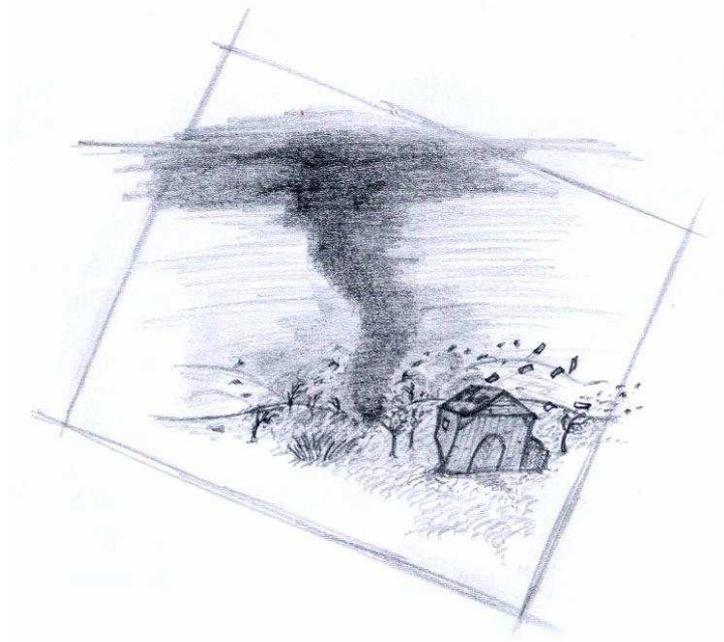


# Nachweis von Wirbeln in einer Ein-Teilchen-Wellenfunktion



Diplomarbeit

von

Daniel Metz

Institut für Kernphysik  
Goethe-Universität  
Frankfurt am Main

September 2010

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

**Frankfurt am Main, den**

<b>- Über diese Arbeit...</b>	<b>04</b>
<b>- 1. Motivation</b>	<b>06</b>
- Theoretische Vorhersagen	07
- Experimentelle Anforderungen	08
- Umsetzung	10
<b>- 2. Theoretischer Hintergrund</b>	<b>10</b>
- Ursprung der Wirbel	10
- COLTRIMS-Methode	14
<b>- 3. Simion-Simulation</b>	<b>17</b>
- gegebene Randbedingungen	18
- Konventionen	19
- Elektronenspektrometer	20
- Rückstoßionenspektrometer	21
- Optimieren der Simulation	24
- Ortsfokussierung	24
- Flugzeitfokussierung	26
- Vorhersagen der Simulation	33
<b>- 4. Auswertung der Simulationsdaten</b>	<b>34</b>
- Finden der Eichfunktion	36
- Impuls in Flugzeitrichtung	38
- Impuls in Ortsrichtung	41
- Eichfunktion für andere Ionen	45
- Auswertung der Simulationsergebnisse	51
- Abhängigkeit der Impulsauflösung von Flugzeit- und Orts-Auflösung	56
- Möglicher Auflösungsgewinn durch Reduzierung der Targetbreite	58
- Möglicher Auflösungsgewinn durch einen gekrümmten Detektor	60

<b>- 5. AutoCAD-Konstruktion</b>	<b>61</b>
- Prinzip der Konstruktion	63
- Funktion bestimmter Konstruktionen	68
- Vor dem Elektronendetektor	72
- Vor dem Rückstoßionendetektor	76
- Gesamtes Spektrometer	78
- Das endgültige Design	78
<b>- 6. Testmessungen</b>	<b>83</b>
- Anpassung der Eichfunktion in Flugzeitrichtung	85
<b>- Ausblick</b>	<b>87</b>
<b>- Literaturverzeichnis</b>	<b>89</b>

## Über diese Arbeit...

Wenige Tage nachdem ich wohlwollend in die Arbeitsgruppe Atomphysik aufgenommen wurde und mich in den ersten Tagen bereits ein wenig mit der dort vorherrschenden Technik vertraut machte, erzählte mir Professor Reinhard Dörner von den Ergebnissen einer Gruppe amerikanischer theoretischer Physiker. Diese hätten nach ihren kürzlichen Berechnungen die Existenz von Wirbeln in dem elementaren System eines Proton-Wasserstoff-Stoßes vorausgesagt. Es handelt sich dabei natürlich nicht um makroskopische Wirbel, wie in obiger Zeichnung irreführenderweise angedeutet, sondern um Wirbel in der Wellenfunktion des beteiligten Elektrons – Wirbel, die bisher in diesem Stoßsystem noch nicht experimentell beobachtet wurden. Zwar gibt es Beobachtungen von Wirbeln in quantenmechanischen Mehrteilchen-Systemen - z.B. in Bose-Einstein-Kondensaten [1] - aber in der Wellenfunktion quantenmechanischer Ein-Teilchen-Systeme war deren Existenz bisher nicht angenommen. Da dieser experimentelle Nachweis ein Projekt war, das in unserer Arbeitsgruppe durchgeführt werden sollte, bot man mir an, meine Diplomarbeit in diesem Rahmen zu schreiben. Da mich die Idee der Suche nach den picoskopischen Wirbeln reizte, fiel es mir nicht schwer, mich in den folgenden Monaten dieser Idee zu verschreiben.

In diesem Moment, in dem ich diese Einleitung zu meiner Diplomarbeit schreibe, sind mein Beitrag zu dieser Idee fast am Ende, die meisten Zahlen und Worte bereits getippt und der Großteil der Bilder, die hoffentlich bei der Veranschaulichung des Sachverhalts und meiner Gedanken helfen, bereits an seinem Ort. Die Suche nach den Wirbeln aber ist zu diesem Zeitpunkt erst am Anfang und wird im Rahmen einer anderen Diplomarbeit fortgesetzt werden. Dieser Teil des Projektes, den meine Diplomarbeit umfasst, beschäftigt sich mit den theoretischen Voraussagen, welche die Motivation für dieses Experiment liefern, der Simulation eines Spektrometers, das in der Lage ist, derart kleine Wirbel aufzulösen, der technischen Umsetzung dieser Simulation, sowie ersten Testmessungen. Damit sollen alle Voraussetzungen gegeben sein um in naher Zukunft eine Verbindung zwischen Theorie und Experiment zu schaffen.

Ich werde damit beginnen, im ersten Kapitel zunächst einen Überblick über die direkten Verbindungen zwischen theoretischem Hintergrund und den daraus folgenden Bedingungen für die experimentelle Umsetzung zu geben. Dadurch wird

deutlich, welche Anforderungen an die Simulation, die Konstruktion sowie an die ersten Testmessungen gestellt waren. Darauf wird in den Kapiteln 2-6 im Detail beschrieben, wie diesen Anforderungen begegnet wurde.

Die Gliederung dieser Arbeit folgt damit direkt meinem tatsächlichen Vorgehen und schließt mit den ersten experimentellen Ergebnissen, die auf allem Vorangehenden aufbauen. Um meine persönlichen Überlegungen hinter den einzelnen Schritten bis zu den ersten Messungen zu verdeutlichen, habe ich neben erläuterndem Text – wenn sinnvoll – auch möglichst häufig anschauliche Grafiken oder Zeichnungen angefertigt, die dem Verständnis dienlich sein sollen.

Bevor nun der wissenschaftliche Teil beginnt, möchte ich noch erwähnen, dass auch diese Diplomarbeit, deren einziger Verfasser ich schließlich sein werde, natürlich nur in einer funktionierenden Arbeitsgruppe zu bewältigen ist und letztendlich viel Unterstützung durch Erläuterungen und Anregungen, aber auch in tatkräftiger Form von außen eingeflossen ist, worauf ich im Detail noch einmal auf den letzten Seiten zurückkommen werde.

## 1. Motivation

In vielen natürlichen Vorgängen bemerken wir die Präsenz von Wirbeln - sie sind ein Phänomen, welches Teil des Strömungsverhaltens von Fluiden unterschiedlichster Art ist. Sie sind dadurch charakterisiert, dass sich um einen Bereich geringerer Teilchendichte ein Bereich erhöhter Teilchendichte ringt, welcher einer typischen Rotation um eine gemeinsame Mittellinie unterliegt – wie man es in der Natur zum Beispiel bei Tornados beobachtet. Vielleicht zunächst weniger offensichtlich ist die Tatsache, dass auch in atomaren und quantenmechanischen Prozessen Wirbel auftreten. So wurde schon für viele Quantensysteme die Existenz von Wirbeln vorausgesagt [2] und auch in vielen Experimenten ein Nachweis solcher Wirbel erbracht. [3] Der Unterschied zu makroskopischen Systemen liegt hier in der Tatsache, dass bei quantenmechanischen Systemen nicht von Wirbeln in einem Teilchenfluss, sondern von Wirbeln im Wahrscheinlichkeitsfluss der Wellenfunktion gesprochen werden muss. Wirbel sind hier gekennzeichnet durch eine verschwindende Wellenfunktion im Zentrum des sich darum windenden Wahrscheinlichkeitsflusses. Neu ist die Voraussage solcher Wirbel für das fundamentale System eines Proton-Wasserstoff-Stoßes. Der experimentelle Nachweis dieser topologischen Objekte in der Wellenfunktion dieses fundamentalen physikalischen Systems ist das Ziel, auf das im Rahmen dieser Diplomarbeit hingearbeitet wurde.

Zunächst soll nun ein kurzer Überblick über die Ergebnisse der US-amerikanischen Arbeitsgruppe von Professor Joe Macek und die daraus folgenden Anforderungen an diese Arbeit gegeben werden.

## Theoretische Vorhersagen

Die theoretische Vorhersage zur Existenz von Wirbeln im p-H-Stoßsystem erfolgte durch Lösung der regulierten, das heißt von divergierenden Lösungen befreiten, zeitabhängigen Schrödingergleichung nach etablierten, numerischen Lattice-Methoden. [4] Dadurch lassen sich die Vorteile der computergestützten Rechnung ausnutzen, indem man den dreidimensionalen Raum durch ein Gitter diskretisiert.

Mit der Lattice-Methode war es der Arbeitsgruppe um Joe Macek zum ersten Mal möglich die Schrödingergleichung für das Proton-Wasserstoff-Stoßsystem bis zu einem Protonenabstand von 10000 a.u. zu berechnen und somit Aufschluss über das Verhalten des Systems im asymptotischen Endzustand, wenn alle drei Teilchen getrennt sind, zu gewinnen. Für die Rechnung wurde ein Gitter simuliert, welches sich passend zu den Dimensionen der gerade betrachteten Vorgänge selbst skaliert. Die besondere Eignung für komplexe Systeme ist bedingt durch den geringen Speicher- und Rechenbedarf aufgrund dieser neuen Methode. Die der Simulation zu Grunde liegende regulierte Schrödingergleichung liest sich wie folgt:

$$\left[ -\frac{1}{2} \nabla_q^2 + \frac{1}{2} \Omega^2 q^2 + R^2 V(q, \tau) \right] \Phi(q, \tau) = i \frac{\partial \Phi(q, \tau)}{\partial \tau}$$

Hier bezeichnet  $q = r/R$  die Raumkoordinaten, wobei  $R(\tau)$  als Abstand der beiden beteiligten Protonen definiert ist und  $\tau$  für die skalierte Zeit mit  $d\tau = dt/R^2$  steht. Außerdem ist  $\Omega(\tau) = Rd(R^{-2}dR/d\tau)d\tau$  und  $V(q, \tau)$  entspricht dem Potential im ausgedehnten Raum.

Die Simulation der Gruppe um Joe Macek wurde für 5 keV Stoßenergie und einen Stoßparameter  $b$  von 1 a.u. durchgeführt. Eine plötzliche Änderung der Topologie der Wellenfunktion durch die Entstehung von Wirbeln tritt erstmals bei einer Entfernung der Kerne von 5 a.u. auf [5]. Sogenannte Ring- und Tornadowirbel sind zwei Erscheinungen, die von der Simulation vorausgesagt werden und auf deren Entstehung und Eigenschaften im Folgenden noch näher eingegangen wird.

Diese freien Wirbel wurden bisher noch nicht in physikalischen Ein-Teilchen-Systemen beobachtet. Diese Topologien sollen mit Hilfe der COLTRIMS-Technologie und geeigneter Auflösung, durch die im Rahmen dieser Diplomarbeit entwickelte Spektrometergeometrie, experimentell nachgewiesen werden.

## **Experimentelle Anforderungen**

Wirbel existieren laut Arbeitsgruppe Macek nach 1. Bornscher Näherung in unterschiedlichsten Stoßsystemen - sind also keine Eigenheit des Proton-Wasserstoff-Stoßes. In der Praxis werden die theoretischen Voraussagen hier durch einen Proton-Helium-Stoß realisiert, da es sehr schwierig ist, die Voraussetzungen zu schaffen um mit einzelnen Wasserstoffatomen, welche natürlich einen starken Drang zur Verbindung zu Wasserstoffmolekülen haben, experimentieren zu können. Bei diesem Stoßsystem werden zwei Reaktionen – Ionisation und Transferionisation – stattfinden. Um Wirbel, welche eine Ausdehnung von weniger als  $0.04 v_p$  besitzen sollen, beobachten zu können, ist es - neben einer entsprechenden Auflösung auf dem Elektronendetektor - nötig, die Messergebnisse nach diesen beiden Reaktionen selektieren zu können, da sich deren Topologien unterscheiden. Außerdem ist eine möglichst präzise Selektion nach Stoßparametern wünschenswert, da die Lokalisierung der Wirbel bei unterschiedlichen Stoßparametern leicht variiert [4], was eine möglichst hohe Impulsauflösung auf dem Rückstoßionen-Detektor erfordert. Für eine Bestimmung der Teilchentrajektorien und damit des Reaktionsverlaufs, ist es notwendig, Flugzeit und Detektionsort, der aus der Reaktion resultierenden Elektronen und Rückstoßionen, zu kennen. Zur Flugzeitbestimmung muss also der Reaktionszeitpunkt, sowie der Nachweiszeitpunkt bekannt sein. Die Projektile werden nach Ladungszustand getrennt und deren Nachweiszeitpunkt aufgezeichnet. Unter Berücksichtigung der Impulserhaltung lässt sich so die Reaktion rekonstruieren. Während der Elektronen- und der Rückstoßionendetektor Detektionsort und Nachweiszeitpunkt liefern, erhält man den Reaktionszeitpunkt bei beiden Reaktionsmechanismen auf unterschiedliche Weise.

### Reaktionsmechanismus 1: Ionisation: $p + He \rightarrow p + He^+ + e^-$

Um den Reaktionszeitpunkt zu bestimmen, kommt hier ein Strahlpulser zum Einsatz, welcher durch die möglichst kurzen Zeitintervalle in denen eine Reaktion stattfinden kann einen engen Rahmen für den Reaktionszeitpunkt liefert. Dadurch sinkt natürlich die Reaktionsrate und es erhöht sich die nötige Messzeit, um ausreichend Statistik zu erhalten.

### Reaktionsmechanismus 2: Transferionisation: $p + He \rightarrow He + He^{2+} + e^-$

Bei der Transferionisation lässt sich ausnutzen, dass die Projektile während der Reaktion ein Elektron einfangen und durch den neuen Ladungszustand durch elektrostatische Ablenkung von den übrigen Projektilen getrennt und nachgewiesen werden können. Durch den Nachweis lässt sich der Reaktionszeitpunkt bestimmen und ein Strahlpulser wird überflüssig, was der Reaktionsrate zu Gute kommt.

### Mindestanforderung an die Auflösung des Rückstoßionendetektors

Um bei der Transferionisation die Anregung des Wasserstoffs sicher erkennen zu können, muss auf dem Rückstoßionen-Detektor eine Impulsauflösung in Strahlrichtung deutlich kleiner als  $\Delta p_z = \Delta Q / v$  erreicht werden. Der Q-Wert bezeichnet die Energiedifferenz zwischen beiden Anregungszuständen. Die Geschwindigkeit  $v$  ergibt sich mit  $2E/m$  aus dem Quotienten der Stoßenergie (5 kV) und der Energie der Targetatome.

$$\Delta p_z = \frac{\Delta Q}{v}$$

$$\Delta p_z = \frac{0.37 a.u.}{0.63 a.u.} = 0.59 a.u.$$

$$\text{Mit: } \Delta Q = 10 eV = 10/27.2 \text{ a.u. und } v = \sqrt{10 kV / 25 kV} = 0.63 a.u.$$

In der Simulation wurde eine Auflösung besser als 0.27 a.u. erreicht, was genügt, um die Rückstoßionen sicher nach beiden Reaktionsmechanismen zu trennen. Dies ist nötig, da die Elektronen-Wellenfunktion in beiden Mechanismen unterschiedliche Topologien besitzt.

## **Umsetzung**

### **Nachweis der Wirbel auf dem Detektor**

Da es sich hier bei den Wirbeln um „Null-Wahrscheinlichkeiten“ im Wahrscheinlichkeitsfluss der Wellenfunktion des Elektrons handelt, können diese selbstverständlich nur statistisch erfasst werden. Wenn es also gelingt, zu unterscheiden, welche Reaktion stattgefunden hat und die zugehörigen Stoßparameter genau genug bekannt sind, lassen sich die statistischen Daten, die der Elektronendetektor liefert, nach Abgleich mit dem Rückstoßionendetektor, derart filtern, dass kleine Punkte, die von Elektronen unberührt sind, in der Elektronenverteilung sichtbar werden müssten.

Wo und in welcher Häufigkeit diese zu erwarten sind und was die Ergebnisse der Gruppe um Joe Macek im Detail sind, soll nun im Anschluss dargestellt werden.

## **Theoretischer Hintergrund**

### **Ursprung der Wirbel**

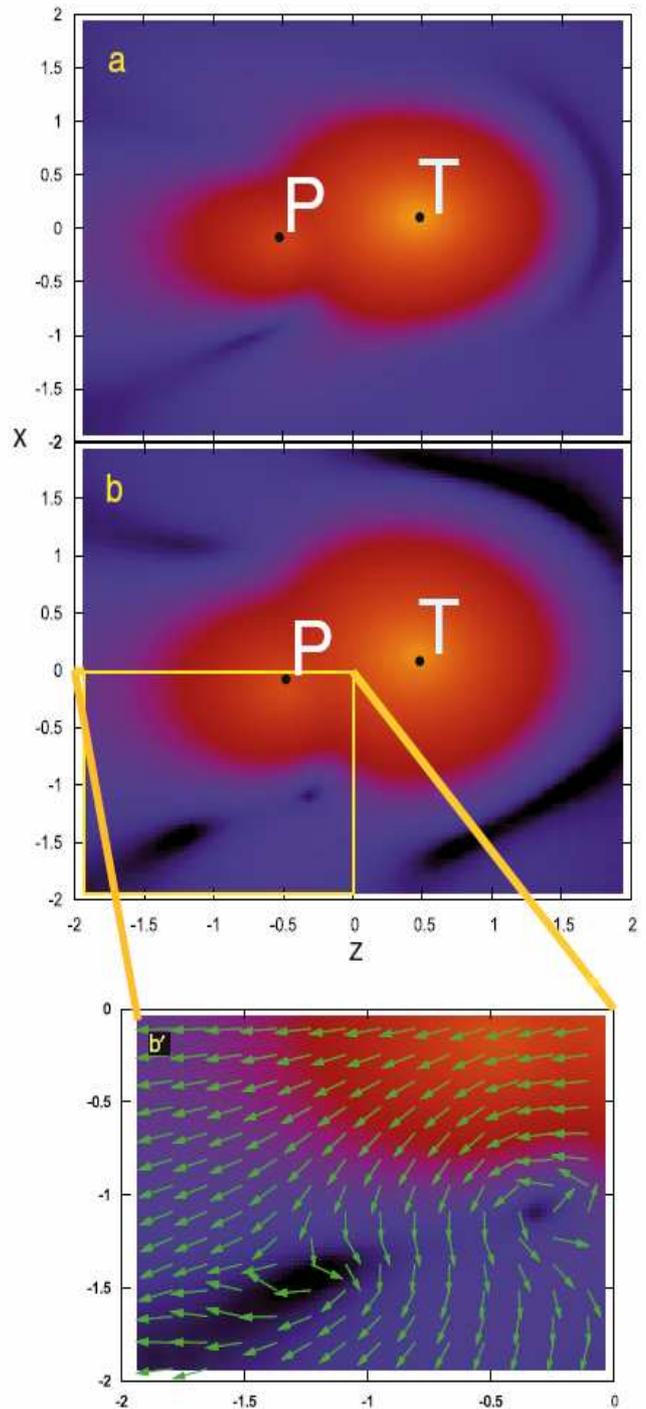
Warum wurden solche Wirbel in einer Ein-Teilchen-Wellenfunktion bisher weder im Experiment noch in vorangegangenen Rechnungen gesehen? Frühere Berechnungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung auf einem Gitter waren nicht in der Lage, diese Wellenfunktion bis zu hinreichend großen Kernabständen zu propagieren, da kein skaliertes Gitter verwendet wurde. In den bisher durchgeführten Experimenten konnten aufgrund der begrenzten Auflösung und Statistik die mit den Wirbeln verbundenen Minima in der Elektronenverteilung nicht beobachtet werden. Man ging bei der Konzeption der Experimente bei langsamen Stoßgeschwindigkeiten davon aus, dass es abgesehen vom Target- und Projektil-Cusp, keine sehr scharfen Strukturen in den Impulsverteilungen gibt [6]. Die Minima im Zentrum der Wirbel haben in der theoretischen Vorhersage eine Ausdehnung von weniger als  $0.04 v_p$ .

In Abb. 1 ist die Veränderung der Wellenfunktion des Elektrons, während sich das Projektil (P) dem Target (T) nähert, dargestellt.

In (a) ist die Wellenfunktion bei einem Abstand von 5 a.u. zu sehen. Im unteren linken Viertel des Bildes erkennt man bereits, wie sich ein dunkler Streifen - welcher eine geringere Elektronenaufenthaltswahrscheinlichkeit repräsentiert - separiert.

In (b), bei einem Abstand von 4.8 a.u., ist der Wirbel in der Wellenfunktion, der sich von der Knotenlinie gelöst hat, bereits deutlich zu erkennen. Im vergrößerten Ausschnitt (b') ist der Wahrscheinlichkeitsfluss eingezeichnet. Dieser "rotiert" um das Zentrum mit verschwindender Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

Neben diesem eben beschriebenen "Tornadowirbel" liefert die theoretische Berechnung außerdem noch andere topologische Objekte, welche als "Ringwirbel" bezeichnet werden [4].



**Abb 1:** Die Elektronenwellenfunktion mit Veränderung des Kernabstandes. Der rote Bereich repräsentiert hohe Aufenthaltswahrscheinlichkeiten, schwarze Bereiche Null-Wahrscheinlichkeiten.

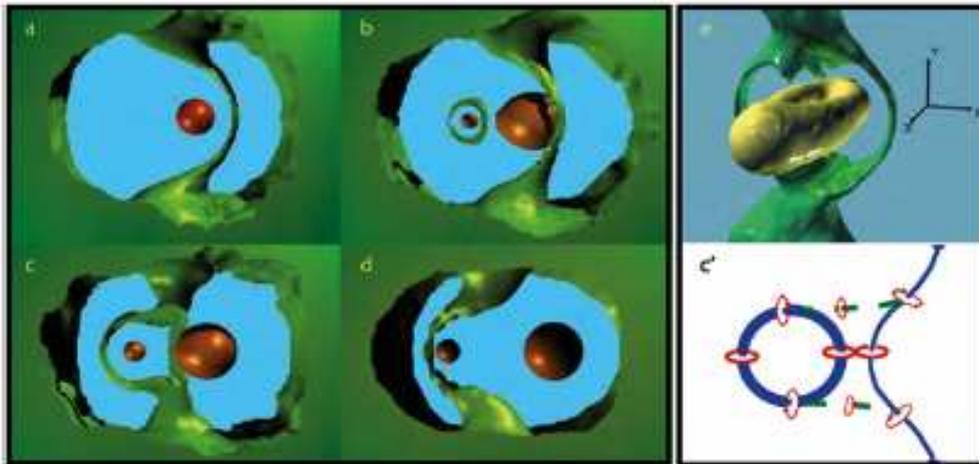
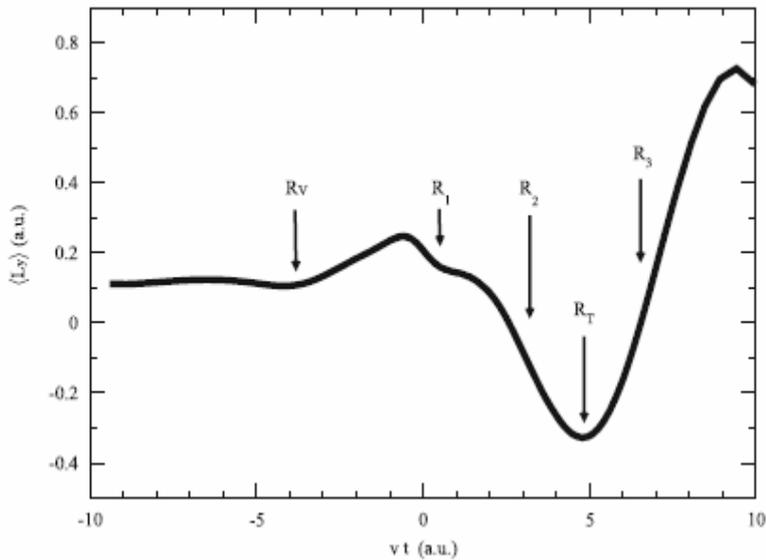


Abb. 2: In den Teilen a-d ist Projektil und Targetatom durch die bronzenen Kugeln dargestellt. Das grüne Volumen repräsentiert Null-Wahrscheinlichkeiten in der Wellenfunktion des Elektrons bei verschiedenen Kernabständen. e' schematisiert die Verbindung des Tornadowirbels mit dem Ringwirbel. e zeigt das Maximum der Wellenfunktion (gelb), sowie deren Nullstellen (grün) nach der Kollision.

In Abbildung 2 sieht man, dass sich - aus einer anderen Perspektive heraus betrachtet - der Tornadowirbel in einer frühen Phase der Kollision um das Target-Atom bei  $R = 5.8$  a.u.(a) windet. Das Target-Atom ist hier die größere der beiden Kugeln. Bei  $R = 6.1$  entsteht ein Ringwirbel um das Projektil mit einigem Abstand zu diesem (b). Etwas später bei  $R = 6.2$  a.u., während der Tornadowirbel weiter um das Targetatom rotiert ist, verbinden sich beide Wirbel (c), bis bei  $R = 6.3$  a.u. der Ringwirbel absorbiert wurde und der Tornadowirbel nun um das Projektil rotiert. In (c') ist schematisch die Kollision des Tornadowirbels mit dem Ringwirbel dargestellt. Da die Rotation um die obere gestrichelte Linie der Rotation um die untere gestrichelte Linie entgegengesetzt ist, vernichtet sich dieser Teil und ausschließlich der Tornadowirbel bleibt bestehen.

In (e) sieht man die Wirbel bei  $R = 50$  a.u. nach der Kollision. Der gelbe Torus repräsentiert dabei das Maximum der Elektronen-Wellenfunktion, die grünen Oberflächen das Minimum. Man sieht also deutlich zwei Tornadowirbel, welche den gelben Torus umschließen und zwei kleinere Wirbel, die von oben auf den gelben Torus deuten [4].



Die theoretischen Berechnungen zeigen außerdem, dass sich der Mittelwert des Elektronendrehmoments senkrecht zur Kollisionsebene mit dem Fortschreiten der Zeit, bzw. des Projektilortes  $vt$ , deutlich ändert, was ohne das Auftreten von Wirbeln nicht erklärt werden kann.

**Abb 3: Das mittlere Drehmoment senkrecht zur Kollisionsebene aufgetragen gegen den Projektilort  $vt$ .**

In den letzten Momenten der gebundenen Zustände, wenn einige Tornadowirbel den Atomkernen anhaften, projizieren sie Drehmoment auf eine Achse senkrecht zur Streuebene und übertragen letztendlich Drehmoment von einem Proton auf das andere. Die vorher beschriebene Verbindung des Tornadowirbels mit dem Ringwirbel scheint dabei entscheidend zu sein für den Übertrag von relativer Drehbewegung zu interner Drehbewegung [4]. In dem Graphen in Abbildung 3 ist die Änderung des mittleren Drehmoments während des Reaktionsvorgangs dargestellt. Die Rechnung wird dabei zunächst im Laborsystem durchgeführt und wechselt nach der Kollision zu skalierten Koordinaten. Die Linie startet mit einem Drehmoment von  $bv/4 = 0.112$  und der Stoßgeschwindigkeit  $v = 0.447$  a.u. In Abwesenheit der Wirbel wäre eine konstante Linie zu erwarten. Die hier vorliegenden Strukturen dagegen sind direkt mit dem Auftreten der Tornadowirbel verbunden. So treten erste Wirbel bei  $R_v$  auf, bei  $t=0$  wird aufgrund des quasi-molekularen Zustandes Drehmoment übertragen, bei  $R_t$  binden Wirbel zum ersten mal an das Targetproton und übertragen Drehmoment auf dieses. Bei  $R_{1,2,3}$  bilden sich Ringwirbel, welche allerdings keinen Einfluss auf die Drehmomentsübertragung haben, da sie kein Netto-Drehmoment transportieren.

## COLTRIMS-Methode

Die Detektion des Experiments findet nach der sogenannten COLTRIMS-Methode statt. Die Reaktionsprodukte - Elektronen und Rückstoßionen - werden dabei durch das angelegte elektrische Feld auf zwei gegenüber liegende Detektoren beschleunigt. Die deutlich leichteren und schnelleren Elektronen werden, auf einen 50 mm vom Reaktionsort entfernten Detektor mit einem Durchmesser von 120 mm, beschleunigt, während die Rückstoßionen über eine 928 mm lange Strecke durch elektrostatische Linsen auf einen Detektor mit einem Durchmesser von 80 mm gelenkt werden.

Die einzigen aufzunehmenden Meßgrößen sind die Orte, an denen die Teilchen auf die Detektoren treffen, deren Flugzeit, sowie das Zeitsignal des Strahlpulser, bzw. der Nachweiszeitpunkt der Projektile. Um ein deterministisches Verhalten zu garantieren, findet die Messung im Ultrahochvakuum statt. Die freie Weglänge der (neutralen) Teilchen ist damit auf etwa 100 km erhöht und lässt von einem stoßfreien Verhalten ausgehen. Mit Kenntnis der Maße des Spektrometers und dessen Potentialverlauf lassen sich damit die Trajektorien jedes einzelnen Teilchens berechnen - man gelangt also zur Kenntnis des Impulsvektors zum Ionisationszeitpunkt. Mit dieser Methode lassen sich alle Teilchen, unabhängig der Ausrichtung ihres Impulses, detektieren - man spricht von einer  $4\pi$ -Raumwinkelakzeptanz [7].

Die Auftrefforte und Flugzeiten werden gelistet gespeichert und lassen sich nachfolgend ordnen, um nach bestimmten Ereignissen zu filtern oder die Detektion zu eichen.

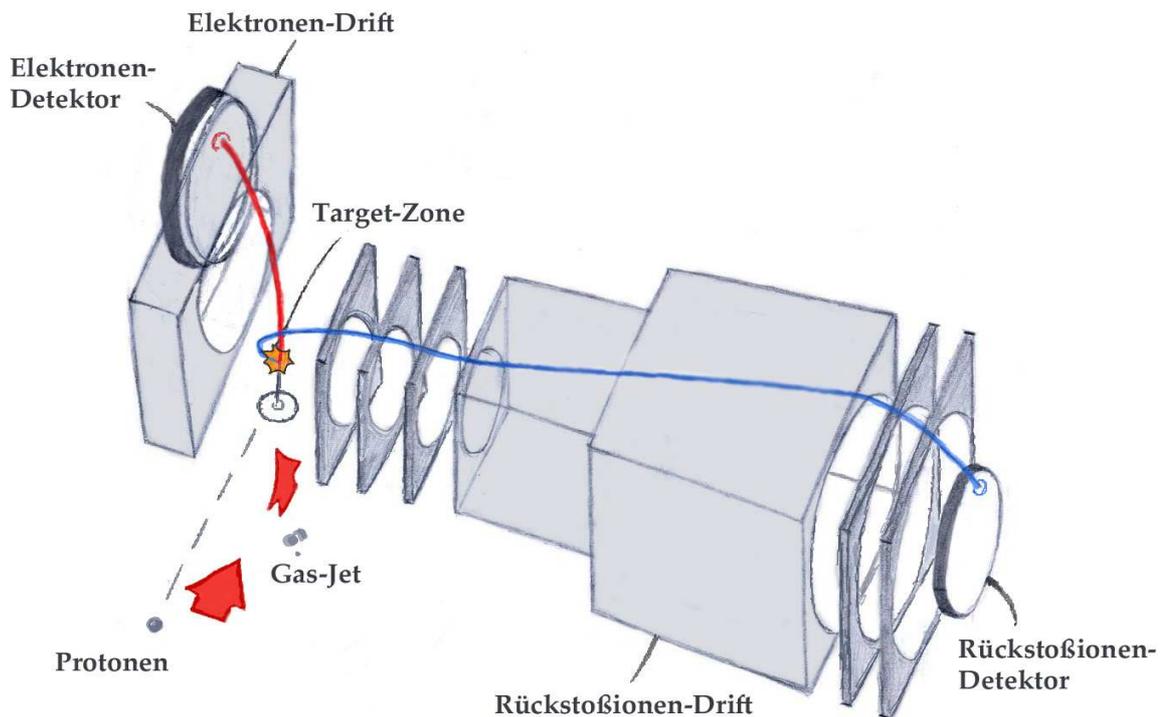


Abb. 4: Hier schematisch dargestellt, sieht man das Spektrometer mit exemplarischen Teilchentrajektorien eines Elektrons (rot) und eines Rückstoßions (blau). Die Protonen treffen in der Targetzone auf den Gasjet und von dort aus werden Elektron und Rückstoßionen auf die gegenüberliegenden Detektoren beschleunigt. Im feldfreien Raum in den Driftstrecken erfahren sie dabei keine Beschleunigung – diese dienen der Erhöhung der Flugzeitdifferenzen.

Da das Phasenraumvolumen der Elektronen nicht symmetrisch um die Spektrometerachse verteilt ist, ist das Spektrometer auf der Elektronenseite entsprechend asymmetrisch. Um das ebenfalls verschobene Phasenraumvolumen der Rückstoßionen zu kompensieren, wird ein Teil des Spektrometer gegenüber der Rückstoßionen-Drift gekippt – was in dieser Darstellung nicht zu sehen ist. Darauf wird später noch genauer eingegangen.

Es fällt außerdem auf, dass die Rückstoßionen stark aufgefächert werden um dann wieder auf den Rückstoßionen-Detektor fokussiert zu werden. Dies ist eine Folge der niedrigen Feldstärke in der Targetzone und notwendig um eine gleichzeitige Orts- und Zeitfokussierung zu erreichen.

Im Vergleich zu vorhandenen Spektrometern muss nämlich das elektrische Absaugfeld stark reduziert werden, um die Elektronenverteilung im Nachweisort und in der Flugzeit drastisch aufzuweiten. Dies führt jedoch zu Problemen beim Nachweis der Rückstoßionen, denn die Ionen bekommen durch das niedrige Feld am Reaktionsort nur sehr wenig Energie, müssen jedoch vor dem Erreichen des Detektors auf eine Energie von ca. 2 keV beschleunigt werden, um eine ausreichende Nachweiseffizienz zu gewährleisten [8].

Normalerweise verwendet man eine Beschleunigungslinse mit anschließender Driftstrecke, um den Einfluss der Targetausdehnung auf die Messgrößen zu minimieren und so die nötige Auflösung bei der Rückstoßionen-Impulsmessung zu erreichen. Durch ein Gitter entkoppelt folgt danach ein homogenes Feld, welches die Ionen auf die zum Nachweis nötige Energie beschleunigt. Dieses übliche Konzept ist hier aufgrund der geringen Feldstärke am Reaktionsort nicht anwendbar. Wenn die Ionen beim Erreichen des Gitters erst wenige eV Energie aufgenommen haben, zerstört der Felddurchgriff durch ein solches Gitter die Abbildungseigenschaften des Spektrometers. Aus diesem Grund müssen mehrere elektrostatische Linsen in das Spektrometer eingebaut werden, damit die Rückstoßionen bis auf 80 eV beschleunigt und dann erst auf ein Gitter vor dem Detektor abgebildet werden.

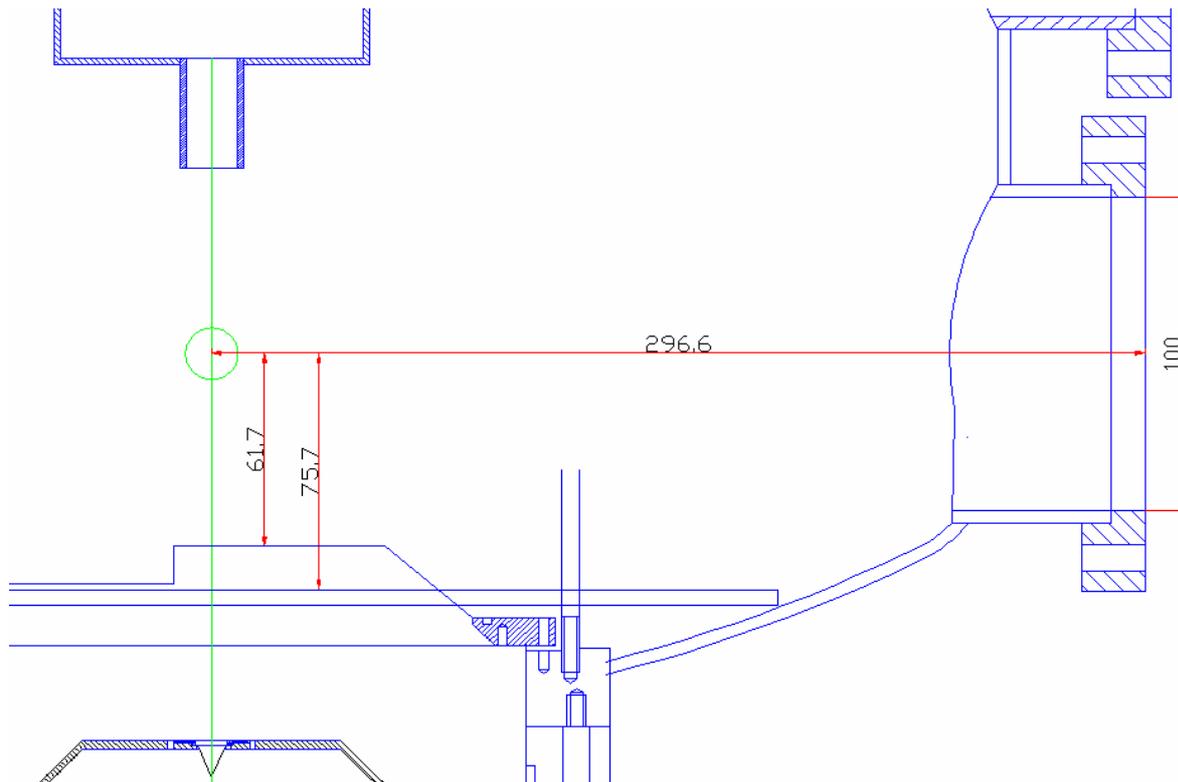
## 2. *Simion*-Simulation

Um genaue Aussagen über die passende Spektrometergeometrie treffen zu können, wurde der experimentelle Aufbau mittels der Simulationssoftware *Simion 8.0* simuliert [9]. Damit lässt sich über eine graphische Benutzeroberfläche eine Anordnung von Elektroden konstruieren, deren elektrische Potentiale variiert werden können. In dieser Anordnung lassen sich dann verschiedene Teilchen mit variablen Anfangsbedingungen kreieren, deren Trajektorien von dem Programm berechnet werden. Durch Auswertung der Flugzeiten und der Verteilung der Nachweisorde auf dem Detektor bei unterschiedlichen Spektrometer-Designs lässt sich die Simulation optimieren. Einschränkend sind hier die Größe der Detektorflächen, sowie die vorgegebenen Maße der Vakuum-Kammer zu sehen, in welche das Spektrometer letztlich eingebaut wurde.

Die größte Schwierigkeit der Simulation bestand darin, die Spektrometergeometrie dem Phasenraumvolumen der zu detektierenden Elektronen und Rückstoßionen optimal anzupassen. Die Elektronen werden aus dem Ladungs- bzw. Masseschwerpunkt des Stoßsystemes emittiert und sind deshalb im Laborsystem in Strahlrichtung gerichtet. Aufgrund des Überschall-Gasjets, der letztendlich mit dem Protonenstrahl gekreuzt wird, ist auch die Rückstoßionenverteilung stark asymmetrisch. Ursächlich für diese Asymmetrien ist die Tatsache, dass der verhältnismäßig hohe Impuls des Gasjets fast vollständig auf die Rückstoßionen übertragen wird, deren Masse gegenüber der Elektronenmasse dominiert. Im Gegensatz dazu wirkt sich die Bewegung des Ladungsschwerpunktes in Richtung des Projektilstrahls nur auf die leichten Elektronen aus, während die Rückstoßionen davon fast unbeeinflusst bleiben.

## Gegebene Randbedingungen

Das Spektrometer ist für den Einbau in eine bereits bestehende Kammer konzipiert und unterliegt deshalb einigen Maßvorgaben. Diese beschränkten sich hauptsächlich auf den Elektronenteil des Detektors und die mögliche Breite der Driftstrecke in Richtung des Rückstoßionendetektors.



**Abb. 5:** Ein Schnitt durch die Experimentierkammer. Links ist die Targetzone zu sehen, rechts befindet sich der Kammerausgang in Richtung Rückstoßionen-Drift. Die kritischen Maße sind rot eingezeichnet.

Der grüne Kreis stellt die Targetzone dar, die eingetragenen Maße zeigen die entscheidenden Abstände, die zu beachten waren. Die Nähe zum Jethut und zur Grundplatte führte dabei zu einigen nötigen Materialausparungen im Bereich der Spektrometerplatten und des Elektronendetektors, die 100 mm breite Öffnung in Richtung des Rückstoßionen-Detektors zu einer stärkeren elektrostatischen Linse, um zu verhindern, dass Teilchen an den Wänden der Drift reflektiert werden. Die stärkere Linse wiederum bedingt größere Korrekturterme bei Impuls- und Zeitauflösung.

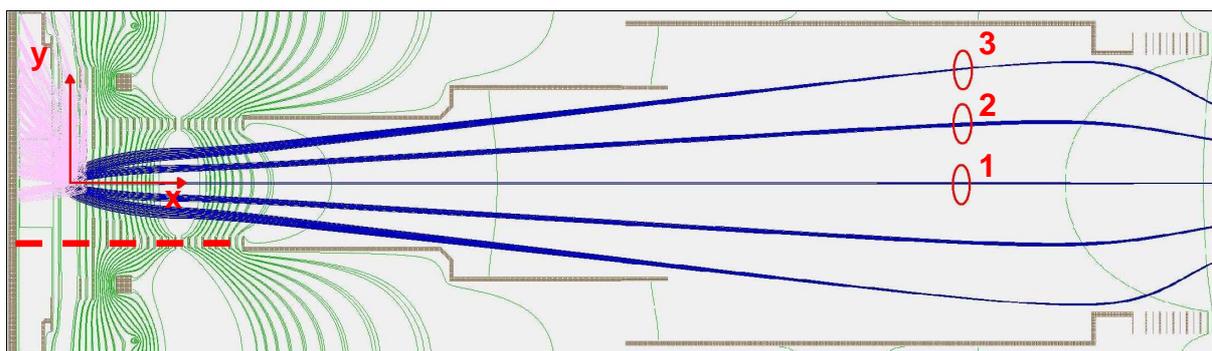
## Konventionen

Um im Folgenden die wichtigsten Zusammenhänge einfach zu umschreiben, sollen hier einige Konventionen bezüglich der gewählten Bezeichnungen eingeführt werden. So werde ich von verschiedenen "Startorten" der Elektronen bzw. Rückstoßionen schreiben, wobei zu bedenken ist, dass es sich außerhalb der Simulation natürlich nicht um Startorte, sondern um Entstehungsorte der Reaktionsprodukte handelt und deren abweichende Lokalisierung lediglich durch die Targetausdehnung bedingt ist.

Da in der Simulation zunächst vereinfachend fünf verschiedene Impulse senkrecht zur Strahlachse betrachtet werden, die zudem an der Spakrometerachse gespiegelt sind, wird außerdem von den Teilcentrajektorien 1-3 (siehe Abb. 6) die Rede sein, welche den meisten nötigen Anschauungen genügen.

Die Koordinaten-Achsen sind wie in der Abbildung gewählt, wobei das simulierte Spektrometer entlang der x-Achse eine Zylindersymmetrie besitzt. Ausgehend von der Targetzone in positiver x-Richtung befindet sich die hier sogenannte "Rückstoßionenseite", während sich in negativer x-Richtung die "Elektronenseite" befindet.

Zusätzlich soll erwähnt sein, dass die Elektronenseite lediglich in der Simulation zylindersymmetrisch ist, während sie tatsächlich, schon aufgrund des begrenzten Raumes in der Experimentierkammer, nur einseitig deutlich über die Spektrometerachse hinausragt. Das wurde hier durch die gestrichelte Linie angedeutet. Die Simulation zeigt eine Draufsicht auf das Spektrometer.



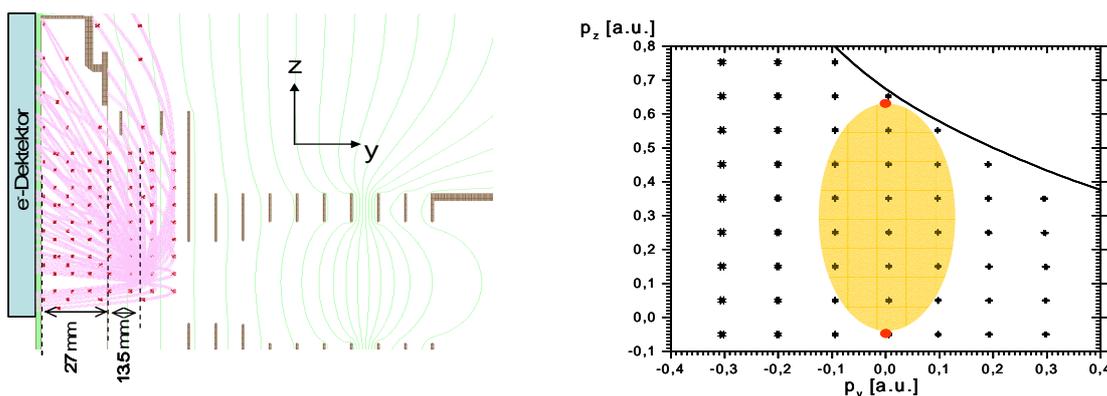
„Elektronenseite“

„Rückstoßionenseite“

Abb. 6: Ein Blick „von oben“ auf das Spektrometer. Der Koordinatenursprung befindet in der Targetzone, die Flugzeitrichtung verläuft entlang der x-Achse, die Ortsrichtung entlang der y-Achse.

## Elektronenspektrometer

Die Elektronenseite des Spektrometers bestand bereits in der Form, in der sie auch in diesem Projekt verwendet wurde und wird hier nur kurz behandelt. Die Simulation dieses Teils ist deshalb weniger aufwendig, weil hier keine elektrostatische Linse sinnvoll einzubringen ist, um eine Orts- und Zeitfokussierung zu erreichen. Im Grunde bestünde auch Interesse die Elektronen zu fokussieren, allerdings würde eine Linse die Flugzeitunterschiede zu klein werden lassen. Die logische Konsequenz, die Driftstrecke zu verlängern, würde die Akzeptanz des Spektrometers noch weiter reduzieren, da bereits im Fall der kurzen Driftstrecke der Detektor mit einem Durchmesser von 120 mm einen Teil des Phasenraumvolumens der Reaktionsprodukte nicht mehr erfasst. Die langsamen Rückstoßionen dagegen ermöglichen aufgrund ihrer höheren Masse das Einbringen einer Beschleunigungsstrecke mit einer elektrostatischen Linse ohne dabei die Flugzeitunterschiede zu sehr schrumpfen zu lassen.



Hier ist die Simulation des Elektronenspektrometers zu sehen. Ein schwaches elektrisches Feld von etwa 0.09 V/mm projiziert die Elektronen auf einen MCP-Detektor mit 120 mm Durchmesser. Nach einer Absaugstrecke von 13,5 mm folgt eine durch ein Gitter getrennte Drift von 27 mm, welche den Effekt der Targetausdehnung auf die Impulsmessung in Feldrichtung (y-Achse) reduziert. Die simulierten Elektronen starten auf einem Gitter im Impulsraum mit  $p_{z,e} = -0.05, 0.05, 0.15 \dots 0.75$  a.u. und  $p_{y,e} = -0.3, -0.2, -0.1, \dots 0.3$  a.u. In der rechten Abbildung sieht man, welche Impulse unter Berücksichtigung der Ausdehnung des Reaktionsvolumens eine Messung ergeben würde. Die erwartete Elektronenverteilung für das Stoßsystem 10 keV p + He ist gelb markiert. Innerhalb dieses Bereiches wird eine Impulsauflösung von 0.012 a.u. = 0.02 m<sub>e</sub>v<sub>p</sub> erreicht. Die Elektronen, welche nach rechts oben, also in Strahlrichtung und gegen Absaugrichtung, emittiert werden, können nicht nachgewiesen werden [5].

## Rückstoßionenspektrometer

Der Teil des Spektrometers, der dem Nachweis der Rückstoßionen dient, musste aufgrund der besonderen Anforderungen, welche die geringe Feldstärke in der Targetzone an das Rückstoßionenspektrometer stellt, vollständig neu simuliert werden. Zwei wesentliche Ziele wollen durch ein geeignetes Design erreicht werden. Zum einen soll die Targetausdehnung, welche etwa 1-1,2 mm betragen wird, möglichst wenig Einfluß auf die Messgrößen haben. Das heißt, dass eine kleine Variation der Reaktionsortes einen möglichst kleinen Einfluß auf den Detektionsort und die Flugzeit des Ions haben soll.

Zum anderen sollen die Impulskomponenten in alle Raumrichtungen möglichst linear auf die Meßgrößen abgebildet werden. Eine Verdopplung des Impulses in Ortsrichtung soll also möglichst auch zu einem doppelten Abstand des Detektionsortes von der Spektrometerachse führen und die Flugzeit soll sich ebenso linear mit dem Impuls in Flugzeitrichtung verändern. Diese Ziele können in einem Spektrometer dieser Art physikalisch zwar nicht gänzlich erreicht werden, dennoch gelingt es später, durch Wahl geeigneter Eichfunktionen, eine gute Annäherung an das Optimum zu erzielen.

Andere Effekte, die ebenso die Auflösungseigenschaften des Spektrometers beeinflussen und die es zu minimieren gilt, sind die chromatische und die sphärische Abberation. Erstere, wird dadurch reguliert, dass man die elektrostatische Linse in der Beschleunigungsstrecke so platziert, dass die Rückstoßionen bereits eine genügend hohe Energie erreicht haben und die relativen Impulsunterschiede möglichst gering sind. Die sphärische Abberation, die von der Form der elektrostatischen Linsen abhängt, wird durch geeignete Wahl des Öffnungsdurchmessers der Spektrometerplatten und der Linsenstärke beeinflusst.

## Basis der Simulation

Um möglichst nah am tatsächlichen Experiment zu sein und die Simulation dennoch auf das Wesentliche zu reduzieren, wurde eine Targetausdehnung von  $1\text{mm}^2$  mit fünf Startorten für Rückstoßionen mit einer Impulsverteilung von  $\pm 10$  a.u. gewählt. Da das Spektrometer im, für die Rückstoßionen relevanten Bereich, zylindersymmetrisch ist, konnte die Simulation auf die x-y-Ebene beschränkt werden. An jedem dieser fünf Startorte wurden dann jeweils Ionen mit den folgenden Impulsen (in a.u.) erzeugt:

Impuls x/y [a.u.]	10	5	0	-5	-10
10	10/10	5/10	0/10	-5/10	-10/10
5	10/5	5/5	0/5	-5/5	-10/5
0	10/0	5/0	0/0	-5/0	-10/0
-5	10/-5	5/-5	0/-5	-5/-5	-10/-5
-10	10/-10	5/-10	0/-10	-5/-10	-10/-10

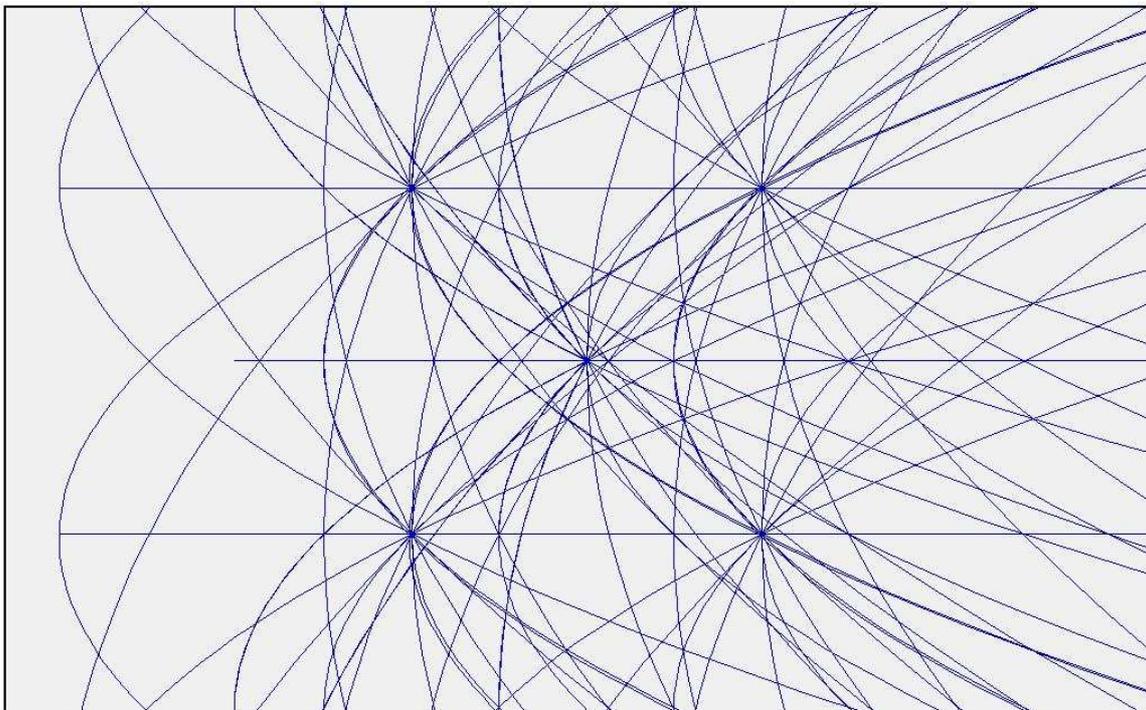


Abb. 7: Die fünf Startorte auf einer Fläche von  $1\text{mm}^2$ . Von jedem Ort starten 25 Ionen mit obigen Impulskombinationen. Die Simulation wurde zunächst mit  $\text{He}^+$ -Ionen durchgeführt.

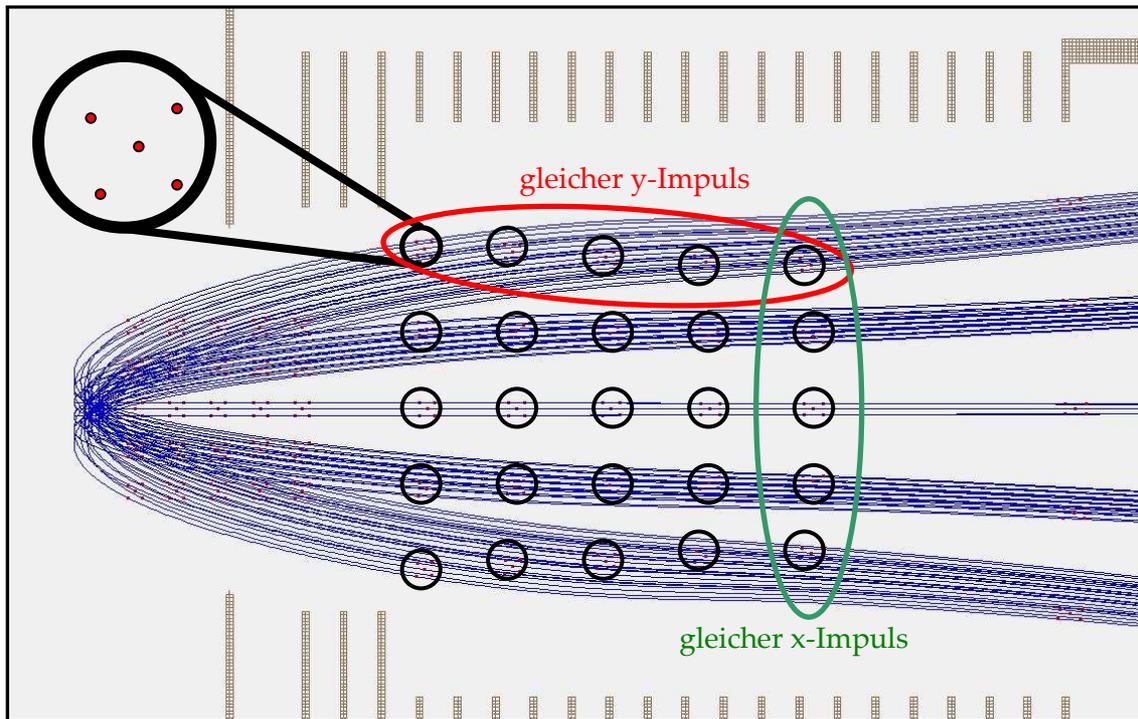


Abb. 8: Eine Ansicht der Teilchentrajektorien im Bereich der Beschleunigungsstrecke. Hier sieht man deutlich, dass sich die Teilchenbahnen - ausgehend von der Targetzone - zu fünf Strängen ordnen, was den fünf verschiedenen Impulsen in y-Richtung entspricht (10, 5, 0, -5, -10 a.u.). Der Impuls in x-Richtung resultiert in einer Anordnung auf gleicher Höhe in Flugzeitrichtung.

Bei den durch technische Begebenheiten vorgegebenen Randbedingungen soll nun erreicht werden, dass sich die Anfangsimpulse möglichst unabhängig von dem Startort des Teilchens, aus der Flugzeit und dem Auftreffort am Detektor, exakt berechnen lassen. Die Spektrometergeometrie soll eine Ortsfokussierung - also die Fokussierung aller Teilchen mit gleichem Impuls in Ortsrichtung auf einen Punkt des Detektors (in einer 3-dimensionalen Ansicht wäre es natürlich ein Kreis) - und eine Zeitfokussierung - also das gleichzeitige Ankommen der Teilchen, die sich ausschließlich durch den Startort unterscheiden - gewährleisten.

## Optimieren der Simulation

### Physikalische Eigenschaften des Spektrometers:

Im Folgenden sollen die veränderlichen Parameter bei der Konstruktion des Spektrometers und die mit deren Veränderung einhergehenden physikalischen Effekte anschaulich dargestellt werden.

Die Stärke der elektrostatischen Linsen, deren Position, die Länge der Driftstrecke, sowie die Position des Detektors sind jene Variablen, welche dabei entscheidenden Einfluss auf die Orts- und Zeitauflösung, also letztendlich die Impulsauflösung, nehmen und sich flexibel verändern lassen. Um zu verstehen, in welcher Weise sich die Teilchentrajektorien mit Veränderung dieser Variablen verhalten und welche Mechanismen hinter diesen Effekten stehen, gehe ich nun etwas detaillierter auf die Vorgehensweise zum Erreichen einer möglichst scharfen Orts- und Zeitfokussierung ein.

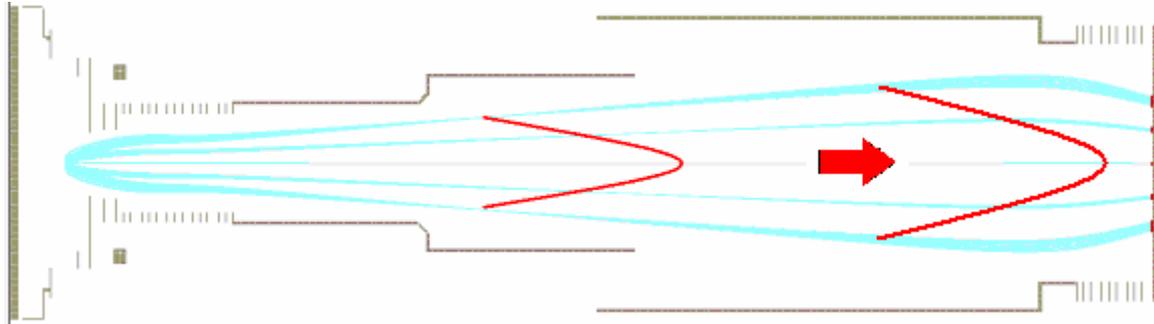
### Ortsfokussierung

Die Ortsfokussierung erfordert ähnlich wie in optischen Abbildungen ein Linsensystem. Um zu erreichen, dass alle Ionen mit gleichem Impuls in Orts-Richtung auf einer möglichst kleinen Fläche auf dem Detektor abgebildet werden, fokussiert man hier mit Hilfe elektrostatischer Linsen.

### Verlauf der Ortsfokussierung:

Für Ionen, welche die elektrostatische Linse im größten Abstand zur Spektrometerachse passieren, wirkt die elektrostatische Linse stärker fokussierend (d.h. die Brennweite ist kürzer), da die elektrostatische Linse in den Randbereichen eine stärkere Krümmung aufweist und die Brennpunkte für unterschiedliche Impulse in  $y$ -Richtung somit auf einer gekrümmten Oberfläche liegen. Dadurch ist es unmöglich für sämtliche Impulse in  $y$ -Richtung eine gleichmäßige Fokussierung auf dem ebenen Detektor, welcher in der  $y$ - $z$ -Ebene liegt, zu erhalten.

Der Verlauf der Trajektorien ist in der folgenden Abbildung für eine zu starke Linse exemplarisch dargestellt. Die Lage der Fokusebene verschiebt sich mit einer Abschwächung der Linse, wie es der Pfeil andeutet:



**Abb. 9:** Hier wurde der Potentialsprung zur elektrostatischen Linse gegenüber der optimalen Einstellung um 5 Volt erhöht, die Linse also verstärkt. Damit kann man die Lage der gekrümmten Fläche, auf der die Brennpunkte der Linse liegen, besser erkennen. Im tatsächlichen Design liegt die rote Kurve zum größten Teil hinter dem Detektor. Der Pfeil deutet die Veränderung der Lage der Fokussierung mit einer Abschwächung der elektrostatischen Linse um etwa 3 Volt an.

Eine Verstärkung der Linse führt also offensichtlich dazu, dass die Position des Ortsfokus näher an die Linse heranrückt, wie man das auch aus der Optik kennt. Ein Verschieben der Linse hat den offensichtlichen Effekt, dass sich die Position des Ortsfokus mit der Linse verschiebt. Da sich der, für den Nachweis der Wirbel elementare Stoßparameter, nur für enge Stöße gut abschätzen lässt, welche zu großen Impulsüberträgen führen, ist es wichtig den Randbereich des Detektors - welcher letztendlich Ionen nach engen Stößen detektieren wird - ähnlich scharf zu stellen, wie den Bereich des halben Detektorradius, welcher die meiste Statistik aufweisen wird. Deshalb wurde sich hier für eine optimale Fokussierung im Bereich von  $\frac{2}{3} r$  entschieden.

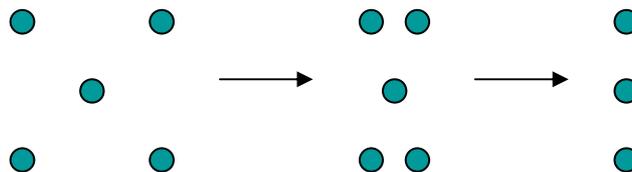
Durch die Fokussierung geht der lineare Zusammenhang zwischen Detektionsort und  $y$ -Impuls verloren, was anschließend durch eine entsprechende Eichfunktion wieder herausgerechnet wird. Dennoch ist darauf zu achten, dass der Grad der Abweichung von einer linearen Verteilung nicht zu groß ist, da dies zu großem Rechenaufwand führen würde und außerdem eine manuelle Fokussierung nach Testmessungen erschwert.

## Flugzeitfokussierung

Um zu erreichen, dass Ionen mit gleichen Impulsen, trotz möglicher Unterschiede, im Reaktionsort gleichzeitig auf den Detektor treffen, erweitert man ein Spektrometer um eine Driftstrecke. Aber auch durch Position und Stärke der elektrostatischen Linsen lässt sich die Zeitfokussierung beeinflussen.

### Verlauf der Flugzeitfokussierung

Durch die Targetausdehnung kommt es in und nach der Beschleunigungsstrecke des Spektrometers nach gleichen Flugzeiten zu deutlich unterschiedlichen Positionen der Ionen. Dies kommt dadurch zustande, dass ein Ion, welches sich näher zum Elektronendetektor befindet, eine längere Beschleunigung erfährt. Um eine optimale Zeitfokussierung zu erhalten, wurde der Detektor so platziert, dass er die Teilchen möglichst dann detektiert, wenn sie gerade auf "gleicher Höhe" sind, wie er hier noch einmal dargestellt ist:

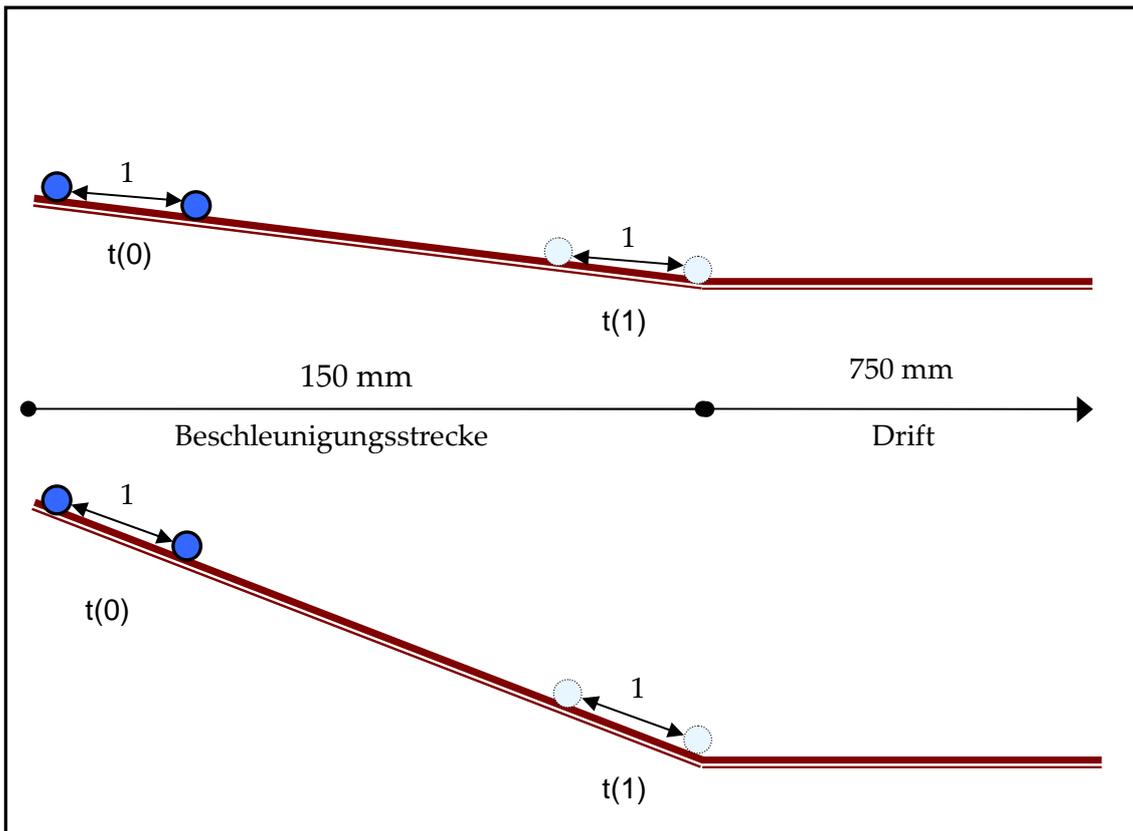


Durch die deutlich unterschiedlichen Ionentrajektorien, abhängig vom Impuls in Ortsrichtung, liegt der Zeitfokus für verschiedene Teilchenbahnen, wie auch beim Ortsfokus, nicht in einer Ebene und man muss aufgrund des ebenen Detektors erneut einen Kompromiss eingehen. Die Ionen mit größerem Impuls in Ortsrichtung fokussieren aufgrund der längeren Trajektorie deutlich früher auf der x-Achse, als Ionen ohne Impuls in Ortsrichtung. Der Zeitfokus liegt also ebenfalls auf dem Teil einer gekrümmten Oberfläche. Die zusätzliche Nach-Beschleunigung vor dem Rückstoßionen-Detektor, welcher einen Durchmesser von nur etwa 80mm besitzt, erschwert die Zeitfokussierung allerdings zusätzlich, da dort wiederum Ionen mit größerer Nähe zur Strahlachse früher und stärker beschleunigt werden als weiter außen liegende - was verstärkt in den Randbereichen wieder zu einer Vergrößerung der Flugzeitdifferenz abhängig vom "Startort" des Teilchens führt.

Im Folgenden soll im Detail gezeigt werden, welche vielleicht nicht offensichtlichen Effekte überhaupt zur Zeitfokussierung führen und in welcher Weise sich eine Verschiebung oder Verstärkung der Linse auf den Zeitfokus auswirkt. Das Ergebnis wird sein, dass eine stärkere Linse zu einer weiter hinten liegenden Zeitfokussierung führt und ein Verschieben der Linse dazu führt, dass der Ort der Zeitfokussierung seine Position der Verschiebungsrichtung entgegengesetzt verändert. Die Frage ist nun aber, wieso dieser Effekt eintritt.

Um den Mechanismus hinter der Zeitfokussierung und die Möglichkeiten darauf einzuwirken zu veranschaulichen, habe ich versucht, über eine Analogie mit zwei Kugeln auf einer Rampe, zu einfacherem Verständnis zu gelangen. Die unterschiedlichen Startorte der beiden Kugeln auf der Rampe entsprechen dabei den unterschiedlichen "Startorten" der Rückstöße aufgrund der Targetausdehnung. Das Gefälle entspricht dem Potentialgefälle, verursacht durch die elektrostatische Linse. Der Fokuspunkt ist dann erreicht, wenn die hintere Kugel die vordere Kugel eingeholt hat.

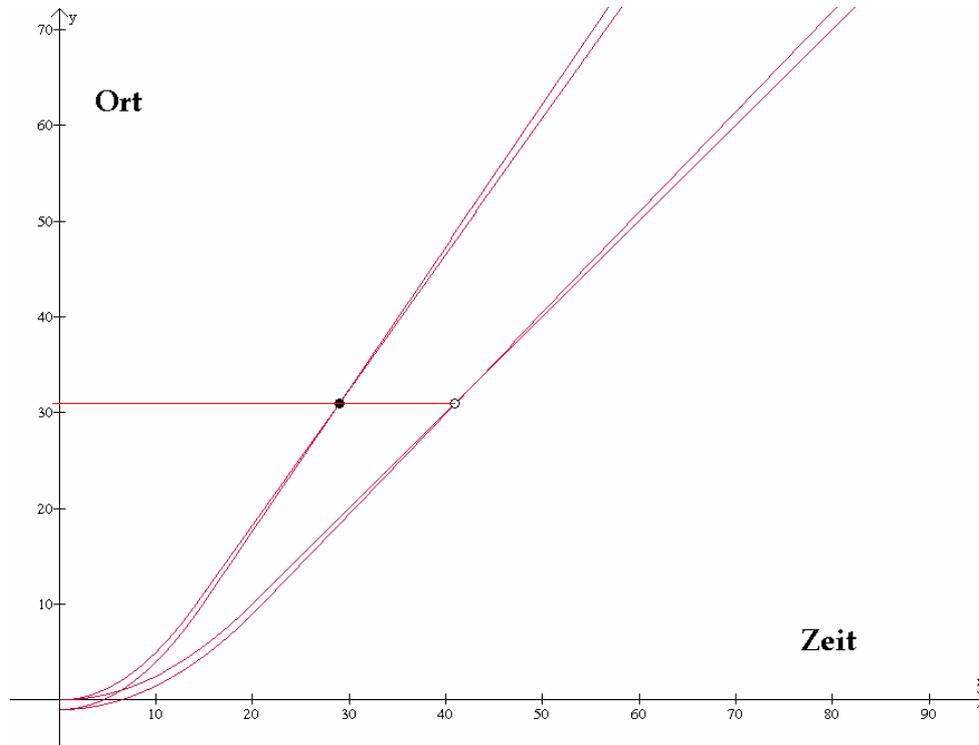
Zunächst mag es vielleicht überraschen, dass man durch eine Veränderung der Stärke der Beschleunigung überhaupt die Position des Zeitfokus beeinflussen kann. Im Fall einer konstanten Beschleunigung, wie sie zwischen zwei Spektrometerplatten gegeben ist, ist es nicht möglich, den Fokuspunkt in der darauffolgenden Drift zu verschieben, indem man die Stärke der Beschleunigung verändert, ohne Startort oder Abstand der beiden Teilchen zu verändern.



**Abb. 10:** Auf beiden Beschleunigungsstrecken verändert sich der Abstand der Kugeln bis zum Erreichen der Driftstrecke (Zeitpunkt  $t(1)$ ) nicht. Zwar ist die Geschwindigkeitsdifferenz in beiden Fällen eine andere, dies hat aber lediglich einen Einfluß auf den Zeitpunkt des Zusammenstoßens, nicht aber auf den Ort.

Man kann sofort verstehen, dass sich der Abstand der beiden Kugeln bis zum Ende der Beschleunigungsstrecke aufgrund der konstanten Beschleunigung nicht verändern wird. Ebenso ist klar, dass die hintere Kugel die vordere Kugel auf der beschleunigungsfreien Driftstrecke irgendwann einholen wird. Dies findet in beiden Fällen am selben Ort (auf der Driftstrecke) statt. Im Fall einer steileren Beschleunigungsstrecke wird die hintere Kugel zwar schneller aufholen, doch, da die vordere Kugel ebenfalls schneller ist, bleibt der Ort des Zusammenstoßens gleich. Unabhängig von der Stärke der konstanten Beschleunigung wird die zweite Kugel die erste also an einem festen Ort treffen, der ausschließlich von Abstand und Startposition der beiden Kugeln abhängt – lediglich der Zeitpunkt des Zusammentreffens verändert sich. Ein Verlängern der Beschleunigungsstrecke hingegen würde das Zusammentreffen im Ort, nicht in der Zeit, nach hinten verschieben. Aber zunächst geht es ja nur darum zu klären, wieso eine stärkere Linse dennoch den Ort des Zeitfokus verschiebt.

Es ist also lediglich der Zeitpunkt des Zusammentreffens abhängig von der Stärke der Beschleunigung und liegt bei stärkerem Gefälle früher in der Zeit, wie man im unteren Graphen erkennt.



**Abb. 11:** Hier sieht man jeweils zwei Funktionen, die sich lediglich durch ihren y-Achsenabschnitt, also den Startort unterscheiden und dann bis zum y-Wert 10 eine gleiche Beschleunigung erfahren und ab dann konstant steigen. Beide Funktionenpaare erfahren eine unterschiedlich starke Beschleunigung und doch unterscheidet sich der Schnittpunkt lediglich in der Zeit, nicht jedoch im Ort.

Wieso lässt sich also der Ort des Zeitfokus durch ein Verstärken der elektrostatischen Linse verschieben, ohne deren Position zu verändern?

Erst eine, sich mit der Zeit ändernde Beschleunigung, ermöglicht es, durch Variation dieser Änderung, die Lage der Zeitfokussierung zu beeinflussen. Je stärker sich die Beschleunigung ändert, desto weiter hinten (im Ort) wird die hintere Kugel die vordere Kugel einholen. Auch das kann man sich anschaulich klar machen, wenn man die Beschleunigungsstrecke für beide Kugeln, in diesem sich ändernden Gefälle, durch eine konstante Beschleunigung nähert. Die unterschiedlichen Startorte beider Kugeln im Beschleunigungsfeld führen dazu, dass die vordere Kugel eine stärkere mittlere Beschleunigung erfährt als die hintere Kugel, da der flache Bahnverlauf zum Teil nicht mehr durchlaufen werden muss. Eine Näherung mit einer konstanten Beschleunigung führt also dazu, dass die vordere Kugel eine steilere Rampe hinabläuft, als die hintere Kugel – was unweigerlich zu einem Verschieben des Zusammenstoßes „nach hinten“ führt.

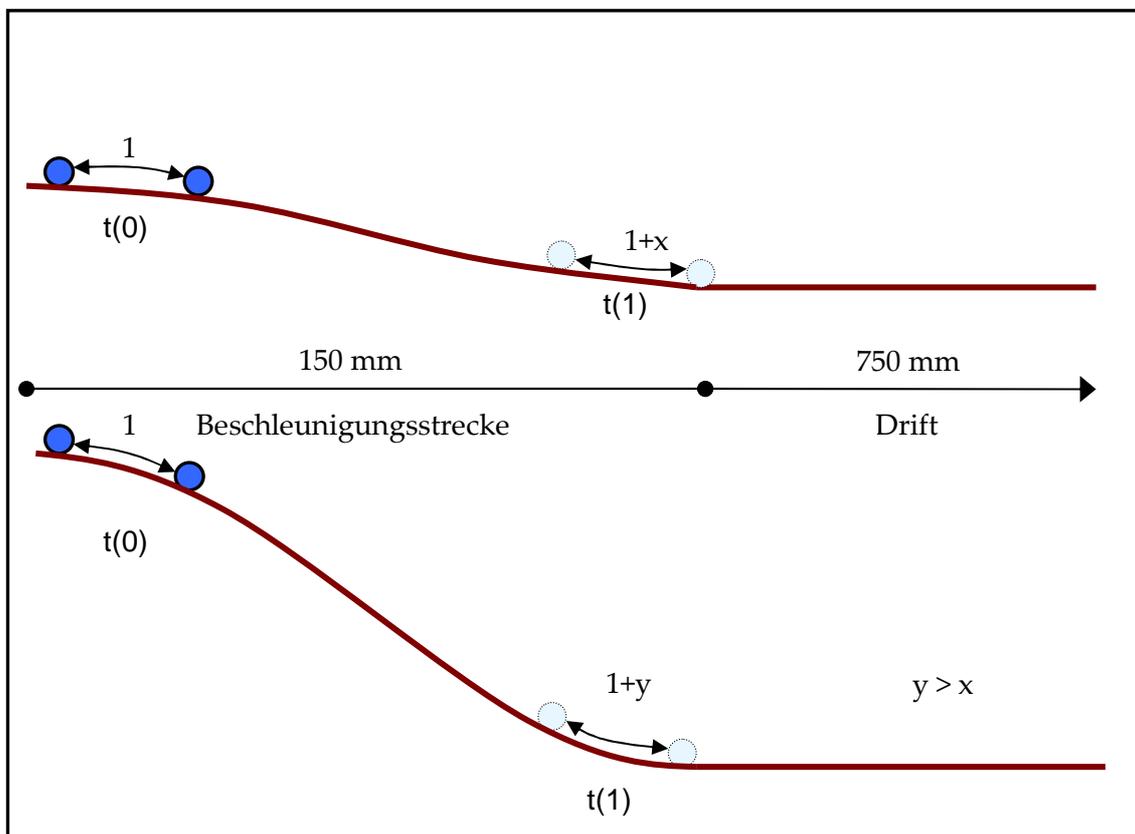
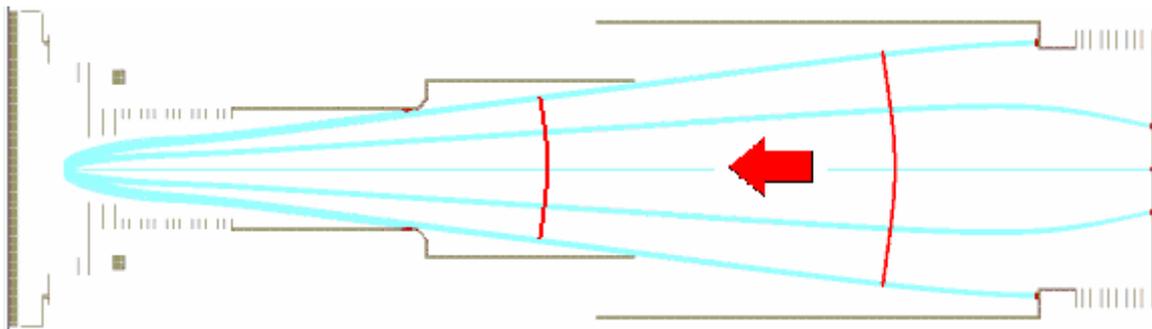


Abb. 12: Im Falle einer nicht konstanten Beschleunigung verändert sich der Abstand beider Kugeln abhängig vom Gefälle bis zum Erreichen der Drift. Bei einem stärkeren Gefälle (unten) ist der Abstand der beiden Kugeln am Ende der Beschleunigungsstrecke am größten und führt dazu, dass sich der Ort des Zusammenstoßes nach hinten verschiebt.

Bleibt nun die Änderung der Beschleunigung gleich und verschiebt man lediglich die Position, die den Beginn der Beschleunigung markiert, nach rechts, werden beide Kugeln in einem flacheren Bereich starten und deren Abstand dadurch weniger Einfluss auf die mittlere Beschleunigung haben. Übertragen auf das Spektrometer folgt daraus, dass sich die Position der Zeitfokussierung entgegengesetzt zur Verschiebung der Linse verändert und eine stärkere elektrostatische Linse zu einer Verschiebung der Zeitfokussierung im Ort nach "hinten" (in Flugzeitrichtung) führt. Das ist entgegengesetzt zum Verhalten der Ortsfokussierung und entspricht den Ergebnissen, die auch die Simulation liefert.

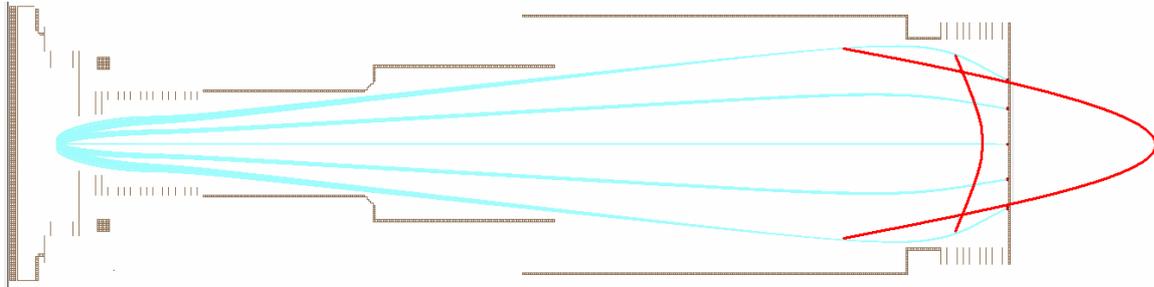
In der folgenden Abbildung sieht man den Verlauf der Trajektorien bei einer stark abgeschwächten elektrostatischen Linse, während die roten Linien die Lage der Zeitfokussierung und deren Veränderung bei einer weiteren Abschwächung der elektrostatischen Linse zeigen.



**Abb. 13:** Hier wurde der Potentialsprung zur elektrostatischen Linse um 2 Volt verringert. Die rechte rote Linie entspricht der Lage der Zeitfokussierung bei dieser Einstellung. Eine weitere Abschwächung um etwa 3 Volt würde zu einer Zeitfokussierung auf Höhe der linken roten Linie führen.

### Die Lage von Orts- und Zeitfokus im endgültigen Spektrometerdesign:

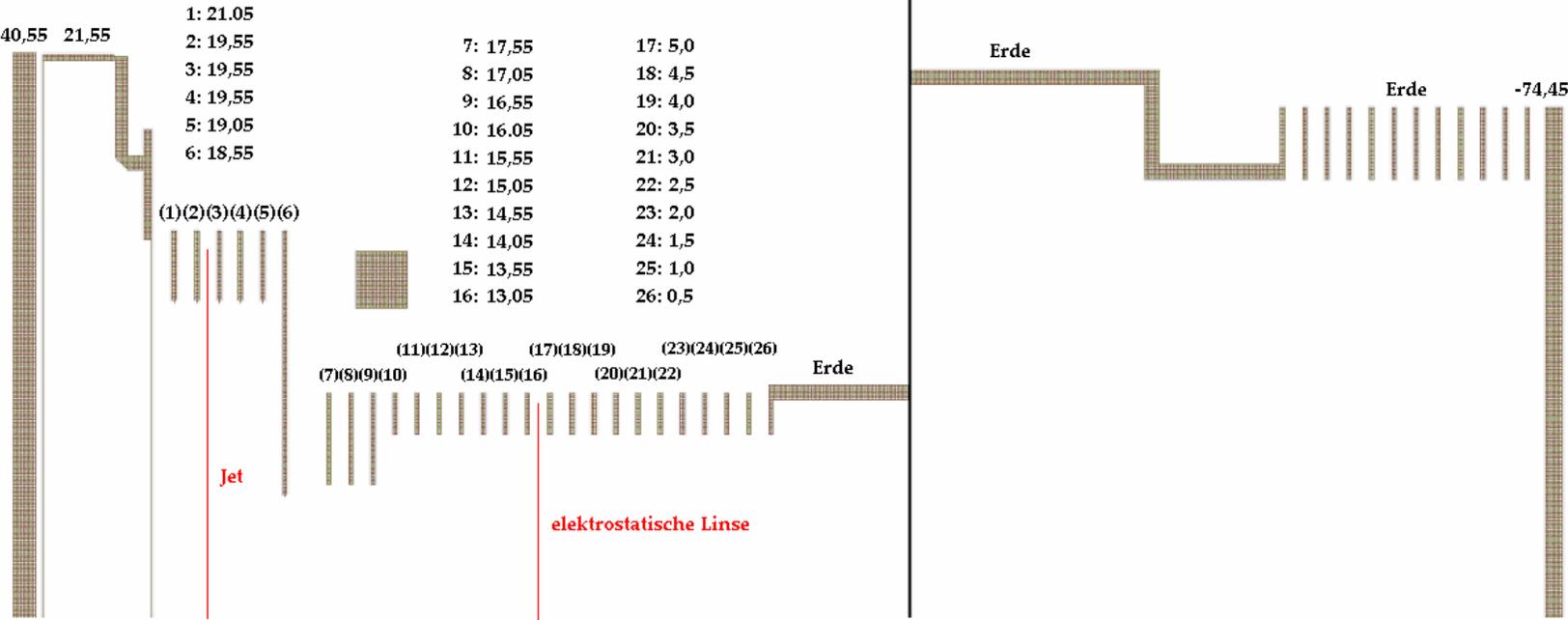
Die gekrümmten Oberflächen des Orts- und Zeitfokus liegen in der endgültigen Konfiguration wie in Abbildung 14 auf dem Detektor.



**Abb. 14:** Die Stärke und Position der Linse sowie die Länge der Driftstrecke wurde so optimiert, dass Orts- und Zeitfokus möglichst auf dem Detektor liegen und eine maximale Impulsauflösung resultiert.

Diese Konfiguration wird mit folgenden Spektrometereinstellungen erreicht:

# Vorhersagen der Simulation



## **Auswertung der Simulationsdaten**

Die Simulation liefert für jedes simulierte Rückstoßion eine Flugzeit und einen Detektionsort. Diese Daten gilt es nun auszuwerten um die genauen Abbildungseigenschaften des Spektrometers zu kennen. Hier wurde für diese Auswertung das Programm Origin 8.1 verwendet.

## Die Rohdaten der Simeon-Simulation

	A[Y]	usec[Y]	y[Y]	t[Y]	zw.Rechnung[Y]	px[X]	py[Y]
	Ionennummer	Flugzeit [usec]	Detektionsort [mm]	Flugzeit [ns]	Zwischenrechnung	x-Impuls [a.u.]	y-Impuls [a.u.]
96	96	33.7262	63.5203	33726.2	-420.6	-10.02512	10.06165
97	97	34.4031	63.298	34403.1	256.3	-4.92449	10.02102
98	98	35.0717	63.0724	35071.7	924.9	0.11497	9.9798
99	99	35.7361	62.8806	35736.1	1589.3	5.11306	9.94478
100	100	36.3994	62.7506	36399.4	2252.6	10.08498	9.92105
101	101	33.7233	-63.567	33723.3	-423.5	-10.06038	-10.07019
102	102	34.4025	-63.3772	34402.5	255.7	-4.95203	-10.03549
103	103	35.0732	-63.1836	35073.2	926.4	0.09391	-10.00011
104	104	35.7395	-63.0237	35739.5	1592.7	5.0971	-9.97091
105	105	36.4043	-62.9282	36404.3	2257.5	10.07038	-9.95347
106	106	32.9817	-34.4272	32981.7	-1165.1	-9.9899	-4.96161
107	107	33.6555	-34.5372	33655.5	-491.3	-4.98864	-4.97991
108	108	34.3299	-34.6582	34329.9	183.1	0.01588	-5.00006
109	109	35.0061	-34.8383	35006.1	859.3	5.02747	-5.03006
110	110	35.685	-35.1306	35685	1538.2	10.04699	-5.07881
111	111	32.8058	0	32805.8	-1341	-9.97628	0
112	112	33.4757	0	33475.7	-671.1	-4.9926	0
113	113	34.1468	0	34146.8	-7.27596E-12	-5.4129E-14	0
114	114	34.8198	0	34819.8	673	5.00674	0
115	115	35.4949	0	35494.9	1348.1	10.0291	0
116	116	32.9817	34.4272	32981.7	-1165.1	-9.9899	4.96161
117	117	33.6555	34.5372	33655.5	-491.3	-4.98864	4.97991
118	118	34.3299	34.6582	34329.9	183.1	0.01588	5.00006
119	119	35.0061	34.8383	35006.1	859.3	5.02747	5.03006
120	120	35.685	35.1306	35685	1538.2	10.04699	5.07881
121	121	33.7233	63.567	33723.3	-423.5	-10.06038	10.07019
122	122	34.4025	63.3772	34402.5	255.7	-4.95203	10.03549
123	123	35.0732	63.1836	35073.2	926.4	0.09391	10.00011
124	124	35.7395	63.0237	35739.5	1592.7	5.0971	9.97091
125	125	36.4043	62.9282	36404.3	2257.5	10.07038	9.95347
126	126	33.7233	-63.567	33723.3	-423.5	-10.06038	-10.07019
127	127	34.4025	-63.3772	34402.5	255.7	-4.95203	-10.03549
128	128	35.0732	-63.1836	35073.2	926.4	0.09391	-10.00011
129	129	35.7395	-63.0237	35739.5	1592.7	5.0971	-9.97091
130	130	36.4043	-62.9282	36404.3	2257.5	10.07038	-9.95347
131	131	32.9817	-34.4272	32981.7	-1165.1	-9.9899	-4.96161
132	132	33.6555	-34.5372	33655.5	-491.3	-4.98864	-4.97991
133	133	34.3299	-34.6582	34329.9	183.1	0.01588	-5.00006
134	134	35.0061	-34.8383	35006.1	859.3	5.02747	-5.03006
135	135	35.685	-35.1306	35685	1538.2	10.04699	-5.07881
136	136	32.8058	0	32805.8	-1341	-9.97628	0
137	137	33.4757	0	33475.7	-671.1	-4.9926	0
138	138	34.1468	0	34146.8	-7.27596E-12	-5.4129E-14	0

Abb. 15: Hier sieht man einen Auszug der simulierten Daten. Insgesamt wurde mit 150 simulierten Teilchen gearbeitet (6 x 25). Die ersten drei Spalten sind Rohdaten, die letzten beiden Spalten zeigen den, mittels der Eichfunktionen errechneten Impuls in x- bzw. in y-Richtung.

Die einzelnen Kästchen liefern hier:

**Rot (1 Feld):** 5 Ionen mit gleichem y-Impuls (0) und x-Impulsen (-10, -5, 0, 5, 10).

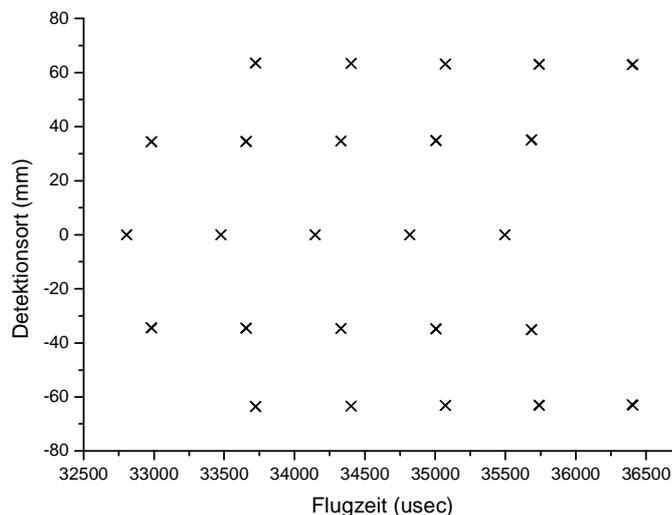
**Blau (5 Felder):** 5 Ionen mit gleichem x-Impuls (0) und y-Impulsen (-10, -5, 0, 5, 10).

**Grün (1 Feld):** Die 25 Auftrefforte resultierend aus den 25 Startimpulsen

**Violett (2 Felder):** 2 Ionen mit identischem Impuls, welche sich lediglich aufgrund der Targetausdehnung in ihrem Startort unterscheiden.

## Finden der Eichfunktion

Die Simulation liefert in der ursprünglichen Form also 150 unterschiedliche Detektionsort-Flugzeit-Kombinationen, welche noch einmal zu 5er-Gruppen, welche sich aufgrund der Targetausdehnung leicht unterscheiden, zusammengefasst werden können. Damit erhält man insgesamt 25 Kombinationen. Diese 25 Punkte repräsentieren die 25 unterschiedlichen Impulskombinationen, die anfangs an die simulierten Rückstoßionen vergeben wurden. Allerdings liegen diese Punkt noch nicht auf einem gleichmäßigen Gitter, wie die Startimpulse es vorgeben. Stattdessen erhält man folgendes Bild:



**Abb. 16:** Die Detektionsorte - gegen die Flugzeiten aufgetragen - liegen ohne eine passende Eichfunktion noch nicht auf einem gleichmäßigen Gitter.

Gesucht ist nun eine Funktion, welche diese 25 Punkte auf das, durch die Startimpulse festgelegte Gitter, verschiebt. Dabei ist ein optimales Ergebnis erwünscht, da die Präzision, mit der man sich diesem gleichmäßigen Gitter nähert, direkt die Impulsauflösung liefert.

Für den Impuls in Flugzeitrichtung (x-Richtung) ergibt sich eine Abhängigkeit von Flugzeit und Detektionsort, während der Impuls in Ortsrichtung (y-Richtung) ausschließlich vom Detektionsort abhängig sein wird. Diese Abhängigkeit des y-Impulses von nur einer Variable ist eine Folge der Ortsfokussierung des Spektrometers.

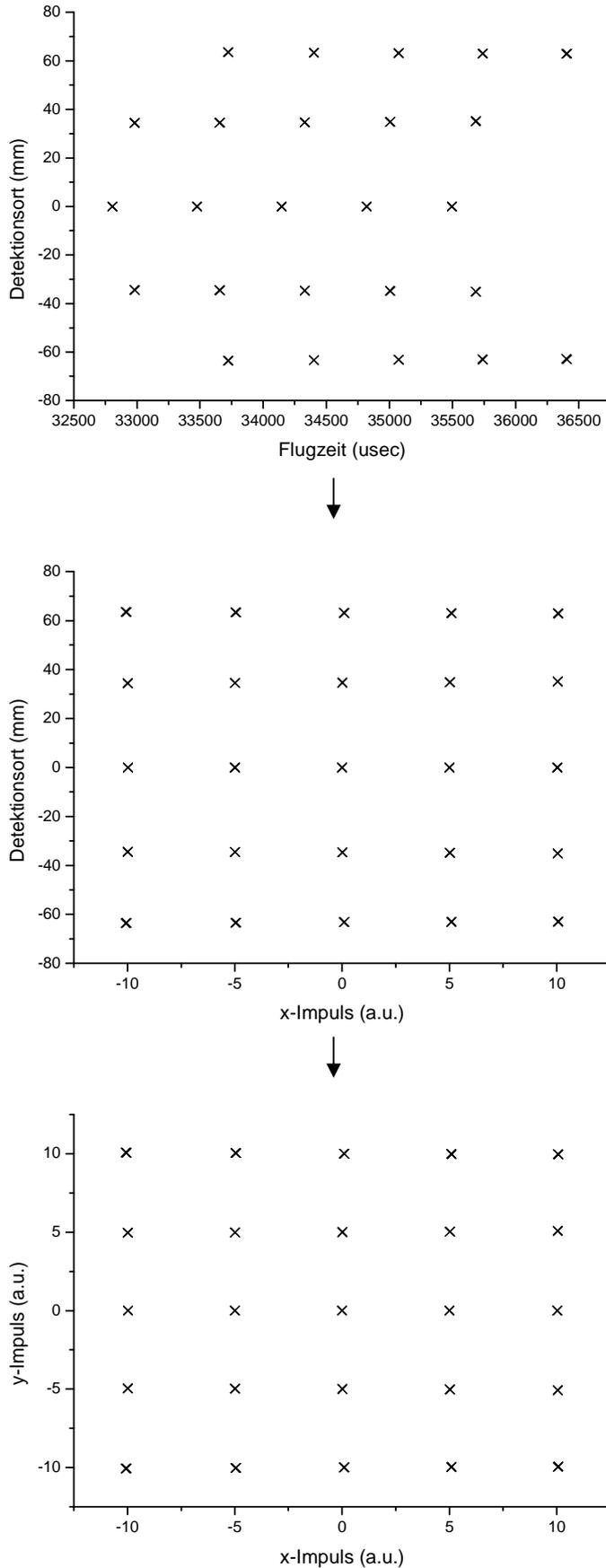


Abb. 17: Man möchte vom oberen Graphen, welcher den Auftreffort gegen die Flugzeit aufträgt, zum unteren Graphen gelangen, welcher die tatsächlichen Startimpulse der Teilchen zeigt.

Da eine einheitliche Eichfunktion gefunden werden muss, geht man davon aus, dass die simulierten Teilchenbahnen an der Spektrometerachse exakt gespiegelt sind und die Targetbreite nur vernachlässigbaren Einfluss auf Flugzeit und Auftreffort hat.

Um die Eichfunktion zu berechnen, muss aber ein deutlich feineres Flugzeit-Detektionsort-Gitter simuliert werden, da die ursprünglichen fünf Gitterpunkte pro Impuls in Flugzeit-richtung es zulassen, verschiedene Funktionen zu finden, die sie an die gewünschte Position verschieben.

## Impuls in Flugzeitrichtung

Um eine passende Eichfunktion für den Impuls in Flugzeitrichtung zu finden, wurden hier 20 verschiedene Impulse in Ortsrichtung betrachtet, welche jeweils den gleichen Impuls in Flugzeitrichtung besitzen. Dadurch lässt sich gut der Zusammenhang zwischen Detektionsort und Flugzeit erkennen. Aufgrund der gewundenen Trajektorien haben Rückstoßionen mit größerem Impuls in Ortsrichtung eine deutlich längere Flugzeit und es gilt diese Zeitunterschiede zu eliminieren.

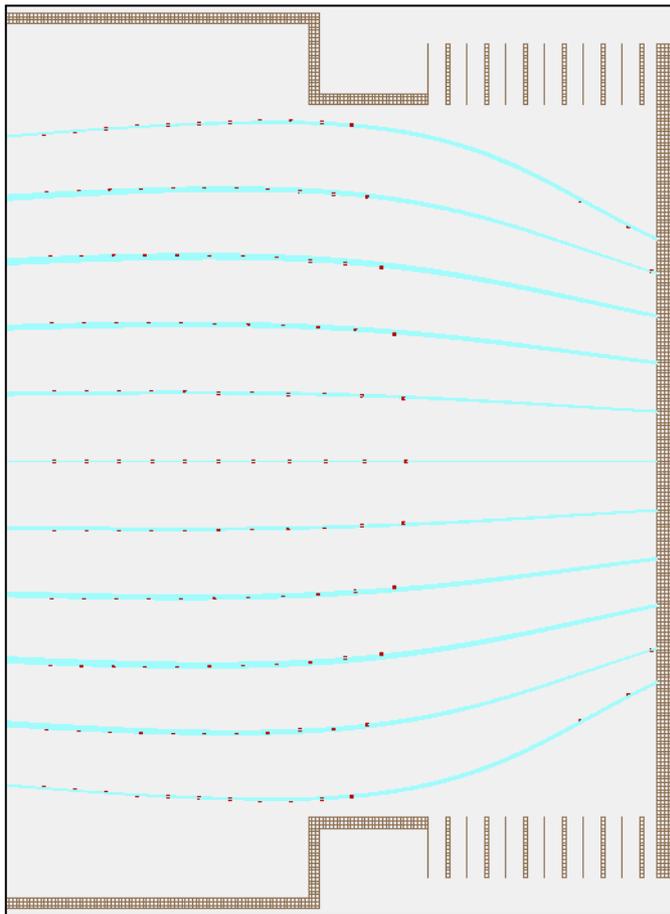


Abb. 19: Die roten Punkte in der linken Abbildung stehen jeweils für ein Rückstoßion mit einer bestimmten Impulskombination. Dieses Impulsgitter kommt offensichtlich für identische Impulse in Flugzeitrichtung nicht gleichzeitig am Detektor an. Die äußeren Rückstoßionen mit größeren Impulsen in Ortsrichtung besitzen aufgrund der längeren Trajektorie eine längere Flugzeit als Ionen mit Nähe zur Spektrometerachse. Die Eichfunktion soll den nichtlinearen Zusammenhang zwischen Detektionsort und Flugzeit bestimmen und herauskorrigieren.

Dazu wurde mittels der Kalkulations-Software *Origin 8.1* das Polynom gefunden, welches die Anordnung der Flugzeiten am besten nähert. Eine Subtraktion dieser Eichfunktion von den realen Flugzeiten führt dann annähernd zu einer Verschiebung der Flugzeiten auf eine Gerade.

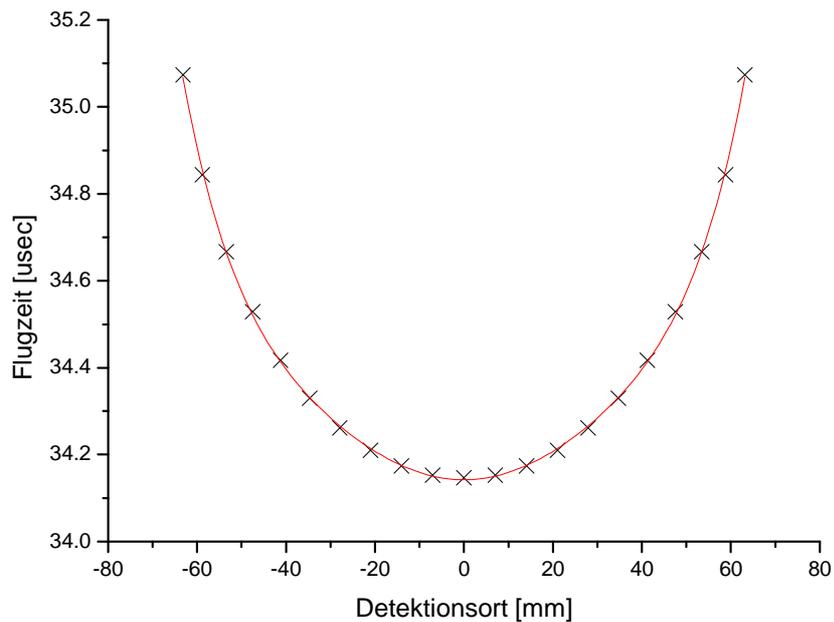


Abb. 18: Hier sieht man deutlich, wie die Flugzeiten mit zunehmendem Abstand zur Strahlachse stark zunehmen. Da aus der Simulation bekannt ist, dass dennoch alle hier dargestellten Teilchen den gleichen Impuls in Flugzeitrichtung besitzen, muss die Funktion gefunden werden, welche die Flugzeiten auf den gleichen Wert korrigiert.

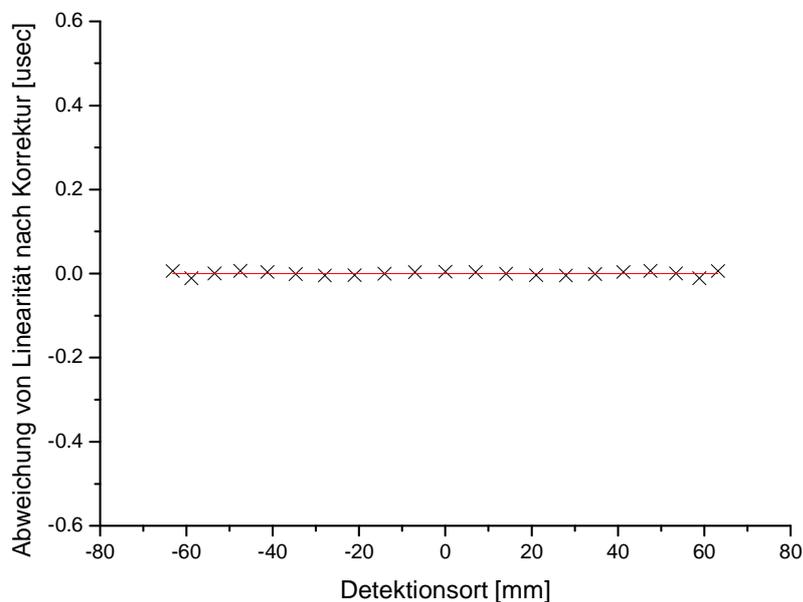


Abb. 19: Wie man sieht, werden die Abweichungen von einer Geraden im Randbereich des Detektors etwas größer, allerdings ist man versucht, einen ökonomischen Kompromiss zwischen Grad des Polynoms und nötiger Rechenleistung zu finden, weshalb diese Annäherung genügend genau ist.

Die Eichfunktion lautet schließlich:

$$([\text{Flugzeit}] - ([\text{Flugzeitschwerpunkt}] + [\text{Polynom}(\text{abh. vom Detektionsort})])) \cdot 7.38$$

Das Polynom ist hier ein Polynom 6ten Grades und abhängig vom Detektionsort  $y$ :

$$5.98^{-17} \cdot y + 1.71^{-4} \cdot y^2 - 8.97^{-20} \cdot y^3 - 2.3^{-8} \cdot y^4 + 2.45^{-23} \cdot y^5 + 9.57^{-12} \cdot y^6$$

Im ersten Term wird die mittlere Flugzeit über alle Rückstöße von der Flugzeit des zu betrachtenden Rückstoßes abgezogen, um den Flugzeitunterschied herauszustellen. Abhängig von diesem Flugzeitunterschied wird dann das, vom Detektionsort abhängige Polynom subtrahiert, um die bereits erwähnte Nicht-Linearität der Simulationsdaten herauszurechnen. Letztendlich wird das Ergebnis dann noch durch einfache Multiplikation skaliert, um die Flugzeiten den vorher festgelegten Impulsen in Flugzeitrichtung zuzuordnen.

Das Resultat der Korrektur für den Impuls in Flugzeitrichtung ist die Anordnung der Punkte auf einem rechteckigen Gitter. Um mit den Anfangsbedingungen der Simulation übereinzustimmen, müssen die Punkte aber noch auf ein quadratisches Gitter verschoben werden.

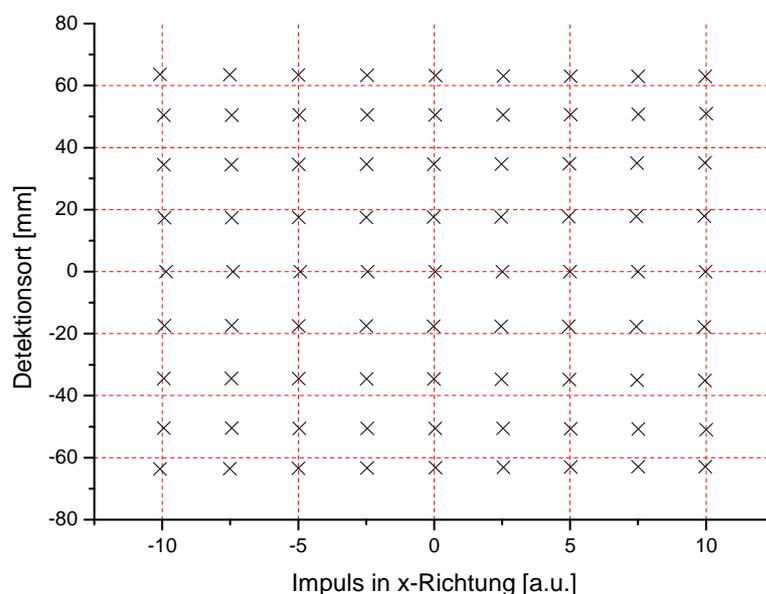


Abb. 20: Der Impuls in x-Richtung ist also bereits korrekt berechnet, allerdings ist ersichtlich, dass das Gitter zu betragsmäßig höheren Detektionsorten noch immer gestaucht ist.

## Impuls in Ortsrichtung

Auch die Ortsrichtung muss korrigiert werden, da auf dem Detektor, wie Abbildung 21 zeigt, kein linearer Zusammenhang zwischen Detektionsort und Impuls in Ortsrichtung besteht.

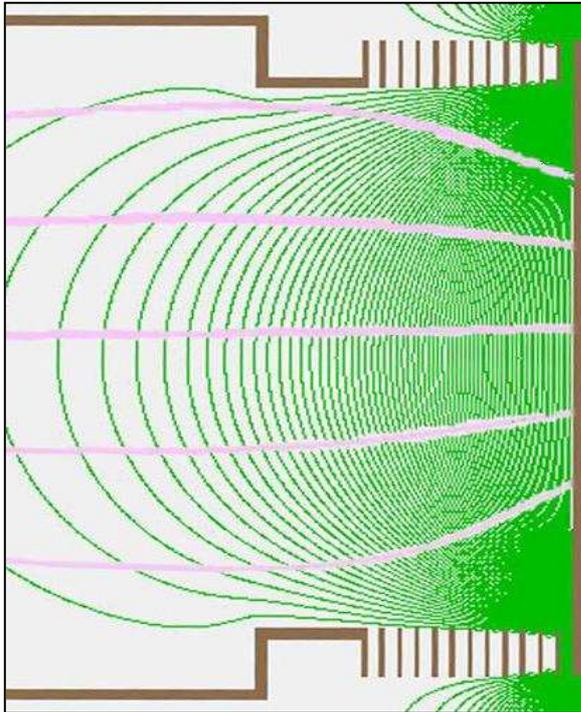
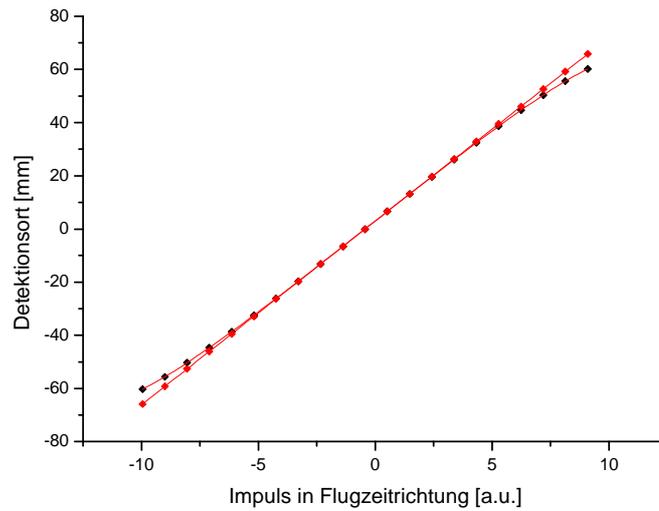


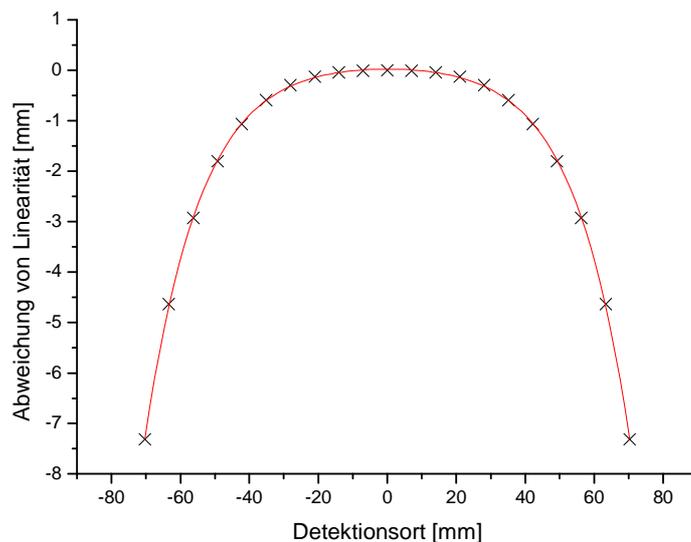
Abb. 21: Wie man sieht, ist der Abstand der mittleren Trajektorie zur nächsten Trajektorie beim Auftreffen auf den Detektor größer als der Abstand der beiden äußeren Trajektorien zueinander. Im Idealfall wäre der Abstand identisch, da der Impulsunterschied in y-Richtung ebenfalls identisch ist ( $0 \rightarrow +5 \rightarrow +10$  a.u.). Die nötige Rückfokussierung auf den Detektor allerdings lenkt die Bahn äußerer Teilchen deutlich stärker ab, als in der Nähe der Spektrometerachse. Die Abweichung von der Linearität wurde anhand der Simulationsdaten berechnet:

Wie Abbildung 22 zeigt, weicht die tatsächliche Verteilung (schwarze Punkte) von der linearen Verteilung (rote Punkte) an den Rändern stark ab. Um die lineare Verteilung zu erhalten, wurde angenommen, dass die Verteilung im Impulsbereich in Ortsrichtung von 0-1 a.u. genügend linear ist und dementsprechend fortgesetzt. Theoretisch müsste man diesen Bereich natürlich minimieren um sich einer Linearität anzunähern, doch es wurde angenommen, dass die Abweichung von dieser in diesem Bereich vernachlässigbar ist.

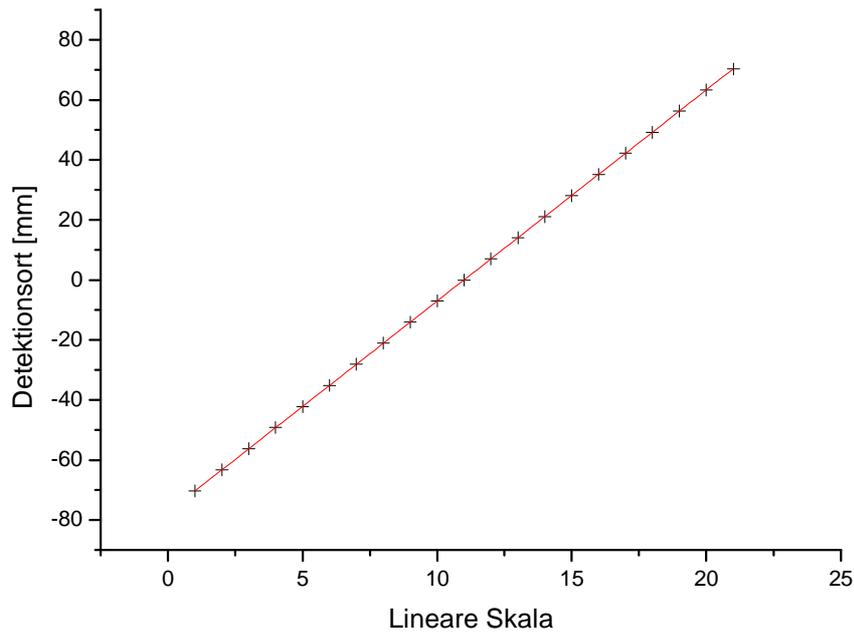


**Abb. 22:** Der Detektionsort gegen den x-Impuls aufgetragen, zeigt einen Vergleich des tatsächlichen Zusammenhangs (schwarze Punkte) mit einem linearen Zusammenhang (rote Punkte).

Die Abweichung beträgt bis zum Rand der Impulsverteilung über 7 mm und wurde hier ebenfalls mittels *Origin 8.1* durch ein Polynom genähert, welches später von den Messwerten subtrahiert wird. Nach Anwendung der Korrekturfunktion erhält man auch hier annähernd eine Gerade, die den gewünschten linearen Zusammenhang zwischen den Impulsen in Ortsrichtung und dem Detektionsort herstellt (Abb. 24).



**Abb. 23:** Hier ist der Betrag der Abweichung der tatsächlichen Verteilung von der linearen Verteilung in mm gegen den Detektionsort aufgetragen. In dieser Darstellung lässt sich leicht ein Polynom finden, welches diese Kurve beschreibt.



**Abb. 24: Nach Anwendung der Eichfunktion für den Impuls in Ortsrichtung liegen alle Punkte auf einer Geraden. Ein Polynom 6ten Grades genügte auch hier den Anforderungen.**

Die Eichfunktion lautet hier:

$$[\text{Detektionsort}] - [\text{Polynom (abh. vom Detektionsort)}] \cdot 0.142$$

Das Polynom ist ein Polynom 6ten Grades und ebenfalls abhängig vom Detektionsort.

$$-7.74^{-18} \cdot y - 3.24^{-4} \cdot y^2 - 2.39^{-20} \cdot y^3 - 1.14^{-7} \cdot y^4 + 8.35^{-24} \cdot y^5 - 2.41^{-11} \cdot y^6$$

Der Detektionsort wird mit dem, vom Detektionsort abhängigen Polynom, multipliziert, um das gewünschte Verhältnis der Impulse in y-Richtung herzustellen. Am Ende folgt eine einfache Multiplikation zur Skalierung. Nach der Korrektur werden auf dem Detektor 0,15 a.u. pro Millimeter abgebildet.

Die auf diese Weise erhaltenen Eichfunktionen werden also auf die gemessenen Flugzeiten und Detektionsorte angewandt, um dann von den Messwerten wieder auf die in der Simulation gewählten Startimpulse schließen zu können. Im folgenden Diagramm sind die korrigierten Impulse in Flugzeit- und Ortsrichtung eingezeichnet. Das rote Impulsgitter kennzeichnet die Startimpuls-Werte aus der Simulation (-10, -5, 0, +5, +10 a.u.). Wie man sieht, kommt es zu einer sehr guten Übereinstimmung. Somit lassen sich nun aus einem Detektionsort und der zugehörigen Flugzeit auf einfache Weise direkt die Impulse des detektierten Rückstoßions nach der Reaktion in der Targetzone ablesen.

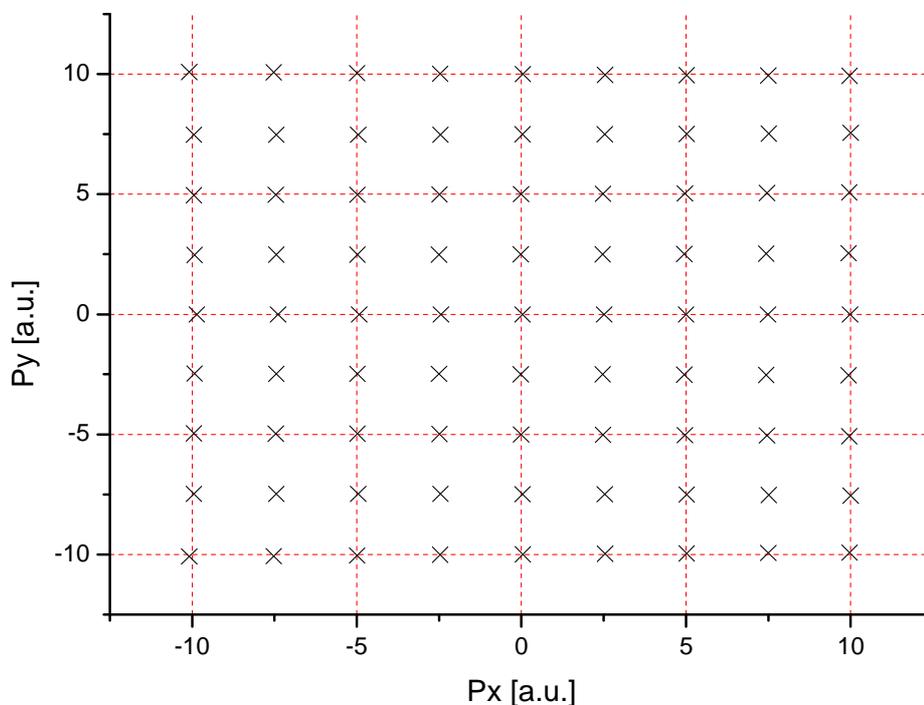


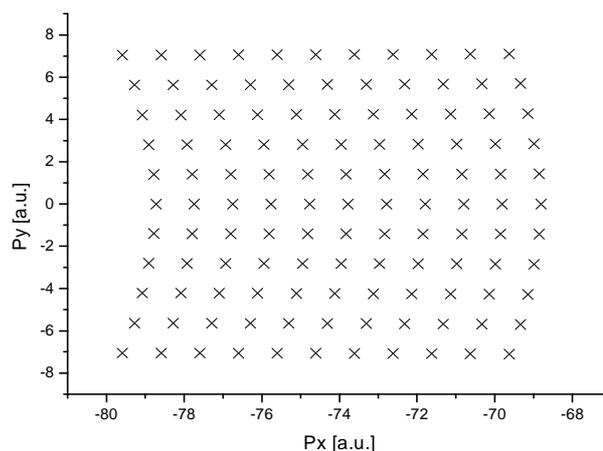
Abb. 25: Nach Anwendung der Eichfunktionen für die Impulse in Orts- und Flugzeitrichtung lassen sich die korrekten Impulswerte direkt aus Detektionsort und zugehöriger Flugzeit ablesen. Es fällt dennoch auf, dass Ionen mit großem Impuls in negative  $x$ -Richtung (hier auf der linken Seite) etwas stärker vom vorgegebenen Impulsgitter abweichen als andere Ionen. Dies liegt vermutlich an leichten Feld-Inhomogenitäten nahe der Elektronendriftstrecke.

## Eichfunktion für andere Ionen

Die gerade bestimmten Eichfunktionen sind in ihrer Form natürlich nur für die simulierten  $\text{He}^+$ -Teilchen gültig und liefern nicht mehr die richtigen Impulse, wenn sich Ladung oder Masse der spektroskopierten Ionen ändert. Jetzt soll gezeigt werden, wie man mit den bekannten Ergebnissen zu den passenden Eichfunktionen für unterschiedlichste Ionen gelangt. Dafür wird das Verhalten der Gitterpunkte für verschiedene Ionenladungen und -Massen betrachtet.

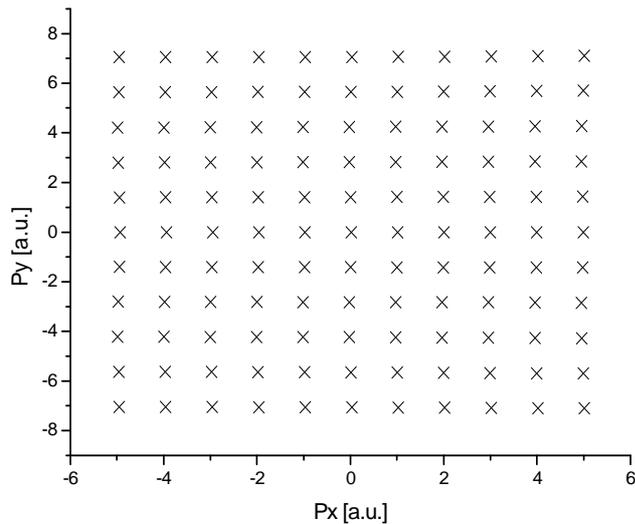
## Rückstoßionen mit doppelter Ladung

Für Rückstoßionen, welche eine andere Ladung tragen, ergibt sich aufgrund der unterschiedlichen Trajektorie auch eine andere Eichfunktion. In der unteren Abbildung wurde die vorher bestimmte Eichfunktion auf  $\text{He}^{2+}$ -Rückstoßionen angewendet.



**Abb. 26:** Die Verteilung bei  $\text{He}^{2+}$ -Ionen ist mit der ursprünglichen Eichfunktion in der Flugzeit stark verkürzt und im Ort gestaucht.

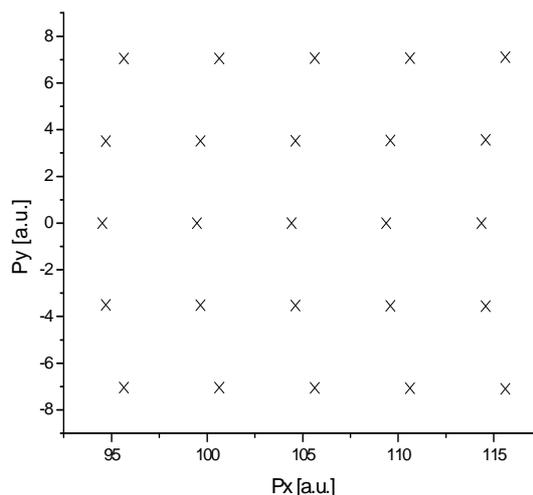
Wie man sieht, kommt es hier wieder zu den bekannten Nicht-Linearitäten. Die höher geladenen Rückstoßionen besitzen im Mittel eine niedrigere Flugzeit und ihr Spektrum nimmt eine kleinere Fläche auf dem Detektor ein. Außerdem scheint die vorher gefundene Eichfunktion hier zu stark zu korrigieren, da die Verteilung im Impulsraum jetzt zur entgegengesetzten Seite gekrümmt ist. Allerdings ergibt sich hier ein einfacher Zusammenhang zwischen der ursprünglichen Eichfunktion und der Eichfunktion für zweifach geladenen Rückstoßionen gleicher Masse (Abb. 27).



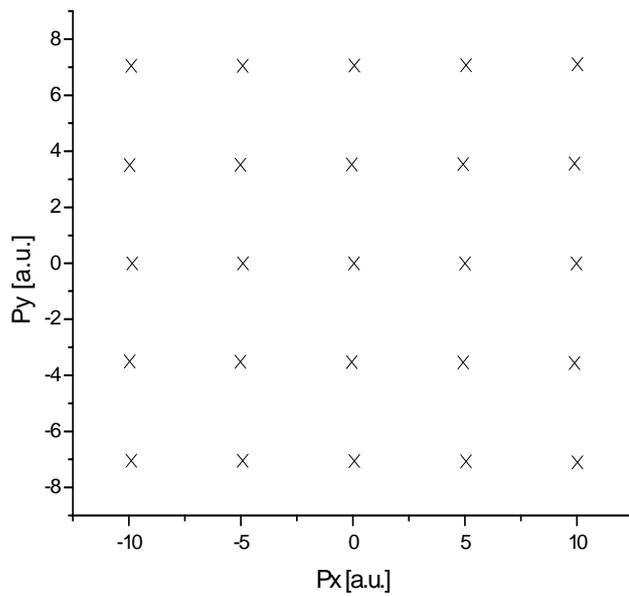
**Abb. 27:** Eine Division des Korrekturterms für den Impuls in Flugzeitrichtung durch  $\sqrt{2}$  liefert sofort die passende Eichfunktion. Um zusätzlich die Skalierung anzupassen, müsste man die Eichfunktion der Ortsrichtung mit  $\sqrt{2}$  und der Flugzeitrichtung mit 2 multiplizieren.

### Rückstoßionen mit halbiertes Ladung

In Abbildung 28 ist die Impulsverteilung nach Anwendung der ursprünglichen Eichfunktion bei Ionen mit halbiertes Ladung zu sehen. Naheliegenderweise sind die Flugzeiten erhöht und die Ortsverteilung deutlich größer. Deshalb ist hier auch nur ein Ausschnitt der gewählten Startimpulse zu sehen (hier: +5 bis -5 a.u.). Der Korrekturterm ist hier offensichtlich nicht stark genug, da immer noch eine Krümmung der Impulsverteilung in die ursprüngliche Richtung besteht. Der Faktor  $\sqrt{2}$  führt auch hier zum erwünschten Effekt (Abb. 29).



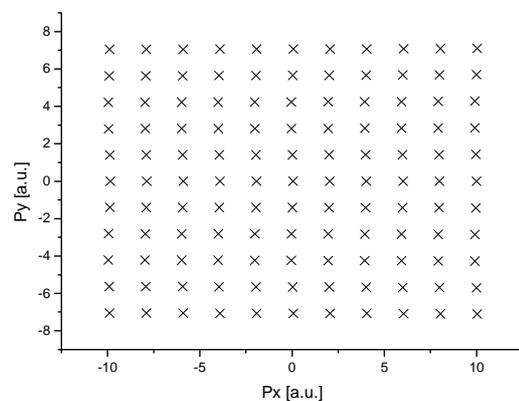
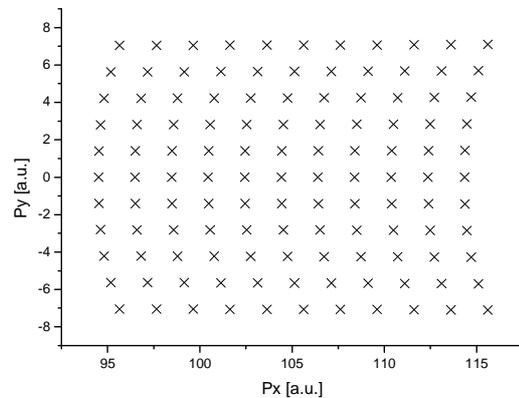
**Abb. 28:** Ionen mit der Ladung  $\frac{1}{2}$  haben erhöhte Flugzeiten und übersteigen die Akzeptanz des Spektrometers. Eine Erhöhung des Potentialgefälles würde dem entgegenwirken.



**Abb. 29:** Eine Multiplikation des Korrekturterms für die Flugzeitrichtung mit  $\sqrt{2}$  liefert die angepasste Eichfunktion für Rückstößen mit gleicher Masse, aber halber Ladung. Für die Skalierung müsste die Ortseichfunktion hier durch diesen Faktor dividiert werden, während in Flugzeitrichtung durch 2 dividiert werden würde.

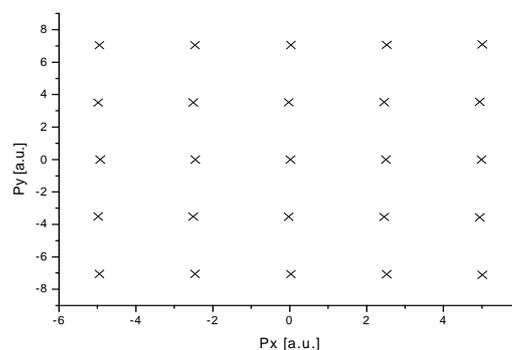
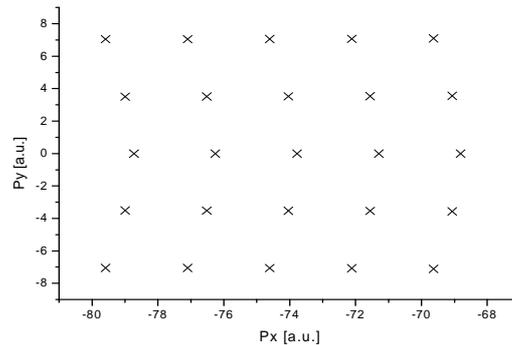
### Rückstößen mit doppelter Masse

Verdoppelt man die Masse der Rückstößen verdoppelt sich erwartungsgemäß wieder deren Flugzeit, während die Ortsverteilung kleiner wird (Abb. oben). Eine Multiplikation des Flugzeitkorrekturterms mit  $\sqrt{2}$  führt hier zur angepassten Eichfunktion (Abb. unten). Eine neue Skalierung ist hier nur in Ortsrichtung nötig und würde durch Multiplikation mit  $\sqrt{2}$  erfolgen.



## Rückstößionen mit halbierter Masse

Selbstverständlich führt auch hier der Faktor  $\sqrt{2}$  zur gewünschten neuen Eichfunktion. Eine Division der Flugzeitkorrektur durch  $\sqrt{2}$  liefert die angepasste Eichfunktion. Skalierung würde über Division der Ortskorrektur durch  $\sqrt{2}$  erfolgen. Auch hier sind lediglich die Impulse bis  $\pm 5$  a.u. in der Grafik enthalten, da die Detektorfläche nicht das komplette Spektrum erfasst.



Veränderungen in Ladung und Masse der Ionen führen also zu leicht verifizierbaren Änderungen der geeigneten Eichfunktion. Die folgende Tabelle fasst die Ergebnisse noch einmal zusammen:

Unterschied zu He <sup>+</sup>	Korrekturterm in Flugzeitrichtung	Skalierung in Flugzeitrichtung	Korrekturterm in Ortsrichtung	Skalierung in Ortsrichtung
Ladung x2	: $\sqrt{2}$	x 2	-	x $\sqrt{2}$
Ladung :2	x $\sqrt{2}$	: 2	-	: $\sqrt{2}$
Masse x2	x $\sqrt{2}$	-	-	x $\sqrt{2}$
Masse :2	: $\sqrt{2}$	-	-	: $\sqrt{2}$

Nachfolgend soll erläutert werden, welche physikalischen Effekte zu den beobachteten Änderungen in der Orts- und Flugzeitverteilung führen. Außerdem soll eine universelle Eichfunktion bestimmt werden, die unter Kenntnis des Ladungszustandes und der Masse der zu detektierenden Ionen sofort die passende Eichung liefert.

### **Skalierung in Ortsrichtung:**

Man kommt zu dem Ergebnis, dass eine Verdopplung der Masse, genauso wie eine Verdopplung der Ladung für gegebene Startimpulse eine Nachskalierung des Impulses in Ortsrichtung durch Multiplikation mit dem Faktor  $\sqrt{2}$  bedingt. Bei einer Halbierung muss man durch den gleichen Faktor dividieren. Dies ist dadurch bedingt, dass im Falle der veränderten Ionenmasse die Startimpulse der Simulation dennoch gleich bleiben und damit die Startgeschwindigkeiten verändert werden. Folglich führt eine doppelte Masse zu kleineren Startgeschwindigkeiten und damit zu einer geringeren Ausdehnung des Ionen-Spektrums auf dem Detektor. Umgekehrt verhält es sich bei einer Verringerung des Masse.

Eine Erhöhung der Ladung lässt die Startgeschwindigkeiten unberührt, ist aber äquivalent zu einer Verstärkung des elektrischen Feldes. Die Verteilung der Ionen wird also deutlich schneller in Richtung des Detektors beschleunigt und ist dadurch ebenfalls in Ortsrichtung weniger ausgedehnt – was wiederum zur gleichen Nachskalierung, wie im Fall der Massenerhöhung, führt.

### **Anpassung des Korrekturterms in Ortsrichtung**

Die Ortskorrektur bleibt in jedem Fall unberührt, da sie eine Eigenschaft im Ortsraum des Spektrometers ist und nicht von Ladung und Masse der detektierten Ionen abhängt.

### **Skalierung in Flugzeitrichtung**

Die Impulse in Flugzeitrichtung müssen lediglich im Falle einer Ladungsänderung neu skaliert werden. Das ist dadurch bedingt, dass eine Ladungserhöhung zu stärkeren Kräften auf die Ionen führt und deren Verteilung um den Flugzeitschwerpunkt gestaucht wird. Eine Ladungsverringerung führt zu einer Streckung.

Eine Veränderung der Masse führt nicht zu diesem Effekt, da die Ionen zwar insgesamt eine veränderte Flugzeit, aufgrund der veränderten Startgeschwindigkeiten als Folge der Impulserhaltung, haben der Flugzeitunterschied zwischen dem ersten und dem letzten Ion aber gleich bleibt.

## Anpassung des Korrekturterms in Flugzeitrichtung

Die Flugzeitkorrektur wird von Ladungs- und Masseveränderungen beeinflusst. Sie muss mit einer Ladungserhöhung oder einer Massenverringerng abgeschwächt werden.

Im Fall einer Ladungserhöhung werden die Flugzeitunterschiede der Ionen geringer, was zu einer weniger starken Zunahme der Flugzeiten mit dem Detektionsort führt. Umgekehrt verhält es sich bei einer Ladungsverringerng.

Eine Massenerhöhung dagegen führt zu längeren Flugzeiten aufgrund der geringeren Startgeschwindigkeiten und damit auch zu höheren Flugzeitunterschieden zwischen Ionen mit unterschiedlichem Impuls in Ortsrichtung, weshalb der Korrekturterm verstärkt werden muss.

**Dadurch ergeben sich folgende universelle Eichfunktionen:**

**In Ortsrichtung:**

$$([\text{Detektionsort}] - [\text{Polynom (abh. vom Detektionsort)}] \cdot 0.142) \cdot \sqrt{\frac{[\text{Ionenmasse}[u]]}{4}} \cdot \sqrt{[\text{Ladung}]}$$

**In Flugzeitrichtung:**

$$\left( \left( [\text{Flugzeit}] - \left( [\text{Flugzeitschwerpunkt}] + ([\text{Polynom (abh. vom Detektionsort)})] \cdot \frac{\sqrt{[\text{Ionenmasse}[u]]}}{\sqrt{[\text{Ladung}]}} \right) \right) \cdot 7.38 \right) \cdot [\text{Ladung}]$$

## Auswertung der Simulationsergebnisse

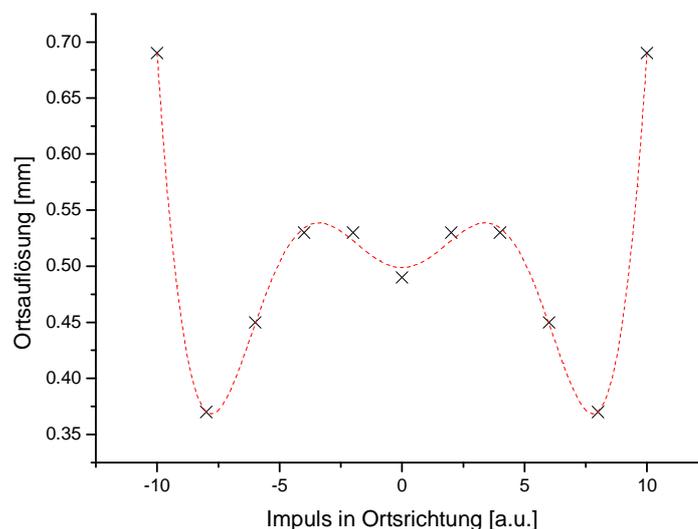
Nachdem bekannt ist in welcher Weise das Spektrometer die Impulse der Ionen auf dem Detektor abbildet, lässt sich nun anhand der durch die Eichfunktion modifizierten Daten überprüfen, welche Ergebnisse das simulierte Spektrometerdesign liefern kann.

### Ortsauflösung

Die Ortsauflösung gibt an, wie stark ein Ion mit gegebenem Impuls im Detektionsort variieren kann. Diese Variation ist bedingt durch die Targetausdehnung und errechnet sich folgendermaßen:

$$\Delta_r = |r_{\max} - r_{\min}|$$

Dabei sind  $r_{\max}$  und  $r_{\min}$  der Maximal- und Minimalwert des Ortes, an welchem Teilchen identischen Impulses, die sich ausschließlich durch ihren Startort unterscheiden, detektiert werden. Die Ortsauflösung des Spektrometers verhält sich wie folgt:



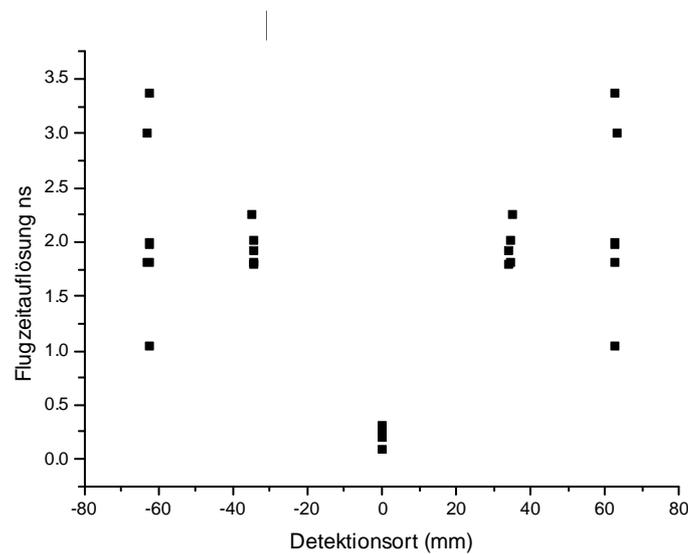
Wie man sieht, ist die Ortsauflösung bei  $3/4r$ , also 7,5 a.u. am besten. Dies ist, wie anfangs bereits erwähnt, beabsichtigt, da in diesem Bereich hohe Stoßparameter und ausreichende Statistik gewährleistet sind. Bis zu den äußersten Trajektorien wird die Auflösung dann etwas schlechter, bleibt aber unter 0,7 mm.

## Flugzeitauflösung

Um die Flugzeitauflösung für Teilchen unterschiedlicher Impulse zu berechnen, berechnet man den maximalen Flugzeitunterschied für eine Gruppe von Teilchen mit identischem Impuls, die sich ausschließlich durch ihren Startort unterscheiden.

$$\Delta_t = |t_{\max} - t_{\min}|$$

Das folgende Diagramm zeigt die Zeitauflösung, die für alle 25 Impulskombinationen erreicht wird.



Man sieht hier die Zeitdifferenz zwischen dem Teilchen, das zuerst und zuletzt den Detektor trifft - jeder Punkt repräsentiert die Zeitdifferenz für Teilchen mit identischem Impuls (folglich 25 verschiedene Impulskombinationen), aber unterschiedlichem Startort. Es ist zu erkennen, dass die Flugzeitauflösung im Randbereich am stärksten variiert und dort im Mittel außerdem am schlechtesten ist. Zur Strahlachse fällt die Flugzeitauflösung bis auf unter 0.5 ns.

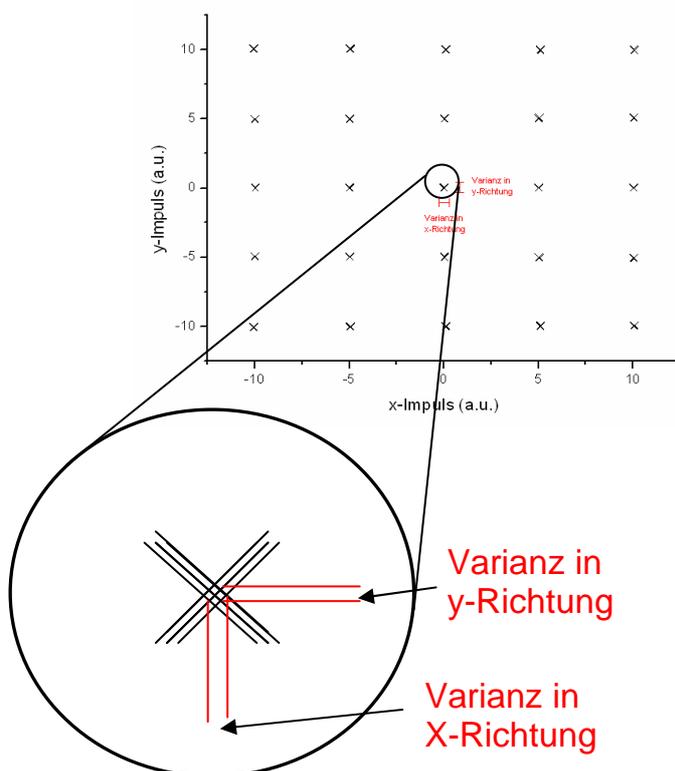
## Impulsauflösung

Die Impulsauflösung ist der entscheidende Wert, der die Qualität der Abbildungseigenschaften des Spektrometers bestimmt. Sie ist direkt abhängig von Orts- und Flugzeitauflösung, wird aber auch durch andere Effekte beeinflusst. Die Leistung der Eichfunktion spielt dabei eine wichtige Rolle. Entscheidend für die Impulsauflösung ist nämlich unter anderem, in welcher Weise die Eichfunktion für das gesamte Phasenraumvolumen der Rückstöße eine passende Korrektur liefert. Zu starke Nicht-Linearitäten bei der Abbildung der Impulse auf Detektionsorte und Flugzeiten erschweren die Bestimmung einer möglichst exakten Korrektur.

Um die Impulsauflösung zu bestimmen, muss die Reichweite der Werte für den Impuls in Flugzeitrichtung und den Impuls in Ortsrichtung nach Anwendung der Eichfunktion ermittelt werden. Die Abweichung von den bekannten Startimpulsen aus der Simulation (10, 5, 0, -5, -10 a.u.) errechnet sich einfach aus:

$$\Delta_P = |P_{MIN} - P_{MAX}|$$

Wobei p den Impulsen entspricht, die letztendlich mit Hilfe der Eichfunktion ermittelt wurden. Die Methode ist für x- und y-Richtung äquivalent.



**Abb. 30:** Die durch die Eichfunktion berechneten Werte für die Impulse in Orts- und Flugzeitrichtung variieren auch für Ionen mit identischem Impuls aufgrund der Targetausdehnung. Es ist zu beachten, dass nicht etwa die Ausdehnung der Kreuze die Varianz des Impulses darstellt, sondern lediglich deren Unschärfe, welche in der Vergrößerung angedeutet ist.

Um die Impulsauflösung in Flugzeit- und Ortsrichtung zu erhalten, wird die maximale Differenz aller Punkte für jeweils einen festen Impulswert ermittelt. Somit erhält man eine Impulsauflösung für verschiedene Impulsbereiche in x- und y-Richtung.

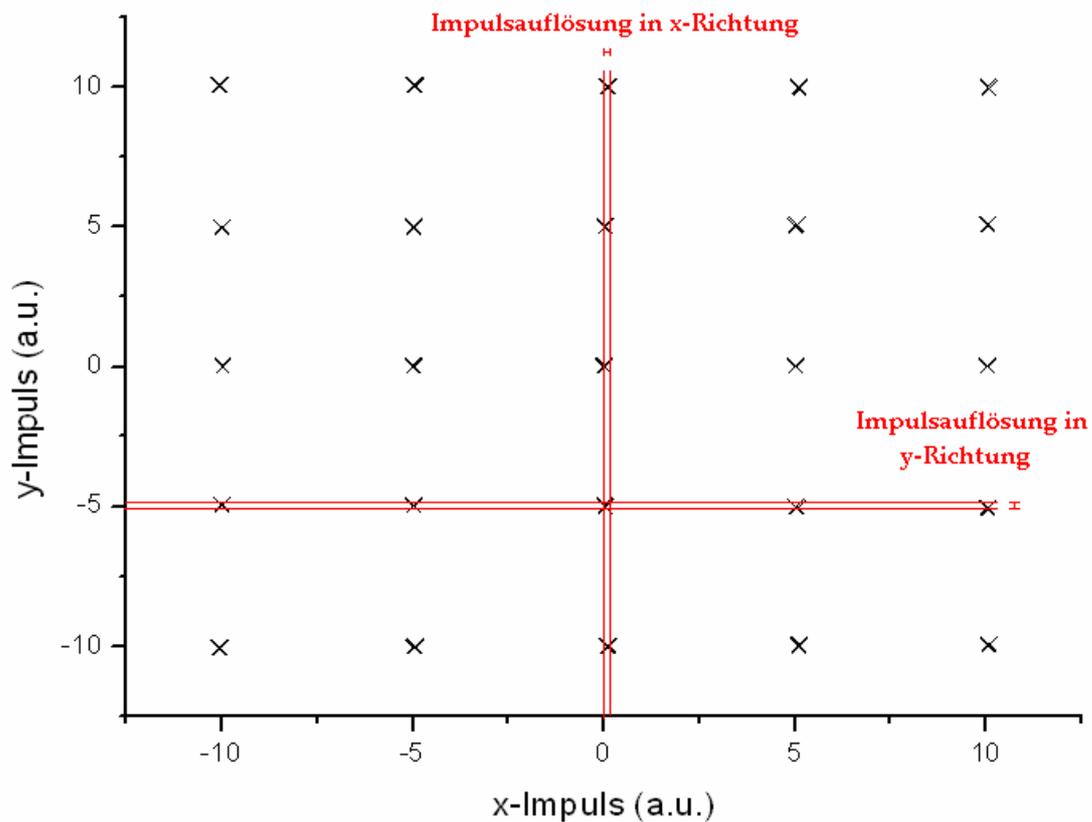


Abb. 31: Beispielhaft ist hier die Impulsauflösung für einen Impuls in Ortsrichtung (y-Impuls) von -5 a.u. und für einen Impuls in Flugzeitrichtung (x-Impuls) von 0 a.u. dargestellt. Es ist ersichtlich, dass die Gültigkeit der Eichfunktionen über alle Impulsbereiche entscheidend ist für eine möglichst scharfe Impulsauflösung.

**Es ergeben sich folgende Werte für die Impulsauflösung in Flugzeitrichtung:**

Mean (X)	Min (X)	Max (X)	Range	N (X)
-9.98148	-10.12302	-9.85933	0.26396	30
-4.97019	-5.02776	-4.91399	0.11377	30
0.01956	-0.01826	0.07698	0.09524	30
4.99672	4.95583	5.05875	0.10293	30
9.96584	9.93452	10.00654	0.07202	30

Man sieht hier den durchschnittlichen, sowie den minimalen und den maximalen Impulswert, den die Eichfunktion für die Impulsbereiche -10, -5, 0, +5 und +10 a.u. liefert. Die Reichweite der Werte ergibt die Impulsauflösung. Die Impulsauflösung in x-Richtung beläuft sich damit auf einen Wert besser als 0.27 a.u. Die Spalte N (Anzahl der Werte) umfasst 30 Werte, da 6 Startorte mit jeweils 5 unterschiedlichen Impulsen in Flugzeitrichtung ausgewertet wurden. Die Asymmetrie der Impulsauflösung in x-Richtung kommt dadurch zustande, dass das Spektrometer in Flugzeitrichtung keine Symmetrie wie in Ortsrichtung besitzt.

**Es ergeben sich folgende Werte für die Impulsauflösung in Ortsrichtung:**

Mean (Y)	Min (Y)	Max (Y)	Range	N (Y)
-9.99757	-10.09905	-9.88185	0.2172	30
-5.00619	-5.08784	-4.94437	0.14347	30
-4.3368E-19	-0.01777	0.01777	0.03554	30
5.00691	4.94437	5.08784	0.14347	30
9.99757	9.88185	10.09905	0.2172	30

Die dargestellten Werte entsprechen den Werten in Flugzeitrichtung. In Flugzeitrichtung wird eine Auflösung besser als 0.22 a.u. erzielt.

## **Abhängigkeit der Impulsauflösung von Flugzeit- und Ortsauflösung**

Die Impulsauflösung lässt sich natürlich zurückführen auf direkt in der Simulation beobachtbare Größen und soll im Folgenden in Abhängigkeit dieser direkt zugänglichen Größen untersucht werden. Interessant ist dabei die Frage, wie stark sich die Impulsauflösung mit einer Verbesserung der Orts- und/oder Zeitauflösung ebenfalls verbessern ließe. Insbesondere wenn man die (noch hypothetischen) Verbesserungsmöglichkeiten durch z.B. ein kleineres Target, bei gleicher Jetgeschwindigkeit, oder eine gekrümmte Detektorfläche bedenkt, ist es aufschlussreich den möglichen Gewinn in der Auflösung zu kennen. Für diese Betrachtung genügt es, die Eichfunktionen in Flugzeit- und Ortsrichtung auszuwerten und deren Verhalten bei Variation der Rohdaten zu bestimmen.

### **Impulsauflösung in Flugzeitrichtung in Abhängigkeit von der Flugzeitauflösung**

Die Flugzeitauflösung hat lediglich einen Einfluss auf die Impulsauflösung in x-Richtung, da die Messung des y-Impulses aufgrund der Ortsfokussierung, also der Fokussierung von Rückstößen mit gleichem Impuls in y-Richtung auf (idealerweise) einen Punkt, unabhängig von der Flugzeit ist.

Die Flugzeit fließt nur linear, als Differenz von der mittleren Flugzeit über alle Rückstößen in die Eichfunktion ein. Die Flugzeitauflösung beträgt im schlechtesten Fall 3,5 ns. Bei einer gesamten Flugzeit von etwa 35000 ns und einer Varianz der Flugzeit für Ionen mit identischem Impuls in Ortsrichtung von knapp 3000 ns ist dieser Betrag im Verhältnis derart klein, dass eine weitere Verbesserung der Flugzeitauflösung keinen meßbaren Effekt hätte. Die Impulsauflösung variiert abhängig von der Flugzeitauflösung in einem Bereich von 0.2 %.

## **Impulsauflösung in Orts- und Flugzeitrichtung in Abhängigkeit von der Ortsauflösung**

Für die Impulsauflösung in Orts und Flugzeitrichtung lässt sich der Einfluss der Ortsauflösung nicht ohne Weiteres gesondert betrachten. Mit einer Veränderung des Ortswerts geht auch eine Änderung der Flugzeit einher.

Würde man beispielsweise kurz vor dem Detektor stärker fokussieren um eine bessere Ortsauflösung zu erreichen, würde das gleichzeitig bedeuten, dass sich die Trajektorien stärker krümmen, die Flugzeitunterschiede zunehmen und die Abbildung der Impulse in Orts- und Flugzeitrichtung stärker nicht-linear wird. Auf diese Weise könnte man die Impulsauflösung in Ortsrichtung auf Kosten der Impulsauflösung in Flugzeitrichtung und größerer Korrekturterme verbessern, was aber nicht gewollt ist. Größere Korrekturterme begünstigen, neben dem bereits erwähnten höheren Rechenaufwand und der erschwerten Eichung nach Messdaten, eine schlechtere Auflösung, da sie bei gleichbleibenden Variationen der Variablen (hier Detektionsort) zu größeren Schwankungen im Ergebnis führen. Man sucht also den optimalen Kompromiss zwischen einer kleinen Ortsauflösung und einer möglichst linearen Abbildung der Messgrößen.

## Möglicher Auflösungsgewinn durch Reduzierung der Targetbreite

Die tatsächliche Targetbreite beläuft sich bei Durchführung des Experiments auf etwa 1,0-1,2 mm. Im Folgenden soll betrachtet werden, wie sich eine kleinere Targetbreite auf die Impulsauflösung des Rückstoßionen-Detektors auswirken würde. Um eine geringere Targetausdehnung zu erreichen, könnte man die Geschwindigkeit des Gasjets erhöhen, was aber zu einer stärkeren Verschiebung des Phasenraumvolumens führen würde. Eine andere Möglichkeit bestünde darin, den Ort, an dem der Gasjet austritt, näher an die Targetzone heranzuführen, wobei hier Störungen im elektrischen Feld zu vermeiden wären.

Die Trajektorien Nr. 1, 2 und 3 (Abb. 32) entsprechen hier Ionen mit den Impulsen 0, +5 und +10 a.u. in Ortsrichtung. Für diese Impulse soll exemplarisch die Impulsauflösung für verschiedene Targetbreiten berechnet werden.

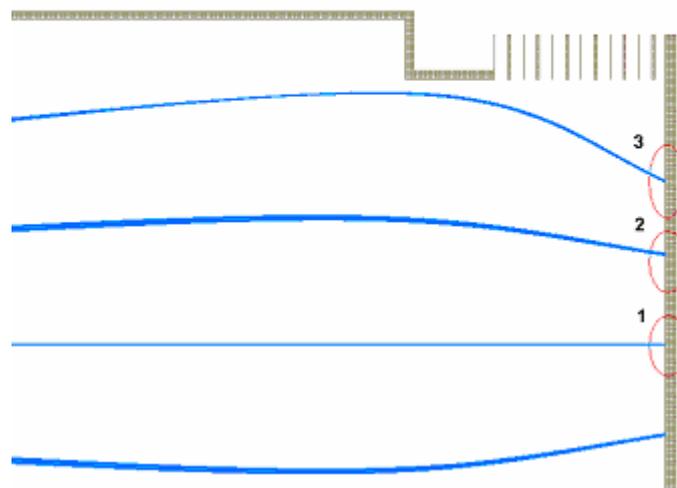


Abb. 32: Die einzelnen Trajektorien unterscheiden sich nur in ihrem Impuls in Ortsrichtung, während in Flugzeitrichtung jeweils alle Impulse vertreten sind. Trajektorie Nr. 1 liegt direkt auf der Spektrometerachse.

Zur Berechnung der Impulsauflösung für verschiedene Targetausdehnungen wurden für die *Simion*-Simulation die Abstände der Ionenstartorte modifiziert und die neuen erhaltenen Rohdaten mit der bekannten Eichfunktion ausgewertet. Für Targetbreiten von 1.5, 1.0, 0.75 und 0.5 mm ergaben sich folgende Impulsaufösungen:

### Impulsauflösung in Flugzeit-Richtung

Teilchenbahn/Targetbreite	1.5 mm	1 mm	0.75 mm	0.5 mm
Nr. 3	0.28 a.u.	0.26 a.u.	0.25 a.u.	0.24 a.u.
Nr. 2	0.13 a.u.	0.11 a.u.	0.10 a.u.	0.9 a.u.
Nr. 1	0.11 a.u.	0.9 a.u.	0.8 a.u.	0.8 a.u.

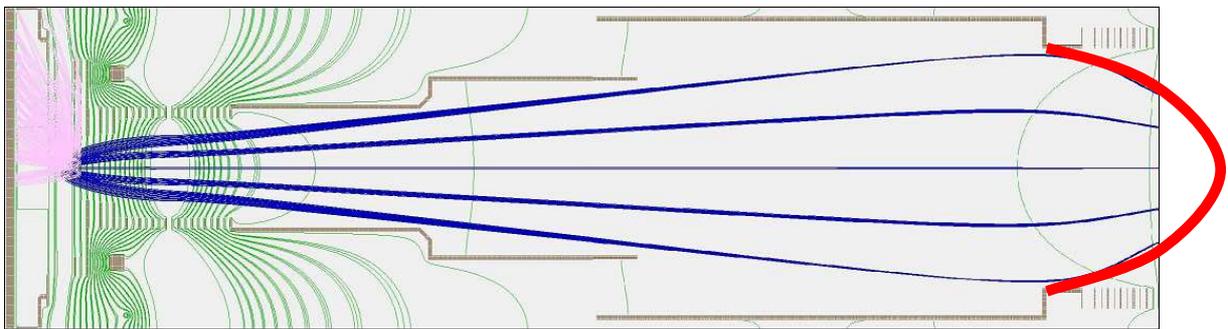
### Impulsauflösung in Orts-Richtung

Teilchenbahn/Targetbreite	1.5 mm	1 mm	0.75 mm	0.5 mm
Nr. 3	0.24 a.u.	0.21 a.u.	0.19 a.u.	0.18 a.u.
Nr. 2	0.16 a.u.	0.14 a.u.	0.13 a.u.	0.13 a.u.
Nr. 1	0.05 a.u.	0.03 a.u.	0.03 a.u.	0.03 a.u.

Eine Verringerung der Targetausdehnung um bis zu 66% führt also maximal zu einer Verbesserung der Impulsauflösung um ca. 25%. Selbst ein punktförmiges Target könnte keine deutlich bessere Impulsauflösung liefern, da Teilchen trotz identischer Impulse in x- oder y-Richtung aufgrund ihrer verschiedenen Impulse in die dazu senkrechte Richtung in einem Spektrometer dieser Art unterschiedliche Kräfte erfahren und deren Trajektorien sich dadurch zwangsläufig aufspalten.

## Möglicher Gewinn durch einen gekrümmten Detektor

Betrachtet man die gekrümmten Flächen, auf denen der Zeit- und der Ortsfokus der Rückstoßionen liegt, wird klar, dass ein gekrümmter Detektor deutlich mehr leisten könnte, als ein ebener Detektor, wie er hier verwendet wird. Mit einem derartigen Detektor ließe sich die "Trajektorienbreite" überall auf unter 0.5mm reduzieren, da der Detektionsort für Teilchen beliebigen  $y$ -Impulses immer genau in deren Brennpunkt wäre. Gleichzeitig hätte der sphärische Detektor den erwünschten Effekt, dass die Flugzeiten der weiter außen liegenden Trajektorien verkürzt werden. Das würde dazu führen, dass die Korrekturterme der Eichfunktion für den Impuls in Flugzeitrichtung kleiner werden würden. Einen solchen Detektor könnte man sich etwa wie in der folgenden Darstellung angeordnet vorstellen:



**Abb. 33:** Ein gekrümmter Detektor könnte einige Vorteile mit sich bringen. Die spezielle Form würde bessere Orts- und Zeitaufösungen für alle Impulsbereiche begünstigen.

Selbstverständlich müssten die Eichfunktionen neu berechnet und die Daten der Messung etwas anders behandelt werden. Der Detektionsort müsste umgerechnet werden in einen Ortswert in der  $y$ -Ebene, da sonst die äußeren Trajektorien sehr schlechte Ortsauflösungen besäßen, da sie aufgrund der Krümmung eine sehr große Fläche des Detektors treffen. Für Projekte, welche eine bessere Impulsauflösung auf dem Rückstoßionen-Detektor erfordern, wäre das aber eine vielversprechende theoretische Möglichkeit – ungeachtet der Frage nach der technischen Umsetzung.

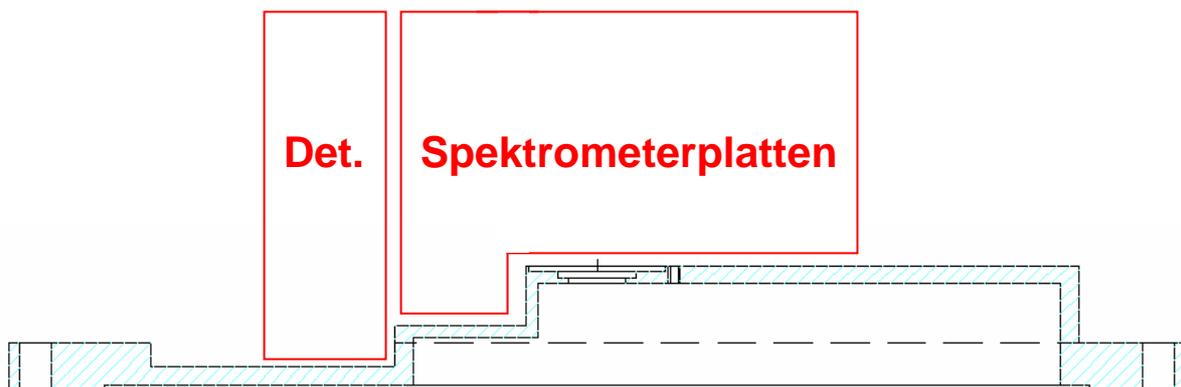
## ***AutoCAD-Konstruktion***

Das Spektrometerdesign, welches nach der *Simion*-Simulation, unter gegebenen Randbedingungen, die optimale Auflösung bietet und sämtliche nötigen Bauteile, die dem Spektrometer den Rahmen bieten, den es benötigt um in den vorgesehenen Vakuumkammern befestigt werden zu können, wurden nun mit dem Programm *AutoCAD* in technischen Zeichnungen realisiert [10].

Mit welchem Konzept die Simulation in einem funktionsfähigen Spektrometer umgesetzt wurde und welche Überlegungen hinter diesem Design stecken, werde ich in diesem Kapitel veranschaulichen. Dabei wird zunächst das Konstruktionsprinzip erläutert um dann einen Überblick über das gesamte Spektrometer zu verschaffen. Im Anschluss werden noch einige zusätzliche Anforderungen, die an das Spektrometer gestellt waren, jedoch nicht in der Simulation auftauchen, behandelt. Wenn es der Anschauung dient, wurden Zeichnungen in einigen Fällen Photographien oder Computergrafiken vorgezogen.

## Limitierende Begebenheiten

Erschwert wurde die Konstruktion durch die knappen Platzverhältnisse in der Experimentierkammer. Um mit einem Delay-Line-Detektor von 120 mm Durchmesser arbeiten zu können, musste das Jetsystem nach unten versetzt und ein neuer Jethut konstruiert werden. Hier musste zum einen die Isolation des Detektors gegen den Jethut gewährleistet werden, zum anderen sollte genügend Raum für den Gasjet und die Skimmer vorhanden sein. Aus diesem Grund wurde der Jethut mit Aussparungen für die letzten Spektrometerplatten vor dem Detektor, sowie den Detektor selbst versehen.



**Abb. 34: Der Jethut musste so konstruiert werden, dass er sich den Formen des Spektrometers genau anpasst.**

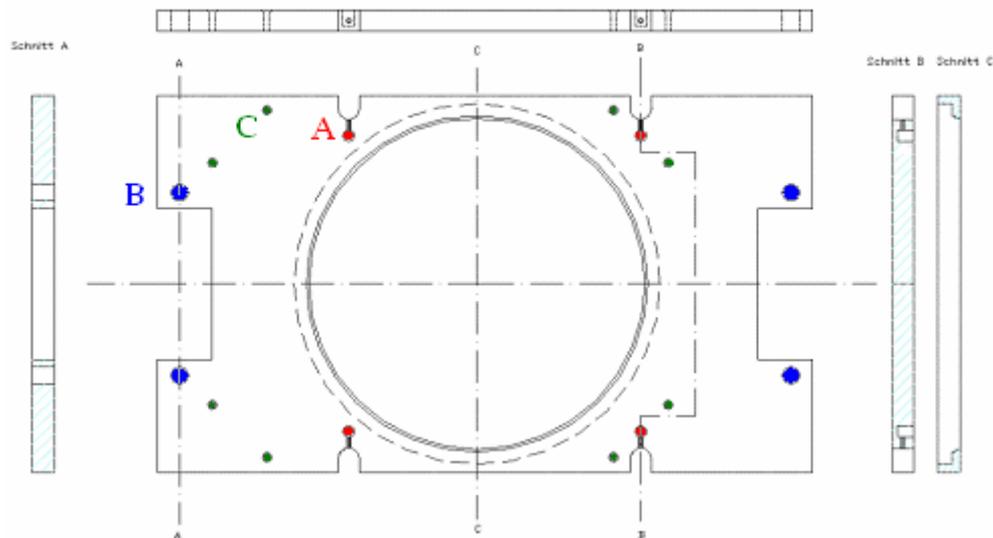
Die Nähe zum Jethut ist auch der Grund, weshalb die meisten Teile des Spektrometers keine Symmetrie aufweisen konnten – was die Konstruktion zusätzlich erschwerte. Um Stabilität zu garantieren sind Spektrometerteile mit Materialaussparungen an der Unterseite deshalb an der oberen Seite oft etwas stärker.

## Prinzip der Konstruktion

Das gesamte Gerüst des Spektrometers wurde aus Aluminium gefertigt, wobei der Großteil der Potentialplatten, welche auf Keramikstangen in Position gehalten werden, aus 0.5 mm dünnem Kupferblech besteht. Um diesen Stabilität zu verleihen, bestehen vier Potentialplatten aus deutlich dickerem Aluminium, welches auf 10 mm dicken Stahlstangen aufgehängt ist. Dadurch erhalten die Keramikstangen in sinnvollen Abständen eine besser gegen Vibrationen (z.B. durch die Vakuumpumpen) geschützte Halterung. Die Stahlstangen wiederum sind über die Spektrometerfüße direkt mit der Grundplatte verschraubt, welche selbst direkt mit der Vakuunkammer verbunden ist. Durch diese Konstruktion wird vermieden, dass das Gewicht des Detektors, der Alumiumbauteile und der Kupferplatten zu einer geometrischen Abweichung von der Simulation führt.

Die folgenden technischen Zeichnungen entsprechen den Zeichnungen, wie sie auch zur Fertigung an die Feinmechanik-Abteilung des IKF weitergeleitet wurden. Anhand dieses Beispiels, das eine der vier stabilisierenden, dickeren Spektrometerplatten und deren rahmengebende, umliegende Spektrometerteile zeigt, soll kurz veranschaulicht werden in welcher Weise das Spektrometer mit der Kammer verbunden ist.

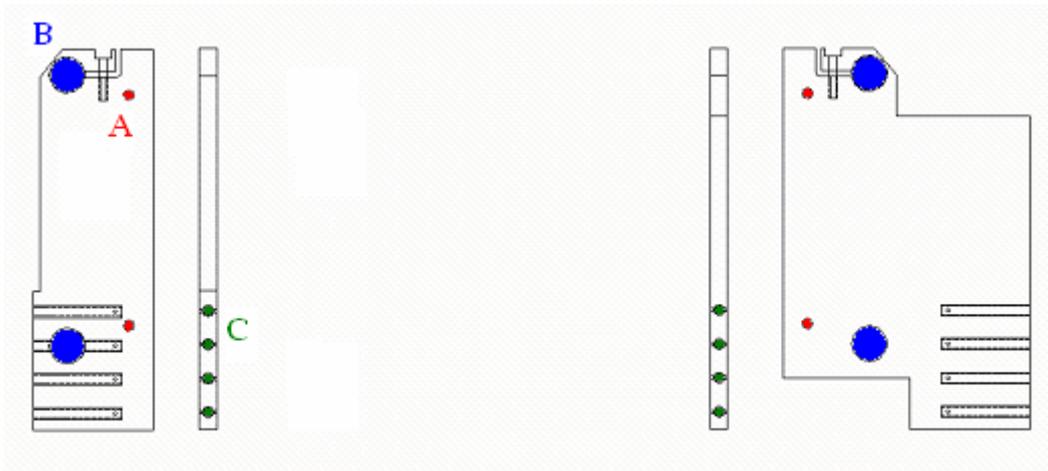
Das Bauteil D1 (Übersicht im Anhang), welches das Gitter zu Beginn der Driftstrecke vor dem Elektronendetektor hält, bietet an den Punkten „A“ die Möglichkeit die Keramikstangen, welche weitere Spektrometerplatten halten, in Sacklöchern zu verschrauben. An den Punkten „B“ wird es durch M3-Gewindestangen gehalten und gegen diese mit Keramikhülsen isoliert. Die acht sichtbaren Durchgangslöcher „C“ dienen der Befestigung der Elektronen-Driftstrecke.



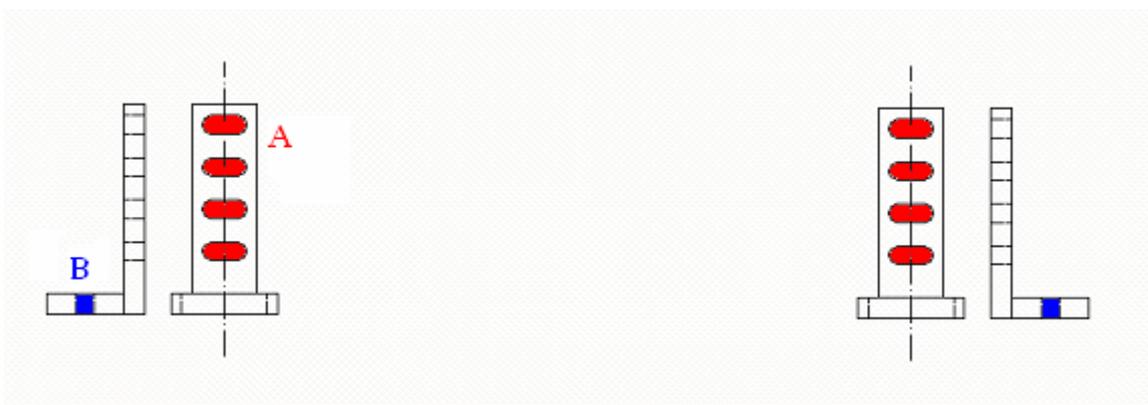
Bauteil G1 bietet den Rahmen für die Aufhängung von Bauteil D1 an den Punkten „A“ und liegt direkt hinter Bauteil D1. Außerdem bietet es Platz für Ein- und Ausgangssteerer an den Punkten „B“. Durch die Öffnungen bei "C" verlaufen die 10 mm starken Stahlstangen, welche der Konstruktion Stabilität verleihen. Durch die große Aussparung in der Mitte verläuft die Elektronendriftingstrecke.



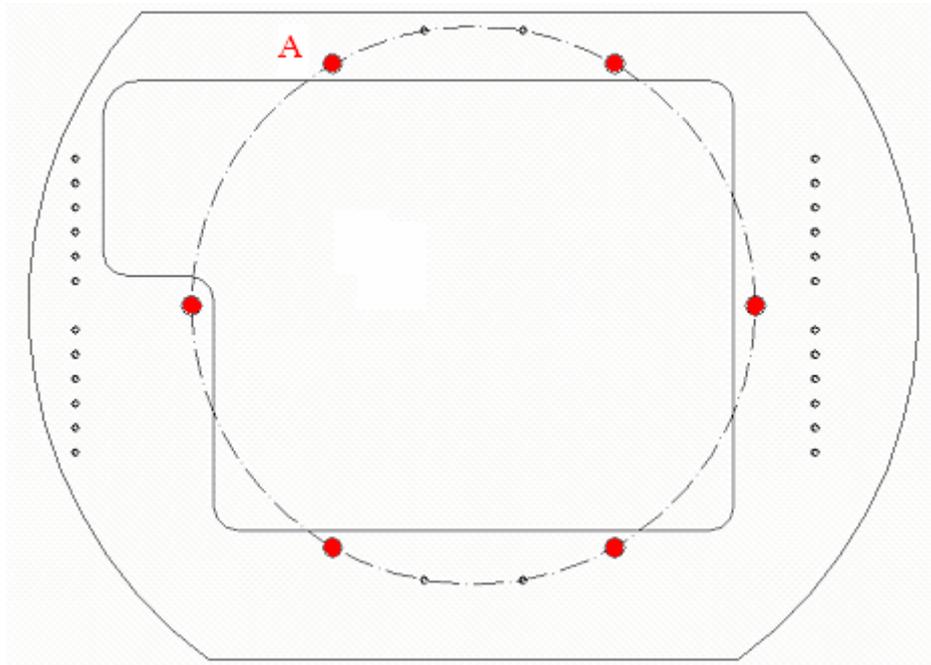
Die Teile J1 und J2 bieten die Möglichkeit die M3-Stangen, welche sowohl durch D1 als auch durch G1 verlaufen bei „A“ zu verschrauben, und werden außerdem auch fest mit den 10mm-Stahlstangen verklemmt („B“). Die Gewinde-Sacklöcher („C“) lassen sich variabel mit den Spektrometerfüßen verschrauben, um die Möglichkeit das Spektrometer in der Höhe zu verstellen zu erhalten.



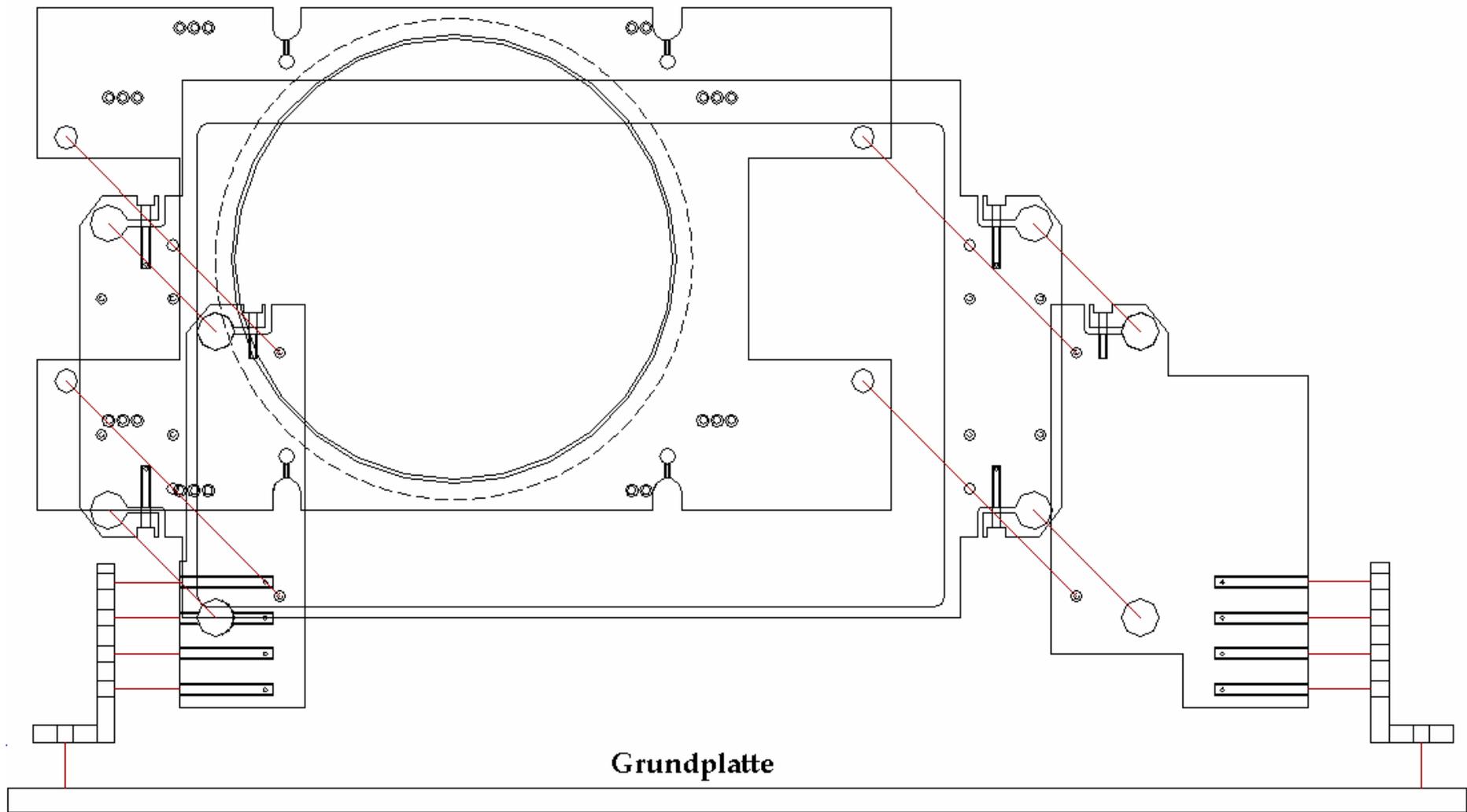
Die Spektrometerfüße, welche seitlich durch „A“ an den Bauteilen J1 und J2 angebracht werden, werden bei „B“ direkt mit der Grundplatte verschraubt und stellen mit insgesamt vier Spektrometerfüßen den einzigen Kontakt des Spektrometers zur Grundplatte und damit zur Experimentierkammer her.



Die Grundplatte ermöglicht es die Spektrometerfüße in verschiedenen Positionen zu befestigen und somit das Gerüst des Spektrometers entlang der Strahlachse zu verschieben. An den Stellen "A" wird die Grundplatte mit der Kammer verschraubt, wobei drei Schrauben die Platte nach unten und drei sie nach oben drücken, um sie gegen Vibrationen zu schützen. Die Asymmetrie der Durchführung ist Resultat des gegen die Spektrometerachse verschobenen Elektronendetektors.



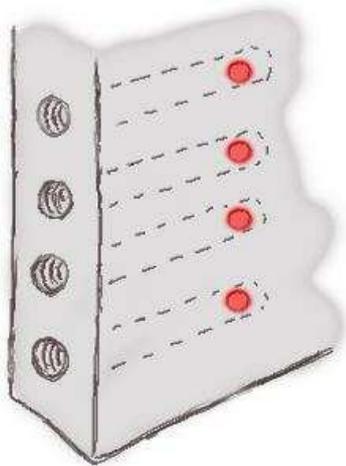
Dieses eben beschriebene Konstruktionsprinzip, wird auch bei den übrigen stützenden Spektrometerplatten angewandt, wobei zwei nicht direkt mit der Grundplatte verbunden sind, sondern ausschließlich über die 10 mm starken Stahlstangen Stabilität erlangen. Die 0,5 mm breiten Kupfer-Spektrometerplatten füllen die Räume zwischen den stützenden Spektrometerplatten und werden durch Keramikstangen gehalten. Die folgende schematische Zeichnung zeigt die Verbindungen noch einmal im Überblick.



## Funktion bestimmter Konstruktionen

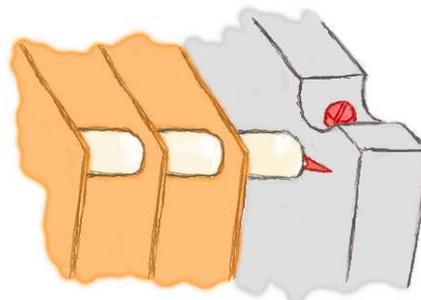
Bevor nun eine Übersicht über das fertige Spektrometer gegeben wird, soll hier noch auf einige Elemente des Spektrometers und dessen Funktion eingegangen werden. Es handelt sich dabei um Konstruktionen, die für eine erfolgreiche Umsetzung des Experiments nötig sind und in allen angefertigten Konstruktionszeichnungen Beachtung finden, aber nicht im Detail in der Simulation oder dem Prinzip der Konstruktion auftauchen.

### Ausgasöffnungen



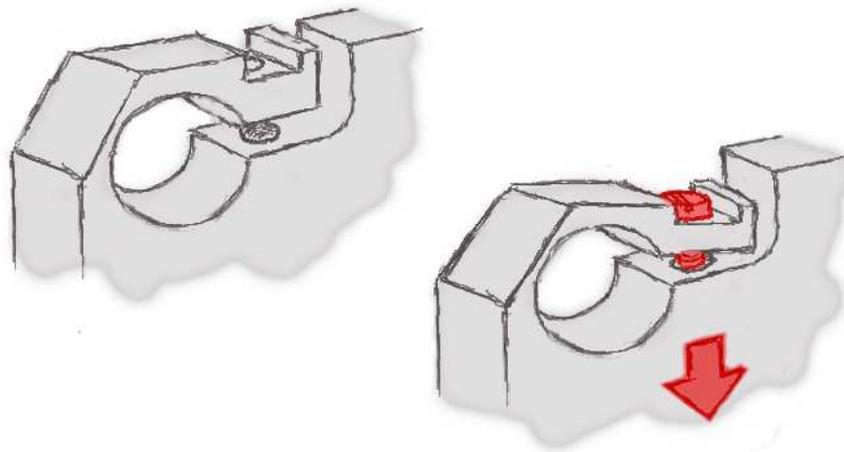
Ausgasöffnungen beschleunigen das Erreichen eines hohen Vakuums, da sie verhindern, dass in der Konstruktion Löcher und Kuhlen entstehen, die nur eine kleine Verbindung zu dem Bereich in dem die Vakuumpumpen arbeiten, haben. Verschmutzungen in diesen Löchern würden stetig zu einer Verunreinigung des Vakuums führen, da sie nur eine geringe Angriffsfläche bieten. In der linken Zeichnung sind vier Ausgaslöcher - einfache Einbohrungen - zu sehen, die sich am Ende von Gewindebohrungen befinden.

Hier sieht man Kupferplatten, die mit einer Keramikhülse auf einer Aluminiumplatte abschließen. Um ein langsames stetiges Ausgasen aus der Gewindebohrung, durch welche die Keramikstangen fixiert werden, zu verhindern, wurden derartige Durchgangslöcher, wie in der Zeichnung dargestellt, mit einer Kerbe versehen.



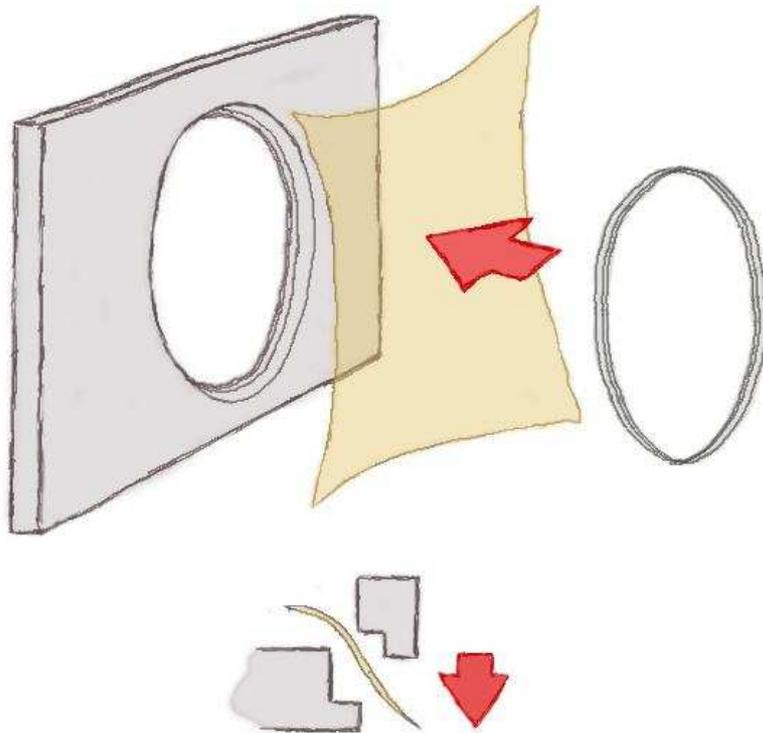
## Klemmmechanismus der 10 mm-Stangen

Die 10 mm starken Stahlstangen, welche die gesamte Spektrometerkonstruktion stützen, sind durch einen Klemmmechanismus direkt mit den tragenden Spektrometerplatten verklemmt. Das gewährleistet zum einen eine vibrationsfreie Aufhängung und zum anderen ein komfortables Montieren, da die Stangen ohne Gewinde einfach durch die Platten geschoben werden können. Die flexible Durchgangsöffnung wird dazu einfach mittels einer Schraube derart verengt, dass sie fest an der durchgeführten Stahlstange festhält.



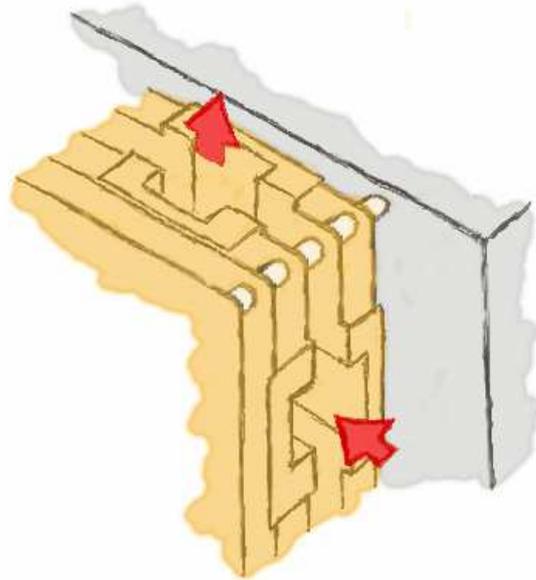
## Drift-Gitter

Die Gitter, welche einen potentialfreien Raum sowohl vor dem Elektronen- als auch vor dem Rückstoßionen-Detektor garantieren, werden zwischen der Spektrometerplatte und einem Spannring eingeklemmt. Dadurch erhält man ein ebenes Gitter. Durch abgerundete Kanten wird ein Einreißen verhindert. Hier wurde ein Edelstahl-Gitter mit einer Maschenbreite von  $240\ \mu\text{m}$  verwendet.

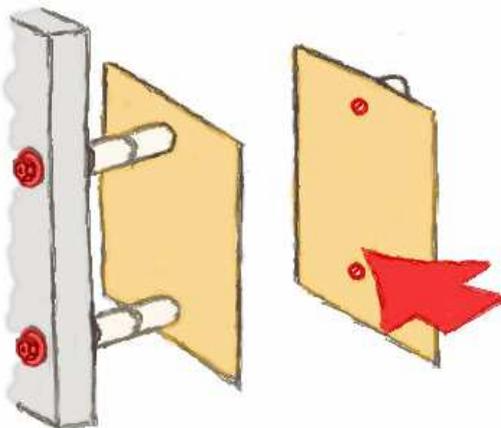


## Platten um Targetzone

In der Targetzone, in der sich Gasjet und Protonenstrahl kreuzen, mussten besondere Kupferplatten verwendet werden um eine Streuung der ein- und austretenden Strahlen an eben diesen zu vermeiden. Deshalb wurden die, von der Targetzone rechts und links befindlichen, Platten mit einer Aussparung versehen, welche auf Höhe der Strahlachsen mehr Raum gewährt, aber dennoch ein homogenes elektrisches Feld zulässt.



## Steerer



Bei den Steuerern an Ein- und Ausgang wurden ebenfalls Kupferplatten verwendet, da diese aufgrund ihres geringen Durchmessers bei der Platzierung im knappen Raum um die Targetzone mehr Variabilität bieten. Um ein möglichst homogenes Feld zu gewährleisten, wurden Senkkopfschrauben in die Oberfläche der Platten eingebettet und diese gegenüberliegend isoliert und mit einer Mutter gekontert.

## Vor dem Elektronendetektor

Es folgen nun einige Konstruktionszeichnungen und Photos des fertigen Spektrometers vor dem Elektronendetektor bis zur Rückstoßionen-Driftstrecke.

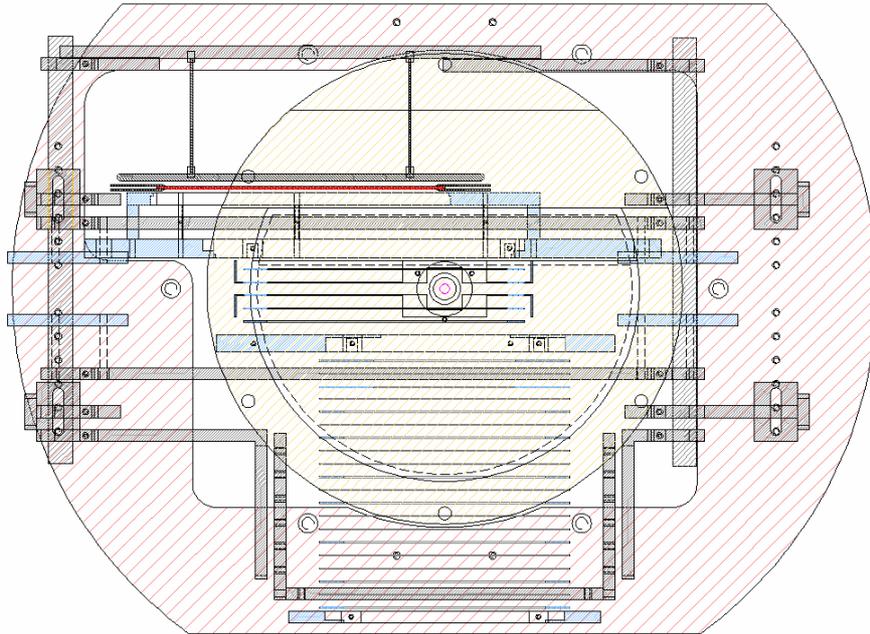


Abb. 35: Eine Draufsicht auf den Teil vor dem Elektronendetektor bis zum Ende der Beschleunigungsstrecke einschließlich der Grundplatte und des Jethuts.

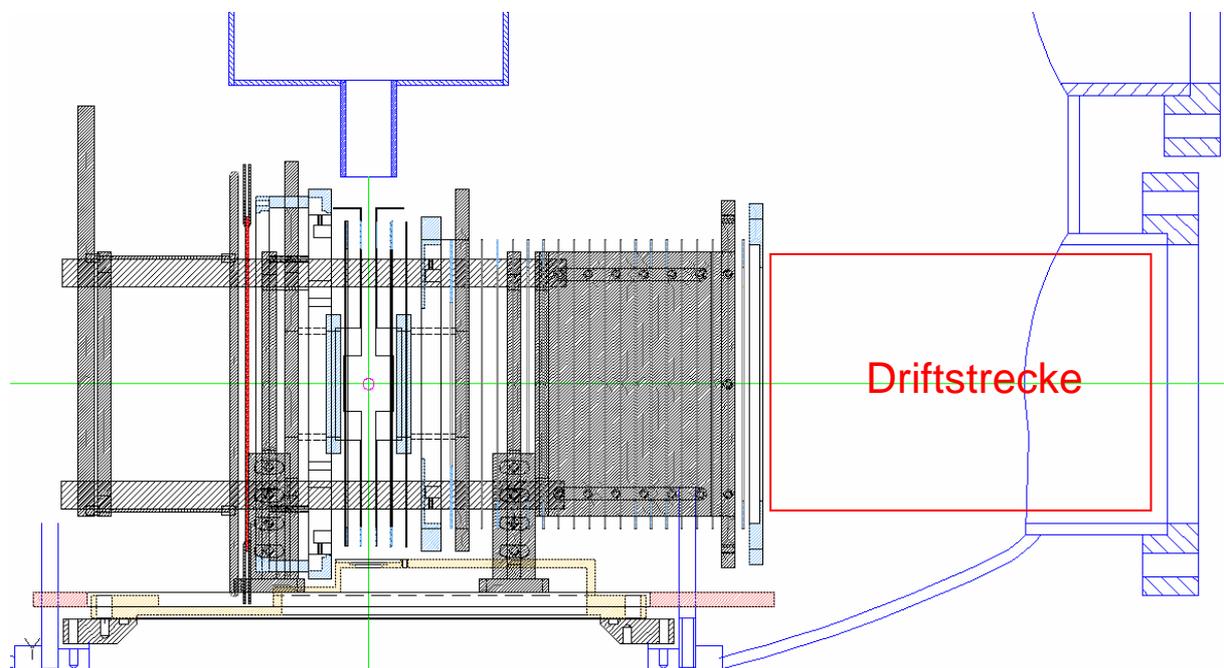
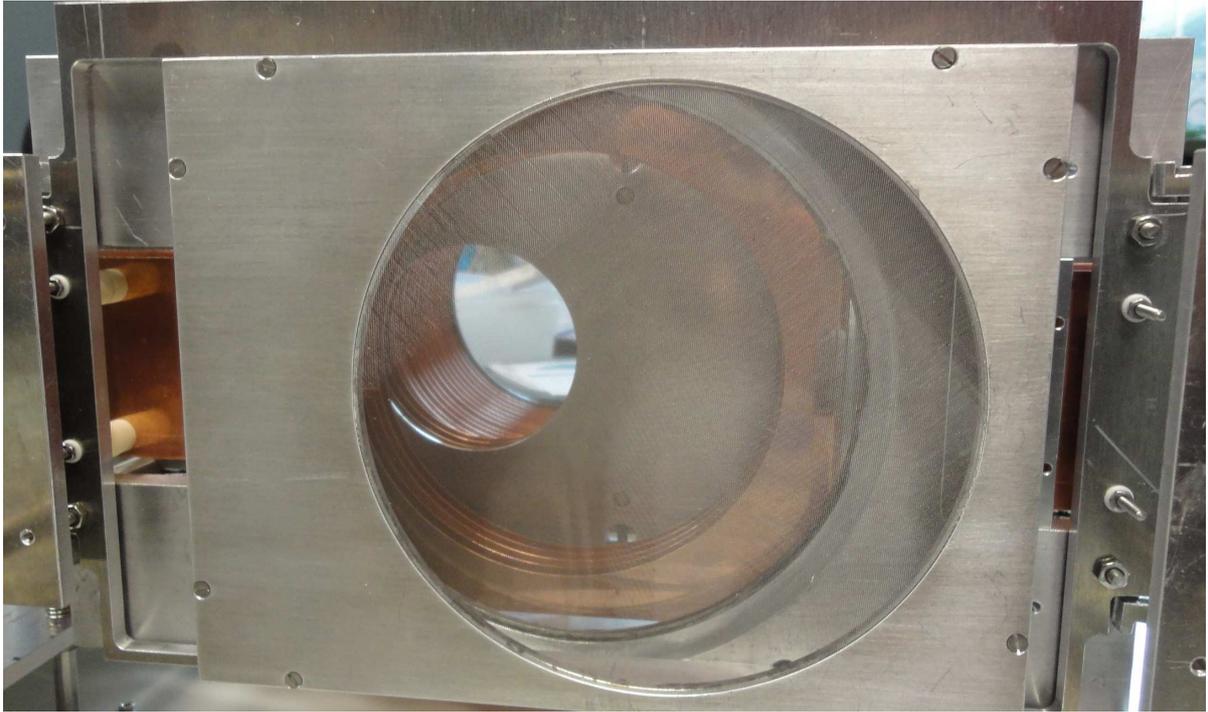
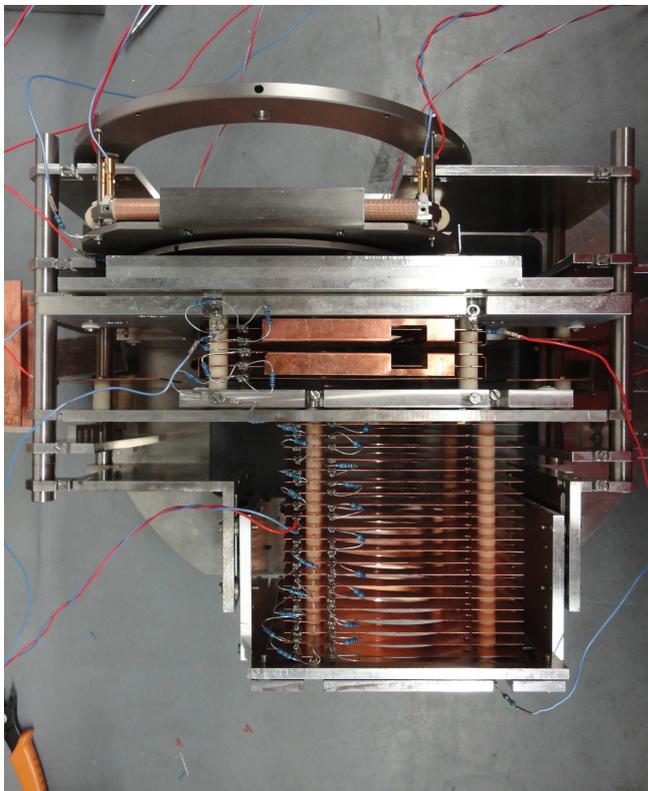


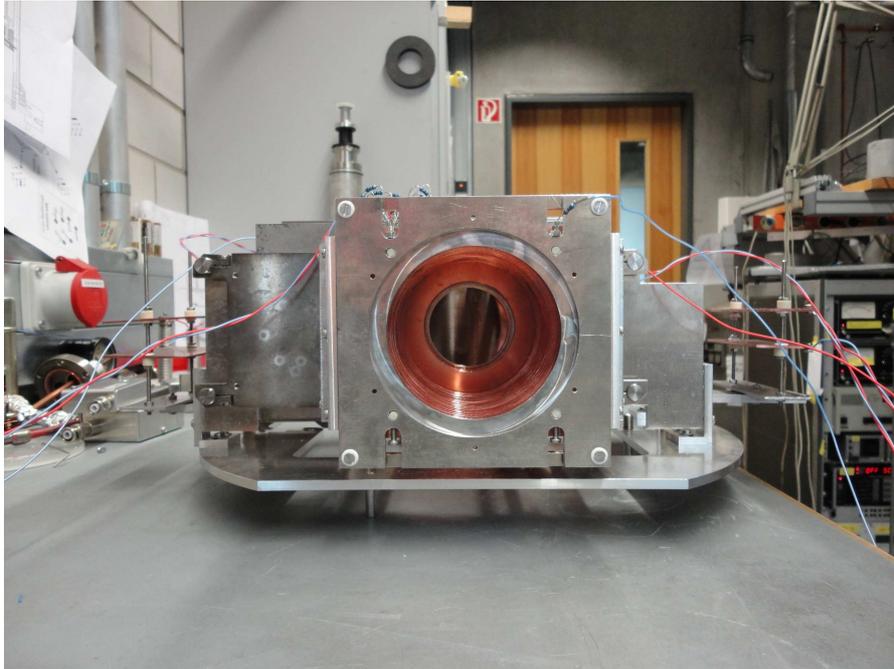
Abb. 36: Der gleiche Teil des Spektrometers in einer Seitenansicht. Hier ist außerdem der Raum bis zum Kammerausgang zu sehen, welcher mit einer Driftröhre aus Kupferblech überbrückt wird.



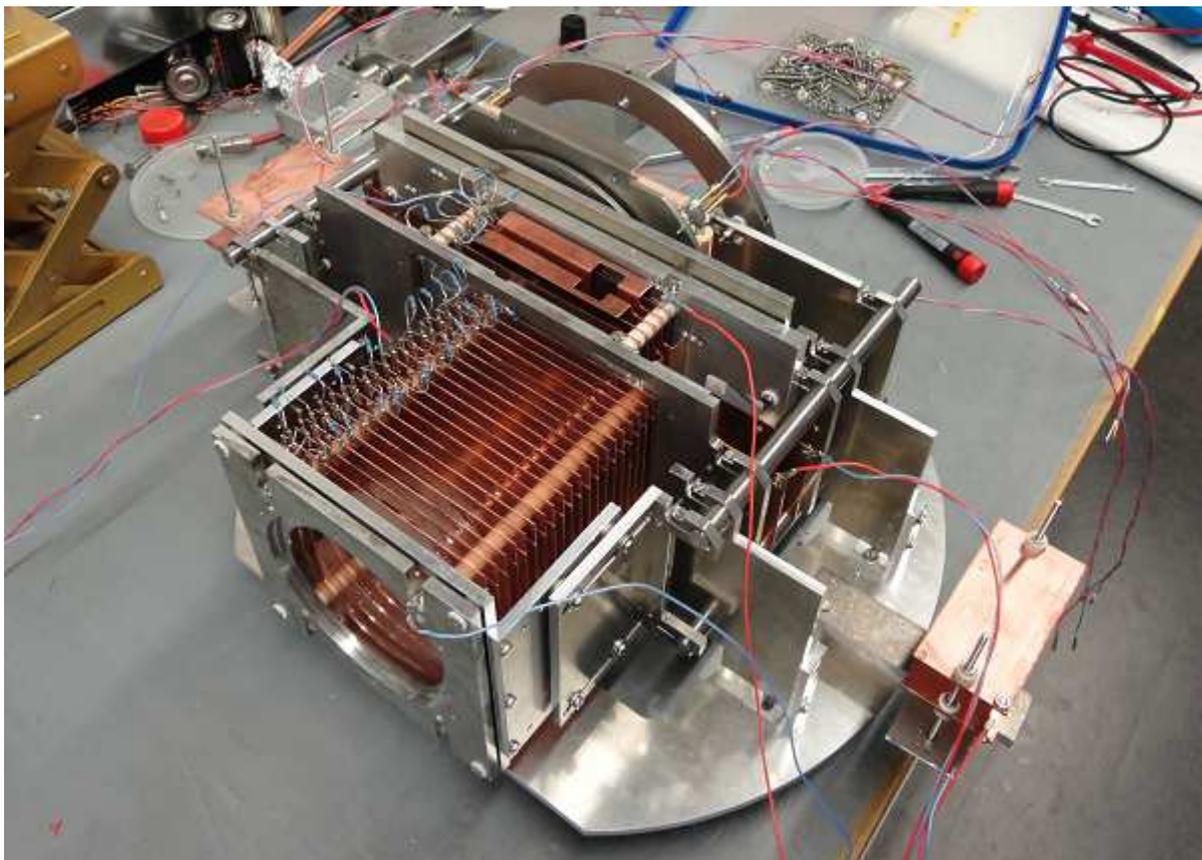
**Abb. 37:** Hier sieht man durch das Spektrometer in Flugzeitrichtung bis zum Ende der Beschleunigungsstrecke. Der Elektronendetektor ist hier noch nicht angebracht.



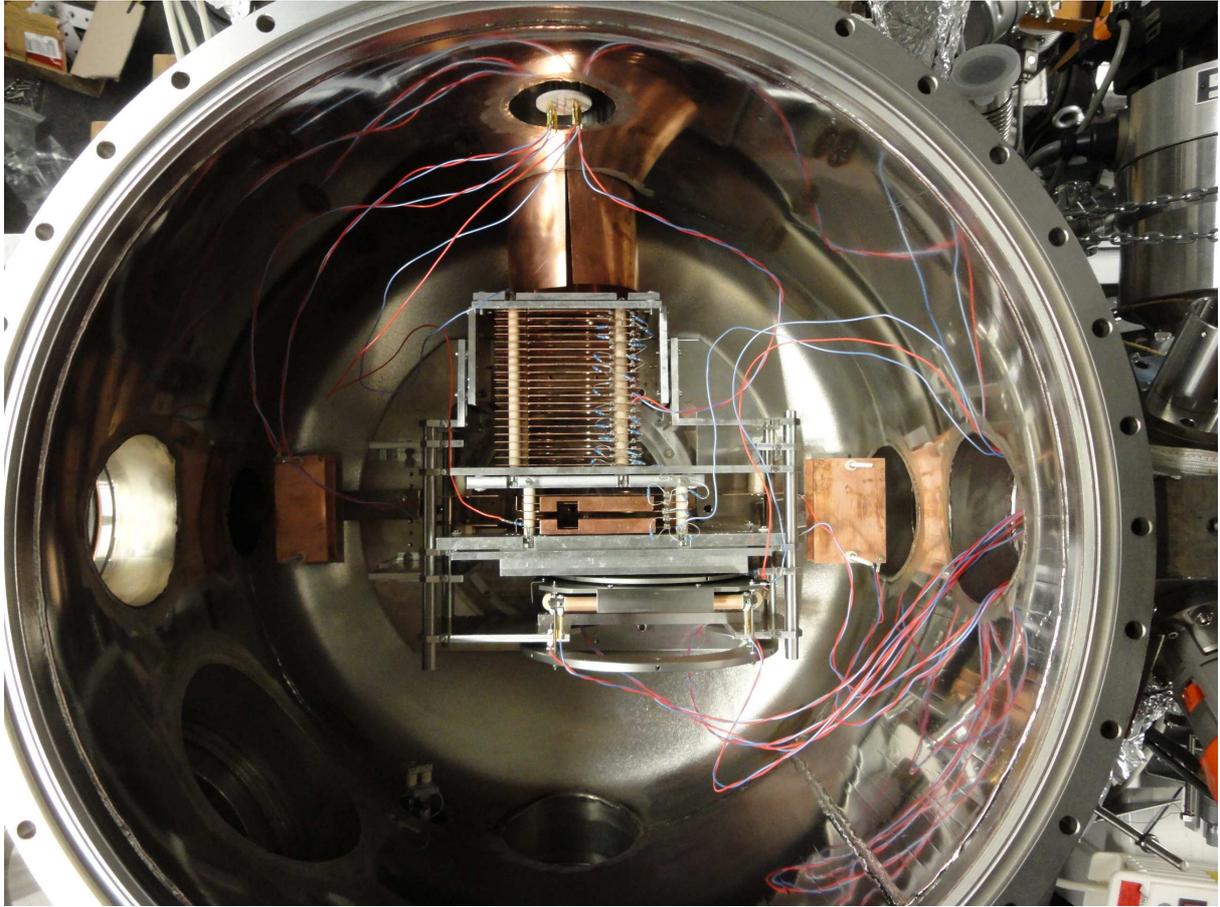
**Abb. 38:** Eine Draufsicht auf den Teil vor dem Elektronendetektor diesmal als Photo. Man sieht die Aussparungen in den Kupferplatten in der Targetzone und den deutlich gegen die Spektrometerachse verschobenen Elektronendetektor. Im Gegensatz zu den technischen Zeichnungen sind hier bereits zwei zusätzliche Kupferplatten am Ende der Beschleunigungsstrecke eingebracht worden, was zu der Verlängerung des Rahmens um 1 cm führt. Auf diese Option wird später noch einmal genauer eingegangen.



**Abb. 39:** Ein Blick entgegen der Strahlrichtung durch die Beschleunigungsstrecke auf den Elektronendetektor.



**Abb. 40:** Hier sieht man außerdem Eingangs- und Ausgangssteerer, welche den Projektilstrahl jeweils sowohl horizontal, als auch vertikal ablenken können.



**Abb. 41: Hier ist das Spektrometer bereits in der Experimentierkammer befestigt. Der Projektilstrahl kommt von links und der Gasjet aus dem Bild heraus. Die Flugzeitrichtung ist in diesem Bild nach oben gerichtet. Am Ende der Beschleunigungsstrecke ist ein Kupferrohr am Kammerausgang befestigt, um einen potentialfreien Raum zu garantieren.**

## Vor dem Rückstoßionendetektor

Nun folgen Übersichten über den verbleibenden Teil des Spektrometers.

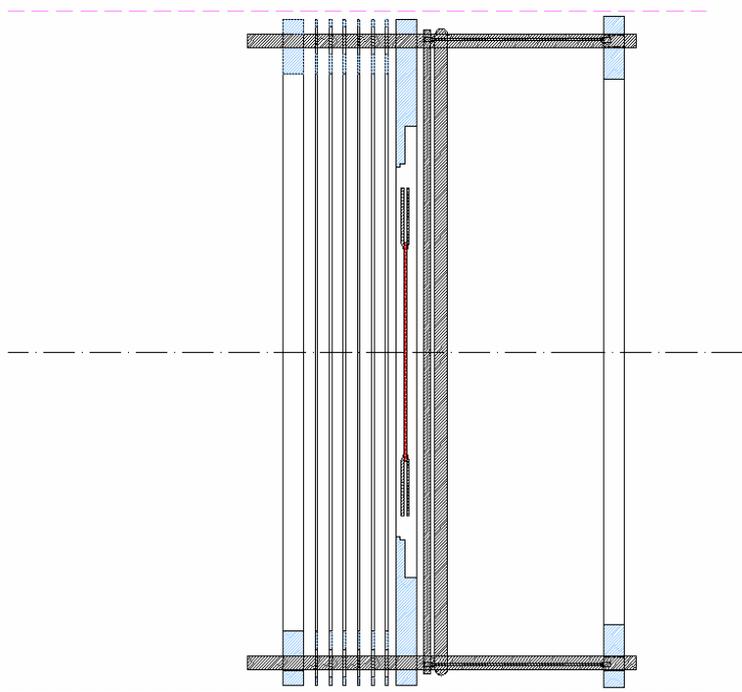


Abb. 42: Seitenansicht des Rückstoßionendetektors. Die Aluminiumplatten vor dem Rückstoßionendetektor wurden mittels 6 M4 Gewindestangen direkt am Endflansch befestigt. Die 6 dünnen Kupferplatten werden von Keramikstangen gehalten. Isolation ist durch Keramikhülsen gewährleistet. Der Detektor (rot) befindet sich direkt hinter einem Edelstahl-Gitter.

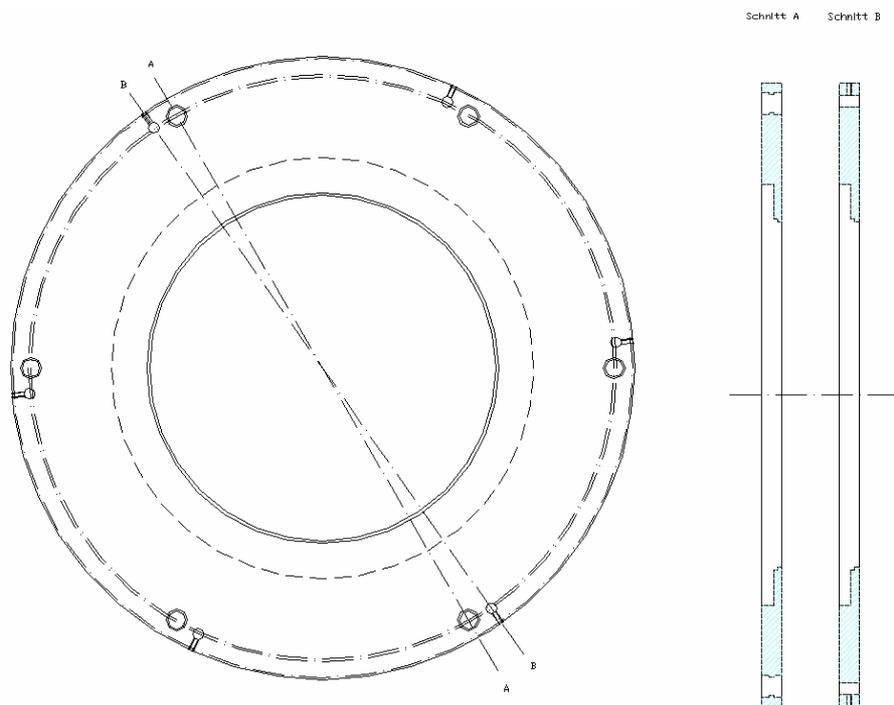


Abb. 43: In der Konstruktionszeichnung dieser Aluminiumplatte direkt vor dem Detektor sind die leicht versetzten Durchführungen für die Keramikstangen, welche die Kupferplatten halten, und die Stahlstangen, welche direkt mit dem Endflansch verbunden sind und das meiste Gewicht halten, zu sehen.

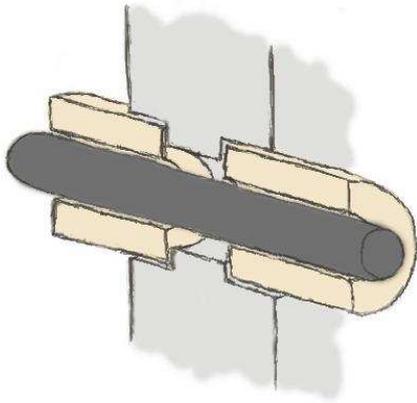


Abb. 44: Hier sieht man einen Schnitt durch eine der Aluminiumplatten. Die Löcher wurden derart konstruiert, dass sie Keramikhülsen einfassen, aber nicht hindurchführen können. Auf diese Weise können die Aluminiumplatten durch die aneinandergereihten Keramikhülsen in einer Position fixiert werden und gleichzeitig ist die Isolation durch den Abstand zur tragenden Stahlstange gewährleistet.

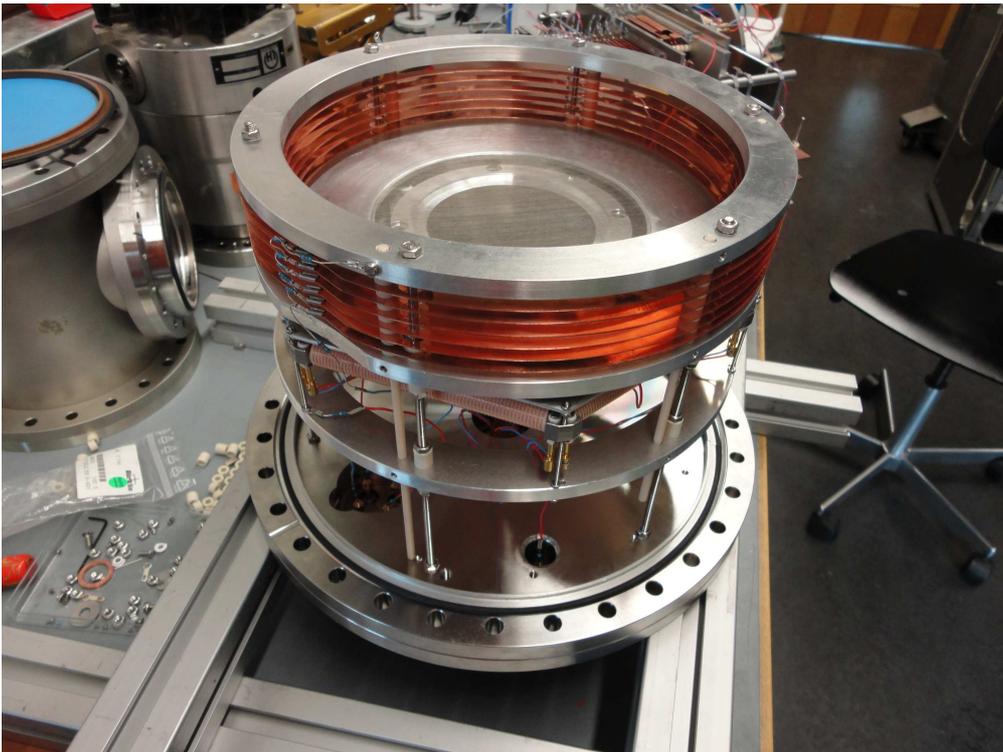


Abb. 45: Eine isometrische Ansicht des Spektrometers vor dem Rückstoßionendetektor. Zu sehen ist das Gitter mit dem dahinter liegenden Detektor mit 80 mm Durchmesser.

## Gesamtes Spektrometer

Beide Teile des Spektrometers sind über die 720 mm lange Driftstrecke der Rückstoßionen miteinander verbunden. Am Kammerausgang schließt sich ein 220 mm langer Wellbalg an, darauf folgt ein 500 mm langes Rohrstück mit einem Durchmesser von 250 mm. Auf diese Weise entspricht die Spektrometer-Geometrie den Vorgaben der Simulation.

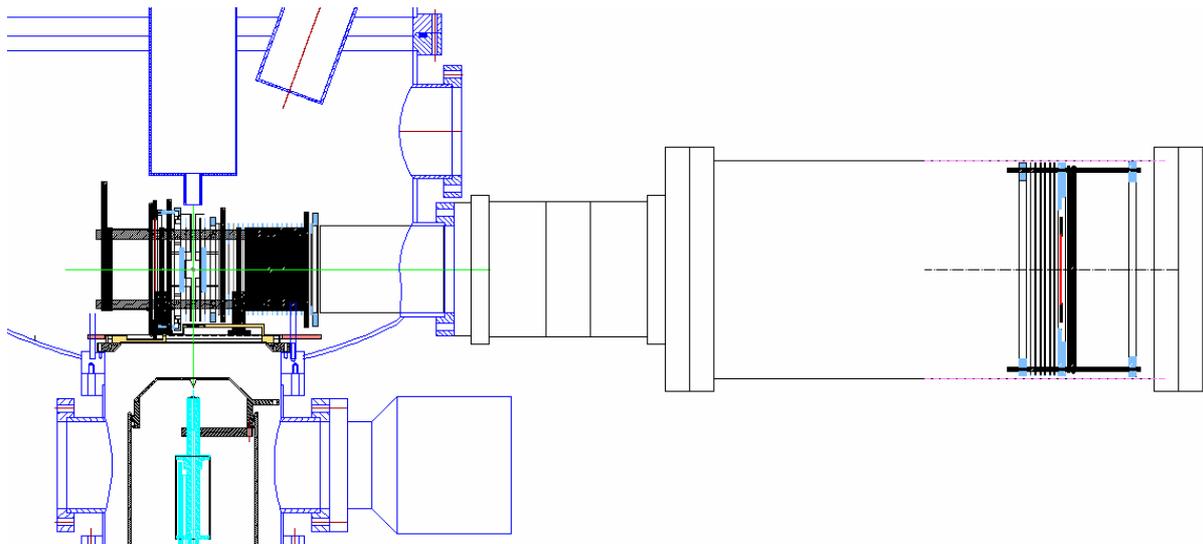


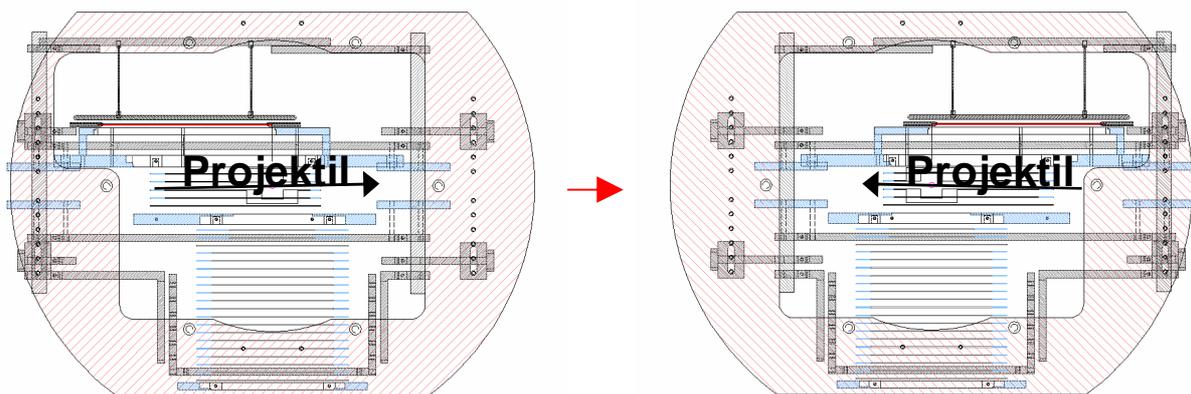
Abb. 46: Eine technische Zeichnung des gesamten Spektrometers und der Experimentierkammer. Von Detektor zu Detektor misst es 983 mm.

## Das endgültige Design

Das Spektrometer ist somit so weit entwickelt, dass es alle Vorgaben der Simulation erfüllt und real in der Experimentierkammer verwendet werden kann. Allerdings waren an das Spektrometer noch einige zusätzliche Anforderungen gestellt, welche unabhängig von der Simulation sind. Beachtung erfuhren diese erst in der *AutoCAD*-Konstruktion und bedingten einige Einschränkungen, bzw. erforderten größere Variabilität. Auf diese zusätzlichen Anforderungen wird nun eingegangen.

## Kompatibilität mit Implanter und EZR

Die Konstruktion musste so angelegt werden, dass es möglich ist das Spektrometer sowohl am Implanter, als auch an der Elektron-Zyklotron-Resonanz-Ionenquelle des IKF der Goethe-Universität in Frankfurt am Main einzubauen. Die Experimentierkammern unterscheiden sich zum einen durch ihr Jetsystem, und zum anderen durch die Richtung, aus welcher der Projektilstrahl auf das Gastarget trifft. Das Design ist grundsätzlich so angelegt, dass es ohne zusätzliche Bauteile zu beiden Experimentierkammern kompatibel ist. Der Elektronendetektor lässt sich in beide Richtungen um 120 mm versetzen und sämtliche Spektrometerplatten lassen sich auf beide Detektorpositionen ausrichten. Steerer finden auf beiden Seiten der Grundplatte Platz.



**Abb. 47:** Die entgegengesetzten Richtungen des Projektilstrahls an Implanter und EZR erforderten das Spektrometer an seiner Achse „spiegeln“ zu können. Das Spektrometer besitzt aber nicht etwa eine oben-unten-Symmetrie, die es erlaubt, es einfach zu drehen. Stattdessen müssen die Spektrometerplatten gegeneinander verschoben werden.

## Verlängern der Beschleunigungsstrecke

Da das Spektrometer möglichst flexibel auch für unterschiedliche zukünftige Projekte verwendet werden soll, wurde es möglichst variabel konstruiert. So lassen sich in der Beschleunigungsstrecke weitere Platten einfügen um größeren Einfluss auf die Position der elektrostatischen Linse zu haben. Eine Verlängerung der Beschleunigungsstrecke bietet außerdem die Option auch Teilchen mit höheren Stoßenergien zu spektrometrieren, die sonst an den Kammerwänden reflektiert würden.

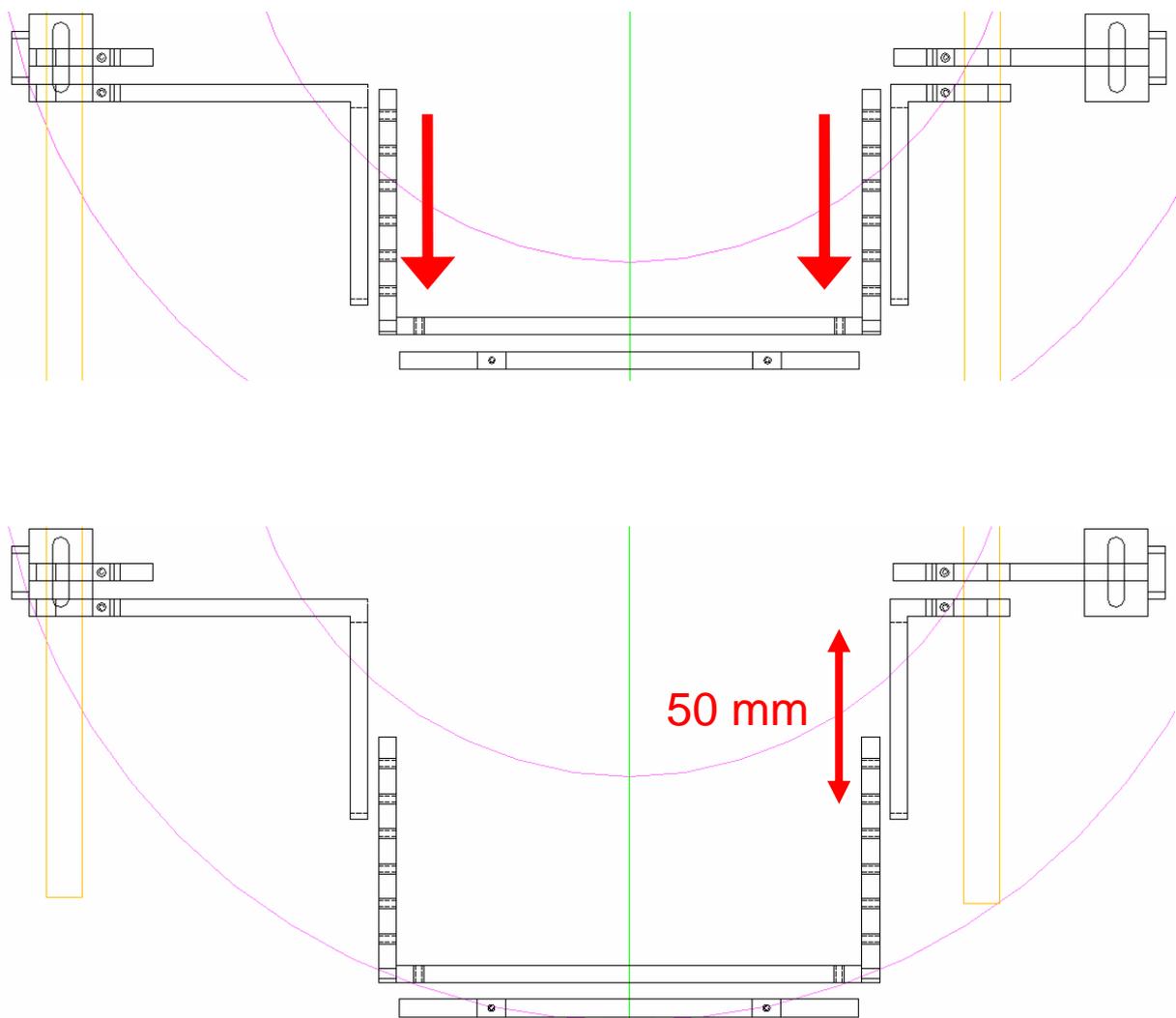


Abb. 48: Die letzte Platte der Beschleunigungsstrecke lässt sich samt isolierendem Rahmen stufenlos verlängern. Dadurch ist es möglich auf fünf Zentimetern weitere 10 Spektrometerplatten einzufügen.

## Kippen des Spektrometers

Die zu detektierenden He-Ionen haben aufgrund des Überschall-Gasjets eine im Laborsystem asymmetrische Impulsverteilung in Ortsrichtung im Bereich von +16/-4 a.u. Diese Verschiebung des Phasenraums würde im Experiment dazu führen, dass ein Teil der Rückstoßionen nicht auf den Detektor trifft, sondern an den Spektrometerwänden reflektiert wird. Deshalb musste die Konstruktion es ermöglichen, den Elektronendetektor und die Beschleunigungsstrecke derart zu kippen, dass die äußersten Rückstoßionen zur Strahlachse hin verschoben den Rückstoßionen-Detektor treffen.

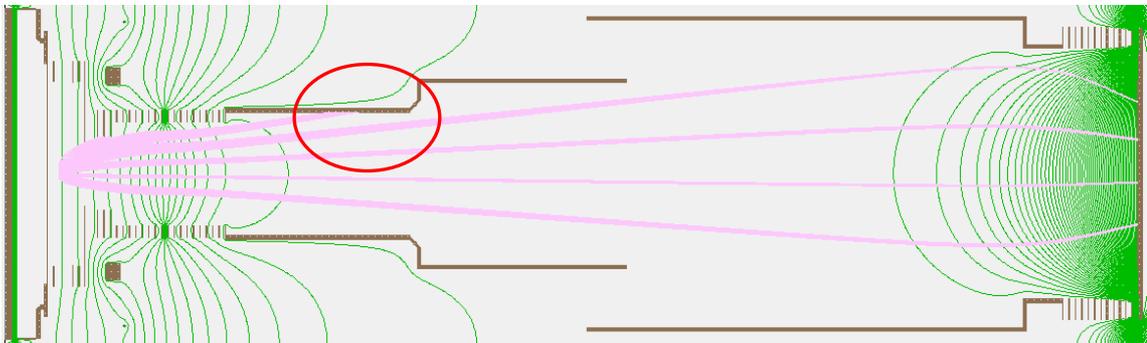


Abb. 49: Die Phasenraum-Verschiebung der Rückstoßionen führt im unveränderten Spektrometerdesign zu einer Kollision mit der Rückstoßionen-Driftröhre schon innerhalb der Experimentierkammer an der Stelle, die hier durch den roten Kreis markiert ist.

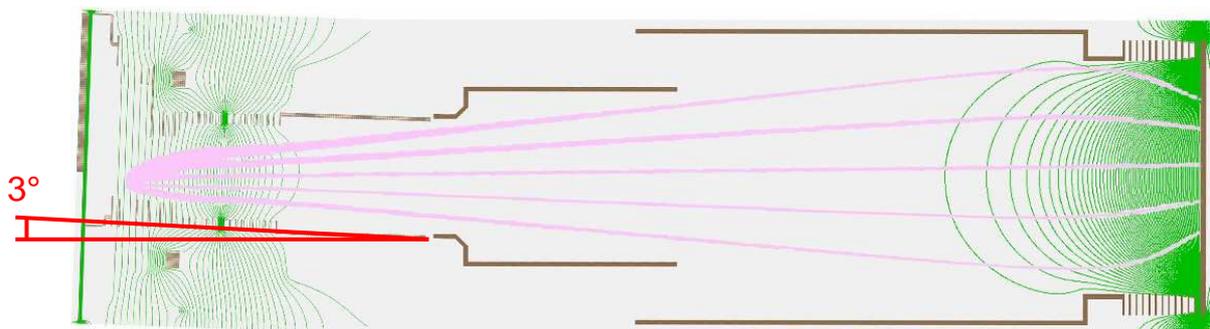


Abb. 50: Ein Kippen des Elektronenteils des Spektrometers um ca.  $3^\circ$  führt dazu, dass die Rückstoßionen eine zusätzliche Beschleunigung in negative Ortsrichtung „nach unten“ erfahren, wodurch die Rückstoßionen wieder zentral auf den Rückstoßionen-Detektor treffen.

## Kippen des Spektrometers an den Spektrometerfüßen

Da das Spektrometer letztendlich aus genannten Gründen um  $3^\circ$  gekippt eingebaut werden muss, ermöglicht die Art der Konstruktion der Spektrometerfüße ein stufenloses Kippen um bis zu  $15^\circ$ . Zusätzlich ist es möglich das gesamte Spektrometer auch nach dessen Montage um  $\pm 5$  mm in Strahlrichtung und  $\pm 10$  mm in der Höhe zu verschieben, um es nach dem Kippen genau auf Targetzone und Kammerausgang abzustimmen.

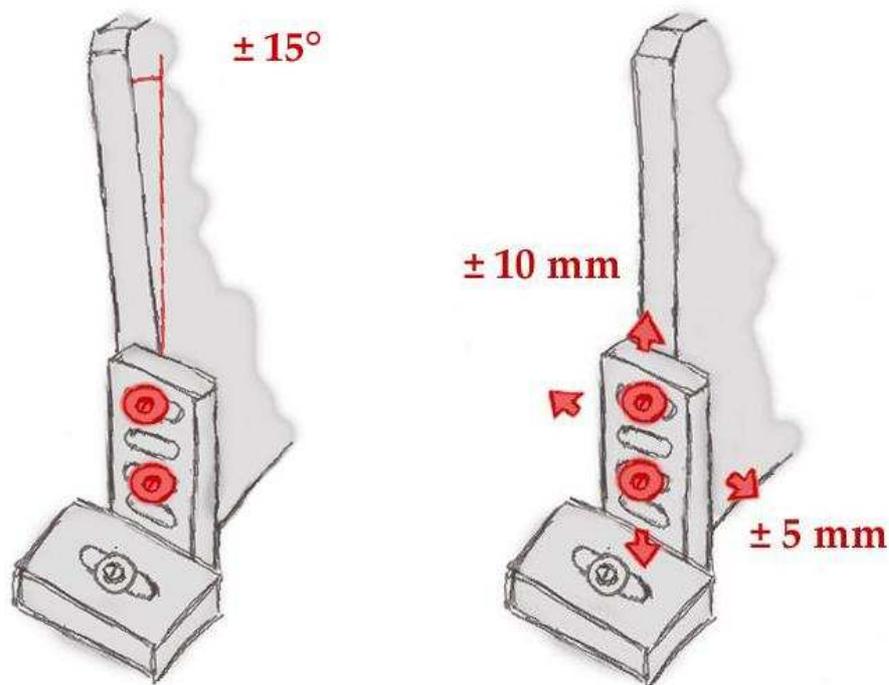


Abb. 51: Die Möglichkeit des stufenlosen Kippens ist dadurch gegeben, dass den Schrauben (in der Zeichnung rot markiert), die den Elektronenteil des Spektrometers halten, ein gewisser Spielraum gewährt wird. Die vier - anstelle von zwei - Aussparungen ermöglichen die Höhenverstellung.

## Testmessungen

In den letzten Wochen war es nun möglich erste Testmessungen vorzunehmen und die Abbildungseigenschaften des Spektrometers, und damit auch die Wirkung der Eichfunktionen, zu erproben. Der Elektronen-Detektor wurde dabei zunächst noch nicht in Betrieb genommen. Auf dem Rückstoßionendetektor wurde das Spektrum einer Reaktion zwischen Alphateilchen und Helium aufgenommen und erste Strukturen aufgelöst. Es ist geplant das gesamte Experiment nun mit den hier verwendeten Reaktionspartnern durchzuführen.

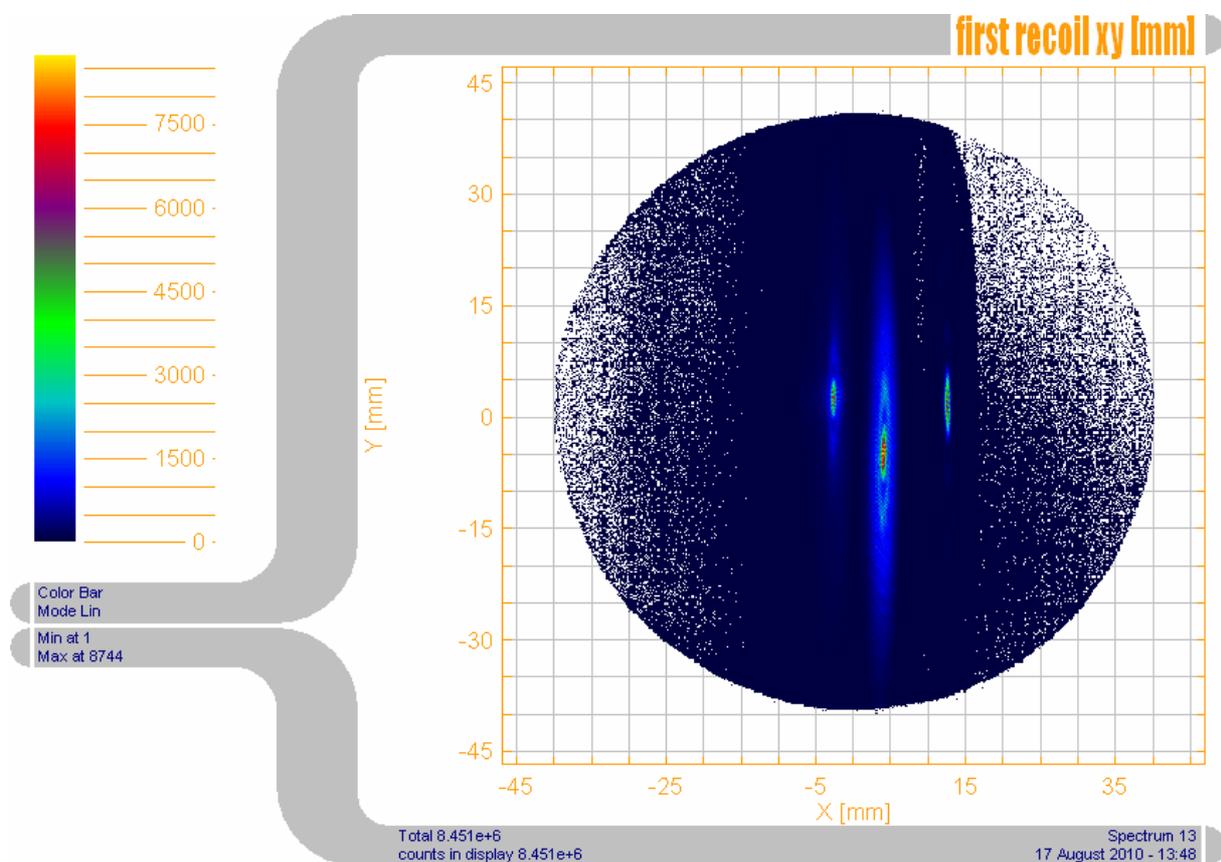


Abb. 52: Das Ortsbild der Rückstoßionen eines  $\alpha$ -He-Stoßes zeigt die Capture-Linien. In der inneren Struktur der Capture-Linien sind die ausgezeichneten Winkel der Reaktion zu erkennen. Die Ortseichfunktion bewirkt für diese Darstellung eine zunehmende Streckung der Abbildung mit zunehmendem Abstand zur Detektormitte, um beschriebene Nicht-Linearitäten auszugleichen. Die Impulsabbildung beträgt schließlich 0,15 a.u. pro Millimeter.

Die Übersetzung der Simulation in ein reales Experiment ist dabei immer mit gewissen Ungenauigkeiten verbunden. Mögliche Störfaktoren durch das Gravitationsfeld der Erde, magnetische Momente im Bereich der Experimentierkammer und kleine Abweichungen zwischen der simulierten und der realen Spektrometergeometrie, haben nur vernachlässigbaren Einfluss oder lassen sich relativ gut vermeiden. Gewisse Abweichungen der Spannungen der Spektrometerplatten von den simulierten Werten lassen sich aber kaum vermeiden und müssen nachträglich durch einen Vergleich der Messdaten mit den Simulationswerten eliminiert werden. Während die Ortskorrektur im Detektionsbereich nur sehr kleine Nicht-Linearitäten korrigiert und lediglich eine r-Abhängigkeit besitzt, muss die Flugzeitkorrektur insbesondere aufgrund möglicher Abweichungen der Flugzeitschwerpunkte von Simulation und Experiment, den Messdaten angepasst werden.

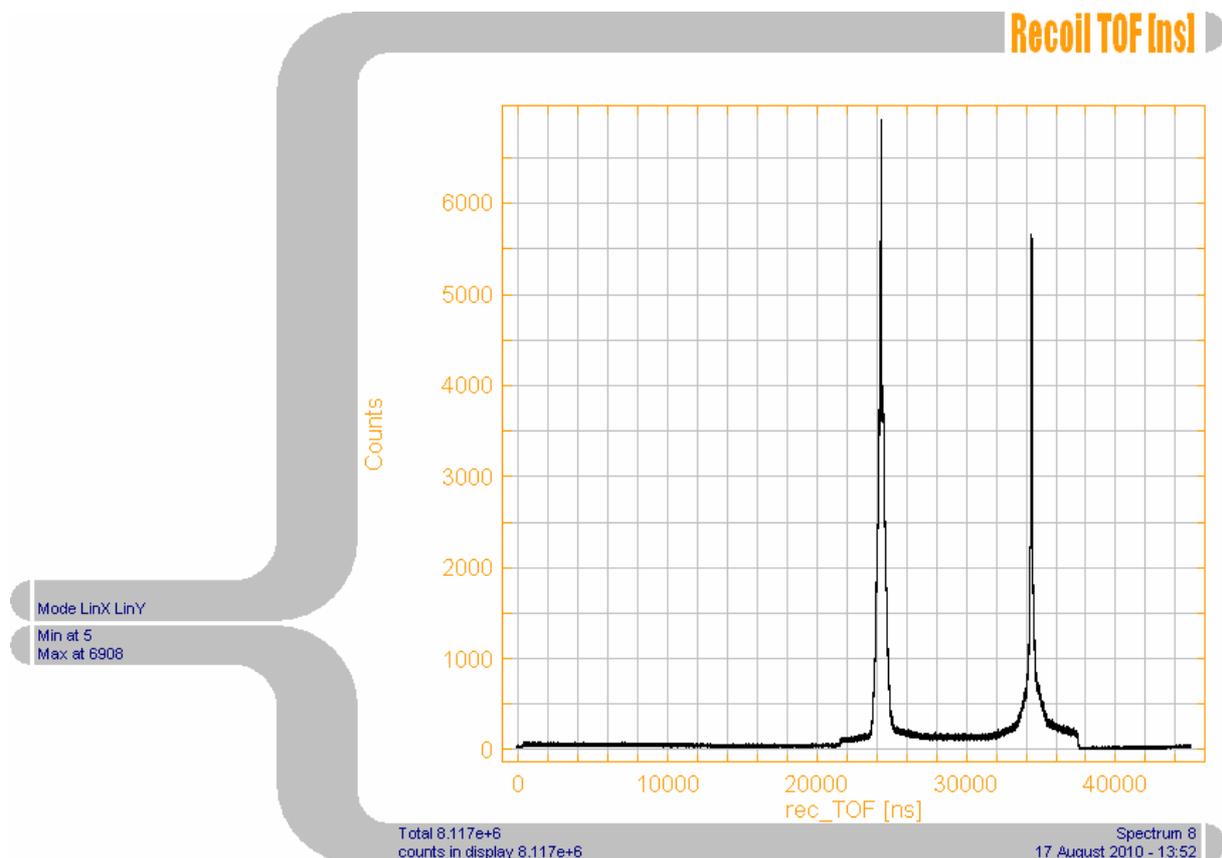


Abb. 53: Die Flugzeitschwerpunkte für Ionisation und Transferionisation aus den Messdaten erlauben zum einen die Überprüfung des  $1: \sqrt{2}$ -Verhältnis zwischen Ionen mit dem Ladungsverhältnis 1:2, zum anderen lässt sich damit die Eichung in Flugzeitrichtung der realen Messung anpassen.

## Anpassung der Eichfunktion in Flugzeitrichtung

Um die Funktion den möglichen Abweichungen in den Spektrometerspannungen anzupassen, skaliert man den Korrekturterm entsprechend des Verhältnisses von tatsächlicher zu simulierter Flugzeit neu (mit dem Faktor  $p$  – siehe unten).

Ein weiterer Umstand, der bei einer Messung bedacht werden muss, ist, dass man zunächst nicht den genauen Ortsschwerpunkt des Spektrums auf dem Detektor kennt. Damit geht einher, dass man den Schwerpunkt der Impulsverteilung in Ortsrichtung nicht kennt und nicht weiß, wie stark die Eichfunktion diesen Punkt in Flugzeitrichtung verschieben wird. Aus diesem Grund, wird nach Anwendung der Eichfunktion noch einmal der Wert des Korrekturterms für den Ortschaftpunkt subtrahiert um das Spektrum wieder an die ursprüngliche Stelle zu verschieben. Mit diesen Modifikationen lautet die Eichfunktion dann:

$$([\text{Flugzeit}] - ([\text{Korrekturterm}(\text{Ort})] \cdot p)) - ([\text{Korrekturterm}(\text{Ortsschwerpunkt})] \cdot p)$$

$$\text{mit } p = \frac{\text{Flugzeitschwerpunkt}(\text{Messung})}{\text{Flugzeitschwerpunkt}(\text{Simulation})}$$

In den folgenden Abbildungen sieht man die Impulsverteilung, wie sie auch stets zum Finden der Eichfunktion sowohl in Orts- als auch in Flugzeitrichtung betrachtet wurde. Anhand dieser Messdaten lässt sich nun überprüfen, ob die Eichfunktionen auch außerhalb der Simulation die richtigen Korrekturen liefern und das Spektrometer die erwünschten Abbildungseigenschaften besitzt.

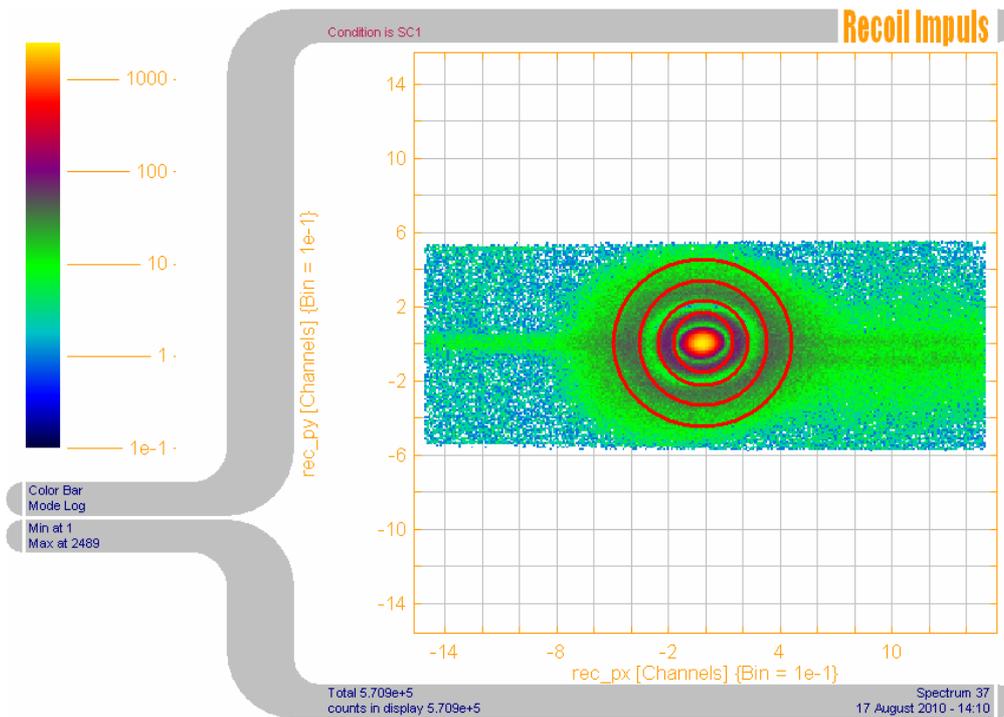


Abb: 54: Vor der Anwendung der Eichfunktionen ist die Verteilung der Ionen im Impulsraum gestaucht und asymmetrisch. Die roten Kreise sind kein Teil des Spektrums und dienen der Überprüfung der Symmetrie.

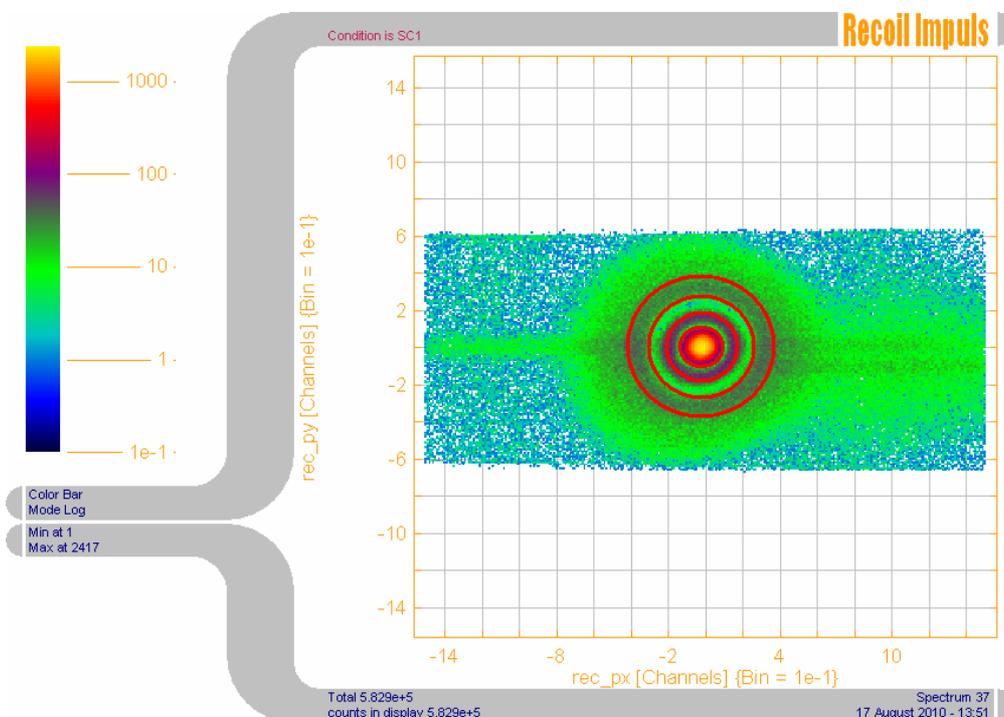


Abb: 55: Nach Anwendung der Eichfunktionen sind Detektionsorte und Flugzeiten korrigiert und es ergibt sich eine physikalisch korrekte, symmetrische Impulsverteilung.

## **Ausblick**

Mit den ersten Testmessungen zur Überprüfung der Abbildungseigenschaften des Spektrometers ist nun der Umfang dieser Diplomarbeit erschöpft. Das Projekt steht damit auf einer Grundlage, die es erlaubt, die Theorie der Arbeitsgruppe um Joe Macek zu überprüfen und etwaige Ergebnisse bis in die Grundannahmen, die schon bei der Simulation des Spektrometers getroffen wurden, auszuwerten. Das ist offensichtlich deshalb entscheidend, da es wie bei allen Ergebnissen der experimentellen Physik möglich sein muss, diese, ausgehend von einfachen physikalischen Gesetzen, bis hin zum Spektrum, zu den Meßpunkten oder anderen Meßgrößen lückenlos nachzuvollziehen, um sie zu verifizieren.

Auf experimentellen Ergebnissen basierend, lässt sich über die Richtigkeit der theoretischen Annahmen zu diesem Zeitpunkt noch nichts sagen. In den kommenden zwei Jahren sind erste endgültige Aussagen über die Existenz der Wirbel in Ein-Teilchen-Wellenfunktionen im Rahmen dieses Projektes zu erwarten. Das Spektrometer selbst wird danach vorraussichtlich noch für weitere Projekte verwendet werden.

## Danksagung

Meine letzten Zeilen möchte ich nun dazu nutzen, einigen Dank auszusprechen an die Personen, die ebenfalls auf die ein oder andere Weise zu dieser Arbeit beigetragen haben.

Zunächst möchte ich Reinhard Dörner für die herzliche Aufnahme in seine Arbeitsgruppe und das Herantreten an mich mit diesem interessanten Thema danken.

Der größte Dank gilt Lothar Schmidt, der zu jeder Zeit gewillt war, meine Fragen zu scheinbar beliebigen Themen zu beantworten und – was noch viel wichtiger ist – das auch konnte. Er brachte damit oft Licht ins Dunkel, ganz gleich ob es um picoskopische Wirbel oder neuronale Netze ging.

Ich möchte mich auch bei Frau Geiß aus der Feinmechanik-Abteilung bedanken, dass sie so flexibel und freundlich auf kurzfristige Konstruktionsänderungen reagiert hat, selbst wenn es dafür eigentlich schon zu spät war.

Weiterer Dank gilt Markus Waitz, dem „Gitter-Experten“, für die Unterstützung beim nervenaufreibenden Spannen der empfindlichen Edelstahl-Gitter.

Auch bedanken möchte ich mich bei Christoph Goihl, der das Projekt zusammen mit Lothar Schmidt fortführen wird, für die experimentelle Unterstützung in den letzten Wochen.

Ein letzter Dank gilt noch all denen, die mehr oder minder unbewusst auf den Fortgang dieser Diplomarbeit eingewirkt haben, indem sie z.B. wie Horst Schmitt-Böcking, der schon vorher wusste, dass Schwarz-Gelb nichts wird, durch politische Diskussionen für Abwechslung sorgten, oder die Roentdek-Leute, wie Sven Schössler oder Achim Czasch, die bereitwillig halfen, wenn ich Konstruktionszeichnungen ihrer Bauteile benötigte oder anderweitig Fragen hatte.

## Literaturverzeichnis:

- [1] J. R. Abo-Shaeer, C. Raman, J. M. Vogels, W. Ketterle, „Observation of Vortex Lattices in Bose-Einstein Condensates“, *Science* Vol. 292. no. 5516, pp. 476 – 479, (2001).
  
- [2] P.A.M. Dirac, “Quantised Singularities in the Electromagnetic Field“, *Proc. Roy. Soc. A* 133, 60, (1931).
  
- [3] K. G. Lagoudakis, T. Ostatnicky, A. V. Kavokin, Y. G. Rubo, R. André, B. Deveaud-Plédran, “Observation of Half-Quantum Vortices in an Exciton-Polariton Condensate“, *Science* Vol. 326. no. 5955, pp. 974 – 976. (2009).
  
- [4] Alexander J. Wagner, “A Practical Introduction to the Lattice Boltzmann Method“, Department of Physics North Dakota State University, (2008).
  
- [5] J. H. Macek, J. B. Sternberg, S. Y. Ovchinnikov, Teck-Ghee Lee, D. R. Schultz, “Origin, Evolution, and Imaging of Vortices in Atomic Processes“, *Phys. Rev. Lett.* 102, 143201, (2009).
  
- [6] D. Metz, R. Dörner, H. Schmidt-Böcking, L. Ph. H. Schmidt, „Entwicklung eines Spektrometers zum Nachweis von Vortices in atomaren Ionisationsprozessen“, *Jahresbericht Institut für Kernphysik Goethe-Universität*, (2009).

- [7] R. Nörenberg, „Aufbau und Test einer COLTRIMS Apparatur zur Untersuchung der Ionisation von metastabilem Helium“, Diplomarbeit Institut für Kernphysik Goethe-Universität, (2007).
- [8] K. Blaum, W. Nörtershäuser, „Moderne Experimente der Atomphysik“, Johannes Gutenberg-Universität Mainz, (2007).
- [9] D. McGilvery, Latrobe University, Melbourne, Australia, D. Dahl, Idaho National Laboratory, “Simion: Industry standard charged particle optics simulation software”, [www.Simion.com](http://www.Simion.com).
- [10] J. Walker, Autodesk: 2D and 3D CAD (Computer Aided Design) –Software, AutoCAD, [www.Autodesk.com](http://www.Autodesk.com).