man einfach jeweils die erste kleine Resonanz eines Paares dem $(1s2p\ ^1P)nd$ -Zustand und die zweite Resonanz dem $(1s2p\ ^1P)(n+1)s$ -Zustand zuordnen.

Die $(1s2p\ ^1P)nd, ns$ -Resonanzen in Abb. 26b sind breiter als die $(1s2p\ ^1P)3d, 3s$ und $4s$ -Resonanzen. Nach der Rechnung in [Wu97] sind die Linienbreiten der $(1s2p\ ^1P)4d$ 25.6 meV und die der $(1s2p\ ^1P)5s$ 22.5 meV. Die Linienbreite der $(1s2p\ ^1P)3d$ -Resonanz beträgt jedoch 0.78 meV, die der $(1s2p\ ^1P)3s$ -Resonanz 3.88 meV und die der $(1s2p\ ^1P)4s$ -Resonanz ist so schmal, daß man sie nicht berechnen kann. Die Resonanzen der $(1s2p\ ^1P)nd, ns$ -Rydbergserien in Abb. 26b sind unnormale breit. Dies ergibt sich daraus, daß es den offenen Kanal $1s2p\ ^3P + \epsilon d, \epsilon s$ gibt. Der Zerfall der $(1s2p\ ^1P)nd, (n+1)s$ -Resonanzen ins $1s2p\ ^3P + \epsilon l$ -Kontinuum ruft die kurzen Lebensdauern und damit die große Linienbreite hervor.

Je näher die $(1s2p\ ^1P)ns$ -Resonanzen im berechneten Spektrum in Abb. 26b bei der $1s2p\ ^1P$ -Schwelle liegen, desto kleiner ist die Linienbreite, ihre Höhe bleibt jedoch fast konstant. Weiter oberhalb der $1s2p\ ^1P$ -Schwelle ergibt sich das kontinuierliche Spektrum, das hier nicht gezeigt ist. Ab 70.5 eV treten die resonanten Strukturen $1s3lnl'$ auf. Im folgenden Abschnitt werden sie weiter diskutiert.

Das gemessene Spektrum zwischen der $1s2s\ ^3S$ - und der $1s2p\ ^1P$ -Schwelle ist also nicht gewöhnlich und sehr kompliziert. Doch mit Hilfe der Rechnungen von Chung et al. konnten die komplizierten resonanten Strukturen den Resonanzen von fünf Rydbergserien ($(1s2s\ ^1S)np$, $(1s2p\ ^3P)ns, nd$ sowie $(1s2p\ ^1P)ns, nd$) erfolgreich zugeordnet werden.

Es gibt viele verschiedene Meßergebnisse und Rechnungen für die Resonanzen zwischen der $1s2s\ ^3S$ - und $1s2p\ ^1P$ -Schwelle (siehe Table 3. in [Kie96]). Zusammenfassend sind in Tab. 8 die Zuordnungen, die Energielagen und die Linienbreiten aufgetragen, die auf den Meßergebnissen dieser Arbeit und den Rechnungen in [Chu97a, Wu97] beruhen.

Bezeichnung in Abbildung	Zuordnung	Resonanzenergie(eV)		Linienbreite(meV)
		Diese Arbeit†	[Chu97a, Wu97]	[Wu97]
3S	$(1s2p^3P)3s$	64.57	64.568	117
4p	$(1s2s^1S)4p$		64.152	89.7
3D	$(1s2p^3P)3d$	65.25	65.255	15.7
3s	$(1s2p^1P)3s$	65.29	65.298	3.88
4S	$(1s2p^3P)4s$	65.56	65.565	77.9
5p	$(1s2s^1S)5p$	65.67	65.672	3.59
4D	$(1s2p^3P)4d$	65.86	65.860	5.64
6p	$(1s2s^1S)6p$	65.88	65.874	6.84
5S	$(1s2p^3P)5s$	65.99	65.992*	
7p	$(1s2s^1S)7p$	66.01	66.018*	
8p	$(1s2s^1S)8p$	66.08	66.074*	
9p	$(1s2s^1S)9p$	66.13	66.124*	
5D	$(1s2p^3P)5d$	66.15	66.144*	
10p	$(1s2s^1S)10p$	66.16	66.163*	
11p	$(1s2s^1S)11p$	66.19	66.183*	
3d	$(1s2p^1P)3d$	66.21	66.207	0.78
6S	$(1s2p^3P)6s$	66.22	66.215*	
12p	$(1s2s^1P)12p$		66.215*	
6D	$(1s2p^3P)6d$	66.32	66.309*	
7S	$(1s2p^3P)7s$		66.359*	
7D	$(1s2p^3P)7d$	66.41	66.404*	
4s	$(1s2p^1P)4s$	66.44	66.436	
8S	$(1s2p^3P)8s$		66.447*	
8D	$(1s2p^3P)8d$		66.466*	
9S	$(1s2p^3P)9s$		66.488*	
9D	$(1s2p^3P)9d$		66.510*	
10S	$(1s2p^3P)10s$		66.541*	
10D	$(1s2p^3P)10d$		66.560	
4d	$(1s2p^1P)4d$	66.81	66.790	25.6
5s	$(1s2p^1P)5s$	66.93	66.915	22.5
5d	$(1s2p^1P)5d$	67.10	67.094	15.5
6s	$(1s2p^1P)6s$	67.16	67.148	11.9

Bezeichnung in Abbildung	Zuordnung	Resonanzenergie(eV)		Linienbreite(meV)
		Diese Arbeit†	[Chu97a, Wu97]	[Wu97]
6d	$(1s2p\ ^1P)6d$	67.25	67.238	9.20
s7	$(1s2p\ ^1P)7s$	67.29	67.276*	
d7	$(1s2p\ ^1P)7d$	67.35	67.334*	
s8	$(1s2p\ ^1P)8s$	67.37	67.358*	
d8	$(1s2p\ ^1P)8d$		67.398*	
s9	$(1s2p\ ^1P)9s$	67.43	67.414*	
s10	$(1s2p\ ^1P)10s$	67.47	67.44*	
s11	$(1s2p\ ^1P)11s$	67.49		

Tabelle 8: Die Zuordnungen, die Resonanzregionen und die Linienbreiten für die resonanten Strukturen $^2P^\circ$, die sich zwischen der $1s2s\ ^3S$ - und der $1s2p\ ^1P$ -Schwelle befinden. Die Bezeichnungen in der ersten Spalte entsprechen den Bezeichnungen in den Abb. 24 und Abb. 26. †: Die Unsicherheit der Energie in dieser Arbeit beträgt ± 0.01 eV. *: Die mit * gekennzeichneten Werte stammen aus [Wu97].

4.1.4 In der Nähe der $1s3l$ -Schwellen

Abb. 27 zeigt gemessene und berechnete Spektren der $2P^o$ -Photoionisation oberhalb von 70 eV. Abb. 27a gibt das absolute Absorptionsspektrum, das von Mehlman et al. mit Hilfe der *Heat Pipe*-Methode gemessen wurde [Meh82]. Abb. 27b zeigt das Meßergebnis dieser Arbeit. Das Spektrum zeigt deutliche resonante Strukturen, die durch Fanoprofile mit negativen q -Asymmetrieparameter angenähert werden können. Die Energiepositionen der resonanten Strukturen stimmen in beiden Spektren gut überein. Das Spektrum in Abb. 27c wurde von Voky mit Hilfe der R-Matrix-Methode berechnet [Vok95]. Wenn das berechnete Spektrum um 0.256 eV zu höheren Energien verschoben wird, stimmt es, mit Ausnahme der Linie F, ausgezeichnet mit dem Spektrum dieser Arbeit überein.

Zwischen 70.5 eV und 75 eV treten die resonanten Strukturen ($1s3lnl'$) auf. Nach der Einkonfigurationsnäherung sollte es zehn Rydbergserien ($1s3s\ ^{1,3}Snp$, ($1s3p\ ^{1,3}Pns, nd$) und ($1s3d\ ^{1,3}Dnp$, ($n+1)f$) geben, die gegen die $1s3l$ -Schwellen konvergieren. Die sechs $1s3l$ -Schwellen liegen in dem engen, weniger als 1 eV breiten Energiebereich zwischen 74.17 eV und 75.04 eV. Zum Vergleich: Die $1s2lnl'\ ^2P$ -Resonanzen, die in den letzten Abschnitten besprochen wurden, befinden sich in etwa 10 eV Abstand zwischen 58 eV und 68 eV. Die vier $1s2l$ -Schwellen, gegen die die sechs ($1s2l)nl'\ ^2P$ -Rydbergserien ($(1s2s\ ^{1,3}Snp$, ($1s2p\ ^{1,3}Pns, nd$) konvergieren, liegen in einem Energieintervall von etwa 3 eV zwischen 64.4 eV und 67.7 eV. Aufgrund der starken Wechselwirkung der Zustände mit den offenen Kanälen und mit anderen nahe liegenden Zuständen, werden die Energielage der $1s2lnl'$ -Resonanzen unterschiedlich verschoben und die Linienformen stark verändert. Die resonanten Strukturen der $1s3lnl'$ -Zustände sollten daher noch komplizierter als die $1s2lnl'$ -Resonanzen sein.

Es ist schwierig, resonante Strukturen in Abb. 27b einem bestimmten Zustand der $1s3lnl'$ -Rydbergserien zuzuordnen wie in dem Spektrum der ($1s2l)nl'$ -Resonanzen. Tatsächlich gibt es bis heute keine theoretischen Untersuchungen, die die resonanten Strukturen in Abb. 27b zuordnen. Voky hat nur den Photoionisationsquerschnitt in Abb. 27c berechnet [Vok95]. Mit Hilfe einer Analogie, die auf der Zuordnung der Doppelanregungen von Helium beruht, wurde versucht die $1s3lnl'$ -Strukturen des beobachteten Spektrums in Abb. 27 zu klassifizieren [Meh82]. Die Analogie beruht auf der folgenden Betrachtung:

Bei den $1s3lnl'$ -Resonanzen ist zu beachten, daß die Kopplung zwischen zwei angeregten Elektronen stärker ist, als die zwischen den angeregten Elektronen und dem $1s$ -Elektron. Daher ist es sinnvoll, bei der Konfiguration der $1s3lnl'$, $n \geq 3$ -Resonanzen zunächst die beiden angeregten Elektronen zu koppeln ($1s(3lnl')$) und nicht mehr wie bisher die ($1s3l)nl'$ -Kopplung zu verwenden.

Wird der Atomkern vom $1s$ -Elektron gut abgeschirmt, dann ist die effektive Kernladung, die auf die zwei angeregten Elektronen wirkt, fast mit der des Heliums identisch. Somit entsprechen

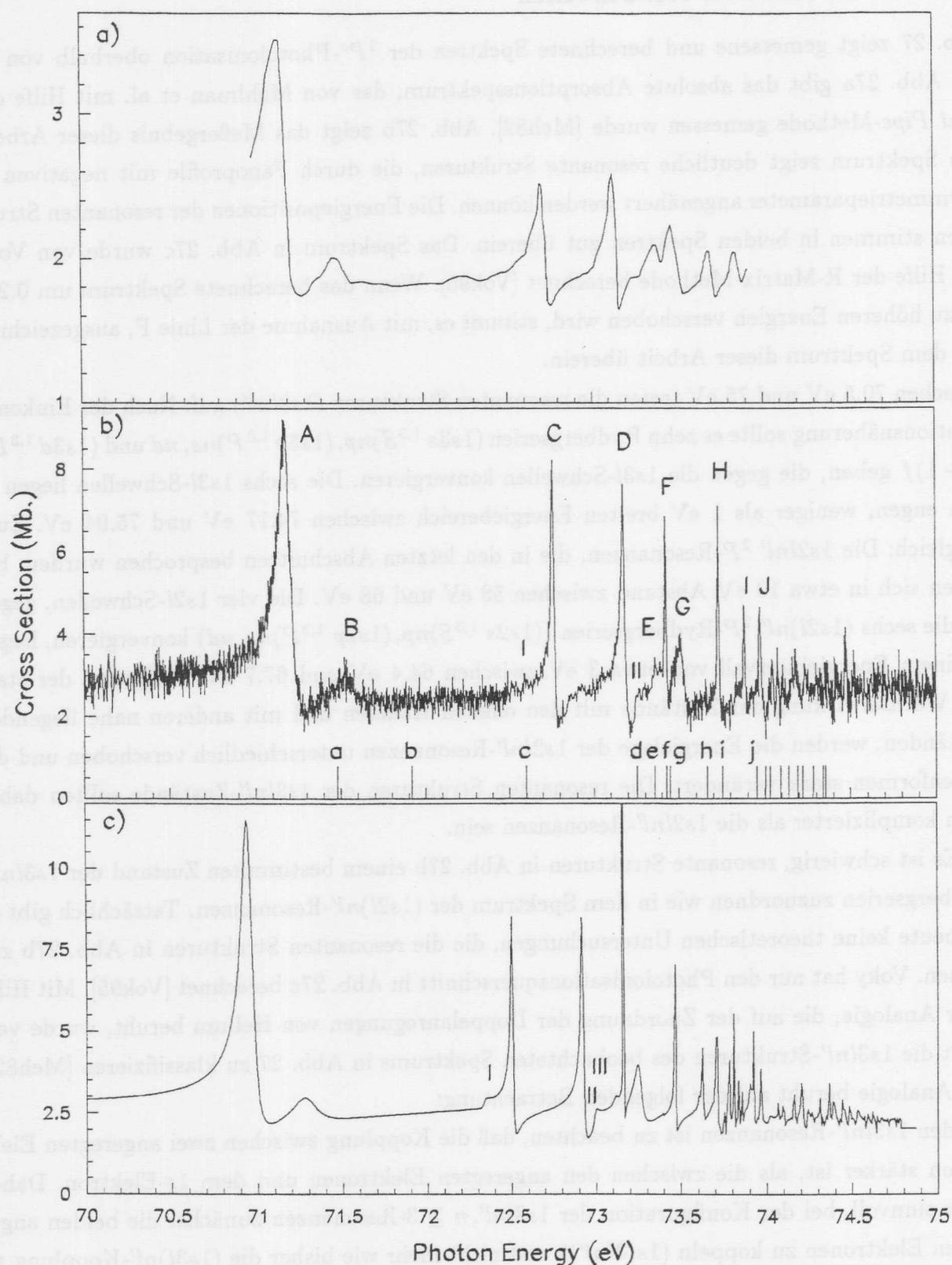


Abbildung 27: Das Photoionenausbeutespektrum des $2P^\circ$ -Zustandes in der Nähe der $1s3l$ -Schwellen. a) Der absolut gemessene Photoabsorptionswirkungsquerschnitt aus [Meh82]. b) Die Li^+ -Photoionenausbeute für $2P^\circ$ aus dieser Arbeit. c) Der durch R-Matrix von Voky berechnete Photoionisationswirkungsquerschnitt aus [Vok95].

die $1s(3lnl')$ -Resonanzen des Lithiums den $3lnl'$ -Doppelanregungen des Heliums. Um die resonanten Strukturen in dem $1s(3lnl')^2P^\circ$ -Photoabsorptionsspektrum des Lithiums den Zuständen zuzuordnen, müssen die $3lnl' \ ^3P^\circ$ - und $3lnl' \ ^1P^\circ$ -Zustände des Heliums berücksichtigt werden, da beide Zustände mit dem im Kern liegenden dritten $1s$ -Elektron des Lithiums koppeln und die $^2P^\circ$ -Zustände bilden.

Obwohl die absoluten Energiepositionen der $3lnl' \ ^3P^\circ$ - und $3lnl' \ ^1P^\circ$ -Zustände des Heliums anders liegen, als die der $1s(3lnl' \ ^3P^\circ)$ - und $1s(3lnl' \ ^1P^\circ)$ -Zustände des Lithiums, sollte der Energieabstand zwischen $3lnl' \ ^3P^\circ$ - und $3lnl' \ ^1P^\circ$ -Zustand des Heliums fast der gleiche sein, wie der zwischen den entsprechenden Zustände des Lithiums. Der Energieabstand der zwei niedrigsten $1s3lnl'$ -Resonanzen bei 71.19 eV und 71.54 eV, die in Abb. 27b als A und B bezeichnet werden, beträgt 0.35 eV. Die entsprechenden Resonanzen $(3, 3a) \ ^3P$ (69.45 eV) und $(3, 3a) \ ^1P$ (69.89 eV) für das Helium liegen 0.44 eV voneinander entfernt [Lip77]. Die Abweichung der Energieabstände ist mit 0.09 eV gering. Für höhere Anregungen wird der Einfluß der Kopplung zwischen den angeregten Elektronen und dem $1s$ -Elektron sogar noch geringer.

Die He^{2+} -Zweifachionisationsschwelle für Helium liegt bei 79.006 eV, die Li^{2+} - für Lithium bei 81.033 eV [Moo71]. Es wird angenommen, daß die Zweifachionisationsschwelle des Lithiums und die nahe liegenden Resonanzen für das Lithium im Vergleich zu denen des Heliums energetisch konstant verschoben sein sollten. Um die Energielage der Resonanzen von Lithium zu erhalten, muß man also die Differenz dieser Schwellen (2.027 eV) zu der Energie der entsprechenden Resonanz des Heliums addieren. Die auf der x-Achse der Abb. 27b eingezeichneten Striche zeigen die erwarteten Energiepositionen der Li-Resonanzen, die mit Hilfe der von Lipsky [Lip77] berechneten He-Doppelanregungen abgeschätzt wurden. Die mit den Großbuchstaben markierten Linien des Spektrums entsprechen demnach den Markierungen mit den kleinen Buchstaben. Die beobachteten Resonanzen im Lithiumatom werden den Zuständen $1s[(N, n\alpha) \ ^{1,3}P] \ ^2P$ zugeordnet, wobei $[(N, n\alpha) \ ^{1,3}P]$ auf der Klassifizierung der angeregten Zustände des Heliums beruht. N ist die Hauptquantenzahl des inneren Elektrons, n die des äußeren Elektrons und α der Serienindex [Lip77 und Meh82]. Die Resonanzen, die zur Serie mit einem bestimmten α gehören, haben fast den gleichen Quantendefekt. Die erwarteten Energielagen (kleine Buchstaben) stimmen nicht mit den Energielagen der Linien in Spektrum Abb. 27b überein. Einige der beobachteten Linien z.B. A, B und D liegen unterhalb der erwarteten Energie, andere (z.B. C, H) oberhalb. Dennoch sehen wir eine Regelmäßigkeit zwischen gemessenem und erwartetem Spektrum: Der Abstand zwischen a $(3, 3a) \ ^3P$ und b $(3, 3a) \ ^1P$ ist mit dem Abstand zwischen A und B fast identisch. Entsprechendes gilt für die Abstände zwischen c $(3, 3b) \ ^3P$ und e $(3, 3b) \ ^1P$, f $(3, 4a) \ ^3P$ und h $(3, 4a) \ ^1P$, sowie d $(3, 4c) \ ^1P$ und g $(3, 4c) \ ^3P$. Tendenziell bleibt der Abstand von Paaren mit gleichen Quantenzahlen N , n und α aber unterschiedlichem Spin beim Übergang von Helium zu Lithium erhalten.

Die kleine Resonanz I im berechneten Spektrum in Abb. 27c kann durch die zuvor benutzte Analogie nicht erklärt werden. Im gemessenen Spektrum kann die berechnete Resonanz I aufgrund der statistischen Meßfehler nicht beobachtet werden.

Die beiden Resonanzen II und III sind im gemessenen Spektrum von [Meh82] in Abb. 27a nicht sichtbar, jedoch in unserem gemessenen Spektrum in Abb. 27b schwach erkennbar. Eine der beiden Resonanzen II und III kann dem $(3, 3b) \ ^1P$ -Zustand zugeordnet werden. Die andere der zwei Resonanzen wird aufgrund der zuvor benutzte Analogie nicht erwartet. Im folgenden werden die resonanten Strukturen einzeln diskutiert.

Die zwei niedrigsten Resonanzen A und B in Abb. 27b, die den $1s[(3, 3a) \ ^3P] \ ^2P$ - und $1s[(3, 3a) \ ^1P] \ ^2P$ -Zuständen zugeordnet werden, wurden von Eder et al. erstmals im Photoabsorptionsspektrum beobachtet und als $1s(3s3p \ ^3P)$ und $1s(3s3p \ ^1P)$ klassifiziert [Ede70]. Da beide Resonanzen große Linienbreiten haben, und die $1s(3s3p \ ^3P)$ -Resonanz eine große Oszillatorstärke hat, sind sie bei den verschiedenen Experimenten deutlich erkennbar und gut aufgelöst. Zusätzlich zu dem schon erwähnten Photoabsorptionsexperiment von Mehlman [Meh78 und Meh82] wurde der totale und der partielle relative Wirkungsquerschnitt in der Nähe der beiden Resonanzen durch Photoelektronenspektroskopie ermittelt [Fer87]. Bei diesen Experimenten sind die Meßdaten durch die Fanoprofile angepaßt und die daraus resultierenden Ergebnisse besonders in [Fer87] ausführlich diskutiert. Da die beiden Resonanzen eng beieinander liegen, sind sie in dieser Arbeit durch die Überlagerung zweier Fanoprofile gemeinsam näherungsweise angepaßt. Die durchgezogenen Linien in Abb. 28 stellen die beste Anpassung zweier Fanoprofile an das Meßergebnis dar. Die daraus resultierenden Fano-Parameter werden in Tab. 9 im Vergleich zu den Ergebnissen anderer Messungen dargestellt. Die Ergebnisse in der Spalte von [Vok95] in Tab. 9 wurden durch Anpassung von Fanoprofilen an das Spektrum aus Abb. 27c ermittelt.

Die Resonanzenergie 71.19 eV für $1s(3s3p \ ^3P)$ in dieser Arbeit stimmt mit der von [Fer87] sehr gut überein. Die 71.14 eV von Mehlman weichen jedoch von beiden experimentellen Ergebnissen ab. Es gibt eine Inkonsistenz in [Meh82]. Bei [Meh82] hat die $1s(3s3p \ ^3P)$ -Resonanz ihre maximale Intensität bei 71.16 eV und die Resonanzenergie bei 71.14 eV. Aufgrund der folgenden Erläuterungen könnten wir aber annehmen, daß die Zahlen vertauscht wurden. Die mathematische Beziehung zwischen der Energie maximaler Intensität E_{max} und Resonanzenergie E_R läßt sich beschreiben durch:

$$E_{max} = \frac{\Gamma}{2q} + E_R \quad (59)$$

wobei q und Γ Asymmetrieparameter und Linienbreite des Fanoprofiles sind. Nach Gleichung (59) muß sich die Resonanzenergie E_R für die $1s(3s3p \ ^3P)$ -Resonanz wegen des negativen q -

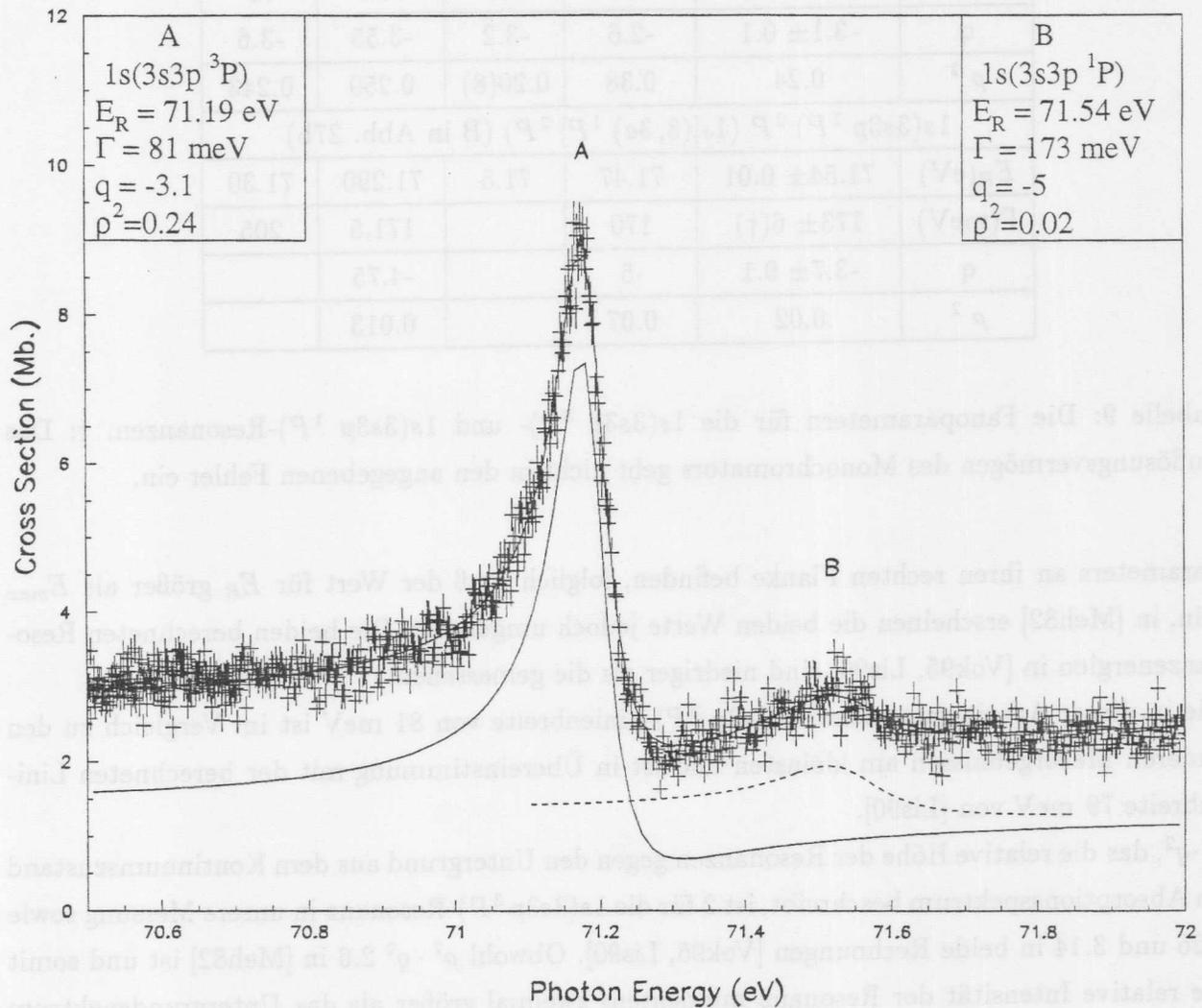


Abbildung 28: Li^+ -Photoionenspektrum (unten) im Bereich der $1s(3s3p\ ^3P)$ - und $1s(3s3p\ ^3P)$ -Resonanz. Die durchgezogene Linie stellt die Anpassung eines Fanoprofils an die Meßdaten für die $1s(3s3p\ ^3P)$ -Resonanz A dar. Die gestrichelte Linie stellt die Anpassung eines Fanoprofils an die Meßdaten für die $1s(3s3p\ ^1P)$ -Resonanz B dar.

$1s(3s3p\ ^3P)\ ^2P\ (1s[(3,3a)\ ^3P]\ ^2P)$ (A in Abb. 27b)					
	Experiment			Rechnung	
	Dieser Arbeit	[Meh82]	[Fer87]	[Vok95]	[Lis90]
$E_R(\text{eV})$	71.19 ± 0.01	71.14	71.19	70.950	70.96
$\Gamma(\text{meV})$	$81 \pm (\dagger) 6$	100	100	76.9	79
q	-3.1 ± 0.1	-2.6	-3.2	-3.55	-3.6
ρ^2	0.24	0.38	0.20(8)	0.259	0.243
$1s(3s3p\ ^1P)\ ^2P\ (1s[(3,3a)\ ^1P]\ ^2P)$ (B in Abb. 27b)					
$E_R(\text{eV})$	71.54 ± 0.01	71.47	71.5	71.290	71.30
$\Gamma(\text{meV})$	$173 \pm 6(\dagger)$	170		171.5	205
q	-3.7 ± 0.1	-5		-4.75	
ρ^2	0.02	0.07		0.013	

Tabelle 9: Die Fanoparametern für die $1s(3s3p\ ^3P)$ - und $1s(3s3p\ ^1P)$ -Resonanzen. †: Das Auflösungsvermögen des Monochromators geht nicht in den angegebenen Fehler ein.

Parameters an ihren rechten Flanke befinden, folglich muß der Wert für E_R größer als E_{max} sein, in [Meh82] erscheinen die beiden Werte jedoch umgekehrt. Die beiden berechneten Resonanzenergien in [Vok95, Lis90] sind niedriger als die gemessenen.

Die in dieser Arbeit gemessene $1s(3s3p\ ^3P)$ -Linienbreite von 81 meV ist im Vergleich zu den anderen Meßergebnissen am kleinsten und ist in Übereinstimmung mit der berechneten Linienbreite 79 meV von [Lis90].

$\rho^2 \cdot q^2$, das die relative Höhe der Resonanzen gegen den Untergrund aus dem Kontinuumszustand im Absorptionsspektrum beschreibt, ist 2 für die $1s(3s3p\ ^3P)$ -Resonanz in unsere Messung sowie 3.26 und 3.14 in beide Rechnungen [Vok95, Lis90]. Obwohl $\rho^2 \cdot q^2$ 2.6 in [Meh82] ist und somit die relative Intensität der Resonanz mindestens zweimal größer als das Untergrundspektrum sein müßte, ist die Intensität der Resonanz fast gleich hoch wie der Untergrund (siehe Abb. 27a). Wie in [Fer87] erwähnt, würde es Probleme in der Analyse der Daten in [Meh82] geben. Die $1s(3s3p\ ^1P)$ -Resonanz B in Abb. 27b hat kleine Intensität und eine große Linienbreite von 173 meV. Die relative Höhe $\rho^2 \cdot q^2$ beträgt nur 0.22, was zu einer sehr schwachen Veränderung gegenüber dem kontinuierlichen Untergrund führt (gestrichelte Linie in Abb. 28).

Abb. 29a zeigt die Vergrößerung der Region von 72.5 eV bis 75 eV in Abb. 27b. Abb. 29b zeigt einen gleich großen Energiebereich aus dem berechneten Spektrum von Abb. 27c. Dieser ist zur besseren Vergleichbarkeit um 0.23 eV verschoben. Die Abb. 29 zeigt gute Übereinstimmung

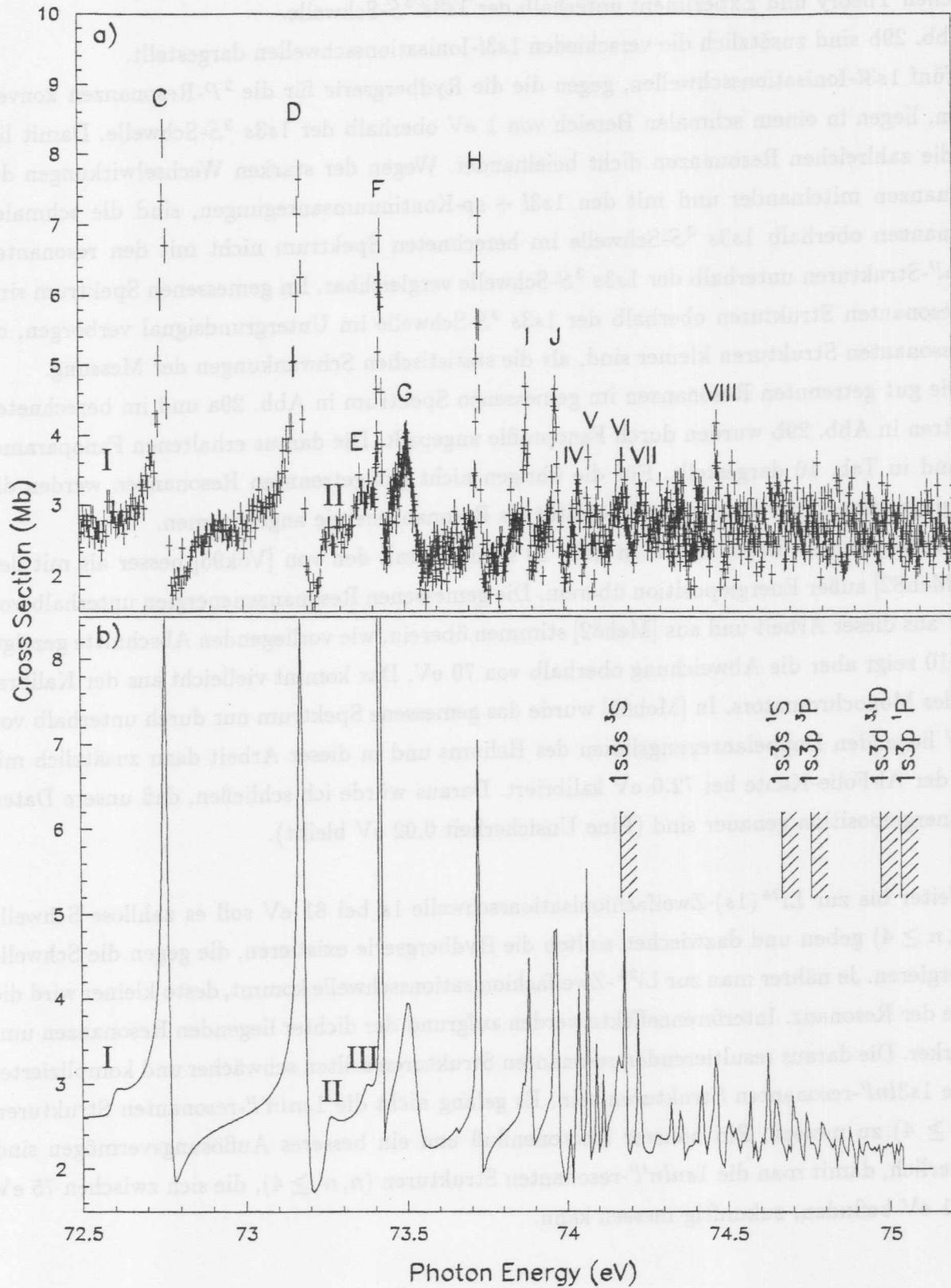


Abbildung 29: Die Vergrößerung des Energiebereiches 72.5 eV bis 75.5 eV von Abb. 27b und 27c.

zwischen Theory und Experiment unterhalb der $1s3s\ ^3S$ -Schwelle.

In Abb. 29b sind zusätzlich die verschiedenen $1s3l$ -Ionisationsschwellen dargestellt.

Die fünf $1s3l$ -Ionisationsschwellen, gegen die die Rydbergserie für die 2P -Resonanzen konvergieren, liegen in einem schmalen Bereich von 1 eV oberhalb der $1s3s\ ^3S$ -Schwelle. Damit liegen die zahlreichen Resonanzen dicht beieinander. Wegen der starken Wechselwirkungen der Resonanzen miteinander und mit den $1s3l + \epsilon p$ -Kontinuumsanregungen, sind die schmalen Resonanzen oberhalb $1s3s\ ^3S$ -Schwelle im berechneten Spektrum nicht mit den resonanten $1s3lnl'$ -Strukturen unterhalb der $1s3s\ ^3S$ -Schwelle vergleichbar. Im gemessenen Spektrum sind die resonanten Strukturen oberhalb der $1s3s\ ^3S$ -Schwelle im Untergrundsignal verborgen, da die resonanten Strukturen kleiner sind, als die statistischen Schwankungen der Messung.

Die gut getrennten Resonanzen im gemessenen Spektrum in Abb. 29a und im berechneten Spektren in Abb. 29b wurden durch Fanoprofile angepaßt. Die daraus erhaltenen Fanoparameter sind in Tab. 10 dargestellt. Für die übrigen nicht gut getrennten Resonanzen werden die Energiepositionen bei maximaler Intensität als Resonanzenergie angenommen.

Das Meßergebnis dieser Arbeit in Tab. 10 stimmen mit den von [Vok95] besser als mit den von [Meh82] außer Energieposition überein. Die gemessenen Resonanzenergien unterhalb von 70 eV aus dieser Arbeit und aus [Meh82] stimmen überein, wie vorliegenden Abschnitte gezeigt. Tab. 10 zeigt aber die Abweichung oberhalb von 70 eV. Das kommt vielleicht aus der Kalibration des Monochromators. In [Meh82] wurde das gemessene Spektrum nur durch unterhalb von 70 eV liegenden Doppelanregungslinien des Heliums und in dieser Arbeit dazu zusätzlich mit Hilfe der Al-Folie-Kante bei 72.0 eV kalibriert. Daraus würde ich schließen, daß unsere Daten zur Energieposition genauer sind (Eine Unsicherheit 0.02 eV bleibt).

Weiter bis zur $\text{Li}^{2+}(1s)$ -Zweifachionisationsschwelle $1s$ bei 81 eV soll es zahllose Schwelle ($1snl, n \geq 4$) geben und dazwischen sollten die Rydbergserie existieren, die gegen die Schwelle konvergieren. Je näher man zur Li^{2+} -Zweifachionisationsschwelle kommt, desto kleiner wird die Stärke der Resonanz. Interferenzeffekte werden aufgrund der dichter liegenden Resonanzen umso stärker. Die daraus resultierenden resonanten Strukturen sollten schwächer und komplizierter als die $1s3lnl'$ -resonanten Strukturen sein. Es gelang nicht die $1slnl'$ -resonanten Strukturen ($n, n' \geq 4$) zu messen. Ein höherer Photonenfluß und ein besseres Auflösungsvermögen sind erforderlich, damit man die $1slnl'$ -resonanten Strukturen ($n, n' \geq 4$), die sich zwischen 75 eV und 81 eV befinden, zukünftig messen kann.

Bezeich. in Abb. 27	Zuordnung von Lipsky	$E_R(\text{eV})$	$\Gamma(\text{meV})$	q	ρ^2
A	$(3, 3a) {}^3P$	$71.19^D, 71.14^M$, 70.950^V	$81^D, 100^M$, 76.9^V	$-3.1^D, -2.6^M$, -3.55^V	$0.25^D, 0.38^M$, 0.259^V
B	$(3, 3a) {}^1P$	$71.54^D, 71.47^M$, 71.290^V	$173^D, 170^M$, 171^V	$-3.7^D, -5^M$, -4.75^V	$0.02^D, 0.07^M$, 0.0127^V
I	—	$72.49^D, 72.346^V$	—	—	—
C	—	$72.76^D, 72.71^M$, 72.504^V	$17^D, 21^M$, 16.1^V	$-3.1^D, -0.5^M$, -2.78^V	$0.23^D, 0.29^M$, 0.294^V
D	$(3, 4c) {}^1P$	$73.18^D, 73.12^M$, 72.921^V	$21^D, 24^M$, 18.59^V	$-2.8^D, -0.44^M$, -2.98^V	$0.25^D, 0.82^M$, 0.273^V
II	—	$73.29^D, 72.999^V$	—	—	—
E	—	$73.36^D, 73.121^V$	—	—	—
F	—	$73.43^D, 73.162^V$	—	—	—
G	—	$73.51^D, 73.251^V$	—	—	—
H	—	$73.73^D, 73.67^M$, 73.467^V	$10^D, 19^M$, 5^V	$-5.6^D, -0.37^M$, -4.8^V	$0.07^D, 0.54^M$, 0.161^V
I	—	$73.88^D, 73.82^M$, 73.625^V	80^M	-0.26^M	0.43^M
J	—	$73.97^D, 73.713^V$	—	—	—
IV	—	$74.04^D, 73.781^V$	—	—	—
V	—	$74.08^D, 73.809^V$	—	—	—
VI	—	$74.18^D, 73.924^V$	—	—	—
VII	—	$74.24^D, 73.965^V$	—	—	—
VIII	—	$74.48^D, 74.203^V$	—	—	—

Tabelle 10: Die Resonanzenergie E_R , die Linienbreite Γ , der Asymmetrieparameter q und die Übereppungsparameter ρ^2 für die resonanten Strukturen, die sich zwischen 70 eV und 75 eV befinden. D : Aus dieser Arbeit, M : aus [Meh82] sowie V : aus der Rechnung von Voky. Unsicherheit in dieser Arbeit: 0.01 eV in Resonanzenergien E_R und 6 meV in die Linienbreiten Γ .

4.2 Dreifachanregungen

Die Diskussion der Dreifachanregungen gliedert sich in zwei Teile.

Zunächst werde ich die Ergebnisse anführen, die sich aus den verschiedenen Untersuchungen der Dreifachanregungen bei Dreielektronensystemen ergeben haben.

Danach werde ich die Meßergebnisse der $^2P^o$ -Dreifachanregungen des Lithiumatoms vorstellen, die in dieser Arbeit durch die Photonionenausbeute-Methode bestimmt worden sind. In diesem Abschnitt werden die Meßergebnisse ausführlich diskutiert, und mit anderen theoretischen und experimentellen Ergebnissen verglichen.

4.2.1 Die Dreifachanregungen des Dreielektronensystems

Dreifachanregungen eines Dreielektronenatoms oder -ions ergeben sich durch korrelierte Übergänge von zwei oder drei Elektronen. Es gibt bei Dreifachanregungen hohler Atome Erscheinungen, die bei Doppelanregungen prinzipiell nicht vorkommen. Im Gegensatz zu den Doppelanregungszuständen liegen die Dreifachanregungszustände oberhalb der Zweifachionisationsschwelle. Deshalb können Dreifachanregungszustände durch Autoionisation sowohl in einfach als auch in zweifach ionisierte Endzustände zerfallen. Darüber hinaus sind alle drei Elektronen der Dreifachanregungen am Zerfall beteiligt. Die Beschreibung dieses stark korrelierten dynamischen Prozesses ist eine große Herausforderung für die Theorie. Deshalb werden Dreifachanregungen seit langer Zeit intensiv theoretisch und experimentell untersucht.

Im folgenden werde ich kurz die Ergebnisse dieser Bemühungen beschreiben.

Im Transmissionsspektrum niederenergetischer Elektronen durch Heliumgas beobachteten Kuyatt et al. zwei interessante Resonanzen bei 57.1 eV und 58.2 eV, d.h. oberhalb der ersten Ionisationsschwelle [Kuy65]. Diese Resonanzen konnten nicht als 1P -Doppelanregungszustände des Heliumatoms gedeutet werden, da die Energien mit den aus Photoabsorptionsmessungen bekannten Energien der Doppelanregung nicht übereinstimmten [Mad63]. Die niederenergetische Resonanz liegt unterhalb der niedrigsten $2s^2$ -Doppelanregungszustandes des Heliums (57.82 eV), die andere Resonanz zwischen dieser und der zweit niedrigsten $2s2p\ ^3P$ -Doppelanregungszustand des Heliums (58.34 eV). Die beobachteten Resonanzen wurden von Fano und Cooper [Fan65b] als $2s^22p$ - und $2s2p^2\ ^2D$ -Dreifachanregungszustände des negativen Heliumions interpretiert. Diese Resonanzen sind die ersten im Experiment beobachteten Dreifachanregungen eines Dreielektronensystems. Sie wurden in verschiedenen Experimenten bestätigt und theoretisch untersucht (siehe Übersichtsartikel [Sch73]).

Bemerkenswerterweise sieht das gemessene He^+ -Ionenausbeute-Spektrum in Abb. 30 ähnlich dem e -Transmissionsspektrum [Qué71]. Daraus folgt, daß zumindest die $2s^22p$ -Resonanz hauptsäch-

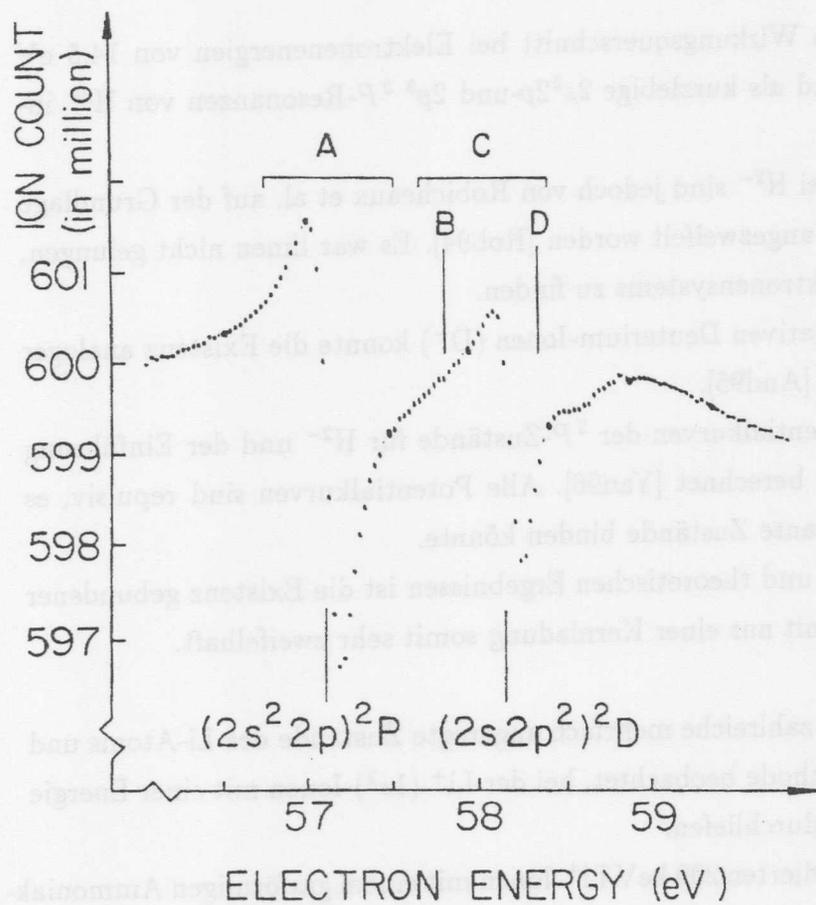
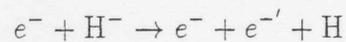


Abbildung 30: He⁺-Ionenausbeute in der Transmissionsspektrum niederenergetischer Elektronen [Qué71]. Die Struktur A: $2s^2 2p^2 P$, B: $2s^2 1S$, C: $2s 2p^2 2D$ und D: $2s 2p^2 3P$.

lich über einen direkten Doppel-Augerprozeß zu $\text{He}^+ (1s)$ zerfällt, denn nach oben Gesagtem kann sie nicht in Kanäle zerfallen, bei denen das He doppelt angeregt verbleibt, während einfach angeregtes Helium ($1snl$) energetisch nicht zu $\text{He}^+ (1s)$ zerfallen kann.

Die Elektronen-Abstreifreaktion (*detachment*) des negativen Wasserstoffions H^- wurde untersucht [Wal70,Pea73]. Der Prozeß wird durch folgende Reaktionsgleichung beschrieben:



Es wurden Resonanzstrukturen im Wirkungsquerschnitt bei Elektronenenergien von 14.5 eV und 17.2 eV beobachtet [Pea73] und als kurzlebige $2s^22p$ - und $2p^3 \ ^2P$ -Resonanzen von H^{2-} interpretiert.

Die Existenz solcher Resonanzen bei H^{2-} sind jedoch von Robicheaux et al. auf der Grundlage detaillierter R-Matrix-Rechnungen angezweifelt worden [Rob94]. Es war ihnen nicht gelungen, gebundene Zustände dieses Dreielektronensystems zu finden.

Bei ähnlichen Experimenten an negativen Deuterium-Ionen (D^-) konnte die Existenz analoger Resonanzen nicht bestätigt werden [And95].

Kürzlich haben Yang et al. die Potentialkurven der 2P -Zustände für H^{2-} und der Einführung von hypersphärischen Koordinaten berechnet [Yan96]. Alle Potentialkurven sind repulsiv, es gibt keinen Potentialtopf, der resonante Zustände binden könnte.

Nach den neuesten experimentellen und theoretischen Ergebnissen ist die Existenz gebundener Zustände für Dreielektronensysteme mit nur einer Kernladung somit sehr zweifelhaft.

M. Rødbro et al. [Rød79] haben zahlreiche mehrfach angeregte Zustände des Li-Atoms und Li^+ -Ions mithilfe der *Beam-Foil*-Methode beobachtet, bei der $\text{Li}^+ (1s^2)$ -Ionen mit einer Energie von 300 keV eine Kohlenstoff-Folie durchliefen.

In einem Ionen-Stoßexperiment kollidierten 200 keV Li^+ -Ionen mit einem gasförmigen Ammoniak-Target (NH_3) [Rød79]. Anregungen durch Ionenstöße werden nicht von Dipol-Auswahlregeln beschränkt, so daß optisch nicht erreichbare Zustände bevölkert werden.

Die aus dem Augerzerfall der verschiedenen mehrfach angeregten Zustände resultierenden Elektronen wurden mit hoher Auflösung ($\frac{\Delta E}{E} = 10^{-3}$) nachgewiesen. Der geringe Beobachtungswinkel bezüglich des einlaufenden Ionenstrahls verringerte die Dopplerverbreiterung durch das Geschwindigkeitsprofil der Ionen.

Die meisten beobachteten Augerlinien konnten auf den Zerfall der Doppelanregungen $\text{Li}^{+**} (2lnl')$ und $\text{Li}^{**} (1snln'l' \ n, n' \geq 2)$ mit Hilfe bekannter Energieniveauschemata zurückgeführt werden, nicht jedoch eine Reihe hochenergetischer Auger-Linien zwischen 75 eV und 82 eV. Rødbro et al. haben vermutet, daß diese Linien durch Zerfälle von $2s^22p$, $2s2p^2 \ ^4P$, 2D , 2P , 2S und $2p^3 \ ^4S$, 2D , 2P -Dreifachanregungen in die $1snl + \epsilon p$ ($n \geq 2$)-Kontinuumskanäle hervorgerufen werden.

Chung konnte die Dreifachanregungszustände, die Ausgangszustände der von Rødbro et al. beobachteten resonanten Augerlinien waren, theoretisch bestimmen, indem er die Resonanzenergie der elf niedrigsten Dreifachanregungszustände mit $^2P^o$, $^4P^e$, $^2D^e$, $^2S^e$, $^2P^e$ und $^2D^o$ -Symmetrie mit Hilfe der Sattelpunktmethode berechnete [Chu82b].

Die von Chung berechneten Energielagen sind in guter Übereinstimmung mit dem Experiment. In einer verbesserten Rechnung unter Berücksichtigung der Verzweigungsverhältnisse beim Zerfall der Resonanzen in die verschiedenen Auger-Kanäle bestimmten Chung et al. erneut die Energielagen und partiellen Linienbreiten der Dreifachanregungen [Chu95] und konnten so die Übereinstimmung mit dem Experiment noch verbessern.

Neben der Augeremission wurde weiterhin die optische Emission des dreifach angeregten $2p^3\ ^4S$ -Zustandes von Li und Be^+ bestimmt [Age84, Man89] und theoretisch untersucht [Chu79]. Wegen der Erhaltung der Parität und des Gesamtspins S in LS -Kopplung ist der Quartett-Zustand gegen Autoionisation metastabil. Er zerfällt hauptsächlich durch einen Fluoreszenzübergang zu $1s2p^2\ ^4P$. Der $1s2p^2\ ^4P$ -Endzustand ist gegen Autoionisation und auch gegen strahlenden Zerfall $2p \rightarrow 1s$ wegen der Spinerhaltung metastabil und hat somit eine sehr lange Lebensdauer.

Die gemessene Wellenlänge $\lambda = 145.016 \pm 0.006\ \text{\AA}$ und Lebensdauer des $2p^3\ ^4S$ -Zustandes $\tau = 13.5 \pm 1.5\ \text{ps}$ dieser Fluoreszenzlinie sind in sehr guter Übereinstimmung mit dem berechneten Ergebnis von $145.019\ \text{\AA}$ und $12.9\ \text{ps}$ [Man89].

Nach der Rechnung von Chung ist die Resonanzenergie des $1s2p^2\ ^4P$ -Endzustands $60.7737\ \text{eV}$ [Chu84]. Daraus ergibt sich eine Resonanzenergie des metastabilen dreifach angeregten $2p^3\ ^4S$ -Zustands von $146.234 \pm 0.004\ \text{eV}$ sowie eine sehr kleine Linienbreite von $49 \pm 5.3\ \mu\text{eV}$.

Der Elektronenstoß-Ionisationsquerschnitt des zu He isoelektronischen $\text{Li}^+(1s^2)$ -Ions wurde von Müller et al. mit sehr guter Statistik gemessen [Mül89]. Die Autoren haben sowohl den direkten kontinuierlichen Ionisationsquerschnitt (3 Mb) als auch den schwach resonant verstärkten Ionisationsquerschnitt (3 kb) im Bereich $130\ \text{eV} - 160\ \text{eV}$ Anregungsenergie beobachtet. Die drei möglichen Ionisationsprozesse können wie folgt beschrieben werden:

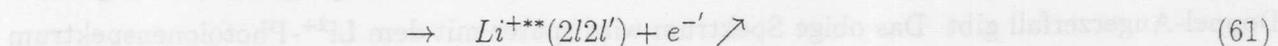


Abb. 31 zeigt das Elektronenstoß-Spektrum, wobei der Untergrund aus der direkten Ionisation abgezogen wurde, um die kleinen Resonanzstrukturen hervorzuheben.

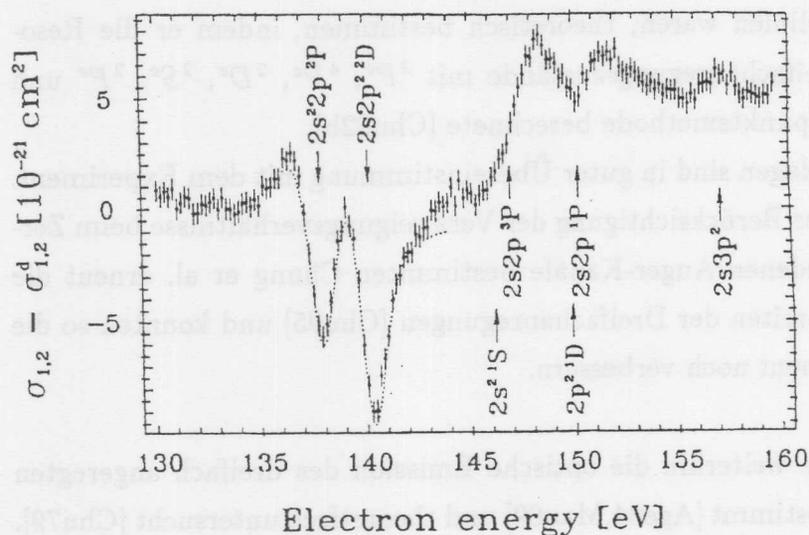


Abbildung 31: Ionisationsquerschnitt von Li^+ nach Elektronstoßanregung [Mül89]. Der Untergrund aus der direkten Ionisation ($\sigma_{1,2}^d$) wurde vom gesamten Ionisation ($\sigma_{1,2}$) abgezogen.

Die Resonanzstrukturen oberhalb 146 eV Anregungsenergie werden von der Reaktion (61) hervorgerufen, wobei zwei Elektronen aus der K-Schale in die L-Schale angeregt werden und durch nachfolgende Autoionisation zerfallen.

Die zwei Resonanzen unterhalb von 146 eV lassen sich durch den Resonanzprozeß (62) erklären, wobei zusätzlich zur obigen Doppelanregung ein einlaufendes Elektron eingefangen wird. Analog zum Helium (siehe S. 80) zerfallen diese dreifach angeregten Zustände in einem Doppel-Augerprozess, was wiederum zum selben Endzustand wie die direkte Ionisation führt. Diese kurzlebigen Resonanzen werden den dreifach angeregten $2s^2 2p$ - und $2s2p^2$ 2D -Zuständen des Lithiumatoms zugeordnet.

Da die Energieniveaus beider Zustände unterhalb der Li^+ -Doppelanregungen liegen, handelt es sich beim Zerfall um einen Ein-Stufen-Prozeß, bei dem ein L-Elektron in die K-Schale übergeht und die anderen beiden L-Elektronen gleichzeitig auslaufen, wiederum analog zum Helium.

Die Resonanzen der Dreifachanregungen in Abb. 31 zeigen asymmetrische Fanoprofile ähnlich wie beim Elektroneneinfang des He^{1-} (siehe Abb. 30). Das deutet an, daß es eine starke Interferenz zwischen der direkten Ionisation und der resonanten Anregung mit nachfolgendem Doppel-Augerzerfall gibt. Das obige Spektrum wird später mit dem Li^{2+} -Photoionenspektrum verglichen.

Die meisten der oben erwähnten Experimente zur Untersuchung der Dreifachanregungen eines Dreielektronensystems sind Stoßexperimente mit bzw. an Elektronen, Ionen und Molekülen. Bei derartigen Stoßreaktionen sind Multipol-Anregungen möglich, was zu komplizierten Spek-

tren führen kann, welche die Konfigurationen aller möglichen Symmetrien wiedergeben. Daher sind Photoabsorptionsmessungen sehr attraktiv, obgleich die Dipolübergangswahrscheinlichkeit niedrig ist, wenn zwei oder drei Elektronen gleichzeitig angeregt werden sollen. Photoabsorptionsspektren geben nur die Zustände wieder, die vom Anfangszustand aus durch Dipolübergänge erreichbar sind. Mit hoher Auflösung und genauer Kalibration der Photonenenergie kann deshalb die Vielzahl überlappender Resonanzen sehr viel genauer bestimmt und zuverlässiger zugeordnet werden als bei Stoßexperimenten.

Die Fortschritte hinsichtlich der Lichtquellen, Detektoren und anderer experimentellen Techniken haben geholfen, das Zählratenproblem zu überwinden.

Kürzlich wurden die ersten Photoionisationsexperimente der Dreifachanregungen des Lithiumatoms unter Benutzung der Dual-Laser-Plasma Technik durchgeführt [Kie94]. Ein Nd-Yag Laser bestrahlte Wolfram-Metall und erzeugte ein Plasma, das als Vakuum-Ultraviolett-Lichtquelle genutzt wurde. Ein weiterer, zeitlich synchronisierter blitzlichtgepumpter Farbstofflaser bestrahlte Li-Metall, um eine Dampfsäule hoher Dichte zu erzeugen. Neben der neutralen Spezies sind im Dampf auch Li-Ionen enthalten. Durch die Veränderung des Zeitabstands der beiden synchronisierten Laserpulse wurden die Photoabsorptionsspektren der Doppelanregungen sowohl des $\text{Li}(1s^2 2s) \rightarrow \text{Li}^{**}(1s n l n' l')$ Atoms als auch $\text{Li}^+(1s^2) \rightarrow \text{Li}^{+**}(n l n' l', n, n' \geq 2)$ der Ions gemessen. Weiterhin wurde bei diesen Experimenten erstmals das Photoabsorptionsspektrum in der Nähe des dreifach angeregten $2s^2 2p$ -Zustands gemessen.

In dieser Arbeit werden die zahlreichen $^2P^o$ -Dreifachanregungen des Lithiums mit Hilfe der Photoionenausbeute unter Benutzung einer Synchrotronstrahlungsquelle untersucht. Unsere Messungen [Kie95] fanden fast gleichzeitig mit denen von Azuma et al. [Azu95] statt. In der Folge wurden auch partielle Wirkungsquerschnitte der dreifach angeregten Zustände mit Photoelektronenspektroskopie an der ALS (Advance Light Source) gemessen [Cub96, Die96, 97a, 97b, 97c].

Im nächsten Abschnitt wird das hier gemessene Photoabsorptionsspektrum der $^2P^o$ -Dreifachanregungen ausführlich diskutiert und mit den Ergebnissen der Elektronenspektroskopie verglichen.

4.2.2 Die ${}^2P^o$ -Dreifachanregungen des Lithium-Atoms

Abb. 32 zeigt die in dieser Arbeit gemessene Li^+ -Photoionenausbeute im Bereich der $1s^2 2s^2 S \rightarrow nln'l'n''l'' (n, n', n'' \geq 2)$ 2P -Dreifachanregungen, die durch einen Dipolübergang unter Absorption eines Photons aus dem Grundzustand des Lithiumatoms erreicht werden können. Im Spektrum sind die deutlich erkennbaren resonanten Strukturen mit großen Buchstaben A–P bezeichnet. Die Bereiche zwischen den bezeichneten Resonanzen wurden ebenfalls gemessen. Es konnten jedoch keine resonanten Strukturen beobachtet werden. Da die Statistik in diesen Bereich aufgrund der kürzeren Meßdauer schlecht ist, wurde das stark varierende Untergrundsignal durch eine Linie ersetzt. Nach dem Energieniveauschema von Lithium in Abb. 1 liegen die doppelt angeregten Zustände von Li^+ in dem Dreifachanregungsbereich. Über dem Spektrum sind einige gemessene $2l2l'$ -Ionisationsschwellen (siehe. Tab. 12) als vertikale Striche markiert und bezeichnet [Rød79, Kie94 und Die97b].

Im gemessenen Spektrum in Abb. 32 gibt es zwei deutliche Resonanzen A und G. In der Nähe von der deutlichen Resonanz G bei 152.5 eV tritt eine Gruppe von kleinen Resonanzen auf. Im Energiebereich ab 160 eV befinden sich die kleinen Resonanzen um Resonanz M. Im Gegensatz zu den Spektren der Doppelanregungen des Heliums und Lithiums (siehe Abb. 11 und Abb. 18) sind im gemessenen Spektrum der Dreifachanregungen in Abb. 32 keine deutlichen Rydbergserien, die gegen die $2l2l'$ -Schwellen konvergieren, zu erkennen.

Schon die Interpretation der überlappenden Serien der höheren doppelt angeregten He- und Li-Zustände (siehe [Dom95] und Abb. 29) bereitet Schwierigkeiten und für die dreifach angeregten Zustände von Li kommt ein weiteres Elektron hinzu. Die Vielzahl der daraus resultierenden Zustände und die Wechselwirkungen mit den Ionisationskontinua macht die Zuordnung der Strukturen im Spektrum sehr schwierig.

Die dreifach angeregten Lithiumatome können, wie man Abb. 1 entnehmen kann, in Li^+ - und Li^{2+} -Ionen zerfallen. Im Rahmen dieser Arbeit wurden die Spektren der Li^+ - und Li^{2+} -Photoionenausbeute für die Dreifachanregungen gemessen. 1994 wurde nur die Li^+ -Photoionenausbeute im normalen Auflösungsmodus (C-Wert=2.25) und mit besserer Statistik über einen großen Energiebereich (130 eV – 170 eV) gemessen (siehe S. 36 im Experiment-Kapitel). Auf der Grundlage dieser Daten wurden 1995 in ausgewählten Spektralbereichen sowohl die Li^+ - als auch die Li^{2+} -Photoionenausbeute im hohen Auflösungsmodus (C-Wert=4.5) erneut gemessen. Die Spektren wurden durch eine Kalibration anhand der Gleichung (55) für C-Werte=2.25 und der Gleichung (57) für C-Werte=4.5 bestimmt. Die in dieser Arbeit angegebenen Resonanzenergien sind niedriger als die in unsere Veröffentlichung in [Kie94], wo die gemessenen Spektren sowohl mit Hilfe der Linien von Edelgasen wie in dieser Arbeit als auch mit Hilfe der Linie der $2s^2 2p$ -Resonanz des Lithiumatoms geeicht sind, die bei 142.32 eV in [Kie94] gemessen wurde. Im folgenden wird das Spektrum in drei Bereiche aufgeteilt und diskutiert. Der erste Teil enthält

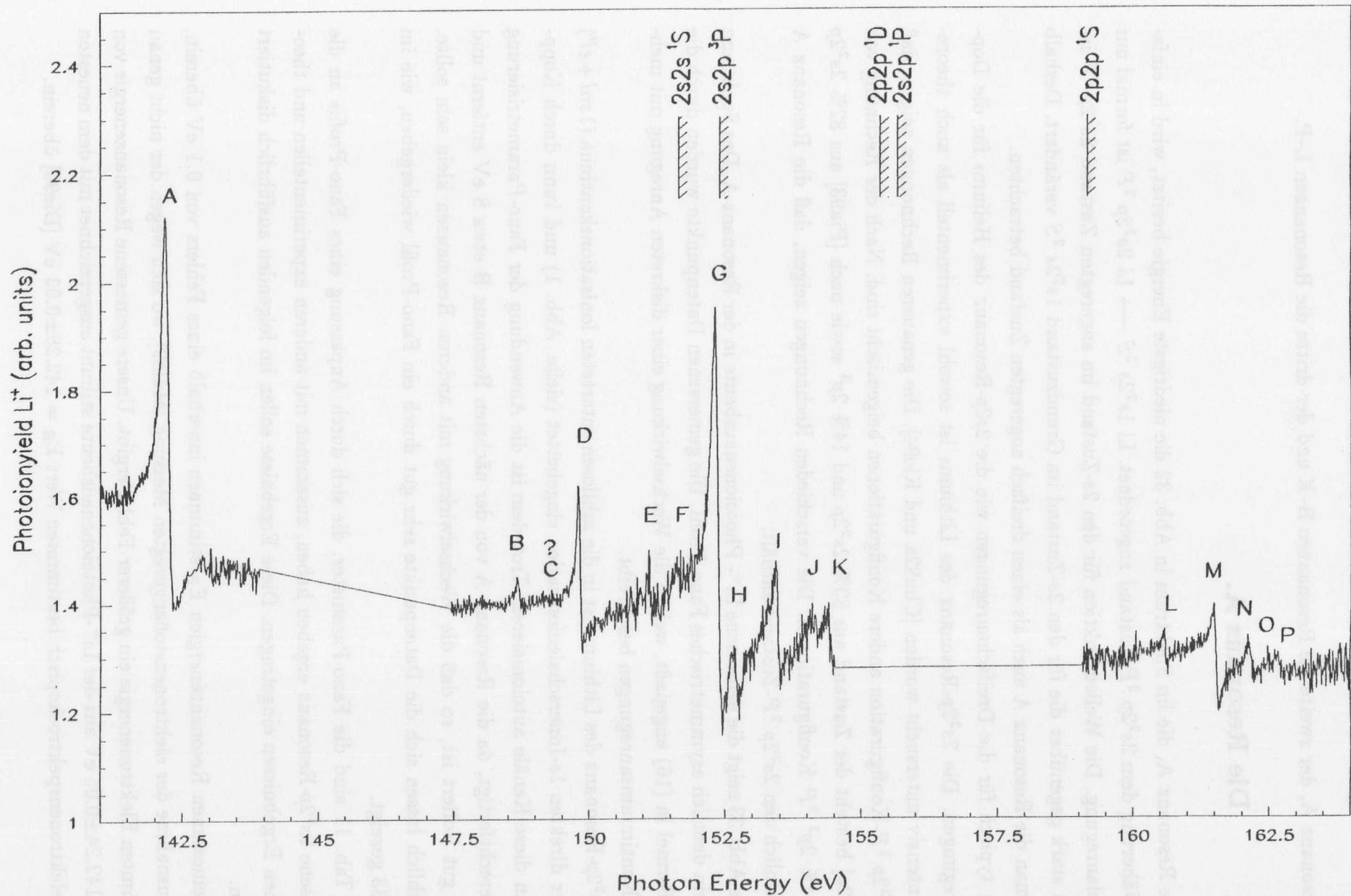


Abbildung 32: Li^+ -Photoionenausbeute im Bereich der $1s^22s\ ^2S \rightarrow 2snln'l'\ ^2P$ -Dreifachanregungen.

die Resonanz A, der zweite die Resonanzen B–K und der dritte die Resonanzen L–P.

Die Resonanz A.

Die Resonanz A, die im Spektrum in Abb. 32 die niedrigste Energie besitzt, wird in einfacher Näherung dem $2s^22p\ ^2P$ -Zustand zugeordnet. $\text{Li } 1s^22s\ ^2S \rightarrow \text{Li } 2s^22p\ ^2P$ ist formal nur Doppelanregung. Die Wellenfunktion für den $2s$ -Zustand im angeregten Zustand $2s^22p\ ^2P$ ist jedoch stark gegenüber die für den $2s$ -Zustand im Grundzustand $1s^22s\ ^2S$ verändert. Deshalb kann man die Resonanz A auch als einen dreifach angeregten Zustand betrachten.

Sie ist typisch für die Dreifachanregungen wie die $2s2p$ -Resonanz des Heliums für die Doppelanregungen. Die $2s^22p$ -Resonanz des Lithiums ist sowohl experimentell als auch theoretisch intensiv untersucht worden [Chu82a und Kie94]. Die genaueren Rechnungen zeigen, daß die $2s^22p\ ^2P$ -Konfiguration andere Konfigurationen beigemischt sind. Nach der Rechnung von [Chu82a] besteht der Zustand aus 83% $2s^22p$ und 14% $2p^3$ sowie nach [Pia93] aus 82% $2s^22p$ und 14% $2p^3\ ^2P$ Konfigurationen. Die verschiedenen Rechnungen zeigen, daß die Resonanz A vornehmlich den $2s^22p\ ^2P$ -Zustand enthält.

Die Abb. 33 zeigt die gemessene Li^+ -Photoionenausbeute in der Resonanz A. Das Spektrum zeigt ein deutlich asymmetrisches Fano-Profil. Die gemessenen Datenpunkte wurden durch die Fano-Formel in (16) angepaßt, welche die Wechselwirkung einer diskreten Anregung mit mehreren Kontinuumsanregungen beschreibt.

Die $2s^22p$ -Resonanz des Lithiums ist in die zahllosen entarteten Ionisationskontinua ($1snl + \epsilon l'$) aus der direkten $1s$ -Innerschalenionisation eingebettet (siehe. Abb. 1) und kann durch Kopplung an diese Kanäle autoionisieren. Trotzdem ist die Anwendung der Fano-Parametrisierung hier gerechtfertigt, da die Resonanz A von der nächsten Resonanz B etwa 8 eV entfernt und damit gut isoliert ist, so daß die Wechselwirkung mit anderen Resonanzen klein sein sollte. Tatsächlich lassen sich die Datenpunkte sehr gut durch ein Fano-Profil wiedergeben, wie im Abb. 33 gezeigt.

In Tab. 11 sind die Fano-Parameter, die sich durch Anpassung eines Fano-Profiles an die gemessene $2s^22p$ -Resonanz ergeben haben, zusammen mit anderen experimentellen und theoretischen Ergebnissen eingetragen. Diese Ergebnisse sollen im folgenden ausführlich diskutiert werden.

Alle gemessenen Resonanzenergien E_R stimmen innerhalb eines Fehlers von 0.1 eV überein, mit Ausnahme der elektronenstoßangeregten Messung [Mül89], wo sich wegen der nicht genau bestimmten Elektronenergie ein größerer Fehler ergibt. Unsere gemessene Resonanzenergie von $E_R = 142.24 \pm 0.05$ eV aus der Li^+ -Photoionenausbeute stimmt ausgezeichnet mit dem neuesten photoelektronenspektroskopisch bestimmten Wert $E_R = 142.28 \pm 0.03$ eV [Die96] überein.

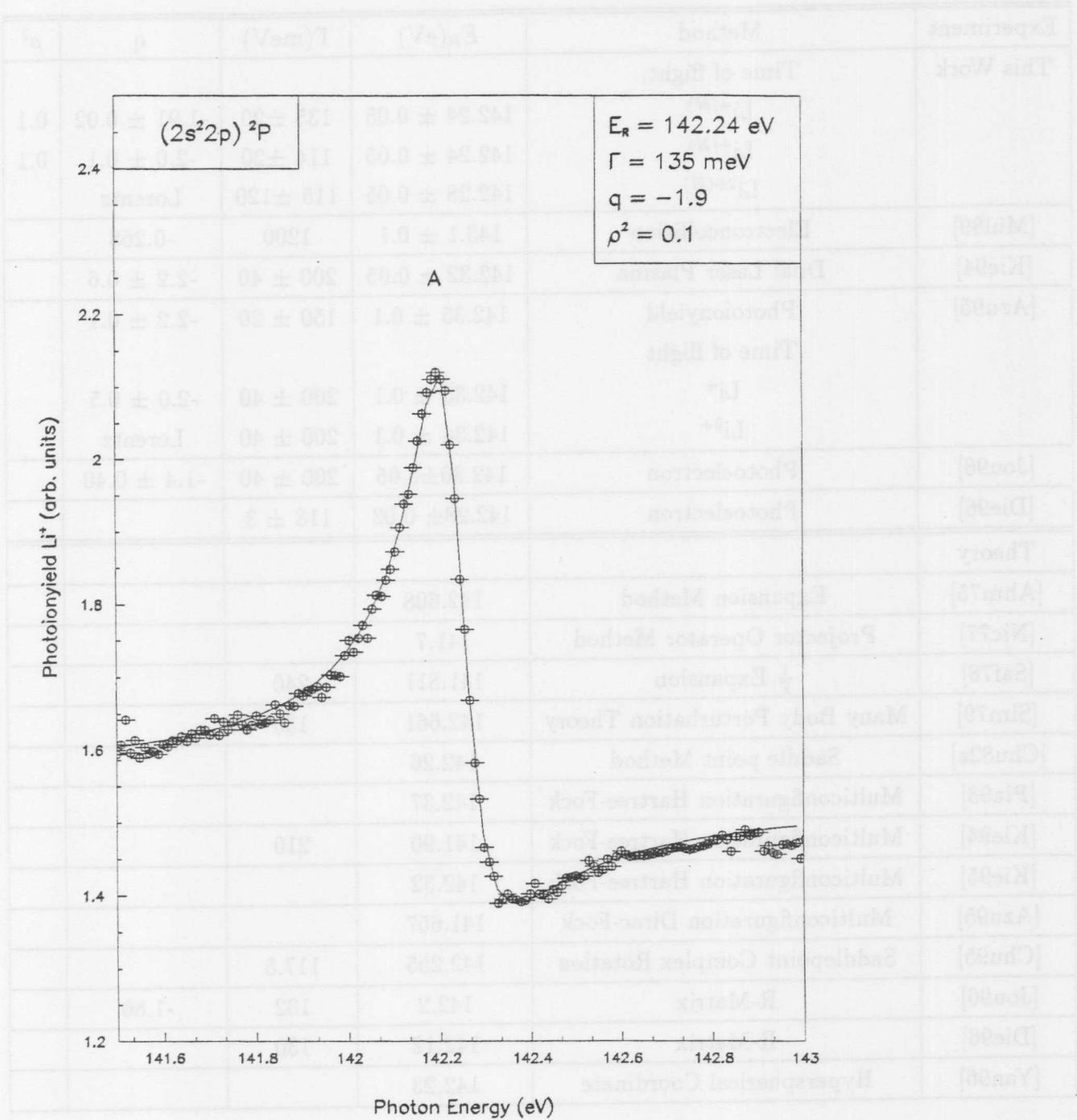


Abbildung 33: $2s^2 2p$ -Resonanz. Die durchgezogene Linie ist ein Fano-Profil, das an die Daten angepaßt wurde.

Experiment	Method	$E_R(\text{eV})$	$\Gamma(\text{meV})$	q	ρ^2
This Work	Time of flight.				
	$\text{Li}^{+(N)}$	142.24 ± 0.05	135 ± 20	-1.91 ± 0.02	0.1
	$\text{Li}^{+(H)}$	142.24 ± 0.05	114 ± 20	-2.0 ± 0.1	0.1
	$\text{Li}^{2+(H)}$	142.28 ± 0.05	115 ± 120	Lorentz	
[Mül89]	Electroncollision	143.1 ± 0.1	1200	-0.268	
[Kie94]	Dual Laser Plasma	142.32 ± 0.05	200 ± 40	-2.2 ± 0.6	
[Azu95]	Photoionyield	142.35 ± 0.1	150 ± 20	-2.2 ± 0.1	
	Time of flight				
	Li^+	142.33 ± 0.1	200 ± 40	-2.0 ± 0.5	
	Li^{2+}	142.34 ± 0.1	200 ± 40	Lorentz	
[Jou96]	Photoelectron	142.30 ± 0.05	200 ± 40	-1.4 ± 0.40	
[Die96]	Photoelectron	142.28 ± 0.03	118 ± 3		
Theory					
[Ahm75]	Expansion Method	142.608			
[Nic77]	Projector Operator Method	141.7			
[Saf78]	$\frac{1}{2}$ Expansion	141.811	240		
[Sim79]	Many Body Perturbation Theory	142.661	130		
[Chu82a]	Saddle point Method	142.26			
[Pia93]	Multiconfiguration Hartree-Fock	142.37			
[Kie94]	Multiconfiguration Hartree-Fock	141.90	210		
[Kie95]	Multiconfiguration Hartree-Fock	142.32			
[Azu95]	Multiconfiguration Dirac-Fock	141.657			
[Chu95]	Saddlepoint Complex Rotation	142.255	117.5		
[Jou96]	R-Matrix	142.2	132	-1.86	
[Die96]	R-Matrix	142.12	130		
[Yan96]	Hyperspherical Coordinate	142.23			

Tabelle 11: Ergebnisse der Messungen und der Rechnungen zur $2s^22p$ -Resonanz. (N) : das Meßergebnis im Normalauflösungsmodus des Monochromators, (H) : das Meßergebnis im Hochauflösungsmodus.

Im Gegensatz dazu weichen die Ergebnisse zahlreicher Rechnungen bis zu etwa 1 eV voneinander ab. Der Wert von [Chu95] 142.255 eV ist in exzellenter Übereinstimmung mit unserem Ergebnis, und auch die R-Matrix-Rechnung [Jou96] stimmt gut mit dem Experiment überein. Die Linienbreite haben wir zweimal unabhängig voneinander bestimmt und erhalten 114 ± 20 meV (135 ± 20 meV) im hohen (normalen) Auflösungsmodus. Trotz des mit der schlechteren Meßstatistik verbundenen größeren Fehlers ist die Linienbreite bei besserer Auflösung deutlich kleiner. Beide Linienbreiten der Li^+ - und Li^{2+} -Photoionenausbeute sind innerhalb eines Meßstatistikfehlers in Übereinstimmung. Tab. 11 zeigt, daß die anderen experimentellen Ergebnisse für die Linienbreite Γ durchweg größer sind als die gemessenen Werte dieser Arbeit und Diehl et al. [Die96]. Der Wert von 114 meV in dieser Arbeit scheint bisher das kleinste gemessene Ergebnis zu sein. Die Schwankungen bei den übrigen experimentellen Werten werden durch die schlechtere Auflösung hervorgerufen, die bis auf [Die96] unterhalb von 1500 lag.

Diehl et al. [Die96] haben die partiellen Photoionisationsquerschnitte des $1s2p \ ^1P + \epsilon s$ - und des $1s2s \ ^3S + \epsilon p$ -Kanals in der Nähe $2s^22p$ Resonanz mit einer Bandbreite von 19 meV gemessen. Die Linienprofile sind in beiden Kanälen stark verschieden. Im $1s2s \ ^3S + \epsilon p$ -Kanal erscheint ein stark asymmetrisches Fanoprofil, während sich im $1s2p \ ^1P + \epsilon s$ -Kanal näherungsweise ein Lorentzprofil ergibt. Der Grund dafür liegt darin, daß die direkte Stärke im ersten Fall der $1s^{-1}$ -Hauptlinie groß ist, im zweiten Fall ($2s$ - $2p$ shake-up) jedoch klein. Diehl et al. erhalten durch Entfaltung der experimentellen Bandbreite von 19 meV die gleiche partielle Linienbreite von 122 ± 5 meV in beiden Kanälen. Die Summe aller gemessenen partiellen Wirkungsquerschnitte führt zu einer Linienbreite von $\Gamma = 118 \pm 3$ meV, die sehr gut mit unserem bei hoher Auflösung bestimmten Wert von 114 ± 20 meV übereinstimmt.

Die theoretischen Ergebnisse für Linienbreiten variieren zwischen 240 meV und 117.5 meV. Der niedrigste Wert von 117.5 meV, welcher mit dem Experiment von dieser Arbeit und [Die96] sehr gut übereinstimmt, stammt wiederum von Chung [Chu95].

Der Fano-Asymmetrieparameter q für die Li^+ -Ionenausbeute wurde zu -1.91 ± 0.01 (-2.0 ± 0.1) im normalen (hohen) Auflösungsmodus bestimmt. Die beiden Werte sind innerhalb des statistischen Fehlers von 0.1 gleich. Der q -Parameter für Li^+ ist tatsächlich gleich wie dem für den totalen Absorptionswirkungsquerschnitt, da das in den $2s^22p$ -Zustand angeregte Atom fast vollständig in einfach geladene Endzustände zerfällt, wie unten gezeigt wird. Der von uns ermittelte q -Parameter ist innerhalb des experimentellen Fehlers in Übereinstimmung mit den Ergebnissen der anderen Photoabsorptionsexperimente. Das Elektronenstoßexperiment [Mül89] weicht von den Photoabsorptionsexperimenten ab, da in diesem Fall die Endzustände überwiegend zweifach geladen sind (siehe S. 83).

Der einzige innerhalb der R-Matrix Methode berechnete Wert ergibt -1.86 für den q -Parameter, in guter Übereinstimmung mit unserem Ergebnis.

Im folgenden soll das Li^{2+} -Ionenspektrum diskutiert und mit dem Li^+ -Spektrum verglichen werden.

Abb. 34 stellt die beiden zu unterschiedlich geladenen Endzuständen gehörenden Spektren im Bereich der Resonanz A, gemessen im hohen Auflösungsmodus, gegenüber. Trotz der schlechten Meßstatistik für die Li^{2+} -Ausbeute können wir die interessante Beobachtung machen, daß der Zerfall der Resonanz A zu sehr unterschiedlichen Linienprofilen in der Li^+ - und Li^{2+} -Ausbeute führt. Die Li^+ -Ausbeute zeigt ein asymmetrisches Fanoprofil, das praktisch identisch mit dem Photoabsorptionsspektrum von [Kie94] ist, wie schon oben erwähnt worden ist. Die Li^{2+} -Photoionenausbeute zeigt jedoch ein Lorentzprofil, in Übereinstimmung mit einer weiteren Photoionenausbeute-Messung [Azu95]. Der Grund ist darin zu sehen, daß die Stärke für die direkte Doppelphotoionisation klein ist. Im Gegensatz dazu zeigt die Li^{2+} -Ausbeute bei dem in Abschn. 4.2.1 erläuterten Elektronenstoßexperiment [Mül89] ein asymmetrisches Fano-Profil (siehe. Abb. 31). In diesem Experiment wurde der Li^{2+} -Endzustand nicht durch Doppel- sondern durch Einfachionisation von Li^+ -Ionen erreicht. Dieser Prozeß hat eine große Stärke, daher wird der q-Parameter klein (-0.268).

Das Maximum der Li^{2+} -Photoionenausbeute liegt nicht bei dem Maximum des Li^+ , sondern bei dessen Resonanzenergie E_R . Eine Fitanalyse zeigt jedoch, daß die Resonanzposition der Li^{2+} -Photoionenausbeute im Vergleich zu Li^+ um etwa 0.04 eV in dieser Arbeit und um 0.01 eV in [Azu95] verschoben ist. Die Verschiebungen liegen in den experimentellen Fehlergrenzen. Die Linienbreiten der Li^+ - und Li^{2+} -Photoionenausbeute sind innerhalb der experimentellen Fehlergrenzen gleich. Diese Anhaltspunkte bestätigen die allgemeine Regel, daß die spektrale Form der verschiedenen Zerfallsprozesse der Resonanz verschieden sein kann, jedoch ihre Linienbreite und Resonanzposition übereinstimmen sollten. Abb. 34 zeigt, daß das Maximum der Li^{2+} -Photoionenausbeute für den $2s^2 2p$ -Zustand nur 3% des Maximums der Li^+ -Photoionenausbeute beträgt. Die Wahrscheinlichkeit für einen Doppelautoionisationsprozeß des $2s^2 2p$ -Zustandes ist im Vergleich mit dem Einfachautoionisationsprozeß sehr gering. Dies kann sich auf zwei Weisen durch das Energieschema von Li, Li^+ und Li^{2+} erklären lassen, das in Abb. 35 gezeigt ist.

Erstens existiert unterhalb der $2s^2 2p$ -Resonanz A auf Abb. 35 neben zahllosen Einfachionisa-

Zuordnung	$2s^2 \ ^1S$	$2s2p \ ^3P$	$2p^2 \ ^1D$	$2s2p \ ^1P$	$2p^2 \ ^1S$	$2l3l' \ ^1P$
Energie(eV)	151.66 ^D	152.41 ^D	155.35 ^R	155.67 ^K	159.16 ^R	164.63 ^D

Tabelle 12: Gemessene Energien einiger $2l2l'$ -Schwellen, gegen die die $2l2l'nl'' \ ^2P$ -Rydbergserien konvergieren. ^D: [Die97b], ^R: [Rød79], ^K: [Kie94].

tionszuständen $\text{Li}^{+*}(1snl, n \geq 1)$ nur ein Doppelionisationszustand $\text{Li}^{2+}(1s)$, den das bei $2s^2 2p$

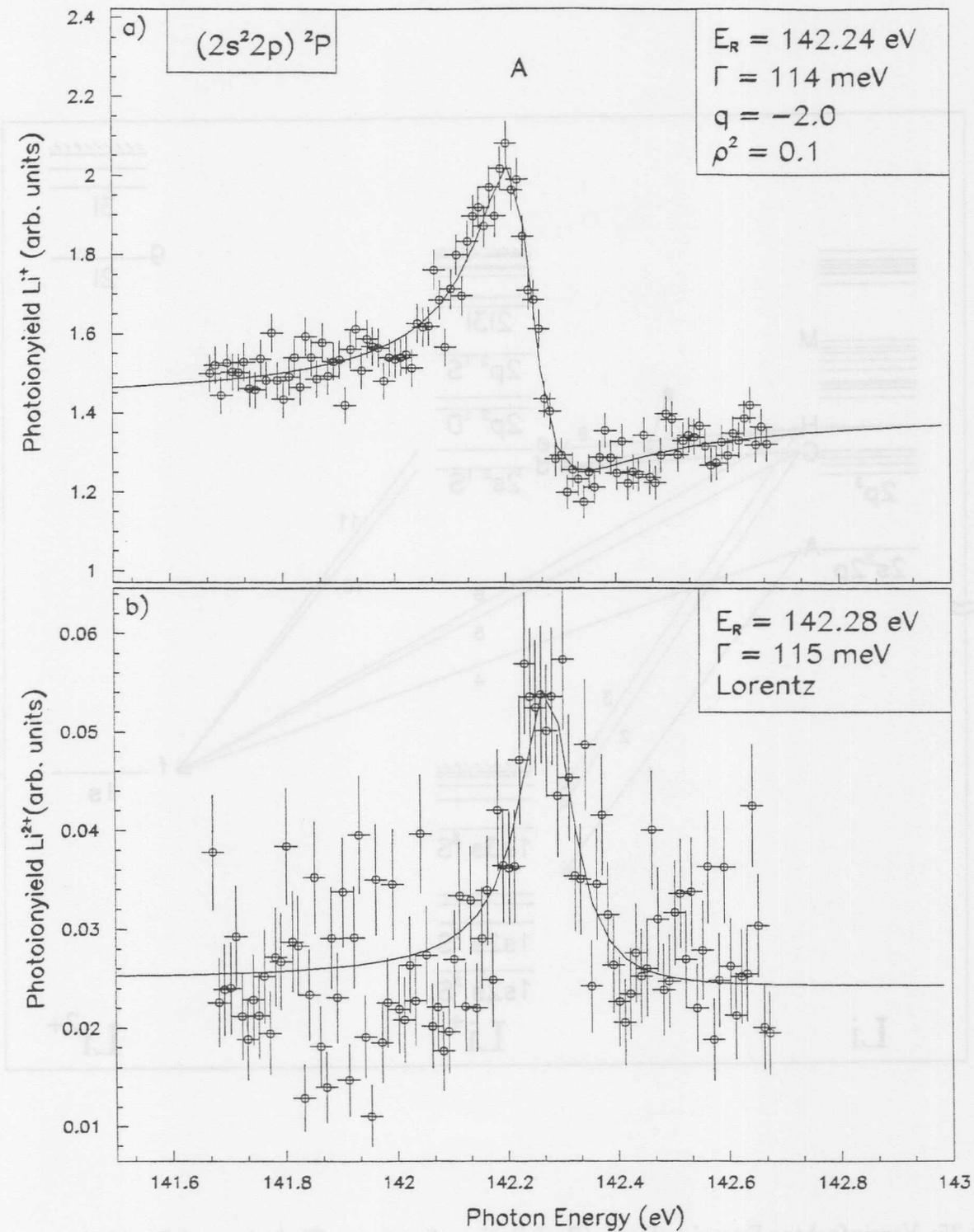


Abbildung 34: Li^+ - (oben) und Li^{2+} -Photoionenspektrum (unten) im Bereich der $2s^2 2p$ -Resonanz. Die durchgezogene Linien stellen die Anpassung eines Fano- (oben) bzw. eines Lorentz-Profiles (unten) an die Daten dar.

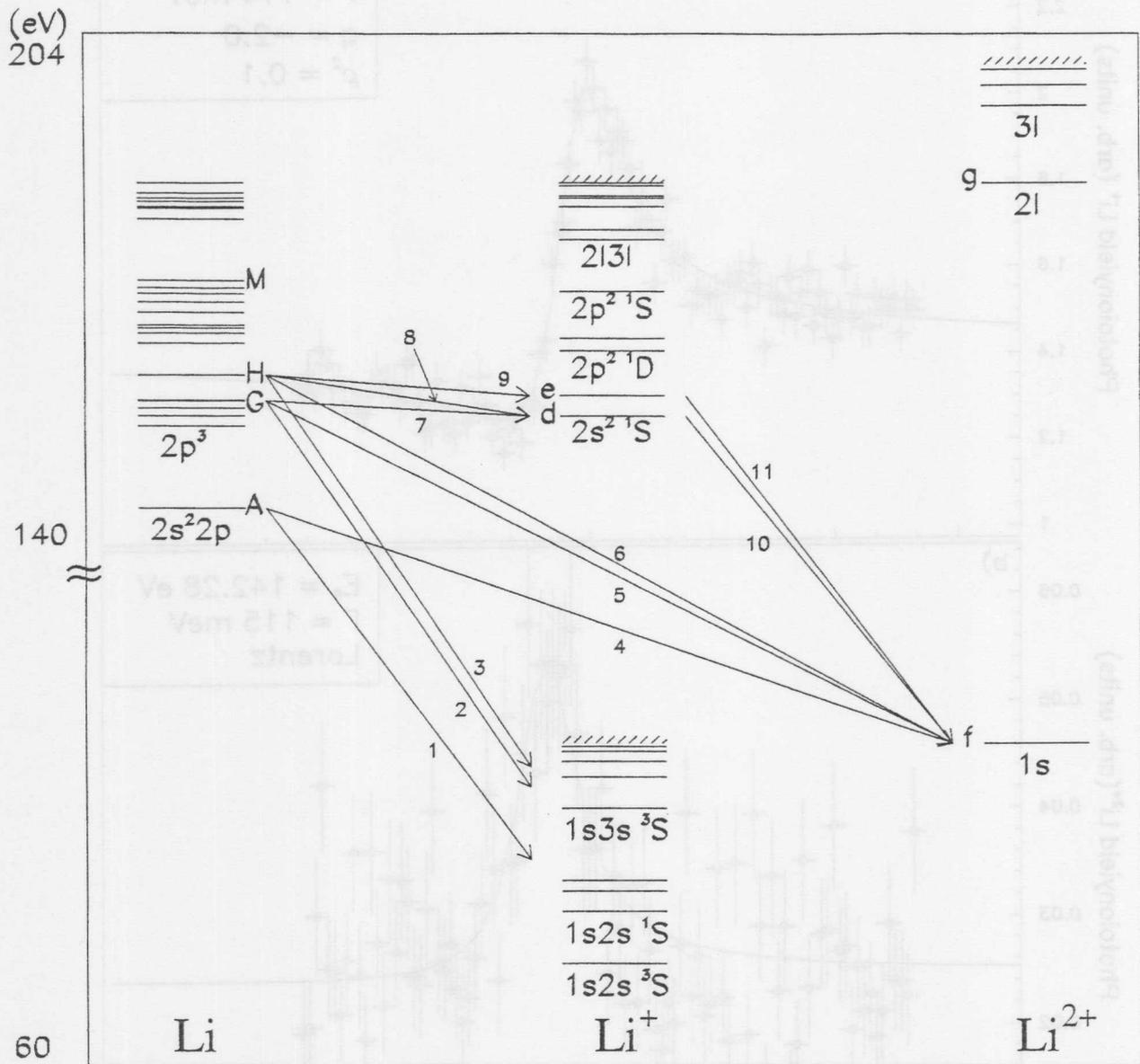


Abbildung 35: Vereinfachtes Energieschema (Zerfallsübergänge) zur Einfach- und Zweifachautoionisation der ²P-Dreifachanregungen des Lithiumatoms. Die Pfeile zeigen die Übergänge vom Atom zum Ion an und berücksichtigen nicht die Energie der Kontinuumselektronen. Die Werte für die Energien der 2l/2l'-Zustände in Li⁺ stammen aus Tab. 12. Die Energieniveaus in Li²⁺ stammen aus [Kel87].

angeregte Lithiumatom durch den Autoionisationsprozeß erreichen kann.

Zweitens gibt es keinen doppelt angeregten Zustand $\text{Li}^{+**}(2lnl', n \geq 2)$ als Zwischenzustand, der energetisch zwischen der $2s^2 2p$ -Resonanz und dem ersten Doppelionisationszustand ($1s$) f liegt, so daß es nur einen direkten Zerfallskanal 4 in Abb. 35 gibt.

Die zwei oben erwähnten Anhaltspunkte lassen Rückschlüsse darauf zu, daß der $2s^2 2p$ -Zustand durch eine Ein-Stufen-Doppelautoionisation entlang dem Zerfallskanal 4 in Abb. 35 in das $1s + \epsilon l + \epsilon' l'$ -Zweifachionisationskontinuum zerfallen kann. Zwei Elektronen in der L-Schale des $2s^2 2p$ -Zustandes laufen gleichzeitig bei dem Doppelautoionisationsprozeß aus und ein Elektron aus der L-Schale füllt das Loch in der K-Schale auf. Die $2s^2 2p$ -Resonanz, die durch Elektronstoß mit Li^+ [Mül89] und Elektronstoß mit Helium [Qué71] erzeugt wird, zerfällt auch durch die Ein-Stufen-Doppelautoionisation in den Zweifachionisationszustand (siehe in Abschn. 4.2.1). Der energetisch niedrigste dreifach angeregte $2s^2 2p$ -Zustand im Dreielektronensystem [Sch73] autoionisiert zweifach durch den Ein-Stufen-Zerfall.

Der Überlappungsparameter ρ^2 für die Li^+ -Photoionenausbeute wurde in dieser Arbeit als 0.1 gemessen. $\rho^2 q^2$, das die relative Stärke der Resonanz gegenüber dem kontinuierlichen Hintergrund darstellt, beträgt 0.4.

Die Resonanzen B—K.

Abb. 36 zeigt die Vergrößerung des Energiebereiches von 148 eV bis 156 eV aus Abb. 33. In diesem Energiebereich erwartet man die Resonanzen, die zu den verschiedenen Rydbergserien des $2l2l'nl''$ -Typs gehören. Die Rydbergserien konvergieren gegen eine der sechs Ionisationsschwellen $2s^2 \ ^1S$, $2s2p \ ^3P$, $2p^2 \ ^3P$, $2p^2 \ ^1D$, $2s2p \ ^1P$ und $2p^2 \ ^1S$, welche doppelt angeregten Zuständen von Li^+ entsprechen.

In Abb. 36 sieht man eine Resonanz B geringer Intensität bei $E_R = 148.68 \pm 0.05$ eV. Die Resonanz gehört zu dem Zustand mit dem zweit niedrigsten Eigenwert der Sekulargleichung für die $^2P^o$ -Zustände [Chu82a]. Der Zustand besteht aus 21% $2s^2 2p$ und 74% $2p^3$ nach der Rechnung von [Chu82a], 14.8% $2s^2 2p$ und 78.5% $2p^3$ nach [Pia93]. Nach allen drei Rechnungen ist die $2p^3$ -Konfiguration der dominierende Anteil für die energetisch zweit niedrigste Resonanz. Demnach kann die Resonanz B dem $2p^3 \ ^2P$ -Zustand zugeordnet werden. Dieser Zustand ist eine erste echte $^2P^o$ -Dreifachanregung, die dadurch erreicht wird, daß ein Lithiumatom im Grundzustand ein Photon absorbiert, und sich so die Drehimpulsquantenzahlen der drei Elektronen verändern. Die drei Elektronen dieser Resonanz haben sowohl die gleiche Hauptquantenzahl $n = 2$ als auch die gleiche Drehimpulsquantenzahl $l = 1$. Die Resonanz B hat eine sehr geringe Intensität, obwohl sie die erste Resonanz der $2p^2 np$ -Rydbergserien ist. Die Elektronen des Li-Grundzustandes haben die gleichen Drehimpuls-

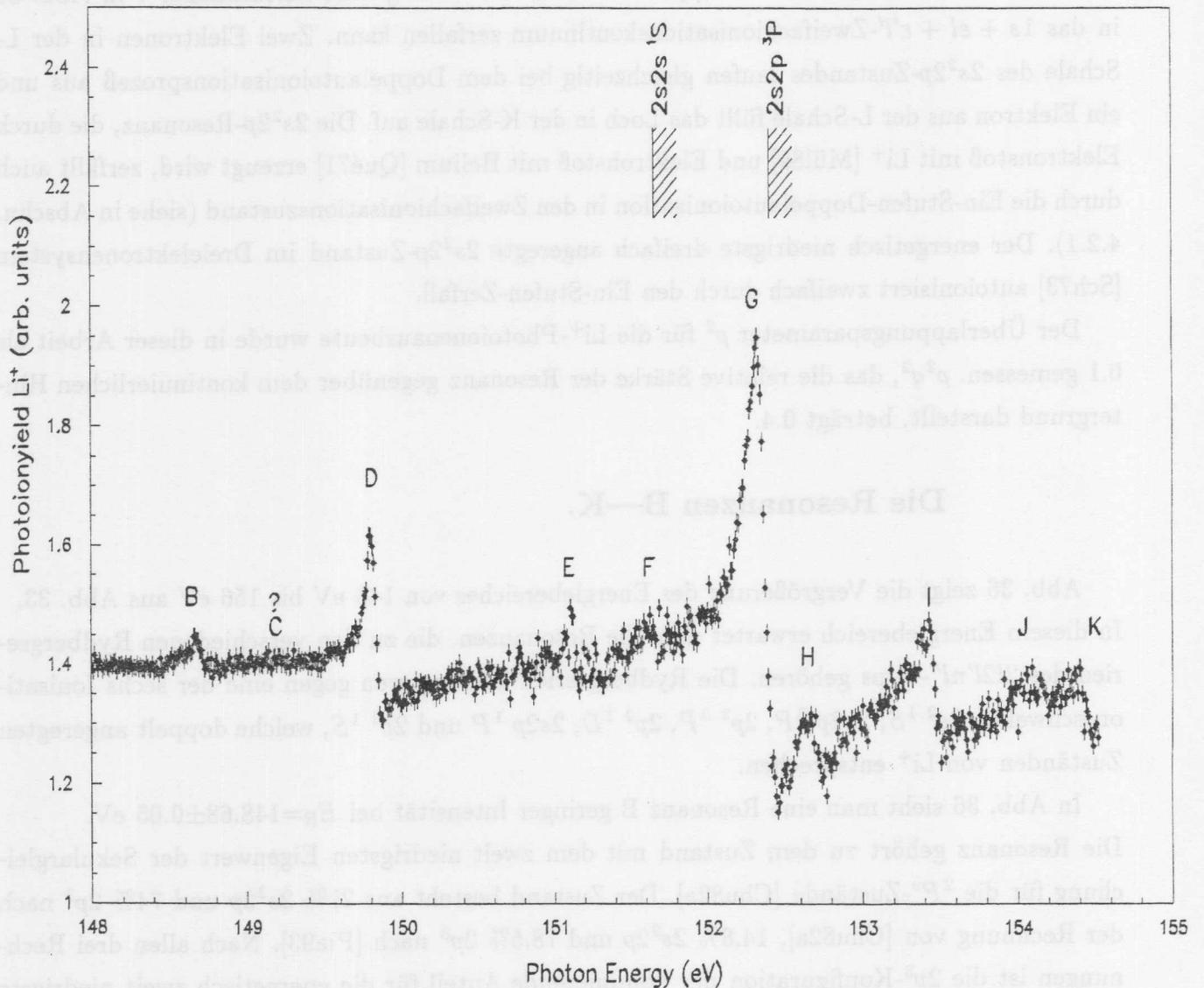


Abbildung 36: Li^+ -Photoionenausbeute der $2s2lnl' \ ^2P$ -Resonanzen des dreifach angeregten Lithiumatoms zwischen 148 eV und 155 eV.

quantenzahlen $l = 0$, obgleich ihre Hauptquantenzahlen unterschiedlich sind. Bei einer Ein-Photonenabsorption von Lithium im Grundzustand, kann in Dipolnäherung nur ein Elektron seine Drehimpulsquantenzahl um eine Einheit ändern. Der Übergang vom $1s^2 2s$ -Grundzustand in den $2s^2 2p$ -Zustand, der einen geringer Anteil an Resonanz B hat [Chu82a, Pia93], ist erlaubt, was zu der geringen Oszillatorstärke führt.

Experiment	Method	E_R (eV)	Γ (meV)
This Work	Time of flight. $Li^{+(N)}$	148.68 ± 0.05	67 ± 20
[Azu95]	Photoionyield	148.7 ± 0.1	
Theory			
[Ahm75]	Expansion Method	149.972	
[Chu82a]	Saddle Point Method	148.972	
[Pia93]	Multiconfiguration Hartree-Fock	149.31	
[Kie95]	Multiconfiguration Hartree-Fock	148.93	
[Azu95]	Multiconfiguration Dirac-Fock	148.439	
[Chu95]	Saddlepoint Complex Rotation	148.729	52.14
[Yan96]	Hyperspherical Coordinate	148.60	

Tabelle 13: Die Ergebnisse der Messungen und Rechnungen der $2p^3 \ ^2P$ -Resonanz. (N) : das Meßergebnis im Normalauflösungsmodus des Monochromators.

Tab. 13 zeigt die Ergebnisse verschiedener Rechnungen und Messungen für die Resonanzenergie und Linienbreite des $2p^3$ -Zustandes. Das Meßergebnis dieser Arbeit für die Resonanzenergie $E_R=148.68\pm 0.05$ eV und das für die $E_R=148.7$ eV von [Azu95] weisen eine gute Übereinstimmung auf. Wie schon bei den Ergebnissen zur $2s^2 2p$ -Resonanz festgestellt, stimmt auch hier Chungs theoretisches Ergebnis von allen Rechnungen am besten überein. Unsere gemessene Linienbreite $\Gamma=67$ meV ist etwas größer als die berechnete $\Gamma=52.14$ meV von [Chu95].

Zwischen den Resonanzen B und D in Abb. 36 sollte es nach den Rechnungen von [Kie95] und [Xia96] eine Resonanz und nach [Azu95] zwei Resonanzen geben. Die berechneten Partialenwirkungsquerschnitte des $1s3l + \epsilon l'$ -Kanals [Jou96] zeigen eine sehr kleine Intensitätsmodulation dazwischen, so daß sie wegen der Begrenzung der Meßstatistik trotz der guten Trennung der Resonanzen B und D nicht beobachtet werden kann. Die theoretisch vorausgesagte Resonanz kann dem $2s^2 3p$ -Zustand zugeordnet werden [Kie95].

Die Resonanz D in Abb. 36 stellt ein deutliches und asymmetrisches Fanprofil dar, das durch $E_R=149.83$ eV, $\Gamma=66$ meV, $q=-1.85$ und $\rho^2=0.05$ parametrisiert werden kann. Die Resonanz D hat eine kleinere Linienbreite und Intensität als die Resonanz A, ihre Formparameter q aber sind nahezu gleich. Deshalb ist es möglich beide Resonanzen den Zustände einer Rydbergserie zuzuordnen, die gegen eine bestimmte $2l/2l'$ -Schwelle konvergiert. Da die erste Resonanz A dem $2s^2 2p^2 P$ -Zustand zugeordnet worden ist, konvergieren diese Rydbergserie gegen die $2s^2 1S$ -Schwelle. Für die Bestätigung dieser Zuordnung können die Quantendefekte für die Hauptquantenzahlen $n=2$ und 3 der zwei Resonanzen A und D mit Hilfe von gemessenen Ionisationsschwellen ($I(2s^2 1S)=151.59$ eV im Tab. 12) berechnet werden. Die Quantendefektanalyse ist gut anwendbar, weil die Resonanzen A und D von den anderen Resonanzen gut getrennt und somit ungestört sind. Die Quantendefektanalyse ergibt 0.79 für die Resonanz A ($n=2$) und 0.22 für die Resonanz D ($n=3$). Wenn die Resonanzen zur selben Rydbergserie gehören, dann sollten ihre Quantendefekte fast gleich sein. Da das nicht der Fall ist, kann man schließen, daß sie verschiedenen Rydbergserien angehören. In dieser Arbeit wird nach Rechnung in [Kie95] die resonante Struktur D dem $(2s2p^3 P)3s$ -Zustand zugeordnet, dessen Rydbergserie gegen die energetisch zweit niedrigste $2s2p^3 P$ -Ionisationsschwelle konvergiert.

Undeutliche und kleine Strukturen E und F wurden zwischen den Resonanzen D und G beobachtet (siehe Abb. 36). Nach den berechneten partiellen Wirkungsquerschnitten der $1s2l + \epsilon l'$ - und $1s3l + \epsilon l'$ -Kanäle [Jou96] treten zahlreiche sowohl komplizierte als auch sehr kleine und schmale Strukturen sehr nahe an dem Maximum der Resonanz G auf. Es sollten auf der Strecke des Spektrums zwischen D und G in Abb. 36 zahlreiche Resonanzen der Rydbergserien geben, die gegen die $2s^2$ - und $2s2p^3 P$ - Schwelle konvergieren, die in der Nahe von Resonanz G liegen. Und möglicherweise finden sich dort auch erste Resonanzen, deren Rydbergserie gegen eine andere Schwelle konvergieren. Die erwarteten nächsten Nachfolger der großen Resonanzen A und D (d.h die $2s^2 3p$ - und $(2s2p^3 P)4s$ -Resonanzen) konnten sowohl im gemessenen als auch im berechneten Spektrum nicht zugeordnet werden. Die Resonanzen zwischen D und G in Abb. 36 werden von den dicht beieinanderliegenden Resonanzen der anderen Rydbergserien so stark gestört, daß man sie meistens nicht mehr klassifiziert. Die resonante Struktur E wird nach Rechnung dem $(2s2p^3 P)4s$ -Zustand zugeordnet [Kie95].

Die resonante Struktur G in Abb. 36 zeigt eine breite und große Resonanz wie die Resonanz A in Abb. 32. Gemäß der Abschätzung aus [Azu95] beträgt das Verhältnis der Intensitäten der Resonanz G zu der $2s^2 2p$ -Resonanz A in Abb. 32 $8:7$.

Dies ist in Übereinstimmung mit unseren experimentellen Ergebnissen, wenn die gesamte Photoionenausbeute ($Li^+ + Li^{2+}$) berücksichtigt wird. Die größte resonante Struktur G soll die erste Resonanz einer Rydbergserie sein, die gegen eine der Ionisationsschwellen $2s2p^1 P$, $2p^2 1D$ und $2p^2 3P$ konvergiert. Die resonante Struktur wurde in [Kie95] und [Jou96] vorläufig dem

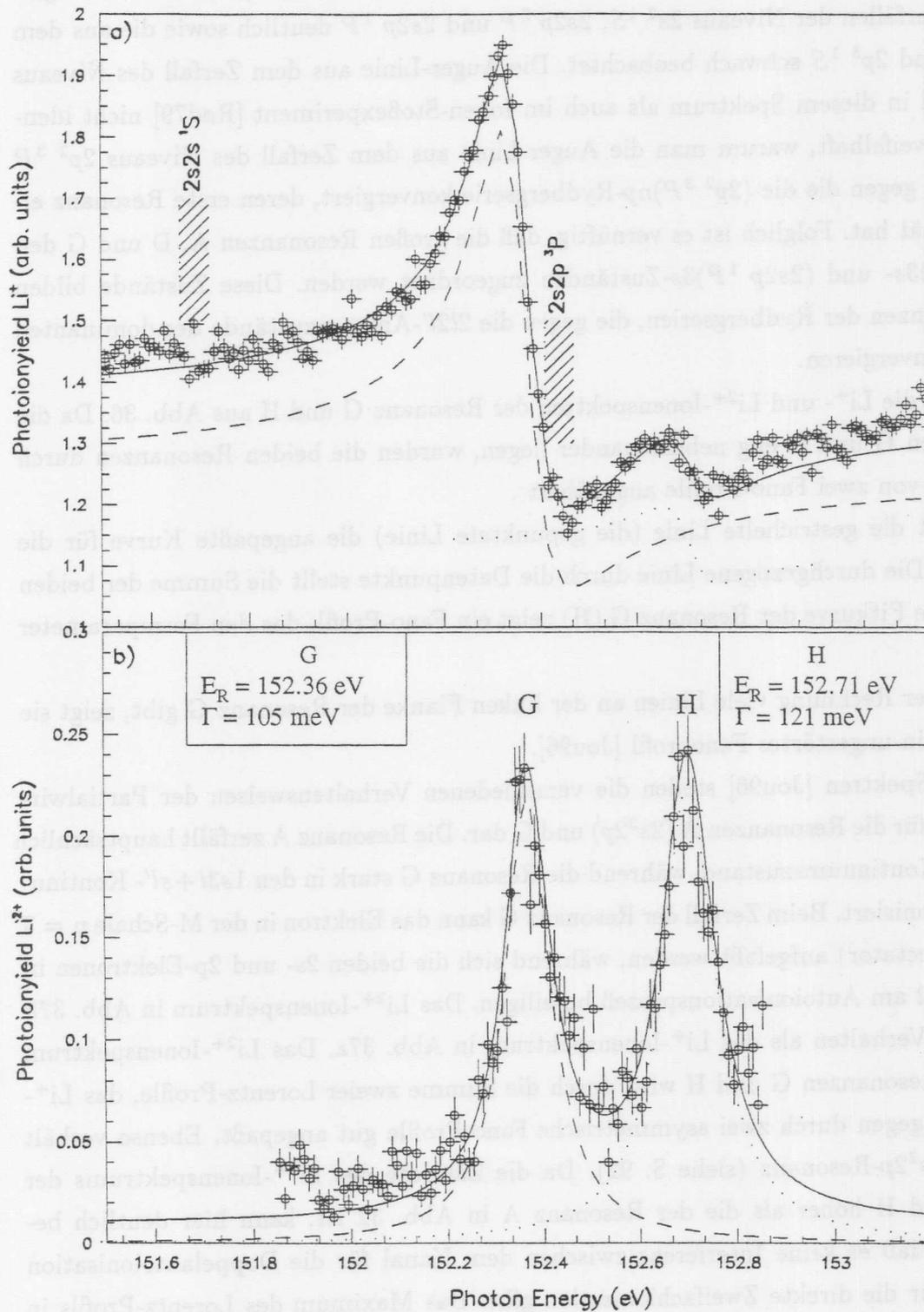


Abbildung 37: Li^+ - (oben) und Li^{2+} -Photoionenausbeute (unten) im Bereich der Resonanzen G und H in Abb. 36. Die durchgezogenen Linien zeigen die Summe der beiden Fitkurven, die an die Daten der Resonanzen G und H angepaßt wurden.

$(2p^2\ ^3P)3p$ -Zustand zugeordnet. Die Zuordnung ist problematisch aufgrund der folgenden experimentellen Ergebnisse. Im gemessenen Photoelektronenspektrum [Die97b] wurden die Auger-Linien aus den Zerfällen der Niveaus $2s^2\ ^1S$, $2s2p\ ^3P$ und $2s2p\ ^1P$ deutlich sowie die aus dem Niveau $2p^2\ ^1D$ und $2p^3\ ^1S$ schwach beobachtet. Die Auger-Linie aus dem Zerfall des Niveaus $2p^2\ ^3P$ ist sowohl in diesem Spektrum als auch im Ionen-Stoßexperiment [Rød79] nicht identifiziert. Es ist zweifelhaft, warum man die Auger-Linie aus dem Zerfall des Niveaus $2p^2\ ^3P$ nicht beobachtet, gegen die die $(2p^2\ ^3P)np$ -Rydbergserie konvergiert, deren erste Resonanz eine starke Intensität hat. Folglich ist es vernünftig, daß die großen Resonanzen A, D und G den $2s^22p$ -, $(2s2p\ ^3P)3s$ - und $(2s2p\ ^1P)3s$ -Zuständen zugeordnet werden. Diese Zustände bilden die ersten Resonanzen der Rydbergserien, die gegen die $2l2l'$ -Anfangszustände des dominanten Auger-Zerfalls konvergieren.

Die Abb. 37 zeigt die Li^+ - und Li^{2+} -Ionenspektren der Resonanz G und H aus Abb. 36. Da die beiden Resonanzen G und H eng nebeneinander liegen, wurden die beiden Resonanzen durch die Überlagerung von zwei Fano-Profilen angenähert.

In Abb. 37a zeigt die gestrichelte Linie (die gepunktete Linie) die angepaßte Kurve für die Resonanz G (H). Die durchgezogene Linie durch die Datenpunkte stellt die Summe der beiden Fitkurven dar. Die Fitkurve der Resonanz G (H) zeigt ein Fano-Profil, das den Formparameter -1.7 (-1.1) hat.

Obwohl es nach der Rechnung viele Linien an der linken Flanke der Resonanz G gibt, zeigt sie wie Resonanz A ein ungestörtes Fano-Profil [Jou96].

Die berechneten Spektren [Jou96] stellen die verschiedenen Verhaltensweisen der Partialwirkungsquerschnitte für die Resonanzen A ($2s^22p$) und G dar. Die Resonanz A zerfällt hauptsächlich in den $1s2l + \epsilon l'$ -Kontinuumszustand, während die Resonanz G stark in den $1s3l + \epsilon l'$ -Kontinuumszustand autoionisiert. Beim Zerfall der Resonanz G kann das Elektron in der M-Schale $n = 3$ als Zuschauer (spectator) aufgefaßt werden, während sich die beiden $2s$ - und $2p$ -Elektronen in der L-Schale $n = 2$ am Autoionisationsprozeß beteiligen. Das Li^{2+} -Ionenspektrum in Abb. 37b zeigt ein anderes Verhalten als das Li^+ -Ionenspektrum in Abb. 37a. Das Li^{2+} -Ionenspektrum in der Nähe der Resonanzen G und H wird durch die Summe zweier Lorentz-Profile, das Li^+ -Ionenspektrum dagegen durch zwei asymmetrische Fano-Profile gut angepaßt. Ebenso verhält es sich mit der $2s^22p$ -Resonanz (siehe S. 92). Da die Zählrate des Li^{2+} -Ionenspektrums der Resonanzen G und H höher als die der Resonanz A in Abb. 32 ist, kann hier deutlich beobachtet werden, daß es keine Interferenz zwischen dem Kanal für die Doppelautoionisation und dem Kanal für die direkte Zweifachionisation gibt. Das Maximum des Lorentz-Profils in Li^{2+} ist nicht gleich dem Maximum des Li^+ -Ionenspektrums, sondern gleich dem maximalem Abfall (der Energieresonanz). Es wird hier wieder wie bei der $2s^22p$ -Resonanz bestätigt, daß die Resonanzenergie der verschiedenen Ionenspektren aus einer Resonanz gleich sind, obwohl ihre

Linienformen ganz verschieden sein können.

Das Intensitätsverhältnis der Li^{2+} - zu Li^+ -Ausbeute bei der Resonanz G beträgt 10% und ist dreimal größer als das bei der $2s^2 2p$ -Resonanz A. Diese Zunahme wird im folgenden durch das Energieschema in Abb. 35 erklärt. Als Folge der Doppelautoionisation gehen die Resonanzen A und G in denselben Endzustand der Zweifachionisation über, da es unterhalb beider Resonanzen nur eine Schwelle für die Zweifachionisation f gibt. Eine Ein-Stufen-Doppelautoionisation entlang dem Zerfallskanal 5 für die Resonanz G findet auch wie die entlang dem 4 für die $2s^2 2p$ -Resonanz A statt. Es gibt unterhalb der Resonanz G einen doppelt angeregten Zustand Li^{+**} , der in Abb. 36 als $2s^2 \ ^1S$ -Schwelle gezeigt wird. Die $2s^2 \ ^1S$ -Schwelle kann sich als Zwischenzustand bei dem Zerfallsprozeß der Resonanz G anbieten. Die Resonanz G zerfällt zuerst durch die Einfachautoionisation entlang dem Zerfallsweg 7 in Abb. 35 in den $2s^2 \ ^1S$ -Zustand. Danach zerfällt sie durch den weiteren Augerzerfall des $2s^2 \ ^1S$ -Zwischenzustandes entlang dem Zerfallsweg 10. Sie erreicht schließlich den Endzustand der Li^{2+} -Zweifachionisation ($1s$). Folglich kann die Resonanz G sowohl durch die Ein-Stufen-Doppelautoionisation (wie in der $2s^2 2p$ -Resonanz) als auch durch die Zwei-Stufen-Doppelautoionisation in den $1s + \epsilon' + \epsilon''$ -Zweifachionisationszustand zerfallen. Die Zwei-Stufen-Doppelautoionisation führt dazu, daß dreifach angeregte Li-Atome hauptsächlich in zweifach ionisierte Endzustände übergeht.

Die Li^+ -Ionenausbeute der Resonanz G ist wesentlich größer als die der Resonanz H, wie in Abb. 37a gezeigt. Aber Abb. 37b zeigt, daß die Li^{2+} -Ionenausbeute der Resonanz G gleich der der Resonanz H ist. Die angepaßte Kurve in Abb. 37 zeigt, daß die Li^{2+} -Ionenausbeute der Resonanz H doppelt so groß wie die Li^+ -Ionenausbeute ist (man beachte den Untergrund in Abb. 37a.). Im Vergleich zu den Resonanzen A und G ist es gerade umgekehrt. Das umgekehrte Verhältnis der Intensitäten der Li^+ -, Li^{2+} -Ionenausbeute für die Resonanz H kann auch durch die Existenz der $2s2p \ ^3P$ -Ionisationsschwelle gut erklärt werden.

Gemäß der Rechnung in [Jou96] liegt die $2s2p \ ^3P$ -Ionisationsschwelle 0.278 eV unterhalb der Resonanz G vor. Aber nach den Meßergebnissen in [Rød79 und Die97b] liegt die Position dieser Schwelle nicht unterhalb der Resonanz G sondern sehr dicht oberhalb der Resonanz G, wie in Abb. 37a eingezeichnet.

Also gibt es noch einen Zerfallskanal entlang den Zerfallswegen 9 und 11 in Abb. 35, der über dem $2s2p \ ^3P$ -Zwischenzustand fährt. Die Zwei-Stufen-Augerzerfälle der Resonanz H, die auf den Zwischenzuständen $2s^2 \ ^1S$ und $2s2p \ ^3P$ beruhen, lassen das angeregte Lithiumatom häufiger in den Endzustand der Zweifachionisation (Li^{2+}) zerfallen als in den Endzustände der Einfachionisation (Li^+).

Die Ergebnisse der Ionenausbeute der Resonanzen H und G zeigen, daß eine Ionisationsschwelle unterhalb und nahe einer Resonanz das Verhalten ihres Zerfalls stark beeinflusst.

Das Li^{2+} -Ionenspektrum in Abb. 37b eignet sich für quantitative Aussagen über die Resonanzen

zenergie und die Linienbreite für die Resonanzen G und H besser als das Li^+ -Ionenspektrum in Abb. 37a, da das Li^{2+} -Ionenspektrum aus zwei Lorentz-Profilen besteht.

Die Resonanzenergie der Resonanz G (H) beträgt 152.36 eV (152.71 eV). Die beiden Werte sind innerhalb des experimentellen Fehlers von 0.05 eV in Übereinstimmung mit den Werten 152.32 eV (152.72 eV) von [Azu95]. Aber die von Diehl et al. [Die96] gemessene Resonanzenergie der Resonanzen G und H weichen mit 152.51 eV und 152.90 eV von den Ergebnissen dieser Arbeit ab.

Die Linienbreite für die Resonanz G (H) aus dem Li^{2+} -Ionenspektrum beträgt 105 meV (121 meV). Die Breiten sind fast doppelt so groß wie die der benachbarten Resonanzen B und D. Die beiden Resonanzen G und H liegen dicht oberhalb der $2s^2$ -Schwelle. Sie können in diesen Zwischenzustand leicht schnell zerfallen. Dies senkt ihre Lebensdauer und verbreitert die resonanten Strukturen. Die Linienbreite für die Resonanz H ist etwas größer als die der Resonanz G, was sich wahrscheinlich auch daraus ergibt, daß die $2s2p\ ^3P$ -Ionisationsschwelle zwischen den Resonanzen G und H liegt.

Oberhalb der Resonanz H liegen weitere resonante Strukturen I, J und K in Abb. 36. Deren Linienbreiten sind relativ groß. Der Grund dafür ist, daß unterhalb der Resonanzen verschiedene Ionisationsschwellen existieren, in die die Resonanzen I, J und K ähnlich wie die Resonanzen G und H zerfallen können. Eine physikalisch fundierte Zuordnung der Resonanzen war nicht möglich.

Es ist uns nicht gelungen, zwischen 155 eV und 159 eV weitere Resonanzen der Rydbergserie zu beobachten, die gegen die $2p^2\ ^1S$ -Ionisationsschwelle konvergiert. Azuma et al. haben eine winzige Resonanz bei 157 eV beobachtet [Azu95]. Diehl et al. haben die partiellen Wirkungsquerschnitte für die Photoionisation vom Li-Grundzustand in $2p^2\ ^1D$ - und $2s2p\ ^1P$ -ionische Zustände (Li^{+**}) zwischen 156 eV und 160 eV gemessen und berechnet [Die97c]. Die berechneten und gemessenen partiellen Wirkungsquerschnitte zeigen eine gute Übereinstimmung. Die $(2p^2\ ^1S)np$ -Rydbergserie von $n=4$ bis zu $n=7$ wurde in den gemessenen partiellen Wirkungsquerschnitten deutlich beobachtet. Die Linienprofile der resonanten Strukturen in diese Rydbergserie sind symmetrisch im $2p^2\ ^1D + \epsilon l$ -Kanal und asymmetrischen im $2s2p\ ^1P + \epsilon l$ -Kanal.

Die $(2l3l')nl''$, ($n \geq 3$)-Resonanzen

Schließlich befaße ich mich mit den $(2l3l')nl''$, ($n \geq 3$)-Resonanzen der Dreifachanregung, die oberhalb der letzten $2p^2\ ^1S$ -Schwelle der $(2l2l')nl''$, ($n \geq 2$)-Resonanzen vorkommen. Die Zustände der Resonanzen haben doppelt angeregte Rump fzustände, wobei sich die zwei Rumpfelektronen in der L-Schale $n = 2$ und der M-Schale $n = 3$ befinden. Es gibt mehr Zustände der $2l3l'$ -Konfiguration für die Rump fzustände, gegen die die $(2l3l')nl''\ ^2P$ -Rydbergserien konvergie-

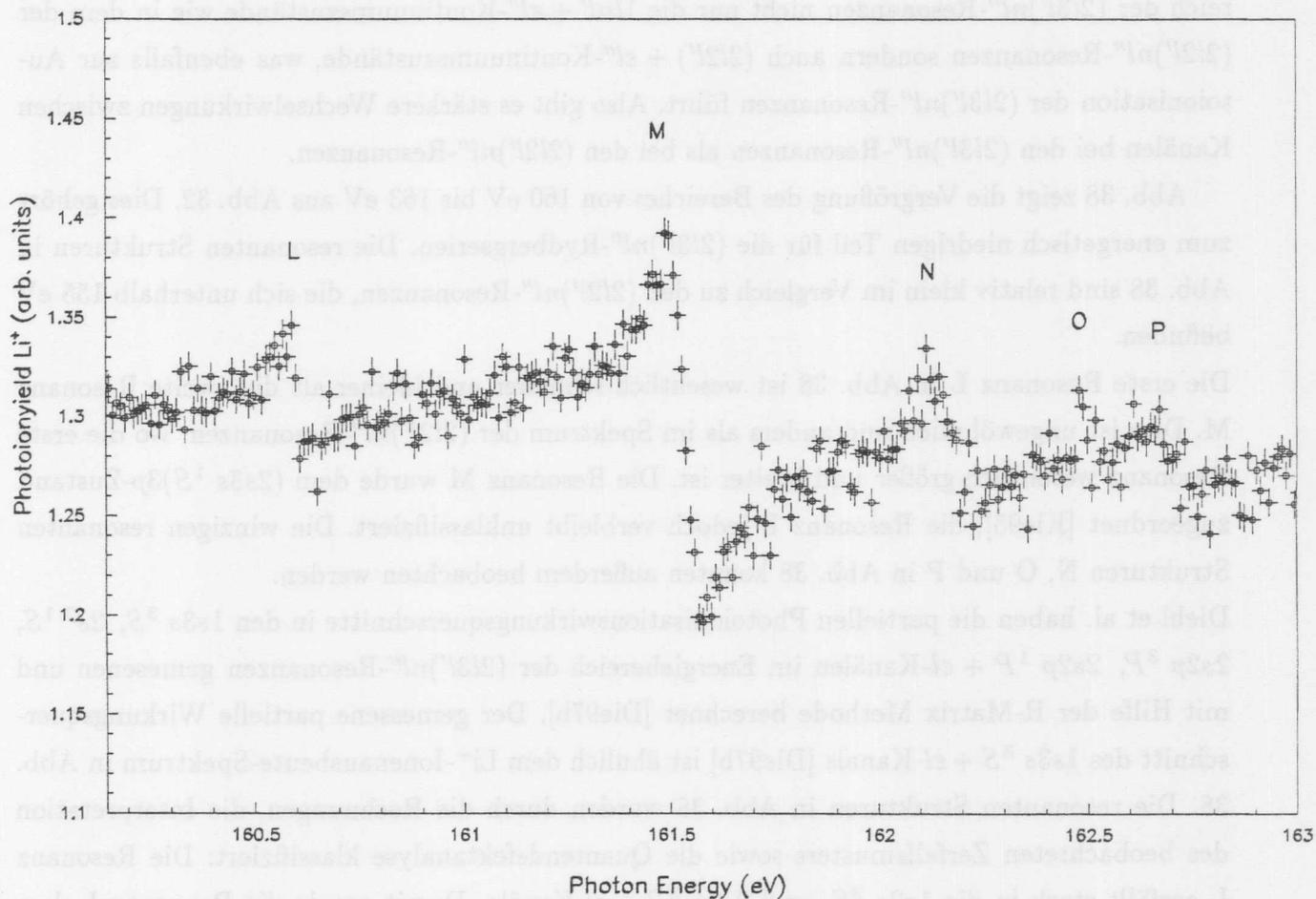


Abbildung 38: Li^+ -Photoionenausbeute aus den $2s2l3l' \ ^2P$ -Resonanzen des dreifach angeregten Lithiumatoms zwischen 160 eV und 163 eV.

ren, als Zustände der $2l2l'$ -Konfiguration für die Rumpfstände der $(2l2l')n'l'^2P$ -Rydbergserien. Deshalb gibt es mehr Rydbergserien der $(2l3l')n'l''^2P$ -Zustände als für $(2l2l')n'l''^2P$. Nach den theoretischen und experimentellen Ergebnissen befinden sich die $2l3l'$ -Ionisationsschwellen in einem relativ kleinen Bereich von knapp 3 eV (zwischen 164.6 eV und 167.5 eV), während die $2l2l'$ -Ionisationsschwellen sich hingegen in einem Energiebereich von 8 eV befinden [Die97b]. Da für die $(2l3l')n'l''^2P$ -Zustände in einem kleineren Bereich mehr Rydbergserien auftauchen als für $(2l2l')n'l''$, überlappen die $(2l3l')n'l''^2P$ -Rydbergserien mehr. Es gibt in dem Energiebereich der $(2l3l')n'l''$ -Resonanzen nicht nur die $1ln'l' + \epsilon l''$ -Kontinuumszustände wie in dem der $(2l2l')n'l''$ -Resonanzen sondern auch $(2l2l') + \epsilon l''$ -Kontinuumszustände, was ebenfalls zur Autoionisation der $(2l3l')n'l''$ -Resonanzen führt. Also gibt es stärkere Wechselwirkungen zwischen Kanälen bei den $(2l3l')n'l''$ -Resonanzen als bei den $(2l2l')n'l''$ -Resonanzen.

Abb. 38 zeigt die Vergrößerung des Bereiches von 160 eV bis 163 eV aus Abb. 32. Dies gehört zum energetisch niedrigen Teil für die $(2l3l')n'l''$ -Rydbergserien. Die resonanten Strukturen in Abb. 38 sind relativ klein im Vergleich zu den $(2l2l')n'l''$ -Resonanzen, die sich unterhalb 155 eV befinden.

Die erste Resonanz L in Abb. 38 ist wesentlich schmaler und kleiner als die zweite Resonanz M. Dies ist ungewöhnlich und anders als im Spektrum der $(2l2l')n'l''$ -Resonanzen, wo die erste Resonanz wesentlich größer und breiter ist. Die Resonanz M wurde dem $(2s3s^1S)3p$ -Zustand zugeordnet [Kie95], die Resonanz L jedoch verbleibt unklassifiziert. Die winzigen resonanten Strukturen N, O und P in Abb. 38 konnten außerdem beobachtet werden.

Diehl et al. haben die partiellen Photoionisationswirkungsquerschnitte in den $1s3s^3S$, $2s^2^1S$, $2s2p^3P$, $2s2p^1P + \epsilon l$ -Kanälen im Energiebereich der $(2l3l')n'l''$ -Resonanzen gemessen und mit Hilfe der R-Matrix Methode berechnet [Die97b]. Der gemessene partielle Wirkungsquerschnitt des $1s3s^3S + \epsilon l$ -Kanals [Die97b] ist ähnlich dem Li^+ -Ionenausbeute-Spektrum in Abb. 38. Die resonanten Strukturen in Abb. 38 wurden durch die Rechnungen, die Interpretation des beobachteten Zerfallsmusters sowie die Quantendefektanalyse klassifiziert: Die Resonanz L zerfällt stark in die $1s2s^3S$ - und $2s2p^3P + \epsilon l$ -Kanäle. Damit wurde die Resonanz L dem $(2s3s^3S)3p$ -Zustand mit dem Quantendefekt 1.08 zugeordnet. Die Resonanz M zerfällt sehr stark in den $2s2p^1P + \epsilon l$ -Kanal, während sie in die $2s2p^3P$ - und $2p2p^1D + \epsilon l$ -Kanäle schwach zerfällt. Somit haben Diehl et al. die Resonanz dem $(2s3p + 3s2p^1P)3s$ - oder $3d$ -Zustand zugeordnet, im Gegensatz zur Zuordnung vom $(2s3s^1S)3p$ in [Kie95]. Die Resonanz N wurde dem $(2s3s^1S)3p$ -Zustand mit Hilfe der R-Matrix-Rechnungen zugeordnet. Mit Hilfe der Quantendefektanalyse wurde die Resonanz P dem $(2s3s^3S)4p$ -Zustand mit dem Quantendefekt 1.06 als zweites Mitglied der $(2s3s^3S)np$ -Rydbergserie zugeordnet. In dieser Arbeit werden die Zuordnungen nach [Die97b] für die resonanten Strukturen in Abb. 38 übernommen.

Die gemessenen Resonanzenergien 160.59 eV, 161.54 eV, 162.12 eV, 162.48 eV und 162.70 für

die Resonanzen L, M, N, O und P in dieser Arbeit stimmen gut mit 160.65 eV, 161.52 eV, 162.17 eV, 162.47 eV und 162.75 eV in [Die97b] überein.

Abb. 39 zeigt das Li^+ - und Li^{2+} -Ionenspektrum der Resonanz M der größten von allen gemessenen $(2l3l')nl''$ -Resonanzen. Die Resonanz M hat ein asymmetrisches Fanoprofil im Li^+ - und ein Lorentz-Profil im Li^{2+} -Ionenspektrum, wie die $(2l2l')nl''$ -Resonanzen A, G und H. Wie für die Resonanz H, ist die Li^{2+} -Ionenausbeute der Resonanz M größer als ihre Li^+ -Ionenausbeute (man beachte auch hier den Untergrund im Li^+ -Ionenausbeute-Spektrum). Nach dem Energieschema in Abb. 35 sind die Zerfallsprozesse für die Resonanz M und für die Resonanz H ähnlich, unterhalb der Resonanz M gibt es Li^{3+} $2l2l'$ -Zustände, die bei ihrem Zerfall als Zwischenzustände in Frage kommen.

Die Linienbreite $\Gamma=85$ meV für die Resonanz M ist nicht verbreitert im Vergleich zu den der Resonanzen G und H, obwohl es noch viele zusätzliche Zerfallskanäle der Zweifachionisation gibt.

Der ρ^2q^2 -Wert im Li^+ -Ionenspektrum, der die relative Zunahme der Resonanzen gegen den kontinuierlichen Hintergrund beschreibt, ist 0.07 und damit über sechsmal kleiner als der 0.4 für die $2s^22p$ -Resonanzen. Dies deutet an, daß man mehr Meßstatistik für die Messung der $(2l3l')nl''$ als für die $(2l2l')nl''$ -Resonanzen braucht.

Die übrigen $(2l3l')nl''$ -Resonanzen, die sich im Energiebereich oberhalb der Resonanz P zu der letzten Li^{3+} $2l3l'$ -Ionisationsschwelle bei 171 eV befinden, konnten in dieser Arbeit nicht identifiziert werden. Dieser Teil des Spektrums, in dem sich die verschiedenen $2l3l'$ -Ionisationsschwellen befinden, könnte von den kleineren und komplizierteren resonanten Strukturen verdeckt sein. Die resonanten Strukturen wurden durch den kontinuierlichen Hintergrund aus dem direkten Ionisationsprozeß im gemessenen Spektrum überdeckt.

Je mehr die Energie des Spektrums zunimmt, desto kleiner ist ρ^2q^2 für die Resonanzen und desto schwieriger ist die weitere Messung. Es ist uns nicht gelungen, die Dreifachanregungen oberhalb der $2l3l'$ -Ionisationsschwellen weiter zu messen.

Ich schließe die Diskussion der Dreifachanregungen des Lithiumatoms mit einem Ausblick auf die hoch angeregten Dreifachanregungen. Oberhalb der $2l3l'$ -Ionisationsschwelle sollte die Gruppe der $(2lnl')n'l''$ ($n \geq 4, n' \geq n + 1$)-Rydbergserien in der Reihenfolge der Hauptquantenzahl n bis unterhalb der zweiten Li^{2+} $2l$ -Ionisationsschwelle vorkommen, gegen die die $2lnl'$ -Rumpfstände konvergieren. Mit zunehmenden Hauptquantenzahlen n der $2lnl'$ -Rumpfstände, überlappen die $(2lnl')n'l''$ -Rydbergserien, die sowohl gleiche als auch verschiedene Hauptquantenzahlen n in den Rumpfständen besitzen. Somit gibt es in der Nähe der Li^{2+} $2l$ -Ionisationsschwelle Wechselwirkungen des $(2lnl')n'l''$ -Zustandes mit den Zuständen, die den $2l(n-1)l'$ - und $2l(n+1)l'$ -Rumpfstände haben.

Oberhalb der Li^{2+} $2l$ -Ionisationsschwelle bei 172.85 eV kommt die Gruppe der $(3l3l')nl''$, ($n \geq$

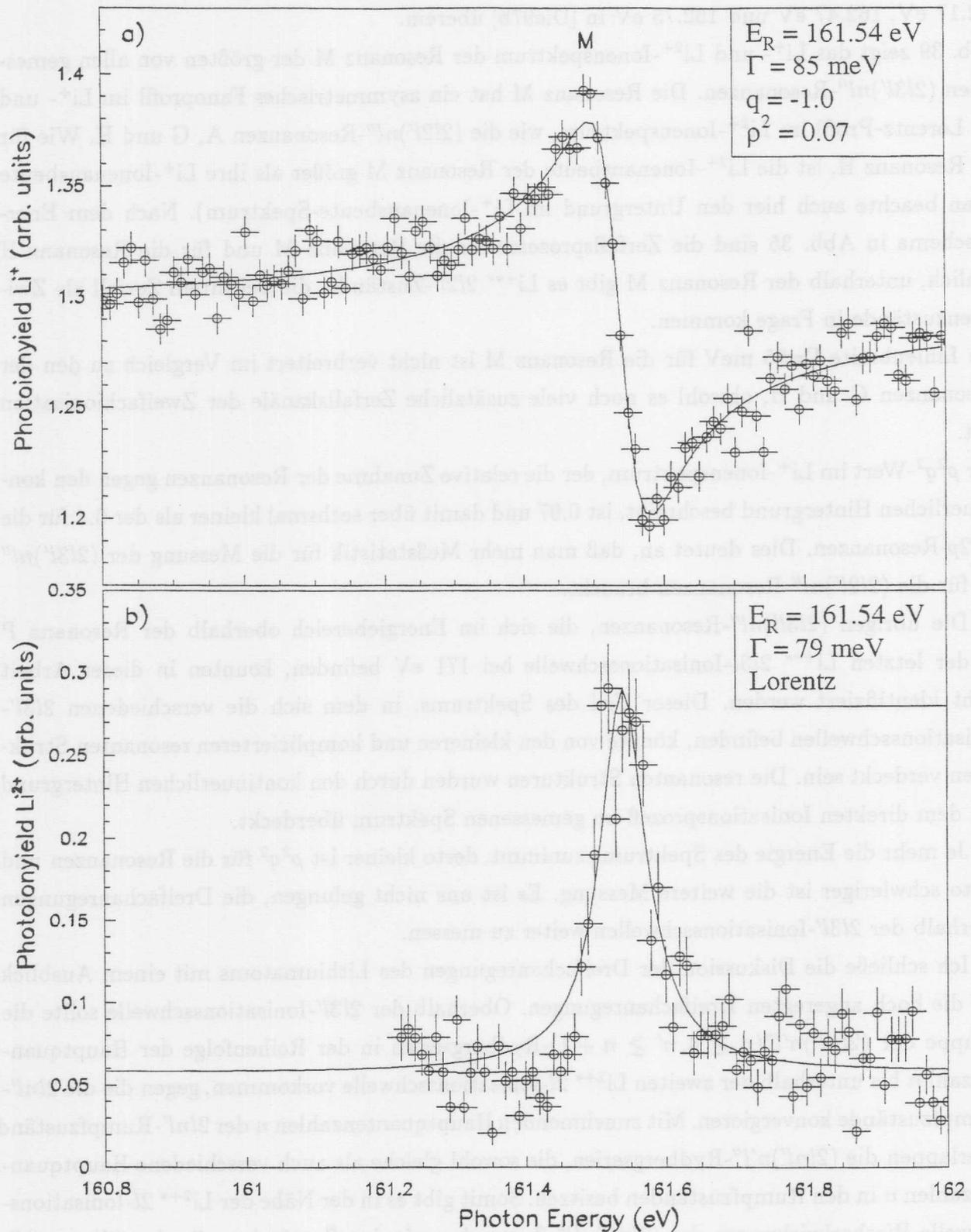


Abbildung 39: Li^+ - (oben) und Li^{2+} -Photoionenspektrum (unten) im Bereich der $(2s3p + 2p3s \ ^1P)3s$ -Resonanz. Die durchgezogene Linie stellt die Anpassung eines Fano- bzw. eines Lorentz-Profiles an der Daten dar.

Bezeichnen. in Abb. 32	Vorläufige Zuordnung	Ionen- Ausbeute	E_R (eV) (± 0.05)	Γ (meV) (± 20)	q- Parameter
A	$2s^2 2p$	$\text{Li}^{+(N)}$	142.24	135	-1.91 ± 0.02
		$\text{Li}^{+(H)}$	142.24	114	-2.0 ± 0.1
		$\text{Li}^{2+(H)}$	142.28	115	Lorentz
B	$2p^3$	$\text{Li}^{+(N)}$	148.68	67	
C	?	"	—	—	—
D	$(2s2p \ ^3P)3s$	"	149.82	64	-1.85 ± 0.06
E		"	151.10(†)	—	—
F		"	151.69(†)	—	—
G	$(2s2p \ ^1P)3s$	$\text{Li}^{+(N)}$	152.36	124	-1.7 ± 0.2
		$\text{Li}^{+(H)}$	152.36	116	-1.8 ± 0.1
		$\text{Li}^{2+(H)}$	152.35	105	Lorentz
H		$\text{Li}^{+(N)}$	152.71	116	-1.1 ± 0.1
		$\text{Li}^{2+(H)}$	152.71	121	Lorentz
I		$\text{Li}^{+(N)}$	153.43(†)	—	Fano
J		"	154.09(†)	—	—
K		"	154.39(†)	—	—
L	$(2s3s \ ^3S)3p$	"	160.59(†)	—	Fano
M	$(2s3p + 3s2p \ ^1P)3s,$ $3d$	"	161.54	85	-1.0 ± 0.1
		$\text{Li}^{2+(H)}$	161.54	79	Lorentz
N	$(2s3s \ ^1S)3p$	$\text{Li}^{+(N)}$	162.12(†)	—	—
O		"	162.48(†)	—	—
P	$(2s3s \ ^3S)4p$	"	162.70(†)	—	—

Tabelle 14: Die vorläufigen Zuordnungen und die aus der Messung bestimmten Parameter für die resonanten Strukturen der Dreifachanregungen des Lithiumatoms. Resonanzenergie (E_R). Linienbreite (Γ). †: Die Position des Maximums der resonanten Struktur wurde ermittelt. (N) : das Meßergebnis im Normalauflösungsmodus des Monochromators, (H) : im Hochauflösungsmodus des Monochromators.

Bezeichnen in Abb. 32	Dieser Arbeit(eV)	[Kie95] (eV)	[Azu95] (eV)	[Jou96] (eV)	[Die96] (eV)	[Die97c] (eV)	[Die97b]
A	142.24	142.33 (142.32)	142.35 (141.657)	142.30 (142.20)	142.28	142.25	
B	148.68	148.77 (148.93)	148.7 (148.439)	(149.01)			
C		(149.25)	(148.187)				
D	149.82	149.91 (149.83)	149.79 (150.008)	(149.70)	149.98 (149.70)	149.95 (149.69)	
E	151.10	151.20 (151.33)	151.10 (150.665)	(150.97)	151.25 (150.97)	151.22 (150.95)	
F	151.69	(151.59)	151.7 (151.805)			151.68 (151.46)	
						151.92 (151.71)	
						152.06 (151.85)	
						152.15 151.95	
G	152.36	152.46 (152.60)	152.32 (151.955)	(152.408)	152.51 (152.41)		
H	152.71	152.75 (152.82)	152.72 (152.47)		152.90 (152.48)		
I	153.43	153.54 (153.58)	153.43 (153.042)	(153.48)	153.66 (153.48)		
J	154.09	154.3 (154.29)	154.43 (154.32)				
K	154.39	154.5 (154.44)	155.0 (154.668)				

5 Zusammenfassung

Die ${}^2P^\circ$ -Doppelanregungen und -Dreifachanregungen im Lithiumatom wurden durch Photoionenausbeutemessungen mit einem Ionenflugzeitsspektrometer untersucht.

2P -Doppelanregungen

Die Spektren der Li^+ Photoionenausbeute wurden im Energiebereich der 2P -Doppelanregungen mit der hohen Auflösung ($\frac{E}{\Delta E} \sim 10,000$) gemessen. Auffallend sind die schmalen starken Resonanzen unterhalb der $1s2s\ {}^3S$ -Schwelle, die zu einer $(1s2s\ {}^3S)np$ -Rydbergserie gehören, und bis zu $n = 14$ aufgelöst werden konnte. Durch die $(1s2s\ {}^1S)3p$ -Resonanz wird diese Rydbergserie stark gestört. Der gemessene Photoionisationsquerschnitt unterhalb $1s2s\ {}^3S$ -Schwelle ist in sehr guter Übereinstimmung mit dem durch die Sattelpunkt-Methode berechneten.

Das gemessene Spektrum zwischen der $1s2s\ {}^3S$ - und der $1s2p\ {}^1P$ -Schwelle weist komplizierte resonante Strukturen auf, die durch die wechselseitige Störung eng beieinander liegender Zustände entstehen. Der gemessene Photoionisationsquerschnitt stimmt mit dem durch die Sattelpunkte-Methode berechneten in Bezug auf den spektralen Verlauf und die Energieposition, und mit dem durch die R-Matrix-Methode berechneten in Bezug auf den spektralen Verlauf überein. Im Vergleich zu den im Rahmen der Sattelpunkte-Methode erhaltenen Ergebnissen gelang es uns, die resonanten Strukturen den fünf Rydbergserien $(1s2s\ {}^1S)np$, $(1s2p\ {}^3P)ns, nd$ $(1s2p\ {}^1P)ns, nd$ zuzuordnen [Wu97]. Die gestörten Rydberg-Serien zeigen charakteristische Variationen der Resonanzenergien, der Linienbreiten sowie des q -Parameters.

Zwischen 70 eV und 75 eV wurden die $1s3lnl'$ -Resonanzen beobachtet, die durch Fanoprofile mit negativem q -Parameter angenähert werden können. Der gemessene Photoionisationsquerschnitt stimmt mit dem durch die R-Matrix-Methode berechneten überein. Die $1s3lnl'$ -Strukturen konnten mit Hilfe einer Analogie klassifiziert werden, die auf der Zuordnung der Doppelanregungen des Heliumatoms beruht. In der Nähe der $1s3l$ -Schwellen sind die resonanten Strukturen sehr schmal und kompliziert aufgrund der starken Wechselwirkung der zahlreichen höheren Rydberg-Resonanzen.

2P -Dreifachanregungen

Die Spektren der Li^+ - und Li^{2+} -Photoionenausbeute der 2P -Dreifachanregungen hohler Lithiumatome, deren K-Schale unbesetzt ist, wurden gemessen. Wir haben zahlreiche Resonanzen beobachtet, bei den ein Photon alle dreie Elektronen anregt, die sich besonders für die Untersuchung der stark Korrelation dreier Elektronen eignen.

Es wurde beobachtet, daß der Zerfall der ersten $2s^22p$ -Resonanz für die 2P -Dreifachanregung zu sehr unterschiedlichen Linienprofilen in der Li^+ - und der Li^{2+} -Photoionenausbeute führt. Die

Li^+ -Photoionenausbeute zeigt eine starke asymmetrische Linie, die praktisch identisch mit der Photoabsorptionslinie [Kie94] ist. Die Li^{2+} -Photoionenausbeute weist jedoch eine schwache Lorentzlinie auf, deren Maximum nur 3% des Maximums der Li^+ -Photoionenausbeute erreicht. Die Linienbreite und die Resonanzenergie sind für die Li^+ - und Li^{2+} -Photoionenausbeute innerhalb der experimentellen Fehlergrenzen gleich. Die gemessene Resonanzenergie und die Linienbreite sind in exzellenter Übereinstimmung mit den durch die Sattelpunkte-Methode berechneten.

Zwischen 148 eV – 155 eV wurde eine weitere Gruppe von Resonanzen beobachtet. In diesem Energiebereich liegen sechs $2l2l'$ -Ionisationsschwellen, gegen die verschiedene 2P -Rydbergserien konvergieren. Die Vielzahl der daraus resultierenden Zustände und die Wechselwirkungen mit den Ionisationskontinua macht die Zuordnung der resonanten Strukturen schwierig. In der Nähe der großen $(2s2p\ ^1P)3s$ -Resonanz nimmt das Intensitätsverhältnis der Li^+ - zu Li^{2+} -Photoionenausbeute stark zu. Die $2l2l'$ -Schwellen in der Nähe der Resonanz beeinflussen stark den Verhältnis von Einfach- zu Zweifachionisation der dreifach angeregten Lithiumatome.

Die $2l3l'n'l''$ -Resonanzen wurden im Bereich von 160 eV bis 163 eV beobachtet. Diese Resonanzen sind relativ klein im Vergleich zu den $2l'2'l'n'l''$ -Resonanzen. Das Li^+ -Ionenausbeute-Spektrum für die $2l3l'n'l''$ -Resonanzen ist dem gemessenen und berechneten partiellen Wirkungsquerschnitt des $1s3s\ ^3S + \epsilon l$ -Kanals in [Die97b] ähnlich. Die beobachteten $2l3l'n'l''$ -Resonanzen sind mit Hilfe der Photoelektronsspektroskopie zugeordnet worden [Die97b].

Ausblick

Weitere Gruppen der hoch angeregten Resonanzen treten bis zur Li^{3+} -Ionisationsschwelle bei 203 eV auf. Photonenquellen wie der Freie Elektronen-Laser bei DESY, die in Zukunft höheren Photonenfluß zur Verfügung stellen, sind erforderlich, um die winzigen resonanten Strukturen in der Nähe Li^{3+} -Ionisationsschwelle zu messen und weitere Experimente zu den Dreifachanregungen und der Dreifachionisation des Lithiumatoms durchzuführen.

Literatur

- [Åbe82] T. Åberg
Handbuch der Physik Vol. 31 Springer Verlag New York (ED. W. Mehlhorn) (1982)
- [Age84] M Agentoft, T Andersen and T K Chung
J. Phys. B **17** L433 (1984)
- [Ahm75] M. Ahmed and L. Lipsky
Phys. Rev. A **12** 1176 (1975)
- [And95] L. H. Andersen et al
Phys. Rev. Lett. **74** 896 (1995)
- [Amu76] M. Ya. Amusia, N. A. Cherepkov, Dj. Zivanovic and V. Radojevic
Phys. Rev. A **13** 1466 (1976)
- [Azu95] Y. Azuma, S. Hasegawa, F. Koike, G. Kutluk, T. Nagata, E. Shigemasa, A. Yagishita, and I. A. Sellin
Phys. Rev. Lett. **74** 3768 (1995)
- [Bur75] P. G. Burke and W. D. Robb
Adv. At. Mol. Phys. **11** 143 (1975)
- [Can77] A. M. Cantú, W. H. Parkinson, G. Tondello and G. P. Tozzi
J. Opt. Soc. Am. **67** 1030 (1977)
- [Che94] Ming-Keh Chen and Kwong T. Chung
Phys. Rev. A **49** 1675 (1994)
- [Chu79] Kwong T. Chung
Phys. Rev. A **20** 1743 (1979)
- [Chu80] Kwong T. Chung
Phys. Rev. A **22** 1341 (1980)
- [Chu81a] Kwong T. Chung
Phys. Rev. A **23** 2957 (1981)
- [Chu81b] Kwong T. Chung
Phys. Rev. A **24** 1350 (1981)

- [Chu82a] Kwong T. Chung
Phys. Rev. A **25** 1596 (1982)
- [Chu82b] Kwong T. Chung and Brian F. Davis
Phys. Rev. A **26** 3278 (1982)
- [Chu84] Kwong T. Chung
Phys. Rev. A **29** 682 (1984)
- [Chu95] Kwong T. Chung and Bing-cong Gou
Phys. Rev. A **52** 3669 (1995)
- [Chu97a] Kwong T. Chung
Phys. Rev. Lett. **78** 1416 (1997)
- [Chu97b] Kwong T. Chung
Phys. Rev. A **56** R3330 (1997)
- [Cod68] K. Codling and R. P. Madden
Phys. Rev. **167** 587 (1968)
- [Coo63] J. W. Fano, U. Fano and F. Parts
Phys. Rev. Lett. **10** 518 (1963)
- [Cub96] D. Cubaynes, S. Diehl, L. Journal, B. Rouvellou, J. -M. Bizau, S. Al Moussalami, and F. J. Wuilleumier, N. Berrah, L. VoKy, P. Faucher, A. Hibbert, C. Blancard, E. Kennedy, T. J. Morgen, J. Bozek and A. S. Schlachter.
Phys. Rev. Lett. **77** 2194 (1996)
- [Dav85] Brian F. Davis and Kwong T. Chung
Phys. Rev. A **31** 3017 (1985)
- [Die96] S. Diehl, D. Cubaynes, J.-M. Bizau, L. Journal, B. Rouvellou, S. Al Moussalami, F. J. Wuilleumier, E. T. Kennedy, N. Berrah, C. Blancard, T. J. Morgen, J. Bozek, A. S. Schlachter, L. VoKy, P. Faucher, A. Hibbert
Phys. Rev. Lett. **76** 3915 (1996)
- [Die97a] S. Diehl, D. Cubaynes, K. T. Chung, F. J. Wuilleumier, E. T. Kennedy, J. -M. Bizau, L. Journal, C. Blancard, L. VoKy, P. Faucher, A. Hibbert, N. Berrah, T. J. Morgen, J. Bozek, and A. S. Schlachter
Phys. Rev. A **56** R1071 (1997)

- [Die97b] S. Diehl, D. Cubaynes, E. T. Kennedy, F. J. Wuilleumier, J. -M. Bizau, L. Journal, L. VoKy, P. Faucher, A. Hibbert, C. Blancard, N. Berrah, T. J. Morgen, J. Bozek and A. S. Schlachter
J. Phys. B **30** L595—L605 (1997)
- [Die97c] S. Diehl, D. Cubaynes, F. J. Wuilleumier, J.-M. Bizau, L. Journal, E. T. Kennedy, C. Blancard, L. VoKy, P. Faucher, A. Hibbert, N. Berrah, T. J. Morgen, J. Bozek, and A. S. Schlachter
Phys. Rev. Lett. **79** 1241 (1997)
- [Dom92a] M. Domke, T. Mandel, A. Puschman, C. Xue, D. A. Shirley, and G. Kaindl
Rev. Sci. Instrum. **63** 80 (1992)
- [Dom92b] M. Domke, G. Remmers, and G. Kaindl
Phys. Rev. Lett. **69** 1171 (1992)
- [Dom95] M. Domke, K. Schulz, G. Remmers, A. Gutier, G. Kaindl, and D. Wintgen
Phys. Rev. A **51** R4309 (1995)
- [Ede70] D. L. Ederer, T. Lucatorto and, R. P. Madden
Phys. Rev. Lett. **22** 1537 (1970)
- [Fan61] U. Fano
Phys. Rev. **124** 1866 (1961)
- [Fan65a] Fano. U. and J. W. Cooper
Phys. Rev. A **137** 1364 (1965)
- [Fan65b] Fano. U. and J. W. Cooper
Phys. Rev. A **138** 400 (1965)
- [Fer87] T. A. Ferrett, D. W. Lindle, P. A. Heimann, W. D. Brewer, U. Becker, H. G. Kerckhoff, and D. A. Shirley
Phys. Rev. A **36** 3172 (1987)
- [Fri90] Harald Friedrich
Theoretische Atomphysik, Springer-Verlag (1990)
- [Gér85] Gérard P, Bizau JM, Cubaynes D, Wuilleumier F
2'ECAMP Amsterdam, Book of abstracts TH (1985)

- [Gil81] E. Gilberg, M. J. Hanus, and B. Foltz
Rev. Sci. Instrum. **52** 662 (1981)
- [Her75] D. R. Herrick and O. Sinanoglu
Phys. Rev. A **11** 97 (1975).
- [Ho91] Y. K. Ho
Z. für Phys. **21** 191 (1991)
- [Jou95] L. Journal.
Dissertation, Universite Paris XI (1995)
- [Jou96] L. Journal, D. Cubaynes, J. -M. Bizau, S. Al Moussalami, B. Rouvellou,
Francois J. Wuilleumier, L. VoKy, P. Faucher, A. Hibbert
Phys. Rev. Lett. **76** 30 (1996)
- [Kel87] Raymond L. Kelly
J. Phys. and Chem. Referenz Data **16** (1987)
- [Kie94] L. M. Kiernan, E. T. Kennedy, J-P. Mosnier, J. T. Costello and B. F.
Sonntag
Phys. Rev. Lett. **72** 2359 (1994)
- [Kie95] L M Kiernan, M-K Lee, B F Sonntag, P Sladeczek, P Zimmermann, E
T Kennedy, J-P Mosnier and J. T. Costello
J. Phys. B **28** L161 (1995)
- [Kie96] L M Kiernan, M-K Lee, B F Sonntag, P. Zimmermann, J T Costello, E
T Kennedy, A Gray and L Vo Ky
J. Phys. B **29** L181 (1996)
- [Kin77] George C King, Michel Tronc, Frank H Read and Richard C Bradford
J. Phys. B **10** 2479 (1977)
- [Kuy65] C. E. Kuyatt, J. A. Simpson and S. R. Mielczarek
Phys. Rev. A **138** 385 (1965)
- [Lar94] C. U. S. Larsson, A. Beutler, O. Björneholm, F. Federmann U. Hahn, A.
Rieck, S. Verbin und T. Möller
Nucl. Instr. and Meth. A **337** 603 (1994)
- [Lin86] C. D. Lin
Adv. At. Mol. Phys. **22** 77 (1986)

- [Lip77] L. Lipsky, R. Anania, and M. J. Conneely
At. Data Nucl. Data Tables **20**, 127 (1977)
- [Lis90] A. Lisini, P. G. Burke and A. Hibbert
J. Phys. B **23** 3767 (1990)
- [Lis92] A. Lisini
AIP Conf. Proc. **258** 149 (1992)
- [Lis96] Lisa Quigley and Keith Berrington.
private communication (1996)
- [Mad63] R. P. Madden, K. Codling
Phys. Rev. Lett. **10** 516 (1963)
- [Man84] Sven Mannervik, Henrick Cederquist and Maciej Kisielinski
Phys. Scr. **T8** 107-111 (1984)
- [Man89] S. Mannervik, R. T. Short, D. Sonnek, E. Träbert, G. Möller, V. Lodwig,
P. H. Heckmann, J. H. Blanke, K. Brand
Phys. Rev. A **39** 3964 (1989)
- [Meh78] G Mehlman, D L Ederer, E B Saloman and J W Cooper
J. Phys. B **11** L689 (1978)
- [Meh82] G. Mehlman, J. W. Cooper and E. B. Saloman
Phys. Rev. A **25** 2113 (1982)
- [Men95] A. Menzel, S. P. Frigo, S. B. Whitfield, C. D. Caldwell, M. O. Krause, J.
Z. Tang and I. Shimamura
Phys. Rev. Lett. **75** 1479 (1995)
- [Moo71] C. Moor
Atomic Energy Levels, Nat. Bur. Stand. Ref. Data Ser., Natl. Stand.(U.S)
Circ. No. 35 (U.S. GPO, Washington, D.C., 1971), Vol.1
- [Mül89] A. Müller, G. Hofmann, B. Weissbecker, M. Stenke, K. Tinschert, M.
Wagner and E. Salzborn
Phys. Rev. Lett. **63** 758 (1989)
- [Nic77] C. A. Nicolaides and D. R. Beck
J. Chem. Phys. **66** 1497 (1977)

- [Pea73] B. Peart and K. T. Dolder
J. Phys. B **6** 1497 (1973)
- [Pet82] H. Petersen
Optics Comm. **40**, 402 (1982)
- [Pet86] H. Petersen
Nucl. Instr. and Meth. A **246**, 260 (1986)
- [Pia93] Nicos A. Piangos and Cleanthes A. Nicolaidis
Phys. Rev A **48** 4142 (1993)
- [Pre88] Thomas Prescher
Dissertation, Universität Hamburg (1988)
- [Qué71] J. J. Quémner, C. Paquet, and P. Marmet
Phys. Rev. A **4** 494 (1971)
- [Rob94] F. Robicheaux et al
Phys. Rev A **49** 1866 (1994)
- [Rød79] M Rødbro, R Bruch and P Bisgaard
J. Phys. B **12** 2413 (1979)
- [Saf78] U. I. Safronova and V. S. Senashenko
J. Phys. B **11** 2623 (1978)
- [Sch73] G. J. Schulz
Rev. Mod. Phys. **45** 378 (1973)
- [Sch86] M. Schmidt
Dissertation, Technische Universität Berlin (1986)
- [Sim79] R. L. Simons, H. P. Kelly, and R. Bruch
Phys. Rev. A **19** 682 (1979)
- [Sla95] Peter Sladeczek
Dissertation, Technische Universität Berlin (1995)
- [Son92] B. Sonntag and P. Zimmermann
Rep. Prog. Phys. **911** (1992)

- [Sta82] A. F. Starace
Handbuch der Physik Vol. 31 Springer Verlag New York (ED. W. Mehlhorn)(1982)
- [Vok95] Vo Ky Lan
private communication
- [Vok98] L. Vo Ky, P. Faucher, H. L. Zhou, A. Hibbert, Y. -Z. Qu, J. -M. Li, and F. Bely-Dubau
Phys. Rev. A **58** 3688 (1998)
- [Wak80] S. Wakid, A. K. Bhatia, and A. Temkin
Phys. Rev. A **21** 496 (1980)
- [Wal70] D. S. Walton, B. Peart and K. Dolder
J. Phys. B **3** L148 (1970)
- [Wil92] K. Wille
Physik der Teilchenbeschleuniger und Synchrotronstrahlungsquellen, Teubner Studienbuch, Stuttgart (1992)
- [Wu97] Lijin Wu and Kwong T Chung
J. Phys. B **30** 1173 (1997)
- [Yan96] Xiazhou Yang, C. G. Bao and C. D. Lin
Phys. Rev. Lett. **22** 3096 (1996)

Danksagung

Allen, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben, möchte ich meinen herzlichen Dank aussprechen. Einige seien an dieser Stelle besonders erwähnt:

Prof. Dr. Bernd Sonntag für die interessante Aufgabenstellung und die gute Betreuung.

Prof. Dr. Peter Zimmermann und Dr. Peter Sladeczek für die gute Zusammenarbeit.

Dr. L. Kiernan für die Hilfe bei den Meßzeiten.

Dr. Andreas Verweyen, Philippe Wernet und Marc Talkenberg für das mühsame Korrekturlesen dieser Arbeit. Ohne ihre freundliche und herzliche Hilfe wäre diese Arbeit nicht möglich gewesen.

Dr. Thomas Dohrmann, Dr. Stefan Brühl, Dr. Andreas von dem Borne und Joachim Schulz für die hervorragende Atmosphäre bei AG Sonntag.

Ganz besonderer Dank gilt meinen Eltern, die mir das Studium und die Doktorarbeit ermöglicht haben, für ihre aufopfernde Unterstützung. Schließlich möchte ich meinen Geschwistern Kyung Mee, Young Mee und Nam Hoon für ihre herzliche Unterstützung danken.

