

KfK 3933
Juni 1985

**Über die Bestimmung von
Röntgenenergien
antiprotonischer Atome durch
kritische Absorption an Kanten
und die theoretische Deutung
von Ergebnissen**

B. Jödicke
Institut für Kernphysik

Kernforschungszentrum Karlsruhe

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE
INSTITUT FÜR KERNPHYSIK
KfK 3933

Über die Bestimmung von Röntgenenergien
antiprotonischer Atome
durch kritische Absorption an Kanten
und die theoretische Deutung von Ergebnissen *

Bernd Jödicke

* von der Fakultät für Physik der Universität Karlsruhe genehmigte
Diplomarbeit

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

Als Manuskript vervielfältigt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH
ISSN 0303-4003

ZUSAMMENFASSUNG

In der vorliegenden Arbeit wird die Möglichkeit untersucht, die Energie von antiprotonischen Röntgenlinien mit Hilfe der Methode der kritischen Absorption zu bestimmen. Es zeigt sich, daß es im Periodensystem der Elemente zahlreiche Isotope gibt, von denen die Energie eines antiprotonischen Röntgenübergangs mit einer K-Kante eines chemischen Elements zusammenfällt. Von diesen Kandidaten werden diejenigen näher diskutiert, bei denen die Energie mit großer Präzision gemessen werden kann. Parallel dazu wird ein Computer-Programm untersucht, das die Übergangsenergien antiprotonischer Atome berechnen kann. Notwendig gewordene Ergänzungen werden dargestellt und die Größe der Korrekturen angegeben. Zusammen mit diesem Programm sind die gefundenen Kandidaten die Grundlage für eine präzise Bestimmung der Masse des Antiprotons.

On the Determination of the Energy of Antiprotonic X-rays by Critical Absorption and the Theoretical Discussion of Results

ABSTRACT

This work examines the possibility of measuring the energies of antiprotonic X-rays by critical absorption. Scanning the periodic table many isotopes are found where the energy of an antiprotonic X-ray coincides with a K-absorption-edge of a chemical element. Those candidates where the energy can be measured with high accuracy are discussed here. Also a computer program which calculates transition energies of antiprotonic atoms is examined. Necessary additions are listed and the corrections are shown. In combination with this program the candidates are the basis for a precise determination of the mass of the antiproton.

INHALTSVERZEICHNIS

Einleitung	3
Kapitel 1. Antiprotonische Atome	5
1.1.Eigenschaften	5
1.2.Kaskade	6
Kapitel 2. Berechnung der Energien antiprotonischer Niveaus	9
2.1.Ursprung des Programms	9
2.2.Von MUON zu PBAR	11
2.3.Erweiterungen des Programms PBAR	13
2.3.1.Magnetische Hyperfeinstruktur	14
2.3.2.Rückstoßkorrektur	15
2.3.3.Elektronenabschirmung	16
2.3.4.Vakuumpolarisation für endliche Kernaushdehnung	19
2.3.5.Kernpolarisierbarkeit	21
Kapitel 3. Die Methode der Kritischen Absorption	27
3.1.Das Prinzip der kritischen Absorption	28
3.2.Die Form der Absorptionskante	29
3.3.Die chemische Verschiebung der Kante	32
3.4.Strukturen im Energiebereich der Kante	32
White line	33
Stufen	34
Strukturen oberhalb der Kante	36
3.5.Strukturen der antiprotonischen Röntgenlinien	37
3.6.Störlinien	39
Kapitel 4. Suche nach Paaren von Emissionslinien und Kanten	41
4.1.Auswahlkriterien	41
4.2.Untersuchung der besten Fälle	44
Transmissions-Diagramm	45
Diagramm des Energiefehlers	47
Die Anzahl der benötigten Antiprotonen (ABA)	48
4.3.Empfehlung	49
Kapitel 5. 5.Schlußbemerkungen	53

Anhang A. Magnetische Hyperfeinstruktur	55
Formelblatt A und B	56
Formelblatt 0 bis 8	58
Anhang B. Tabelle der Kanten und Emissionslinien	71
Verzeichnis der Symbole	77
Literaturverzeichnis	79

EINLEITUNG

Genauere Bestimmungen der Energien von physikalischen Zuständen sind stets von großer Bedeutung. Mit exakten Werten können Theorien überprüft und verbessert werden, um so ein tieferes Verständnis der physikalischen Vorgänge zu erreichen. Zum Beispiel führte die Spektroskopie elektronischer Atome zu immer neuen Widersprüchen mit der älteren Quantentheorie des Atoms, von ihr zur Quantenmechanik und schließlich zur Quantenelektrodynamik.

Bei den sogenannten exotischen Atomen ist ein μ^- oder ein negativ geladenes Hadron im Coulombfeld des Kerns gebunden. Die Energien der Röntgenübergänge dieser Teilchen können, bis auf den Einfluß der starken Wechselwirkung, berechnet werden. Messungen der Übergangenergien ermöglichen daher das Studium von quantenelektrodynamischen (QED) Effekten und Eigenschaften der Kernladungsverteilung einerseits, sowie andererseits der starken Wechselwirkung bei kleinen Impulsüberträgen. Wenn diese Effekte ausreichend genau bekannt sind, kann aus den Übergangenergien die Masse des umlaufenden Teilchens bestimmt werden. Auf diesem Wege sind bereits die Massen für μ^- [DEV60], π^- [LUD80], K^- [LUM81] und \bar{p} [HUA75,ROB77,ROB78] gemessen worden. Der bisher genaueste Wert für die Masse des Antiprotons ist $m_{\bar{p}} - m_p = 51 \pm 49$ keV [ROB78]. Abbildung 1 vermittelt einen Eindruck von der Änderung der Übergangsenergie, wenn für die Masse des Antiprotons die Abweichung $m_{\bar{p}} = m_p \pm 50$ keV angenommen wird.

Bei exotischen Atomen sind die Übergangenergien bis über 100 keV groß. Für ein Experiment bleiben deshalb nur die folgenden drei Wege, die Energie von Röntgenübergängen genau zu bestimmen:

1. Festkörperdetektoren: Ihre Energieauflösung reicht nicht aus, um sehr feine Effekte zu finden. Die Genauigkeit bei 80 keV beträgt z.Zt. bestenfalls 10 eV.

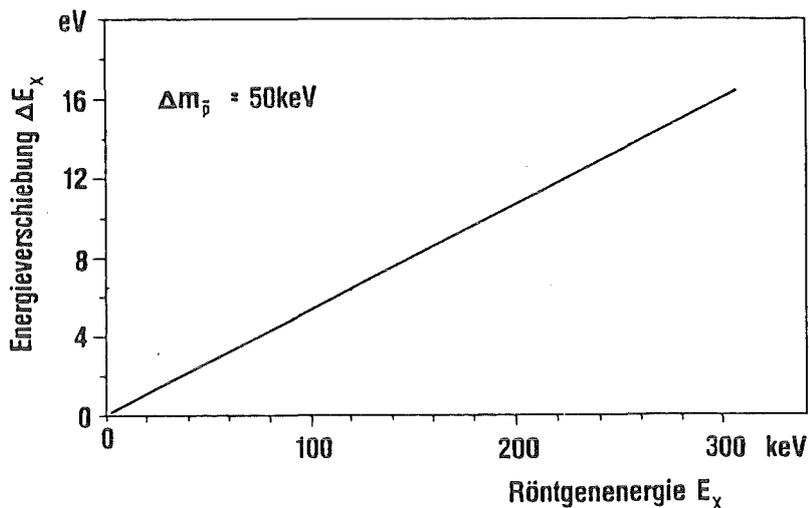


Abbildung 1. Größe der Energieverschiebung eines Röntgenübergangs aufgrund einer angenommenen Differenz von 50 keV zwischen den Massen von Proton und Antiproton

2. Kristallspektrometer: Sie erzielen zwar eine sehr hohe Genauigkeit, benötigen aber eine große Intensität, die bei antiprotonischen Atomen noch nicht zur Verfügung steht.
3. Methode der kritischen Absorption: Sie erreicht auch bei kleiner Intensität eine große Genauigkeit. Eine Einschränkung ist, daß sie nur bei wenigen Übergängen angewendet werden kann.

In der vorliegende Arbeit wird untersucht, welche antiprotonischen Übergangsenergien mit der Kantenmethode sehr genau bestimmt werden können. Zunächst wird ein Computerprogramm vorgestellt, das die Übergangsenergien berechnet. Anschließend wird die Methode der kritischen Absorption erläutert und nach Übergängen gesucht, deren Energien mit dieser Methode gemessen werden können. Am Ende werden einige Isotope empfohlen, die für eine Präzisionsmessung einer Übergangsenergie besonders geeignet sind.

KAPITEL 1. ANTIPROTONISCHE ATOME

Mit dem Studium der Röntgenübergänge in exotischen Atomen wurde schon früh begonnen. Bereits 1948 wurden Hinweise auf die Existenz myonischer Atome gefunden [TIC48]. Im Jahre 1952 gelang der erste Nachweis pionischer Atome [CAM52]. Nach dem Bau von neuen, leistungsfähigen Beschleunigern war es dann auch möglich, Kaonen, Sigmonen und Antiprotonen in großer Anzahl zu erzeugen und die dazugehörigen exotischen Atome zu untersuchen.

Bisher waren Ergebnisse von Messungen an antiprotonischen Atomen stets mit großen statistischen Fehlern behaftet. Der Grund dafür war die niedrige Bildungsrate von niederenergetischen Antiprotonen in Beschleunigern. Dieser Nachteil fiel mit der Inbetriebnahme eines Ringbeschleunigers für niederenergetische Antiprotonen (Low Energy Antiproton Ring: LEAR) weg. Durch den LEAR stehen jetzt große Antiprotonen-Flüsse zur Verfügung. Bedingt durch die lange Lebensdauer ist es möglich, Antiprotonen nach ihrer Produktion in einem Antiprotonen-Akkumulator (AA) zu speichern. Dabei zerfallen - außer den Elektronen - alle negativ geladenen Teilchen, die den Antiprotonen beigemischt sind und mit dem gleichen Impuls eingefangen werden. Auf diese Art werden im LEAR nahezu reine Antiprotonen Ströme von bis zu 10^6 Antiprotonen/Sekunde erreicht.

1.1.EIGENSCHAFTEN

Einige charakteristische Eigenschaften antiprotonischer Atome lassen sich im Rahmen des Bohrschen Atom-Modells aufzeigen. Für ein Bohrsches Atom gilt:

- Bindungsenergie $E_n = m_r (Z\alpha)^2 / 2n^2$ (1.1)

- Bohrscher Radius $r_n = n^2 / Z\alpha m_r$ (1.2)

Das Antiproton hält sich generell viel näher am Kern auf als das Elektron. Erst bei $n = \sqrt{m_p/m_e} \approx 43$ hat das Antiproton den gleichen Bohr'schen Radius wie das 1s-Elektron. Die Wellenfunktionen antiprotonischer Niveaus mit kleiner Hauptquantenzahl n überlappen teilweise mit der Kernladungsverteilung. Dieser Überlapp führt dazu, daß das Antiproton mit einem Nukleon des Kerns annihilieren kann. Die Bindungsenergien und die Übergangsenergien sind bei vergleichbaren n ca. 2000 mal größer als bei elektronischen Atomen. Die Strahlungsübergänge liegen deshalb im Röntgenbereich mit Energien bis über 100 keV. Die Übergangsenergie hängt linear von der Masse des umlaufenden Teilchens ab.

1.2.KASKADE

Das Antiproton wird in ein Niveau mit großer Hauptquantenzahl ($n \approx 43$) eingefangen. Der Einfangprozeß ist ein sehr komplexer Vorgang. Er wurde bei Pionen und Myonen näher untersucht, konnte jedoch nicht vollständig aufgeklärt werden [PON73,DAN79]. Er ist von den Festkörpereigenschaften des Targets ebenso abhängig wie von seiner chemischen Zusammensetzung. In Fällen, in denen die Kaskade selbst nicht untersucht werden soll, genügen meist die Annahmen, daß der Einfang in ein Niveau mit großer Quantenzahl n stattfindet und die Bahndrehimpuls-Zustände entsprechend ihren statistischen Gewichten $(l(l+1))$ besetzt werden. Diese Annahmen stehen bislang nicht im Widerspruch zu den Beobachtungen.

Ist das Antiproton einmal eingefangen, beginnt die atomare Röntgen-Kaskade, wobei das Antiproton in Zustände mit niedriger Energie übergeht. Die dabei frei werdende Energie wird auf verschiedene Arten weggeführt. Bei großen n ist der Überlapp der Antiproton-Wellenfunktionen mit den elektronischen Wellenfunktionen so groß, daß Auger-Übergänge vorherrschen. Erst danach treten vorwiegend Strahlungsübergänge auf. Das Antiproton kaskadiert bis zu einem Zustand mit niedrigem n , aus dem heraus es mit einem Nukleon des Kerns annihiliert.

Die Strahlungsübergänge mit der größten Intensität sind elektrische Dipolübergänge. Für diese gilt die Auswahlregel $\Delta l = \pm 1$. Elektrische Quadrupol- und magnetische Dipolübergänge sind möglich, jedoch stark unterdrückt.

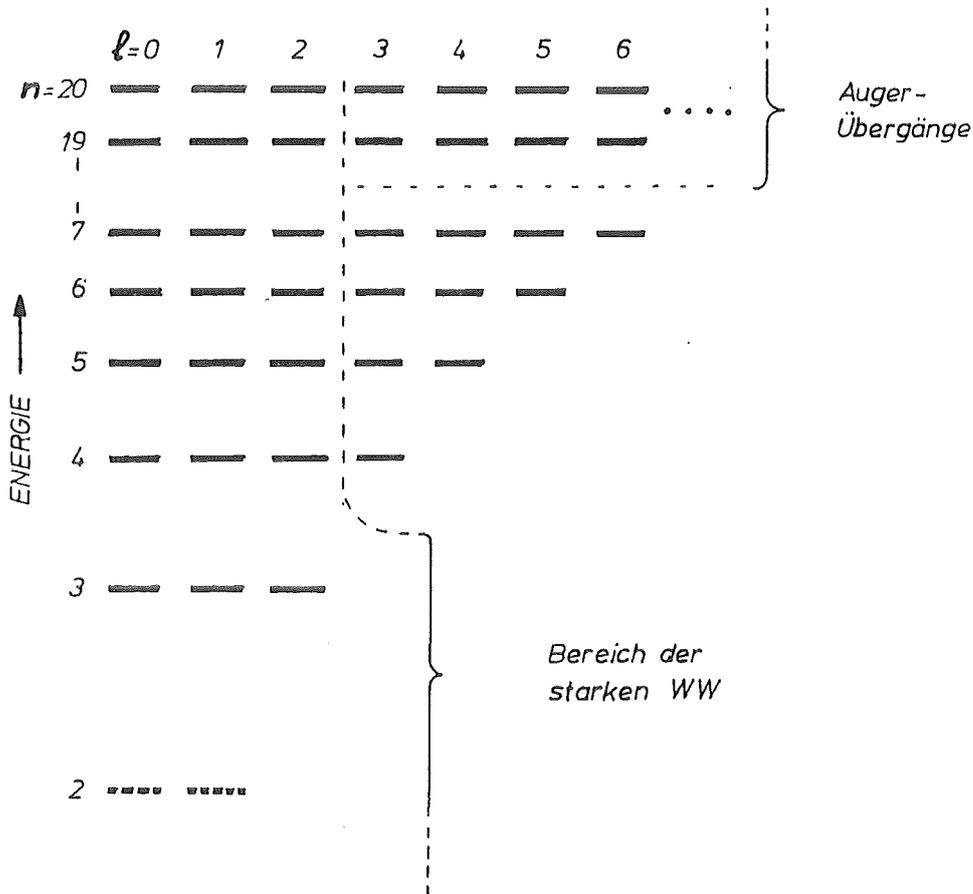


Abbildung 2. Niveauschema des antiprotonischen Atoms 0-16

Das Termschema eines antiprotonischen Atoms läßt sich in drei Gebiete einteilen (siehe Abbildung 2):

1. Sehr große Hauptquantenzahlen n ($n \geq 20$ bei 0-16). Die Wechselwirkung mit den Elektronen ist relativ stark. Die Vorgänge sind schwer zu beschreiben, so daß man keine genauen Vorhersagen über die Energien solcher antiprotonischen Zustände machen kann.
2. Niveaus, in denen sich die Antiprotonen sehr nahe am Kern aufhalten ($1 < 3$ bei 0-16). Der Überlapp der Wellenfunktionen mit

dem Kern macht sich bemerkbar. Die starke Wechselwirkung führt zu einer Verschiebung der Energien der Zustände und zu einer Entvölkerung der Niveaus durch Annihilation, die zu einer zusätzlichen Verbreiterung führt.

3. Zustände, bei denen das Antiproton sich nicht zu weit entfernt oder zu nahe am Kern befindet ($l \geq 3$ und $n < 20$ bei O-16). In diesem Gebiet lassen sich alle Effekte durch die QED beschreiben. Bei diesen Übergängen sind Präzisionsmessungen möglich, da die Korrekturen im Vergleich mit Punkt 1 weniger komplex, oder im Gegensatz zu Punkt 2 bekannt sind.

Auger- und Röntgenübergänge sind durch ihre Auswahlregeln auf Übergänge mit $\Delta l = \pm 1$ beschränkt. Kaskadenrechnungen zeigen, daß Niveaus mit großem l am stärksten bevölkert werden und die zirkularen Übergänge die intensivsten sind.

KAPITEL 2. BERECHNUNG DER ENERGIEN ANTIPROTONISCHER NIVEAUS

Das Eigenwertproblem für die Energien und die Zustände eines antiprotonischen Atoms wird mit Hilfe eines Computerprogramms gelöst, das zu Beginn der vorliegenden Arbeit im Institut vorhanden war. Die Grundzüge dieses Programms mit dem Namen PBAR werden im folgenden kurz angedeutet. Daran anschließend werden die erforderlichen Erweiterungen dargestellt.

2.1. URSPRUNG DES PROGRAMMS

Das PBAR-Programm basiert auf dem Programm MUON von G.A. Rinker. In MUON werden die Dirac-Gleichung für das System Kern plus Myon gelöst und damit die Wellenfunktionen des Myons sowie die Energieeigenwerte gewonnen. Eine detaillierte Beschreibung der Physik myonischer Atome ist bei Borie und Rinker zu finden [BOR82].

Ausgangspunkt ist der Hamiltonoperator des Systems Kern plus Myon in der Form:

$$H_{N\mu} = H_N + \vec{\alpha}\vec{p} + \beta m_r - e\vec{\alpha}\vec{A} - e\Phi \quad (2.1)$$

In \vec{A} und Φ sind Operatoren enthalten, die sowohl auf Kern- als auch auf Myonen-Zustände wirken. Um die dazugehörigen Eigenwertgleichungen entkoppeln zu können, wird vorerst der Term $e\vec{\alpha}\vec{A}$ vernachlässigt und später störungstheoretisch behandelt. Ferner definiert man ein zeitlich gemittelttes elektromagnetisches Potential V_0 , das vom Kern erzeugt wird und in dem sich das Myon bewegt:

$$V_0(r) = -e \langle 0 | \Phi | 0 \rangle \quad |0\rangle = \text{Kerngrundzustand ohne Myon}$$

Dann wird aus Gleichung 2.1:

$$H_{N\mu} = H_N + \vec{\alpha} \vec{p} + \beta m_r + V_0(r) + V_p \quad (2.2)$$

mit
$$V_p = -e\Phi - V_0(r)$$

Das hiermit definierte Potential V_p beschreibt die Anregungen des Kernes. V_p wird später als Störung behandelt und zunächst vernachlässigt. Damit erhält man eine Gleichung, deren Terme entweder Myon- oder Kern-, aber keine gemischten Operatoren enthalten. Die Eigenzustände des Gesamtsystems sind also das Produkt der Kern- und der Myonenzustände. Die Zustände des Myons erhält man durch die Lösung des Eigenwertproblems zu folgendem Hamiltonoperator:

$$H^0 = \vec{\alpha} \vec{p} + \beta m_r + V_0(r) \quad (2.3)$$

Die Gleichung $H^0 \Psi = E^0 \Psi$ wird am besten in Kugelkoordinaten gelöst. Der Dirac-Spinor in Kugelkoordinaten lautet:

$$\Psi_{n\kappa}(r) = \begin{cases} \frac{1}{r} G_{n\kappa}(r) & \langle r | \kappa \mu \rangle \\ \frac{i}{r} F_{n\kappa}(r) & \langle r | -\kappa \mu \rangle \end{cases} \quad (2.4)$$

Der Winkelspinor $|\kappa \mu\rangle$ ist gemeinsamer Eigenzustand der Operatoren l^2 , σ^2 , j^2 und j_z . Durch die Separation des Drehimpulsanteils erhält man die gekoppelten Differentialgleichungen für die Radialkomponenten:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} G_{n\kappa}(r) &= -\frac{\kappa}{r} G_{n\kappa}(r) + [m_r + E_{n\kappa} - V_0(r)] F_{n\kappa}(r) \\ \frac{d}{dr} F_{n\kappa}(r) &= +\frac{\kappa}{r} F_{n\kappa}(r) + [m_r - E_{n\kappa} + V_0(r)] G_{n\kappa}(r) \end{aligned} \quad (2.5)$$

Dieses System aus zwei Differentialgleichungen wird in MUON numerisch gelöst. Als Anfangswert für das Iterationsverfahren dient die Energie des betreffenden Zustandes in der Punktkernnäherung. Als Lösung erhält man den Energieeigenwert $E_{n\kappa\mu}^0$ und die Radialkomponenten des ungestörten Problems.

Neben dem Coulombpotential bestimmen noch andere Effekte die Bindungsenergie des Myons. Die Vakuumpolarisation beeinflusst die Energie eines Niveaus stark und kann deshalb nicht störungstheoretisch behandelt werden. Aus diesem Grund wird das Ühling-Potential (Ordnung $\alpha Z\alpha$ [UEH35]) und das Källen-Sabry-Potential (Ordnung $\alpha^2 Z\alpha$ [KÄL55]) in MUON exakt behandelt, d.h. diese Potentiale werden zum Coulombpotential addiert und anschließend das Gleichungssystem (2.5) numerisch gelöst. Auswirkungen auf den Zustand des Myons durch die Abschirmung des Coulombfeldes mit Elektronen (electron-screening), die Myon-Vakuumpolarisation, die Vertexkorrektur und durch die Rückstoßkorrektur werden als Störungen des Eigenwertproblems (2.3) aufgefaßt [BOR82]. Diese Effekte werden näherungsweise in erster Ordnung behandelt:

$$\Delta E_{n\kappa\mu}^{\text{Stör}} = \langle n\kappa\mu | V^{\text{Stör}} | n\kappa\mu \rangle \quad (2.6)$$

Die Energieverschiebung durch die Polarisierbarkeit des Kerns wird nicht in MUON berechnet. Diese Größe muß auf anderem Weg gewonnen werden. Die Beiträge der Vakuumpolarisation der Ordnung $\alpha(Z\alpha)^n$, $n=3, 5, 7$ zur Energie werden zwar berechnet, aber nicht zur Bindungsenergie addiert.

2.2.VON MUON ZU PBAR

Das skizzierte Programm wird in modifizierter Form auch für Antiprotonen benutzt, da Antiprotonen wie Myonen Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen sind und durch die Diracgleichung beschrieben werden können. Es gibt jedoch drei wichtige Unterschiede zwischen Myonen und Antiprotonen:

1. Das Antiproton spürt die starke Wechselwirkung.

Dies hat zur Folge, daß antiprotonische Niveaus, deren Wellenfunktionen mit dem Kern überlappen, von der starken Wechselwirkung erheblich beeinflusst werden. Es ist nicht mehr möglich, Kern- und Antiproton-Wellenfunktionen zu entkoppeln. Zur Berechnung der Energieverschiebungen müssen zusätzliche Modellannahmen über die starke Wechselwirkung gemacht werden. Dies soll im Rahmen des hier beschriebenen Programms nicht behandelt werden.

2. Das Antiproton hat eine endliche Ausdehnung.

Die endliche Ausdehnung ist nur bei der Kernpolarisierbarkeit von Bedeutung. Dieser Effekt wird im Abschnitt 2.3 behandelt.

3. Das Antiproton hat ein anomales magnetisches Moment.

Dies führt zu einem zusätzlichen Term in der Diracgleichung, dem sogenannten Pauli-Term. Daraus ergeben sich neue Beiträge für die Feinstruktur- und Hyperfeinstruktur-Aufspaltung sowie die Rückstoßkorrektur. Diese Änderungen werden im folgenden beschrieben.

Die Diracgleichung mit dem Pauli Term lautet:

$$[\not{p} + e\not{A} + \frac{\kappa e}{4m} \sigma_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - m_r] \Psi = 0 \quad (2.7)$$

$$\text{mit } \sigma_{\mu\nu} F^{\mu\nu} = -2i \vec{\alpha} \vec{E} + \vec{\Sigma} \vec{B}$$

wobei $F^{\mu\nu}$ der Tensor des elektromagnetischen Feldes ist, das vom Kern erzeugt wird. Die stationären Lösungen der Gleichung (2.7) erhält man aus der Eigenwertgleichung:

$$E\Psi = \left[\vec{\alpha} \vec{p} + \beta m_r + V_0(r) - \frac{i\kappa e}{2m_p} \vec{\gamma} \vec{E} - e\vec{\alpha} \vec{A} + \frac{\kappa e}{2m_p} \vec{\gamma}_0 \vec{\Sigma} \vec{B} \right] \Psi \quad (2.8)$$

Von den sechs Termen auf der rechten Seite der Gleichung (2.8) beschreibt der vierte ($\sim \vec{\gamma} \vec{E}$) den Beitrag des anomalen magnetischen Moments vom Antiproton zur Feinstruktur der Spektrallinien. Er trägt we-

sentlich zu den Eigenwerten und Eigenfunktionen bei und wird deshalb im Eigenwertproblem selbst behandelt:

$$E_0 \Psi = \left[\vec{\alpha} \vec{p} + \beta m_r + V_0(r) - \frac{i k e}{2m_p} \vec{\gamma} \vec{E} \right] \Psi \quad (2.9)$$

Das anomale magnetische Moment des Antiprotons erscheint damit formal als weiterer Potentialterm in der Diracgleichung. Die beiden letzten Terme in (2.8) werden störungstheoretisch behandelt. Von diesen ist der Term $e \vec{\alpha} \vec{A}$ bereits in den Programmen MUON und PBAR enthalten. Er gibt die Wechselwirkung des Kernmoments mit dem Bahndrehimpuls vom Myon bzw. Antiproton wieder. Der letzte Term beschreibt die Wechselwirkung des anomalen magnetischen Moments des Antiprotons mit dem vom Kernspin erzeugten Magnetfeld. Er war bisher nicht in dem Programm PBAR enthalten und wird in Abschnitt 2.3 näher untersucht.

2.3. ERWEITERUNGEN DES PROGRAMMS PBAR

In den folgenden Abschnitten dieses Kapitels werden der letzte Term in Gleichung 2.8, sowie eine Reihe von Korrekturen zu den Energien der antiprotonischen Zustände bzw. den Übergangsenergien untersucht. Die Größe der Korrekturen wird als Funktion der Ordnungszahl Z angegeben und mögliche Fehler werden diskutiert.

Korrekturen, die aus MUON unverändert übernommen wurden, wie z.B. die Vakuumpolarisation, werden in der vorliegenden Arbeit nicht näher beschrieben. Die Beiträge von VP3, VP5 und VP7 werden in PBAR zur Bindungsenergie addiert, da diese Korrekturen nicht vernachlässigbar klein sind. Die Beiträge der Vertexkorrekturen und der Myon-Vakuumpolarisation zur Energie sind bei antiprotonischen Atomen in Zuständen bei denen die starke Wechselwirkung vernachlässigt werden kann, so klein, daß sie in PBAR nicht berechnet werden. Die Bezeichnungen der folgenden Gleichungen entsprechen denen bei Borie und Rinker [BOR82].

2.3.1. MAGNETISCHE HYPERFEINSTRUKTUR

Kerne spüren das elektromagnetische Feld, das von der Bahnbewegung und dem Spin des Antiprotons ausgeht. Die Wechselwirkung des Kernmoments mit diesem Feld führt zur Hyperfeinstrukturaufspaltung antiprotonischer Röntgenlinien. Die Wechselwirkung wird durch die beiden letzten Terme der rechten Seite in Formel (2.8) beschrieben. Der erste dieser zwei Terme ($e\vec{\alpha}\vec{A}$) wurde von Borie und Rinker in Störungstheorie berechnet (siehe auch Anhang A) und ist in den Programmen MUON und PBAR enthalten. Die dazugehörige Energieverschiebung beträgt:

$$\Delta E = - \langle n\kappa\mu | e\vec{\alpha}\vec{A} | n\kappa\mu \rangle \quad (2.10)$$

$$\Delta E = -\kappa [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \frac{1}{\kappa^2 - \frac{1}{4}} \frac{g}{2Z} \frac{m}{m_p} \int_0^\infty dr FG \frac{dV}{dr} \quad (2.11)$$

Bei antiprotonischen Atomen tritt ein zusätzlicher Term auf. Er beschreibt den Beitrag des anomalen magnetischen Moments zur Hyperfeinstruktur:

$$\Delta E = \langle n\kappa\mu | \frac{\kappa e}{2m_p} \chi_0 \vec{\Sigma} \vec{B} | n\kappa\mu \rangle \quad (2.12)$$

Er wurde ebenfalls in Anhang A unter Verwendung der Drehimpulsalgebra berechnet:

$$\Delta E = \frac{\kappa m_r}{2 m_p} [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \frac{1}{\kappa^2 - \frac{1}{4}} \frac{g}{2Z} \frac{m}{m_p} \int_0^\infty dr FG \frac{dV}{dr} \quad (2.13)$$

Die gesamte Korrektur der Energie eines Niveaus durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung ist die Summe dieser zwei Beiträge:

$$\Delta E = -\left(\kappa - \frac{\kappa_p m_p r}{2 m_p}\right) [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \frac{1}{\kappa - \frac{1}{4}} \frac{g}{2Z m_p} \int_0^{\infty} dr FG \frac{dV}{dr} \quad (2.14)$$

Der prozentuale Anteil des anomalen magnetischen Moments des Antiprotons an der Hyperfeinstruktur-Aufspaltung beträgt ca. $|\kappa_p/2\kappa| \approx 1/(1+1)$. Bei zirkularen Übergängen mit großen Hauptquantenzahlen n ist dieser Anteil klein (z.B. 5% bei $n=20$). Bei leichten Kernen kann der Beitrag von κ_p fast 50% ausmachen, da Übergänge zu Niveaus mit kleinen n beobachtet werden (z.B. $n=3$ in O 17).

2.3.2. RÜCKSTOSSKORREKTUR

In der Diracgleichung (2.7) wird aus programmtechnischen Gründen die nichtrelativistische reduzierte Masse verwendet. Der Unterschied zwischen dieser näherungsweise Beschreibung und der richtigen Verallgemeinerung der reduzierten Masse [TOD73] wird als Störung behandelt. Die daraus folgende Energieänderung für Antiprotonen wurde von E. Borie berechnet [BOR83].

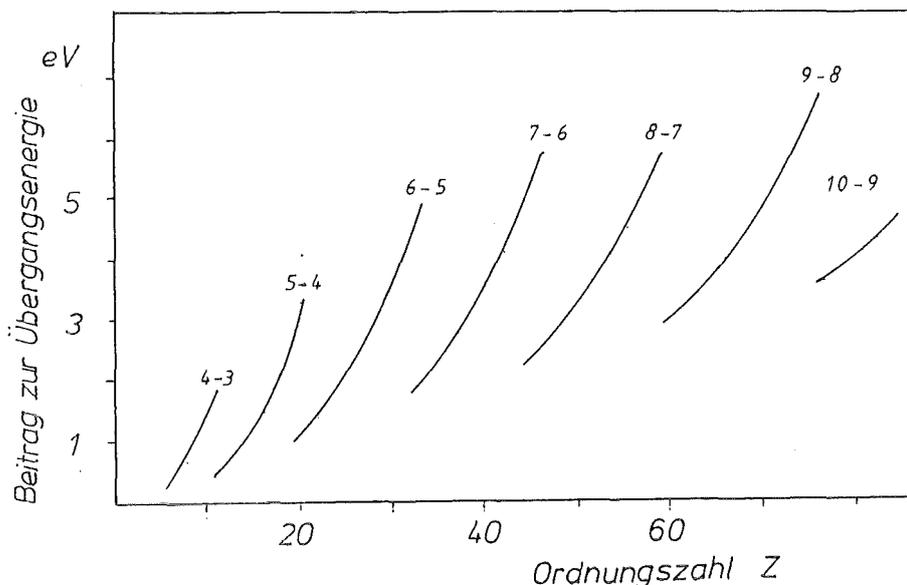


Abbildung 3. Beitrag der Rückstoßkorrektur zur Energie des letzten beobachtbaren Übergangs

Die sogenannte Rückstoßkorrektur beträgt:

$$\Delta E = \frac{B_0^2}{2m_N} - \frac{(Z\alpha)^2}{6m_N} \langle r_N^2 \rangle \langle r^{-4} \rangle - \frac{(Z\alpha)^2}{8m^2 m_N} \kappa \langle r^{-4} \rangle - \frac{i\kappa}{2mm_N} Z\alpha \langle (B_0 - \frac{Z\alpha}{r}) \frac{\delta r}{r^3} \rangle \quad (2.15)$$

Dabei bedeutet B_0 die Bindungsenergie des Elektrons im untersuchten Zustand. Von diesen 4 Termen liefern die beiden ersten den Hauptbeitrag und waren bereits in den Programmen MUON und PBAR enthalten. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden die beiden letzten, vom anomalen magnetischen Moment κ abhängigen Terme untersucht. Sie führen nur zu kleinen Änderungen in den Energien der Zustände ($\Delta E < 0.1$ eV).

Abbildung 3 zeigt die gesamte Rückstoßkorrektur an der Energie des letzten beobachtbaren Röntgenübergangs in Abhängigkeit von Z . Die Verschiebungen sind stets kleiner als 7 eV über dem gesamten Bereich der Ordnungszahlen. Die Rückstoßkorrektur wird durch Gleichung (2.15) im Programm sehr genau erfaßt. Ihre Fehler können daher vernachlässigt werden.

2.3.3. ELEKTRONENABSCHIRMUNG

Durch die endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen nahe am Kern wird die Kernladung in ihrer Wirkung auf das Antiproton etwas abgeschirmt. Das Antiproton spürt nur eine effektive Ladung $Z_{\text{eff}} \cdot e$. Dadurch wird die Bindungsenergie eines Antiprotons verringert. Z_{eff} ist abhängig vom Radius der Antiprotonenbahn. Für kleine n ist die Abschirmung gering.

Dieser Effekt kann durch ein Abschirm-Potential (screening-potential) V_S beschrieben werden. Es hängt von r ab und ist so definiert, daß

$V_S(0) = 0$ ist, d.h., keine Abschirmung durch Elektronen ganz nahe beim Kern auftritt. Das Potential hat die Form:

$$V_S(r) = \frac{4\pi\alpha}{r} \int_0^r dr_e \rho(r_e) (r_e^2 - rr_e) \quad (2.16)$$

r : Elektronenradius
 ρ_e : mittlere Elektronendichte
 r_e : p - Koordinate

Wobei die Elektronendichte wie folgt normiert ist:

$$4\pi \int_0^\infty dr_e \rho(r_e) r_e^2 = \text{Anzahl der Elektronen.} \quad (2.17)$$

Im Programm PBAR stehen zwei Möglichkeiten zur Berechnung von V_S zur Wahl. Für die erste und bisher vorhandene Möglichkeit wurde die Elektronenverteilung in einer separat durchgeführten Hartree-Fock-Rechnung (HF) für jedes Z bestimmt und V_S dann durch ein 7-parametriges Potential beschrieben. Die Parameter sind im Programm intern gespeichert. Der Nachteil dieser ersten Version besteht darin, daß der Effekt, den ein fehlendes Elektron auf die Bindungsenergie hat, nicht untersucht werden kann. Dieses fehlende Elektron kann z.B. durch Augereffekt aus dem Atom entfernt worden sein, was bei exotischen Atomen häufig auftritt.

Die zweite Version ist ein Ergebnis der vorliegenden Arbeit. Sie ermöglicht es, die Auswirkungen fehlender Elektronen zu studieren, indem die analytischen Lösungen der Wellenfunktion für die elektronischen 1s-, 2s- und 2p-Niveaus benutzt werden. Andere Zustände tragen weniger als 1% zur Abschirmung bei. Im Programm besteht damit die Möglichkeit vorzugeben, wieviel Elektronen sich in dem jeweiligen Niveau befinden sollen.

Die analytischen Wellenfunktionen für Elektronen aus der Lösung der Diracgleichung in der Punktkernnäherung sind dem Buch von Achieser und Berestetzki entnommen worden [ACH62]. Für ρ_e wird die tatsächliche Elektronendichte verwendet:

$$\rho_e(r) = |\Psi|^2 = F^2 + G^2 \quad (2.18)$$

F und G sind die kleine und die große Komponente der elektronischen Wellenfunktion. Gleichung (2.16) wird mit dieser Elektronendichte numerisch integriert. Das so erhaltene Abschirm-Potential wird in das Unterprogramm RAD von PBAR übergeben, in der die Energieverschiebung berechnet wird.

Am Beispiel des Kerns Ba-138 wurde der Einfluß fehlender Elektronen in K- und L-Schalen auf das Abschirmpotential untersucht (siehe Tabelle 1). In den Abkürzungen der Kopfzeile (z.B. 2224) sind die Anzahl der in den einzelnen Zuständen vorhandenen Elektronen angegeben. Hierin entsprechen die 1. Stelle dem 1s-Niveau, die 2. dem 2s- und die 3. und 4. den jeweiligen 2p-Niveaus.

$n_i - n_f$	HF eV	2224 eV	2200 eV	2124 eV	1224 eV
20 - 19	21.2	21.2	21.1	20.0	12.0
19 - 18	19.1	19.2	19.1	18.0	10.8
18 - 17	16.9	17.0	16.9	16.0	9.6
17 - 16	15.0	15.1	14.9	14.1	8.4
16 - 15	13.0	13.0	12.9	12.3	7.4
15 - 14	11.3	11.2	11.2	10.6	6.3
14 - 13	9.5	9.6	9.5	9.0	5.4
13 - 12	8.0	7.9	7.9	7.5	4.5
12 - 11	6.5	6.6	6.5	6.2	3.7
11 - 10	5.3	5.2	5.3	5.0	3.0

Tabelle 1. Beiträge der Elektronenabschirmung zur Übergangsenergie in Ba-138 für verschiedene Besetzungszahlen der Elektronenzustände

Die Übereinstimmung der beiden Versionen bei ungestörten Elektronenzuständen ist sehr gut. Das Fehlen von 2p-Elektronen macht sich nicht bemerkbar. Änderungen der Übergangsenergien durch das Fehlen eines 2s-Elektrons liegen zwischen 0.5 und 2 eV je nach Übergang. Fehlt ein 1s Elektron, so sind die Änderungen bis 12 eV groß.

Dieses Ergebnis wirft die Frage auf, ob man annehmen darf, daß die elektronischen 1s- und 2s-Zustände immer besetzt sind. Dieses Problem wird am Beispiel des Überganges 9-8 in Ge-70 studiert. Die Lebensdauer eines Zustandes ist durch seine Breite charakterisiert. Die Breite des antiprotonischen Zustandes ist kleiner als 10^{-2} eV [POT84]. Die Breite des 1s-Zustandes im Germanium ist 2.0 eV [KRA79]. Da im Festkörper genügend Elektronen zur Verfügung stehen, erfolgt das Auffüllen eines K-Loches ungefähr 200mal schneller als der antiprotonische Übergang. Daraus folgt, daß bei ca. 0.5% aller Übergänge ein 1s-Elektron fehlt. Der neue Schwerpunkt der Energie ergibt sich zu:

$$\begin{aligned}
 E_{\text{neu}} &= E_{\text{alt}} \cdot 99.5\% + E_{\text{ohne 1s}} \cdot 0.5\% \\
 &= E_{\text{alt}} + 0.5\% \Delta E_{\text{screen}} \quad (2.19)
 \end{aligned}$$

Da der Effekt eines fehlenden Elektrons in diesem Fall maximal 12 eV wird, ist die Empfindlichkeit der Screening-Korrektur auf ein fehlendes Elektron klein. Dies gilt jedoch nicht für Gase, bei denen nicht genug Elektronen zur Verfügung stehen, um das K-Loch aufzufüllen. Bei Gasen kann die Wirkung fehlender Elektronen beobachtet werden.

2.3.4. VAKUUMPOLARISATION FÜR ENDLICHE KERNAUSDEHNUNG

Eine weitere Korrektur, die schon bei myonischen Atomen wichtig war, kommt von der endlichen Ausdehnung der Kernladungsverteilung. Nach dem Gauß'schen Gesetz spürt ein Antiproton, das sich außerhalb des Kerns bewegt, keine Details der kugelsymmetrischen Ladungsverteilung des Kerns. Jedoch werden die virtuellen Elektron-Positron-Paare der

Vakuumpolarisation, die sich ja teilweise im Kern befinden, durch die Ladungsverteilung beeinflusst. Die daraus folgende Verzerrung der Vakuumpolarisationswolke wirkt auf die Antiprotonen zurück und verschiebt die Energieniveaus.

Zur Behandlung dieses Problems gibt es in der Literatur Vorschläge von J. Arafune [ARA74], sowie von Brown, Cahn und McLerran [BRO75]. In beiden Artikeln werden Potentiale berechnet, die die Verzerrung der Polarisationswolke beschreiben. Im PBAR-Programm werden die Ergebnisse von Brown, Cahn und McLerran verwendet, da die Autoren im Gegensatz zu Arafune alle Ordnungen von $Z\alpha$ berücksichtigen. Ihre Rechnungen ergeben für die Änderungen im Potential (mit $\lambda=(1-Z^2\alpha^2)^{\frac{1}{2}}$):

$$\delta V(r) = \frac{\alpha}{\pi r} \left(\frac{b}{r}\right)^{2\lambda} \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{1+\lambda} - \frac{\langle r_N^2 \rangle}{6b^2} \right] \left[1 - \frac{(Z\alpha)^2}{2(1+\lambda)} \left(1 - \frac{\langle r_N^2 \rangle}{3b^2}\right) \right]^{-1} \\ \times \frac{\Gamma(4\lambda)}{\lambda^2(2\lambda+1)^2} \left| \frac{\Gamma(\lambda+iZ\alpha)}{\Gamma(2\lambda)} \right|^4 \quad (2.20)$$

Im Ühling-Potential das zur Berechnung der Vakuumpolarisation in MUON verwendet wird, ist die Korrektur für endlich Kernausdehnung bis zur Ordnung $\alpha(Z\alpha)$ enthalten. Daher muß von δV der Ühling-Anteil

$$\delta V_{\text{Üh}}(r) = \frac{\alpha Z\alpha}{\pi r} \left[-\frac{1}{9} \frac{\langle r_N^2 \rangle}{r^2} + \frac{1}{3} m_e^2 \langle r_N^2 \rangle + \dots \right] \quad (2.21)$$

subtrahiert werden. Man erhält dann:

$$\Delta E(r) = \frac{\alpha Z\alpha}{9\pi r} \frac{\langle r_N^2 \rangle}{r^2} \left[1 + \left(\frac{\langle 5r_N^2 \rangle}{3r^2}\right)_N^{\lambda-1} + 15 \frac{(2\lambda-3)}{(1+\lambda)(3+2\lambda)} \right] \\ \times \frac{2\sqrt{2}\pi \Gamma(\lambda) \Gamma(\lambda+\frac{1}{2}) \Gamma(\lambda+\frac{3}{2})}{\lambda^2 (2\lambda+1)^2 (\Gamma(\lambda+\frac{1}{2}))^3} \quad (2.22) \\ \times \left[\prod_0^{\infty} \left(1 + \frac{1+\lambda^2}{(n+\lambda)^2}\right)^{-1} \right]$$

Derjenige Teil, der nur von λ abhängt, wird hier als Brownfaktor bezeichnet. Dieser Brownfaktor ist nur abhängig von Z . Er wurde mit einem externen Programm berechnet und ist in numerischer Form im Programm gespeichert.

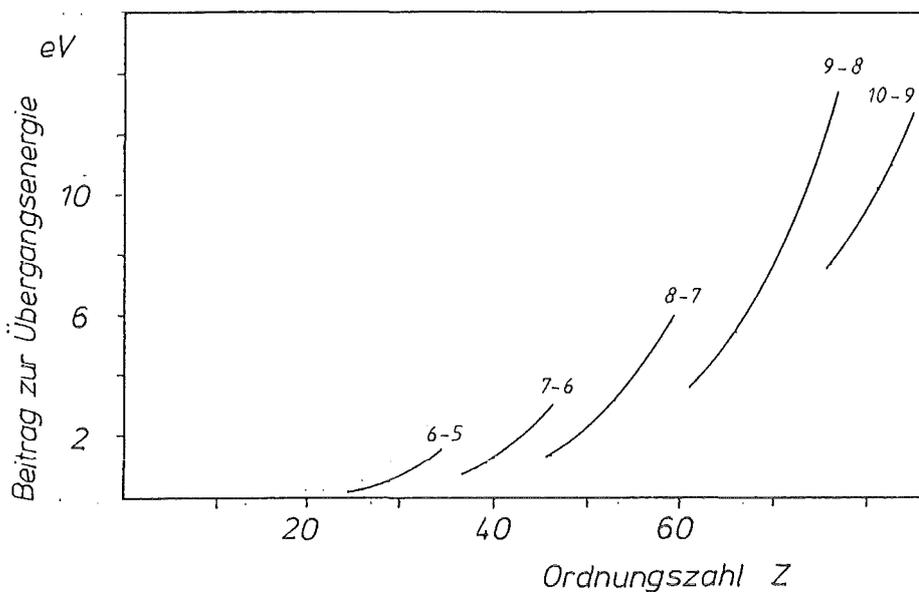


Abbildung 4. Beitrag der endlichen Ausdehnung des Kerns zur Vakuumpolarisation beim letzten beobachtbaren Übergang

Abbildung 4 zeigt die Größe der Korrektur der Vakuumpolarisation bei endlicher Kernausdehnung am letzten beobachtbaren Übergang. Bei Kernen mit großem Z führt diese Korrektur zu einer deutlichen Verschiebung der Energien. Da die Korrektur alle Ordnungen von $Z\alpha$ berücksichtigt, sind die Fehler der theoretischen Werte sehr klein.

2.3.5. KERNPOLARISIERBARKEIT

Im Feld des sich bewegenden Antiprotons kann die Ladungsverteilung des Kerns verzerrt werden (und umgekehrt auch die des Antiprotons). Die hiermit verbundenen Anregungen des Kerns führen zu Energieverschiebungen der antiprotonischen Niveaus. Abbildung 5 zeigt das Feynman-Diagramm für diesen Effekt.

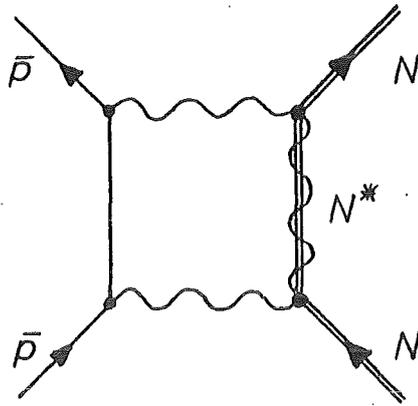


Abbildung 5. Feynman-Graph für die Kernpolarisierbarkeit

Für große Bahndrehimpulse l des Antiprotons ist die Energieverschiebung eines Niveaus mit den Quantenzahlen nl durch die Kernpolarisation mit der Multipolarität L gegeben durch:

$$\Delta E_{nlL} = -\alpha/2 \alpha_{\text{pol}}(L) \langle r^{-2L-2} \rangle_{nl} \quad (2.23)$$

$\alpha_{\text{pol}}(L)$ ist die Polarisierbarkeit des Systems Kern-Antiproton. Der Dipolterm ist der dominierende:

$$\Delta E_{nl} = -\alpha/2 \alpha_{\text{pol}}(1) \langle r^{-4} \rangle_{nl} \quad (2.24)$$

Ericson und Hüfner zeigten, daß bei antiprotonischen Atomen die Polarisierbarkeit zwei Terme hat [ERI72]: die Kernpolarisierbarkeit α_N und die Polarisierbarkeit des Antiprotons α_p

$$\alpha_{\text{pol}} = \alpha_N + Z^2 \alpha_p \quad (2.25)$$

Die Größe α_p wurde durch Compton-Streuung von 70-MeV-Photonen an Protonen gemessen [GOL60] zu $\alpha_p = (9 \pm 2) 10^{-4} \text{ fm}^3$.

Für einige Kerne wurde α_N aus gemessenen totalen Kern-Photon-Wirkungsquerschnitten berechnet [AHR76]. Es besteht die Möglichkeit, diese Werte direkt ins Programm einzulesen.

Für die meisten der stabilen Kerne ist die Polarisierbarkeit noch nicht gemessen worden. Deshalb muß auf theoretisch gefundene Werte zurückgegriffen werden. Die Polarisierbarkeiten, die in PBAR verwendet werden, stammen aus Berechnungen von Ericson und Hüfner, die Kern-Photon-Querschnitte an das Tröpfchenmodell angepaßt haben. Das Ergebnis ist:

$$\alpha_N = 3.2 \cdot 10^{-3} A^{5/3} \text{ fm}^3 \quad (2.26)$$

In Tabelle 2 werden die Polarisierbarkeiten aus der semi-empirischen Formel (2.26) mit den experimentellen Daten von Ahrens et al. verglichen.

	Li 7	Be 9	C 12	O 16	Al 27	Si 28	Ca 40
Ahrens et.al. [AHR76]	0.210	0.366	0.316	0.585	1.10	1.17	2.23
Ericson et.al. [ERI72]	0.082	0.125	0.201	0.325	0.778	0.826	1.497

Tabelle 2. Werte der Polarisierbarkeiten für verschiedene Kerne
in fm³

Für leichte Kerne liegen die Werte von Ericson und Hüfner niedriger als die gemessenen. Dies kommt daher, weil bei leichten Kernen auch andere Anregungen neben der E1-Anregung wesentlich zur Polarisierbarkeit beitragen. Für mittelschwere Kerne werden die Fehler kleiner. So beträgt die Abweichung z.B. ca. 50% bei Ca-40. Polarisierbarkeiten für schwere Kerne sind in diese Tabelle nicht eingetragen. Ericson und Hüfner zeigten jedoch [ERI72], daß ihre Formel für Kerne mit Z>20, Abweichungen von der experimentellen Polarisierbarkeit liefert, die

kleiner als 20% sind. Es bleiben aber starke Schwankungen um diesen Wert, die theoretisch noch nicht beschrieben werden können.

Entsprechend dieser Situation wurde für das PBAR-Programm folgender Kompromiß gewählt:

1. Sind Meßwerte aus Photoabsorptionsquerschnitten vorhanden, können diese direkt verwendet werden.
2. Sind keine Meßwerte vorhanden, wird näherungsweise der Wert von Ericson und Hüfner verwendet. Danach ergibt sich für die Energieverschiebung:

$$\Delta E_{\kappa\mu} = -2\pi\alpha (3.2 \cdot 10^{-3} A^{5/3} + 9 \cdot 10^{-4} Z^2) \langle r^{-4} \rangle_{\kappa\mu} \quad (2.27)$$

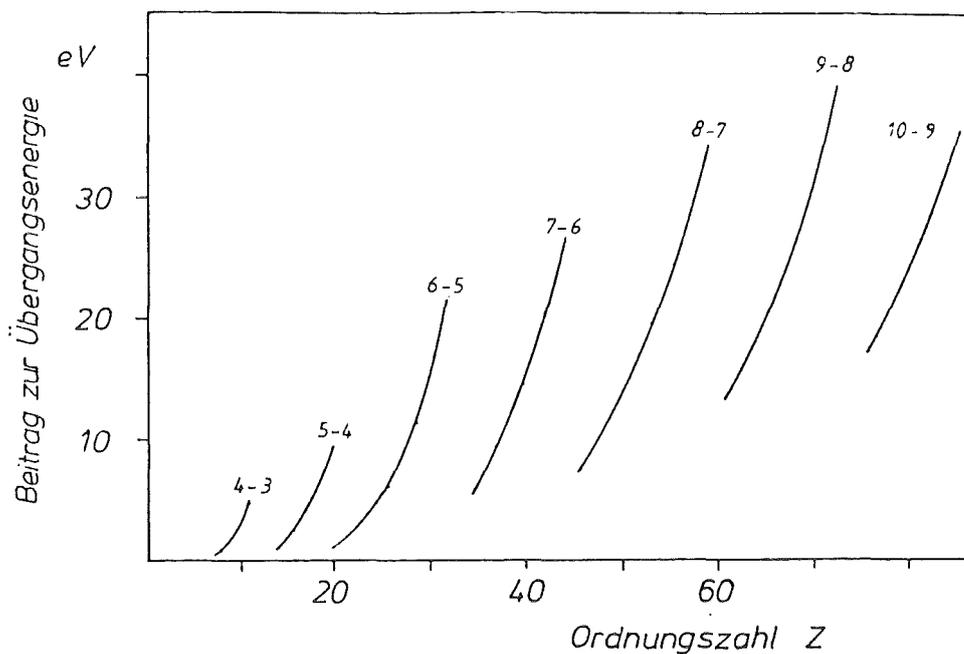
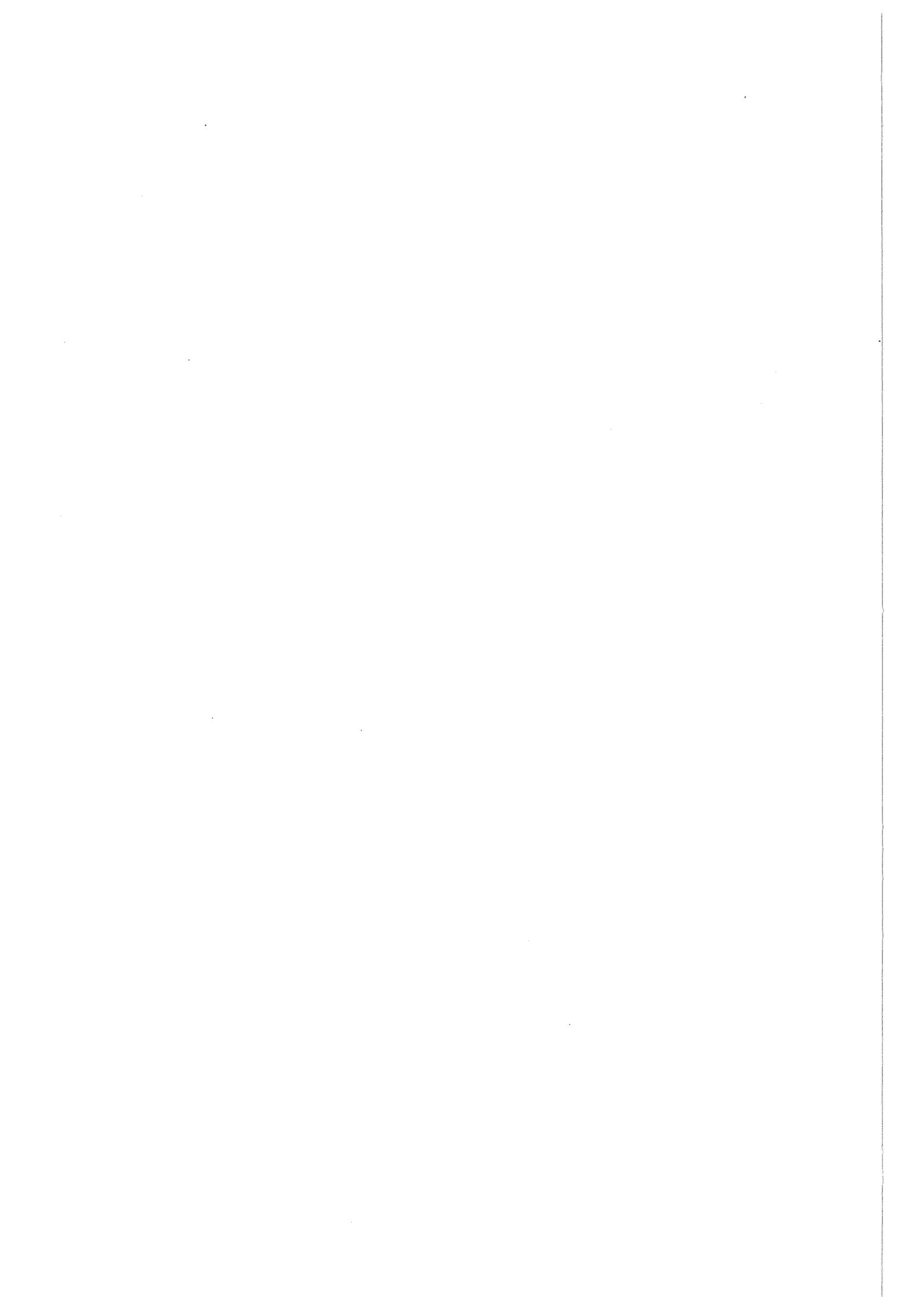


Abbildung 6. Beitrag der Kernpolarisierbarkeit zur Energie des letzten beobachtbaren Übergangs

Die Korrekturen durch den Effekt der Kernpolarisierbarkeit sind hauptsächlich für Atome mit großem Z und deren letzte beobachtbare Übergänge von Bedeutung. Abbildung 6 zeigt die Korrektur an der Energie

des letzten beobachtbaren Übergangs in Abhängigkeit von Z . Zur Berechnung wurde die Näherung (2.26) für α_N verwendet.

Für Kerne mit $Z < 18$ sind die Werte der Kernpolarisierbarkeit α_N mit großen Fehlern behaftet. Da die Energie-Korrektur selbst jedoch klein ist, z.B. 0.7 eV beim 3d-Niveau in O 16, ist der Beitrag dieses Fehlers zur Unsicherheit der Übergangsenergie klein. Bei Kernen mit großem Z ($Z > 18$) sind zwar die Werte für α_N besser bekannt (ca. 20% Fehler), doch sind die Beiträge der Korrekturen größer. Die Korrekturen in den Übergangsenergien werden im Extremfall des 10-9 Übergangs im U-238 bis zu 50 eV groß. Der Fehler aufgrund des unbekanntes α_N ist damit ca. 10 eV. Beim 10-9 Übergang im Pb-208 beträgt die Korrektur 27 eV mit einem Fehler von ca. 5 eV.



KAPITEL 3. DIE METHODE DER KRITISCHEN ABSORPTION

Untersucht man die Intensität von Röntgenstrahlen hinter einem absorbierenden Material, so kann man Änderungen der relativen Intensität mit der Energie feststellen. Diese Änderungen sind schwach und kontinuierlich, wenn sie vorwiegend von der elastischen bzw. inelastischen Streuung der Photonen im Absorber herrühren. Die Änderungen geschehen nahezu abrupt, wenn die einfallenden Photonen gerade genug Energie haben, um innere Elektronen der absorbierenden Atome in das Kontinuum zu transportieren. Bei dieser Energie tritt starke Absorption auf, und eine plötzliche Änderung in der relativen Intensität wird beobachtet. Dies ist die sogenannte Absorptionskante.

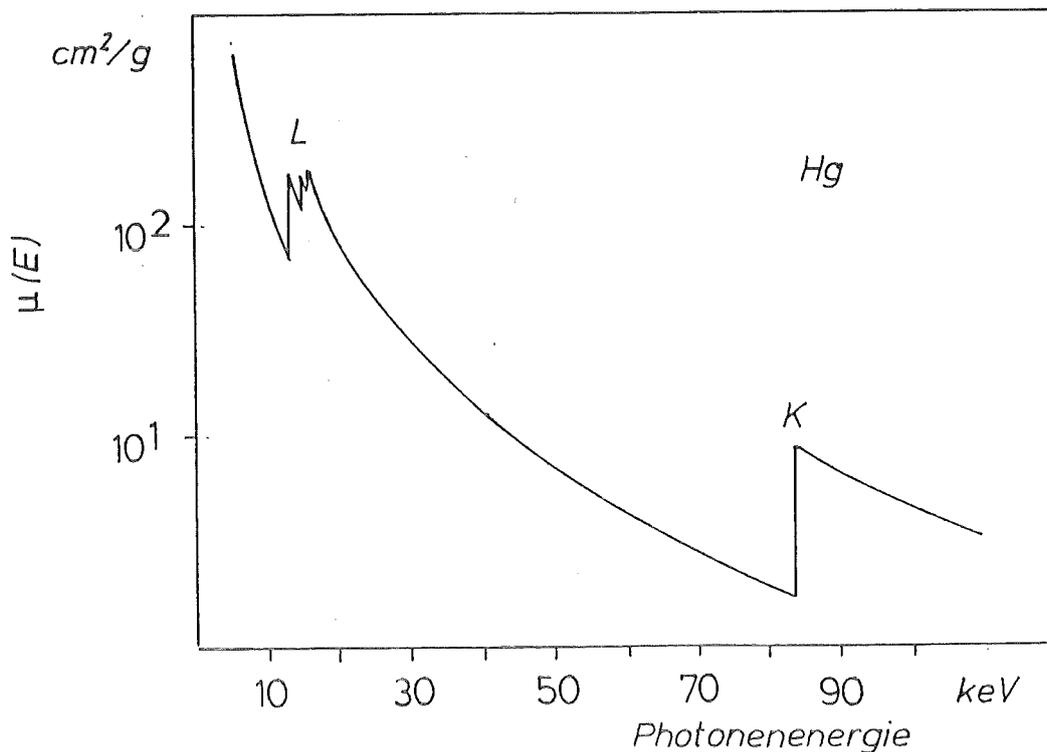


Abbildung 7. Extinktionskoeffizient von Quecksilber

Abbildung 7 zeigt den Verlauf des Extinktionskoeffizienten μ von Quecksilber mit der Energie. Der Extinktionskoeffizient ändert sich mit Ausnahme von wenigen Stellen kontinuierlich. Der Sprung in μ bei

großen Energien ist die K-Kante, sie entspricht dem Übergang des 1s-Elektrons in das Kontinuum. Die Sprünge bei kleineren Energien sind die drei L-Kanten (Übergänge der 2s- und 2p-Elektronen ins Kontinuum). Weitere Kanten, die z.B. Übergängen aus 3s-, 4s- usw. Zuständen entsprechen, sind in diesem Bild nicht mehr zu sehen. Die Form der K-Kante ist im folgenden von besonderem Interesse. Ihre Breite ist von der Größenordnung 10 eV.

3.1.DAS PRINZIP DER KRITISCHEN ABSORPTION

Das starke und schnelle Anwachsen von $\mu(E)$ an den Kanten kann ausgenutzt werden, um in einem Absorptionsversuch die Energie E_x einer Röntgenlinie auf empfindliche Weise zu messen.

Das Prinzip der kritischen Absorption soll am Beispiel einer Röntgenlinie mit nur einer Komponente der Energie E_x und einer Röntgenabsorptionskante, deren Verlauf durch eine Arcustangens-Kurve beschrieben wird, erläutert werden. Die Energie E_x liege im Bereich der Absorptionskante eines Elementes, der Absorber habe die Massenbelegung t . Dann werden 2 Messungen durchgeführt, in denen die Intensitäten der Röntgenquelle direkt (I_0) und hinter dem Absorber (I) gemessen werden. Die Intensität hinter dem Absorber ist abhängig von der Energie der Linie:

$$I = I_0 e^{-\mu(E_x)t} \quad (3.1)$$

Den genauen Wert der Energie E_x erhält man aus:

$$\mu(E_x) = -1/t \ln(I/I_0) \quad (3.2)$$

$$E_x = \mu^{-1}(-1/t \ln(I/I_0)) \quad (3.3)$$

Für eine Kante, deren $\mu(E)$ wie eine Arcustangens-Kurve verläuft, ist die Zuordnung von Intensitätsverhältnis und Energie eindeutig.

Die Empfindlichkeit der Meßmethode ist definiert als die Änderung der Intensität I bei einer Änderung der Energie. Liegt die Linie im steilsten Bereich der Kante, hängt die Intensität empfindlich vom Wert der Energie E_x ab. Die Linie wird "kritisch absorbiert". Da $\mu(E)$ im Bereich ober- und unterhalb der Kante sich nur langsam ändert, ist dort die Empfindlichkeit erheblich geringer. Bei diesen Energien werden Linien nicht kritisch absorbiert. Besteht eine Linie aus mehreren benachbarten Komponenten, die im Detektor nicht aufgelöst werden können, so reduziert jede nicht kritisch absorbierte Komponente die Empfindlichkeit der Meßmethode.

Die Methode der kritischen Absorption wurde bei exotischen Atomen schon öfters angewendet. Im Jahre 1960 wurde von Devons, Gidal, Ledermann und Shapiro die Myonen-Masse nach dieser Methode bestimmt [DEV60]. Die Autoren konnten eine Röntgenenergie von 88 keV auf 15 eV genau messen. Dies ergibt eine Unsicherheit in der Myonen-Masse von $2 \cdot 10^{-4}$. Ein weiteres Experiment, das diese Methode ausnutzte, wurde im Jahre 1981 von Lum, Wiegand et al. durchgeführt [LUM81]. Sie bestimmten die Kaonen-Masse auf $1 \cdot 10^{-4}$ genau. Die bisher erreichte Präzision war jedoch nie so groß wie die von uns angestrebte ($< 5 \cdot 10^{-5}$). Daher müssen wesentlich mehr Fehlerquellen untersucht und - falls nötig - ausgeschaltet werden.

3.2.DIE FORM DER ABSORPTIONSKANTE

Um die Möglichkeiten der Kanten-Methode ausschöpfen zu können, muß man die Form der Absorptionskanten sehr genau kennen. Der Verlauf der Kanten wurde nur für wenige chemische Elemente und deren Verbindungen gemessen. Es ist deshalb wichtig, die Theorie der Absorptionskanten zu verstehen, um auf diesem Weg möglichst viel Information über die Struktur einer Kante zu erhalten.

Wie in diesem Abschnitt gezeigt wird, ist die Grundform jeder Kante die Arcustangens-Kurve (Abbildung 8). Daneben kann - abhängig vom Element und der Art des Festkörpers - der atan-Kurve eine Struktur

aufgeprägt sein. Als "Lage der Kante" wird der Umkehrpunkt der atan-Kurve bezeichnet. Für die Beschreibung ihrer Form wird festgelegt, daß atomar gebundene Elektronen-Zustände negative und freie Zustände positive Energien haben sollen.

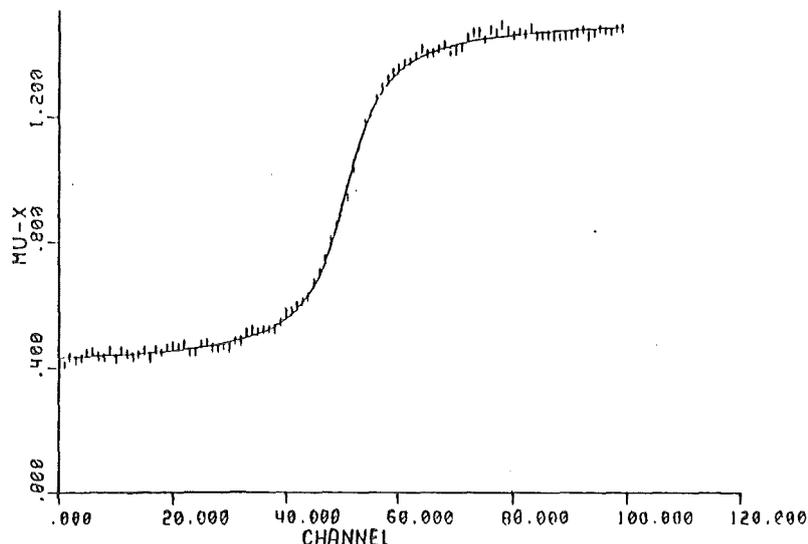


Abbildung 8. K-Kante von Holmium [FAI75]

Die Darstellung in diesem Abschnitt lehnt sich an die von Agarwal [AGA79] gegebene an. Die Absorptionskante entsteht durch den Übergang von Elektronen aus einem inneren Zustand i in die Zustände f des Kontinuums. Form und Lage des inneren Niveaus werden beschrieben durch $\omega(E)$, eine Funktion, die proportional zum Wirkungsquerschnitt ist:

$$\omega(E_i) dE_i = \frac{\Gamma_i/2\pi}{(\frac{1}{2}\Gamma_i)^2 + (E_i - E_{i0})^2} dE_i \quad (3.4)$$

E_{i0} : Energie des Niveaus

Γ_i : Breite des Niveaus [FWHM]

E_{f0} sei der Rand des Kontinuums. Das Kontinuum kann als Menge dicht liegender Resonanzniveaus f betrachtet werden. Die Schwellenenergie für ankommende Photonen ist $E = E_i + E_{f0}$. Hat ein Photon mehr Energie, wird das Elektron vom inneren Zustand zu einem der Resonanzzustände $E_f > E_{f0}$ übergehen. Die Übergangsenergie E ist $E = h\nu = E_i + E_f$.

Der Absorptionskoeffizient $\tau_f(E)$ des Resonanzniveaus f hat dann folgende Form, falls das innere Niveau i durch Gleichung 3.4 beschrieben wird:

$$\tau_F(E) = C \omega(E_i) = C \frac{\Gamma_i/2\pi}{(\frac{1}{2}\Gamma_i)^2 + (E-E_{i0f})^2}$$

$$E_{i0f} = E_{i0} + E_f$$

C : Konstante

(3.5)

Die Größe C ist proportional zur Oszillatorstärke des Resonanzzustandes. Nimmt man an, daß im Bereich der Kante die Oszillatorstärken unabhängig von der Frequenz sind, so ist C in diesem Bereich konstant. Der Absorptionskoeffizient ergibt sich aus der Integration über alle möglichen Werte von E_{i0f} :

$$\tau(E) = \frac{C \Gamma_i}{2\pi} \int_{E_{i0f0}}^{\infty} \frac{dE_{i0f}}{(\frac{1}{2}\Gamma_i)^2 + (E-E_{i0f})^2}$$
(3.6)

$$= \frac{C}{\pi} \operatorname{atan} \left(\frac{E - E_{i0f0}}{\frac{1}{2}\Gamma_i} \right) + \frac{1}{2}$$
(3.7)

$$E_{i0f0} = E_{i0} + E_{f0}$$

Der Extinktionskoeffizient $\mu(E)$ ist die Summe aus den Koeffizienten für die Photoabsorption $\tau(E)$ und für die Photonenstreuung $\sigma(E)$. Da der Koeffizient $\sigma(E)$ sich im Bereich der Kante nur wenig ändert, kann er als konstant angesehen werden. Damit wird:

$$\mu(E) = \frac{C}{\pi} \operatorname{atan} \left(\frac{E - E_{i0f0}}{\frac{1}{2}\Gamma_i} \right) + \frac{1}{2} + \sigma(E_{i0f0})$$
(3.8)

D.h. die Kante liegt an der Stelle E_{i0f0} , zeigt atan-Form und hat die Breite Γ_i des inneren Zustandes.

3.3.DIE CHEMISCHE VERSCHIEBUNG DER KANTE

Unter chemischer Verschiebung einer Kante versteht man den Unterschied zwischen der Energie E_{i0f0} des Umkehrpunktes der atan-Kurve bei einer chemischen Verbindung gegenüber derjenigen des reinen Elementes.

Je höher die Elektronegativität eines Liganden ist, desto mehr wird die Elektronenhülle der äußeren Orbitale des Absorberatoms polarisiert. Die Abschirmung innerer Niveaus durch äußere Elektronen wird dadurch geringer. Je mehr die Bindung ionisch ist, desto größer ist die effektive Kernladung des Absorberatoms, und desto größer auch die Energieverschiebung der Kante. Die Energieverschiebungen sind im allgemeinen positiv und liegen zwischen 1 eV und 20 eV [AGA70].

Falls eine Röntgenlinie nicht genau in den Bereich einer Kante fällt, besteht im Prinzip die Möglichkeit, die Kante zu "schieben", indem man eine Verbindung der Absorberatome mit geeigneten Elementen herstellt. Die Größe der Verschiebung ist jedoch noch nicht theoretisch zugänglich. Außerdem setzen zusätzliche Atome im Absorber, die nicht kritisch absorbieren, die Empfindlichkeit der Kantenmethode herab. Für die Anwendung der Methode der kritischen Absorption sind deshalb Verbindungen von Elementen ungeeignet.

3.4.STRUKTUREN IM ENERGIEBEREICH DER KANTE

Bei der Herleitung der atan-Form der Kante wurde angenommen, daß die möglichen Endzustände allein im Kontinuum liegen. Ebenso wurde von einer konstanten Dichte der Endzustände ausgegangen. In realen Atomen können auch gebundene Zustände Endzustände sein. Im Leitungsband, das bei Metallen die Rolle des Kontinuums übernimmt, liegen die Zustände nicht gleichmäßig dicht. Diese vom einfachen Fall abweichende Dichte der Endzustände wird als Struktur in der Kante sichtbar. Solche Strukturen werden im folgenden beschrieben.

White line

Die sogenannte "White Line" ist eine Absorptionslinie, die der Absorptionskante bei etwas niedrigerer Energie vorgelagert ist. Abbildung 9 zeigt die White Line am Beispiel der K-Kante von Argon.

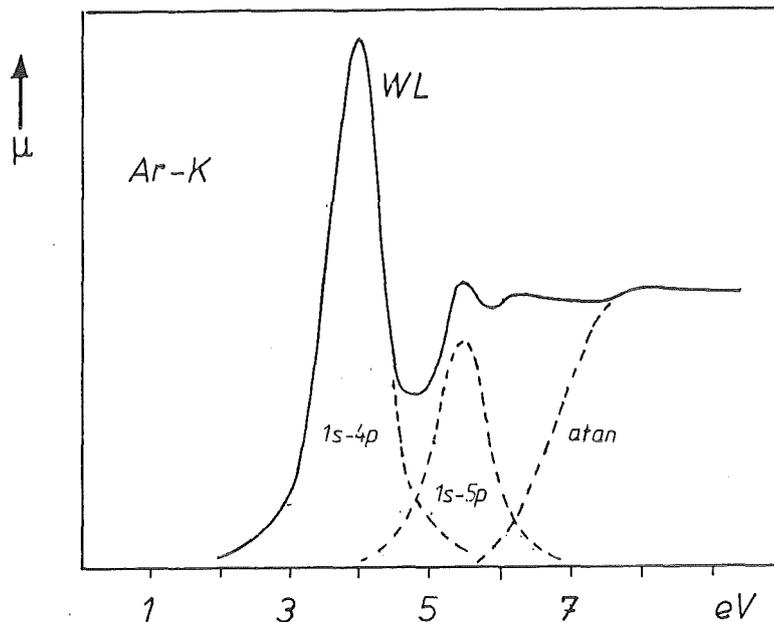


Abbildung 9. Die White Line vor der K-Kante von Argon [SCH63]

Im Edelgas Argon existieren neben den Zuständen im Kontinuum weitere mögliche Endzustände für das $1s$ -Elektron: die leeren p -Niveaus. Diese haben einen Einfluß auf den Verlauf des Absorptionskoeffizienten. Der Übergang des $1s$ -Elektrons in den ersten freien Zustand ($4p$) ergibt die große Absorptionslinie. Die nächste Linie kommt vom Übergang $1s$ nach $5p$. Linien zu Übergängen in höhere Zustände sind im Bild nicht mehr eingezeichnet. Die eigentliche $atan$ -Kurve ist im Verlauf von $\mu(E)$ kaum noch zu sehen.

Die Breite sowohl der Absorptionslinien als auch der Kante ist gleich der Breite des $1s$ -Niveaus (Formel 3.5; im Fall von Argon 0.58 eV). Die Energiedifferenz zwischen den Übergängen $1s-4p$ und $1s-5p$ beträgt ca. 2 eV, so daß die erste Absorptionslinie vom Anstieg des Absorptionskoeffizienten getrennt erscheint. Diese der Kante vorgelagerte Linie heißt White Line. Sie tritt nur bei Elementen mit niedrigem Z

auf, da bei großen Z der Energieabstand des Übergangs vom $1s$ -Niveau in den ersten freien p -Zustand zur Kante klein ist im Vergleich mit der Breite. Bei Metallen kann man die White Line ebenfalls nicht beobachten, da die Zustände dort zu Energiebändern entartet sind.

Eine White Line in Verbindung mit einer Kante kann bei der Methode der kritischen Absorption zu Zweideutigkeiten in der Energiebestimmung führen. Um solchen Schwierigkeiten aus dem Wege zu gehen, sollten für die Kantenmethode Kerne mit großem Z und keine Edelgase verwendet werden.

Stufen

Bei der genaueren Untersuchung von Kanten findet man manchmal einen Knick im Anstieg von $\mu(E)$. Diese Stufe läßt sich an den Beispielen von Zink und Nickel erläutern (siehe Abbildung 10). Die Stufen spiegeln die Dichte der möglichen Endzustände in den Leitungsbändern wider.

1. K-Kante von ^{30}Zn

Die elektronische Struktur des Zn-Atoms ist $[\text{KL}]3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$. Das relativ schmale $3d$ -Band ist besetzt. Im Festkörper kann $4s$ - $4p$ -Hybridisierung vorliegen, die den oberen Teil des $4s$ -Niveaus entvölkert und den unteren Teil des $4p$ -Zustands bevölkert. Die Übergänge vom $1s$ -Zustand in die freien Zustände des $4p$ -Bandes ergeben den arcustangensförmigen Teil der Kante.

2. K-Kante von ^{28}Ni

Bei den sogenannten Übergangselementen mit ihren unvollständig gefüllten d -Schalen wird die Beschreibung schwieriger. Die Elektronenstruktur von ^{28}Ni ist $[\text{KL}]3s^2 3p^6 3d^8 4s^2$. Im Metall überlappt das $4p$ -Niveau mit dem $3d$ - und dem $4s$ -Niveau. Es liegt daher $4s$ - $4p$ - $3d$ -Hybridisierung vor. Bandberechnungen [DIM71] zeigen, daß im unteren Teil des Energiebandes die s - p - d -Mischzustände liegen. Darüber erlangen die Zustände zunächst überwiegend s -Symmetrie und endlich im oberen Teil des Bandes fast reine p -Symmetrie. Als

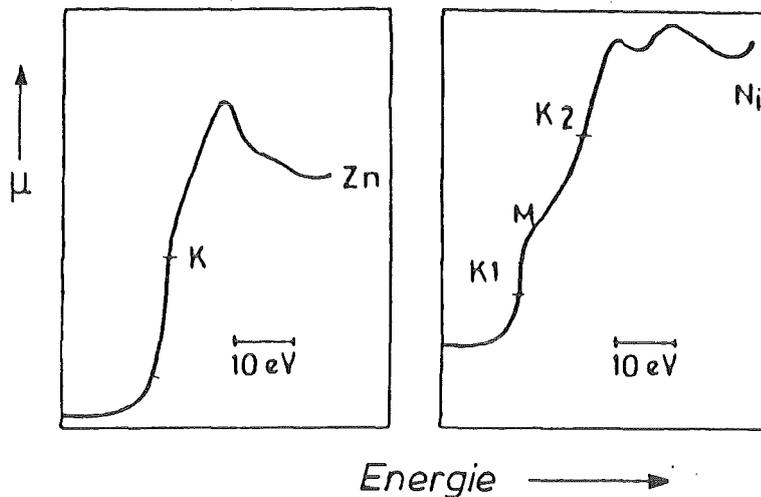


Abbildung 10. Stufen in den Absorptionskanten von Zn und Ni. [YEH67]

Folge hiervon zeigt die K-Kante von Nickel Struktur. Der erste Anstieg des Absorptionskoeffizienten (K1) rührt von dem Übergang der Elektronen aus dem $1s$ -Zustand in den s - p - d -Mischzustand her. In der Mitte des Energiebandes liegen die möglichen Endzustände wegen der vorherrschenden s -Symmetrie weniger dicht, so daß der Absorptionskoeffizient abnimmt. Dies ist als Knick in der Kante zu sehen. Der zweite Anstieg (K2) kommt vom Übergang $1s \rightarrow 4p$, da bei etwas größerer Energie der $4p$ -Zustand fast rein ausgebildet ist.

Neben der Hybridisierung, die besetzte p -Schalen frei macht, führen teilweise leere d -Schalen ebenfalls zu Strukturen in der Kante. Kanten mit solchen Eigenschaften sind nicht so gut für die Methode der kritischen Absorption geeignet wie glatte Kanten, da sie die Interpretation der Ergebnisse erschweren (siehe Kap.4). K-Kanten von schweren Kernen (Pt, Ir, Au usw.) und von Elementen aus der Gruppe der Seltenen Erden zeigen wegen der großen Breite ihrer $1s$ -Zustände keine Struktur.

Strukturen oberhalb der Kante

Unmittelbar oberhalb einer Kante können Strukturen im Extinktionskoeffizienten auftreten, die sich bis 1000 eV weit erstrecken. Diese Strukturen werden in der Literatur mit extended fine structure (EFS) oder extended X-ray absorption fine structure (EXAFS) bezeichnet.

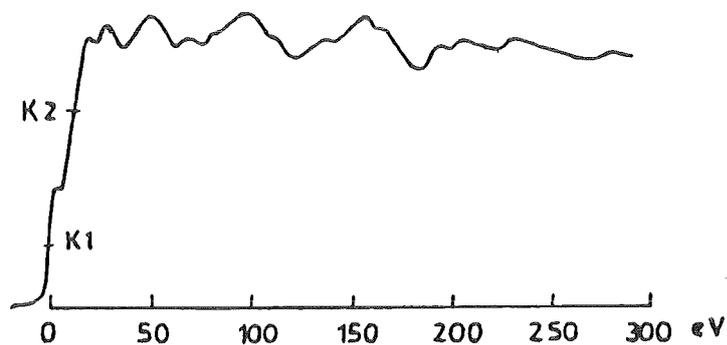


Abbildung 11. Extended Fine Structure von Kupfer [AGA76]

Abbildung 11 zeigt eine solche ausgedehnte Feinstruktur, die sich an die Kupferkante anschließt. In dieser Struktur spiegeln sich die Eigenschaften des Festkörpers wider, in den das Absorberatom eingebettet ist. Nach einer von R.L. Kronig in den Jahren 1931ff. gegebenen Deutung entstehen die Minima durch Reflexion der beim Photoeffekt freigesetzten Elektronen an den Gitterebenen. Elektronen, deren Impulse den Bragg'schen Bedingungen für Reflexion an den Gitterebenen genügen, können sich nicht als freie Teilchen im Festkörper bewegen. Sie finden daher keine freien Plätze im Endzustand des Absorptionsprozesses und deshalb wird die Wahrscheinlichkeit für Absorption minimal. Eine ausführliche Beschreibung dieser Erklärung, sowie andere Deutungsmöglichkeiten werden in der Darstellung von Agarwal [AGA79] gegeben.

Bei der Anwendung der Methode der kritischen Absorption wird sich eine ausgedehnte Feinstruktur nur dann ungünstig auswirken, wenn die zu messende Röntgenlinie aus mehreren Komponenten besteht, von denen einzelne in diesen Bereich fallen. Bei Kanten von Atomen mit großer

Ordnungszahl Z ist die EFS nicht mehr zu erkennen, da die großen Breiten der $1s$ -Zustände die Strukturen verschmieren.

3.5. STRUKTUREN DER ANTI-PROTONISCHEN RÖNTGENLINIEN

Nicht allein Strukturen im Extinktionskoeffizienten in und oberhalb einer Kante können die Empfindlichkeit der relativen Intensität hinter dem Absorber gegenüber Änderungen der Energie (siehe Kapitel 4) beeinträchtigen. Auch die Form von antiprotonischen Röntgenlinien kann darüber entscheiden, ob eine Linie für die Energiebestimmung nach der Methode der kritischen Absorption geeignet ist. Anzahl, Abstand und Intensität der einzelnen Komponenten tragen - neben der Energieauflösung des Detektors - zur Linienform des Röntgenübergangs bei. Von den verschiedenen Komponenten fallen im allgemeinen nur wenige in den Energiebereich der Kante und sind für die Energiebestimmung nutzbar. Die übrigen Komponenten tragen zwar zur Intensität der zu messenden Linie, aber nicht zur Empfindlichkeit der Methode bei.

Die folgenden drei Beispiele greifen auf eine Reihe von Kandidaten vor, die im Kapitel 4 näher untersucht werden. Die Beispiele sollen das hier Gesagte verdeutlichen.

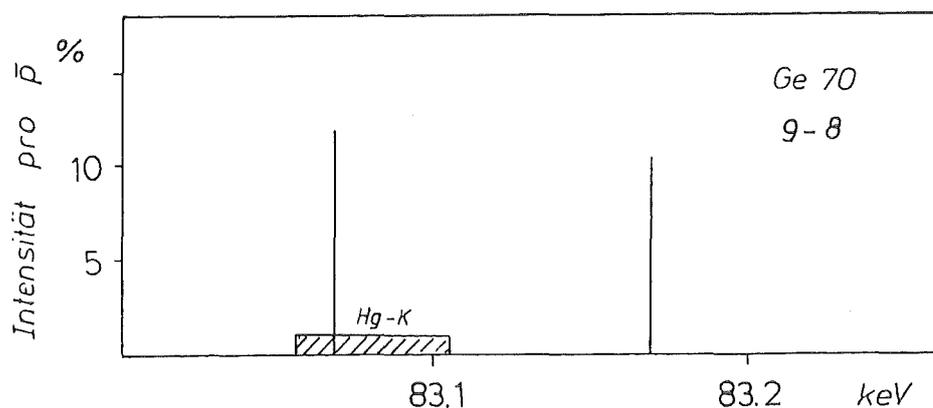


Abbildung 12. Feinstruktur des Übergangs 9-8 im \bar{p} -Ge-70

Der Spin des Antiprotons führt zur Dublett-Struktur der Röntgenlinien. In Abbildung 12 wird gezeigt, daß die eine der beiden Komponenten des 9-8-Übergangs im antiprotonischen Ge-70 im empfindlichen Bereich der K-Kante von Quecksilber erwartet wird, während die andere oberhalb liegt.

Ist der Spin des Kerns vom antiprotonischen Atom von null verschieden, so erhöht die Hyperfeinstruktur die Zahl der Komponenten. Eine große Anzahl von Komponenten kann die hinter dem Absorber erwartete Intensität unempfindlich werden lassen gegenüber geringen Abweichungen der Linie von der berechneten Röntgenenergie. Abbildung 13 zeigt den Fall von Cl-37, bei dem das Kernmoment zu einer Vielzahl von Komponenten führt, so daß der überwiegende Anteil der Intensität der Linie außerhalb des empfindlichen Bereichs der K-Kante von Terbium absorbiert wird.

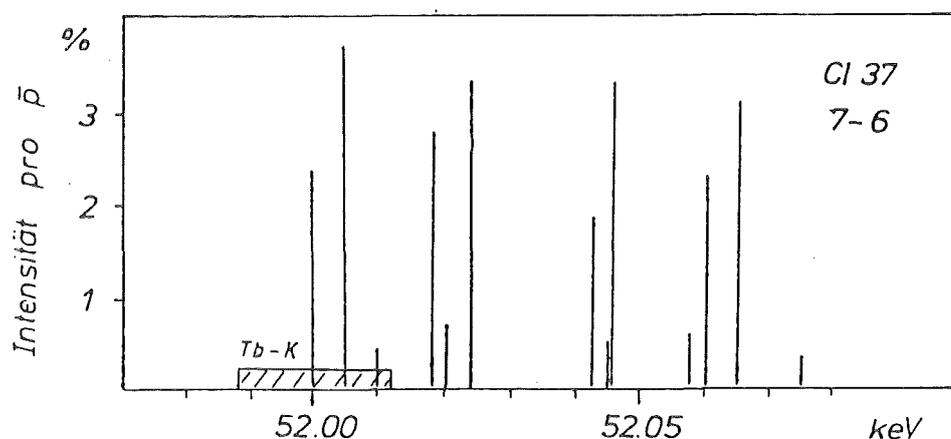


Abbildung 13. Hyperfeinstruktur des Übergangs 7-6 im \bar{p} -Cl-37

Eine dritte Quelle für die Komponentenvielfalt sind die sogenannten inneren Übergänge die in Niveaus mit $l < n-1$ gehen. Durch Aufhebung der l -Entartung weichen ihre Energien von der des zirkularen Übergangs ab. Abbildung 14 zeigt am Beispiel des 17-15 Übergangs in Nd-142, daß auch durch solche Komponenten ein großer Anteil der Intensität außerhalb des kritischen Bereichs der K-Kante von Blei liegt.

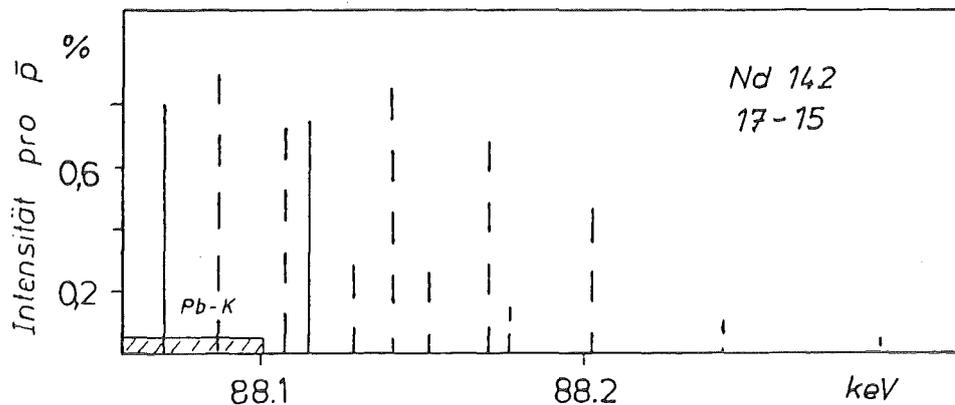


Abbildung 14. Sogenannte "Innere Übergänge" (gestrichelt) des 17-15 Übergangs im \bar{p} -Nd-142

3.6. STÖRLINIEN

Unter Störlinien sollen alle weiteren Emissionslinien pionischen, antiprotonischen oder elektronischen Ursprungs verstanden werden, die im Bereich der zu messenden Linie liegen, von ihr nicht auflösbar sind, und auf diese Weise die Empfindlichkeit der Kantenmethode reduzieren. Die meisten antiprotonischen Störlinien werden in der Targethalterung z.B. Aluminium, sowie im Sauerstoff und Stickstoff der das Target umgebenden Luft gebildet. Weitere \bar{p} -Störlinien werden im Target selbst erzeugt. Zufällig ist das Verhältnis der Energien von den Übergängen 13 - 11 und 10 - 9 nach der Bohr'schen Formel gleich 1.0007. Daher liegt bei allen Kernen die 13-11-Linie im Energiebereich der 10-9-Linie. Pionische Atome werden von Pionen unter den Zerfallsprodukten bei der Proton-Antiproton-Annihilation gebildet. Ebenso sind die charakteristischen elektronischen Röntgenlinien (K_{α} - und K_{β} -Linien) des Targets und des Absorbers im Spektrum zu sehen.

KAPITEL 4. SUCHE NACH PAAREN VON EMISSIONSLINIEN UND KANTEN

In den vorangegangenen Kapiteln wurde ein Computer-Programm vorgestellt, das antiprotonische Übergangsenergien sehr genau berechnet. Daran anschließend wurde die Struktur der Röntgenabsorptionskanten diskutiert. In diesem Kapitel werden Fälle gesucht, bei denen die Energie von Emissionslinien antiprotonischer Atome und von K-Kanten elektronischer Atome zusammenfallen. Anschließend wird diskutiert, ob die Fälle für eine Bestimmung der Energie der jeweiligen Röntgenlinie auf $\Delta E/E < 5 \cdot 10^{-5}$ geeignet sind. Diese relative Genauigkeit entspricht beim Problem der Bestimmung der Antiprotonenmasse der bisher erreichten Präzision. Das bedeutet, daß der tolerable Fehler ΔE kleiner als $5 \cdot 10^{-5} \cdot E(\text{Linie})$ sein muß.

4.1. AUSWAHLKRITERIEN

Die Empfindlichkeit der Kantenmethode wird dann optimal ausgenützt, wenn die Energie einer Emissionslinie in den steilsten Bereich einer Absorptionskante fällt. Unter den vielen Röntgen-Übergängen in antiprotonischen Atomen gibt es nur wenige, die diese Bedingung erfüllen. Jedoch genügen für viele Fragestellungen der Physik, wie z.B. die Bestimmung der Antiprotonenmasse, wenige, sehr genau gemessene Übergangsenergien.

Bei der Suche nach geeigneten Kandidaten müssen zunächst einige allgemeine Randbedingungen erfüllt werden. Bei der geforderten Genauigkeit $\Delta E/E$ für die Energie E des Übergangs soll der tolerable Fehler ΔE größer als 1 eV werden dürfen. Energieunterschiede, die kleiner als 1 eV sind, können mit der Kantenmethode nur schwer nachgewiesen werden. Um eine einfache Interpretation der Meßergebnisse zu gewährleisten, soll die Kante wenig Struktur haben. Als drittes muß die Röntgenlinie intensiv genug sein, damit sie auch hinter dem Absorber mit ausreichender statistischer Genauigkeit nachgewiesen werden kann. Eine

weitere Bedingung ist, daß die Übergangsenergie durch das Programm PBAR sehr genau berechnet werden kann.

Mit diesen Bedingungen, die in den folgenden Punkten 1. bis 4. präzisiert werden, läßt sich eine Vorauswahl treffen, die die Zahl der möglichen Fälle deutlich einschränkt.

1. Nur K-Kanten sind interessant, da sie im allgemeinen glatter als L-, M- oder gar O-Kanten sind.
2. Antiprotonenlinien mit Energien $E > 100$ keV sind uninteressant, da es dort keine Absorptionskanten gibt. Antiprotonenlinien und Kanten mit $E < 20$ keV sind uninteressant, da der tolerable Fehler der Energie bei der angestrebten Genauigkeit kleiner als 1 eV sein müßte.
3. Nur Antiprotonenlinien der Übergänge mit $\Delta n = 1$ und 2 sind genügend intensiv.
4. Energien von solchen Zuständen, die von der starken Wechselwirkung beeinflußt werden, können nicht mit der hier erforderlichen Genauigkeit berechnet werden. Aus diesem Grund kommen die letzten beobachtbaren Übergänge für eine Bestimmung der Antiprotonenmasse nicht in Frage.

Unter Beachtung dieser Bedingungen wurde bei allen stabilen Isotopen nach Übergängen gesucht, die in den Bereich einer K-Kante fallen, für den gilt:

$$|E_{\text{Kante}} - E_{\text{Linie}}| < 10 \text{ eV}$$

Damit es möglich war, relativ viele Isotope in endlicher Zeit zu untersuchen, wurden für die erste Suche einige Vereinfachungen in den Eingabedaten des PBAR-Programms gemacht.

Das Ergebnis ist eine umfangreiche Liste von Fällen, die den bis jetzt gestellten Anforderungen genügen (siehe Anhang B). Aus diesen Fällen müssen in einem zweiten Auswahlverfahren die günstigen herausgefiltert werden. Dazu werden weitere Qualitätskriterien benötigt:

1. Um die statistischen Fehler so klein wie möglich zu halten, werden nur Übergänge mit $\Delta n = 1$ berücksichtigt. Diese Übergänge haben wesentlich höhere Intensitäten als $\Delta n = 2$ Übergänge.
2. Die aus Kaskadenrechnungen und aus Hyperfeinstruktur-Betrachtungen ermittelte Anzahl der Komponenten soll möglichst klein sein. Am besten wären solche Fälle, bei denen nur die beiden Komponenten der Feinstruktur auftreten. Diese Bedingung erleichtert die Auswertung der Meßergebnisse (siehe Kap. 3).
3. Die Hauptquantenzahl n des antiprotonischen Zustandes soll möglichst klein sein. Bei niedrigen n sind die komplizierten Screening-Korrekturen wesentlich kleiner als bei hohen n . Die Übergangsenergie kann somit genauer berechnet werden.
4. Die Targetkerne sollen leicht sein, da dort die QED Korrekturen klein sind und somit auch weniger zum Fehler des theoretischen Wertes für die Röntgenenergie beitragen.
5. Es dürfen keine Störlinien im Energiebereich der zu messenden Linie liegen, weil durch solche Störlinien die Empfindlichkeit der Methode erheblich reduziert wird (siehe Kap.3).

Unter Beachtung der Bedingungen 1. bis 5. bleiben nur noch acht Röntgenlinien für die engere Auswahl (Tabelle 3). Zwei weitere interessante Fälle, für die $|E_K - E_x| < \Gamma$ gilt, wurden hinzugefügt. Sie werden zusammen mit den anderen acht Kandidaten näher untersucht.

Kante	Energie keV	Breite eV	Kern	$E_K - E_x$ eV	n_i	-	n_f
80 Hg	83.08	54.6	70 Ge	9.64	9+	-	8+
77 Ir	76.125	46.8	100 Mo	15.82	11-	-	10-
62 Sm	46.850	19.7	42 Ca	-6.65	8+	-	7+
59 Pr	42.002	16.2	138 Ba	14.61	16-	-	15-
57 La	38.934	14.1	46 Ti	0.42	9+	-	8+
51 Sb	30.483	9.16	50 V	7.34	10+	-	9+
			50 V	-5.86	10-	-	9-
50 Sn	29.193	8.49	20 Ne	4.22	6-	-	5-
47 Ag	25.519	6.75	62 Ni	8.54	12-	-	11-
			64 Ni	4.74	12+	-	11+
			64 Ni	-4.25	12-	-	11-
			24 Mg	-6.12	7+	-	6+

Tabelle 3. Die zehn besten Fälle

4.2. UNTERSUCHUNG DER BESTEN FÄLLE

Aus diesen Fällen sollen die günstigsten durch eine möglichst quantitative Diskussion der zu erwartenden Intensitäten sowie deren Empfindlichkeiten gegenüber Abweichungen der tatsächlichen Röntgenenergie von der berechneten herausgefunden werden.

TRANSMISSIONS-DIAGRAMM

Im folgenden wird untersucht, welchen Effekt eine Verschiebung der Energie der Linie auf die Intensität hinter dem Absorber hat. Dabei ist zu berücksichtigen, daß die Linie aus mehreren Komponenten besteht, die vom Detektor nicht aufgelöst werden. Unter "gesamte Intensität" I_g wird die Intensität des ganzen Linienkomplexes verstanden:

$$I_g = \int_{E_0 - \Delta E}^{E_0 + \Delta E} I(E) dE \quad (4.1)$$

- $I(E)$: Intensitätsverteilung der Röntgenquelle
 E_0 : Energieschwerpunkt der Röntgenlinie
 ΔE : Energieauflösung des Detektors (FWHM)

Die durch einen Absorber verminderte Intensität I_T ist:

$$I_T(E) = I(E) e^{-\mu(E)t} \quad (4.2)$$

Die gesamte Intensität hinter dem Absorber ist:

$$I_{Tg} = \int_{E_0 - \Delta E}^{E_0 + \Delta E} I(E) e^{-\mu(E)t} dE \quad (4.3)$$

Als nächstes soll untersucht werden, wie empfindlich die Intensität I_{Tg} auf eine in der Natur möglicherweise vorhandene Verschiebung der Energie E_0 des Linienkomplexes reagiert. Dazu wird die Intensitätsverteilung mit der Absorptionskante gefaltet. Der neue Parameter x gibt den Energieunterschied zwischen einer fiktiven Lage der Linie und der errechneten Lage an. Die gesamte Transmission (TTI) ist eine Funktion von x :

$$TTI(x) = \int I(E') e^{-\mu(E'-x)t} dE' \quad (4.4)$$

Die Definition ist so gewählt, daß $TTI(0)$ gleich der erwarteten Gesamtintensität I_{Tg} ist. Da die Breite einer Emissionslinie wesentlich kleiner ist als die Breite der Kante, kann man die Lorentzlinien durch δ -Funktionen approximieren:

$$I(E') = \sum \delta(E' - E_i) I_i \quad (4.5)$$

I_i ist die Intensität der i -ten Linie und E_i ist deren Energie. Damit wird:

$$TTI(x) = \sum I_i e^{-\mu(E_i - x)t} \quad (4.6)$$

Die Faltung wird numerisch durchgeführt. Nach Kapitel 3 wird $\mu(E)$ durch eine atan-Kurve beschrieben:

$$\mu(E) = B_1 + B_2 \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \tan^{-1} \left(\frac{E_K - E}{\Gamma/2} \right) \right] \quad (4.7)$$

Dabei bedeuten:

- B_1 = asymptotischer Wert von μ unterhalb der Kante
- B_2 = Größe des Sprungs in der Kante ($= \mu_{\text{oben}} - \mu_{\text{unten}}$)
- Γ = Breite der Kante
- E_K = Energie der Kante

Die Energien der Kanten sind dem Tabellenwerk von Cauchois und Senemaud [CAU78] entnommen worden. Die Breite der Kante ist gleich der Breite des elektronischen 1s-Niveaus, deren Wert bei Krause und Olivier zu finden ist [KRA79]. Die Werte von μ unter- und oberhalb der Kante sind bei Storm und Israeli angegeben [STO70].

Abbildung 15 zeigt die Intensität TTI hinter dem Absorber als Funktion von x für verschiedene Dicken im Falle der Quecksilber K-Kante mit der 9-8 Linie in Germanium-70. Die Anwendung des TTI -Diagramms ist folgende: Aus dem Verhältnis der Intensitäten mit und ohne Absorber, $I_{\text{mit}}/I_{\text{ohne}}$, und dem Wert der Massenbelegung t kann man aus der Kurve

sofort die dazugehörige, gesuchte Energie ablesen. Dabei ist wichtig, daß TTI eine streng monoton fallende Funktion ist, da sich sonst Mehrdeutigkeiten ergeben können. Dies ist aber bei einem einigermaßen glatten Verlauf der Kante immer der Fall (siehe Kap. 3).

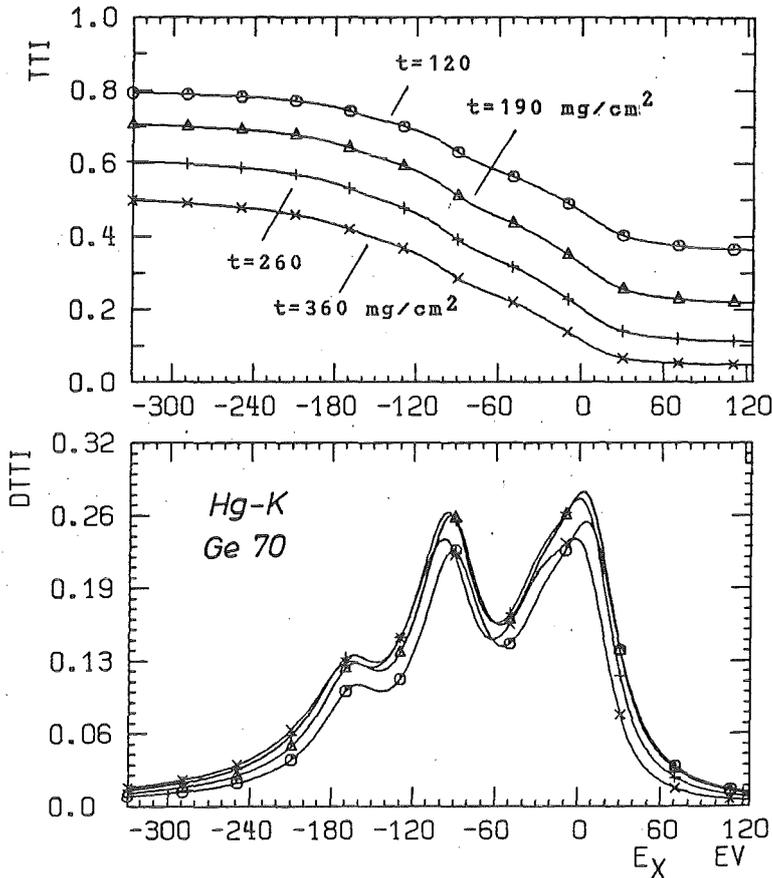


Abbildung 15. Diagramme für die Transmission (TTI) und deren Ableitung nach der Energie (DTTI; in $\% \cdot \text{eV}^{-1}$)

DIAGRAMM DES ENERGIEFEHLERS

Zur Bestimmung der Genauigkeit des ermittelten Energiewertes werden die Fehlergrenzen von I/I_0 in das Diagramm gezeichnet. Diese ergeben dann die dazugehörigen Fehlergrenzen für die Energie.

Mit der Steilheit von TTI nimmt die Empfindlichkeit der Meßmethode zu. Aus diesem Grund wird neben TTI auch die Ableitung von TTI nach der

Energie (DTTI) berechnet (Abbildung 15). Die Ordinatenwerte haben die Bedeutung einer Empfindlichkeit. Sie geben an, wie genau eine Intensität gemessen werden muß, um 1 eV Energieauflösung zu erreichen. Dies ist ein wichtiger Wert, da die Genauigkeit der zu messenden Intensität direkt mit der Anzahl N_p der dazu benötigten Antiprotonen verknüpft ist. Je größer der Betrag von DTTI ist, desto weniger Antiprotonen werden benötigt, um die gewünschte Genauigkeit zu erreichen. Trägt man DTTI für verschiedene Dicken auf, so wird klar, daß es eine optimale Dicke gibt, d.h. eine Dicke, bei der die Empfindlichkeit bei $x=0$ am größten ist.

DIE ANZAHL DER BENÖTIGTEN ANTIPROTONEN (ABA)

Aus den bekannten Informationen über die Empfindlichkeit der Kantenmethode bei der Lage der Linie, $DTTI(0)$, und bei optimaler Dicke t , der angestrebten Genauigkeit von $\Delta E/E = 5 \cdot 10^{-5}$ und der Intensität der Linie wird eine Zahl (ABA) berechnet, die proportional zu der später benötigten Anzahl der Antiprotonen ist. Damit sollen diejenigen Kandidaten gefunden werden, bei denen möglichst wenige Antiprotonen zur Bestimmung der Röntgenenergie gebraucht werden.

Die relative Genauigkeit der Intensität, die erforderlich ist, um die angestrebte Genauigkeit von $\Delta E/E$ bei einer bestimmten Energie E zu erreichen, ist das Produkt aus dem absoluten Fehler der zu messenden Energie und der Empfindlichkeit der Meßmethode:

$$\Delta I/I = \Delta E \cdot DTTI \quad (4.8)$$

Sofern nur statistische Fehler berücksichtigt werden, folgt:

$$\Delta E \cdot DTTI = 1/\sqrt{N_{X\text{-rays}}} \quad (4.9)$$

$$\text{mit } N_{X\text{-rays}} = I_{\text{CASCAD}} \cdot \frac{N_p}{p}$$

I_{CASCAD} wird aus Kaskadenrechnungen gewonnen, und gibt an, zu welchem Prozentsatz ein eingefangenes Antiproton einen bestimmten Röntgenübergang macht. $N_{\bar{p}}$ ist die Anzahl der Antiprotonen. Die aus dieser Betrachtung berechnete Anzahl der benötigten Antiprotonen ABA ist ein Maß für die Effektivität eines Kandidaten:

$$N_{\bar{p}} \equiv \text{ABA} = 1/(\Delta E_m^2 \text{DTTI}^2 I_{\text{CASCAD}}) \quad (4.10)$$

Der Wert von ABA sollte möglichst klein sein. Die Zahlen ABA sind in Tabelle 4 aufgenommen.

4.3.EMPFEHLUNG

Im folgenden werden die 10 "besten" Fälle genauer auf ihre Eignung zu einer Präzisionsmessung untersucht. Wichtige Bewertungskriterien sind die ABA sowie die Ungenauigkeiten in der Berechnung der Übergangsenergie. Wie in Kapitel 2 gezeigt wurde, stammen die größten theoretischen Fehler von den Beiträgen der Polarisierbarkeit des Kerns ΔE_{NP} und der Screening-Korrektur ΔE_{S} . Von diesen ist der Energiebeitrag der Kernpolarisierbarkeit für alle betrachteten Übergänge kleiner als 0.2 eV. Alle bei der weiteren Auswahl der Kandidaten interessierenden Werte, wie die Massenbelegung t , die Dicke d und der Wert des tolerablen Fehlers ΔE , sind ebenfalls in Tabelle 4 aufgeführt. Die einzelnen Fälle werden wie folgt kommentiert.

- \bar{p} -Ge-70 / Hg-K-Kante

Die Hg-K-Kante kann nach Kapitel 3 sehr gut durch eine atan-Kurve beschrieben werden. Wegen der großen Breite der Kante ist die kritische Absorption in einem sehr weiten Energiebereich möglich. Die ABA ist relativ klein. Ebenso sind die Korrekturen im Vergleich mit ΔE klein.

- \bar{p} -Mo-100 / Ir-K-Kante

Bei der Ir-K-Kante wird ebenso wie bei der Hg-K-Kante keine Struktur erwartet. Ein Nachteil dieses Falles ist die relativ große

Kante	Kern	$n_i - n_f$	ABA	t	d	ΔE_S	ΔE_{NP}	ΔE
				mg cm ⁻²	μm	eV	eV	eV
80 Hg	70 Ge	9- 8	23400	240	177	1.1	0.2	4.2
77 Ir	100 Mo	11-10	34000	250	111	3.0	0.2	3.8
62 Sm	42 Ca	8- 7	28000	65	86	0.4	0.1	2.3
59 Pr	138 Ba	16-15	39400	67	99	13.0	0.1	2.1
57 La	46 Ti	9- 8	12600	69	102	0.6	0.0	1.9
51 Sb	50 V	10- 9	13900	50	75	1.0	0.0	1.5
50 Sn	20 Ne	6- 5	7300	70	96	0.0	0.0	1.5
47 Ag	62 Ni	12-11	28500	36	34	2.0	0.0	1.3
	64 Ni	12-11	24700	33	31	2.0	0.0	
	24 Mg	7- 6	44600	22	21	0.1	0.0	

Tabelle 4. Weitere Daten der besten Fälle: d: Dicke des Absorbers
 ΔE_S : Beitrag der Screening-Korrektur; ΔE : tolerabler Fehler
 ΔE_{NP} : Beitrag der Kernpolarisierbarkeit; t: Massenbelegung

Korrektur aus der Elektronenabschirmung bei der Berechnung der 11-10-Linie von Molybdän. Die ABA ist ebenfalls größer als bei Ge/Hg.

- \bar{p} -Ca-42 / Sm-K-Kante

Die Kante wird, wie bei allen Seltenen Erden (Kapitel 3), sehr gut durch eine atan-Kurve beschrieben. Der Beitrag der Korrekturen ist sehr klein im Vergleich zu ΔE . Die ABA ist etwas schlechter als beim Paar Ge/Hg.

- \bar{p} -Ba-138 / Pr-K-Kante
Praseodym gehört ebenfalls zur Gruppe der Seltenen Erden, so daß auch hier mit einem glatten Verlauf der K-Kante zu rechnen ist. Der interessante Übergang in Barium hat sehr große Hauptquantenzahlen. Daraus resultiert ein großer Beitrag der Screening-Korrektur zur Übergangsenergie. Ein fehlendes 1s-Elektron bewirkt eine Verschiebung um 5.6 eV gegenüber einer ungestörten Elektronenverteilung. Außerdem ist die ABA sehr groß.
- \bar{p} -Ti-46 / La-K-Kante
Die La-K-Kante hat keine Struktur. Die Korrekturen sind unerheblich und die ABA ist sehr klein, nur etwa halb so groß wie bei Ge/Hg. Ebenso ist der Wert des tolerablen Fehlers noch relativ groß (1.9 eV).
- \bar{p} -V-50 / Sb-K-Kante
V-50 hat einen Kernspin von $I=6$, was zur Hyperfeinstrukturaufspaltung führt. Außerdem liegt im Bereich der Sb-K-Kante neben der 10-9-Linie noch die 13-11-Linie von V-50.
- \bar{p} -Ne-20 / Sn-K-Kante
In der Kante erwartet man Struktur, da für metallisches Zinn mit s-p-Hybridisierung zu rechnen ist. Die ABA ist sehr klein. Falls der Verlauf der Kante sehr genau bekannt ist, kann dieser Fall für die Messung einer Übergangsenergie verwendet werden.
- \bar{p} -Ni-62 / Ag-K-Kante
Die ABA ist groß und die Ag-K-Kante zeigt Struktur. Die Screening-Korrektur ist im Vergleich mit ΔE groß. Dieser Fall ist deshalb nicht weiter interessant.
- \bar{p} -Ni-64 / Ag-K-Kante
Im Vergleich mit Ni-62 ist die ABA zwar niedriger. Die Struktur in der Kante und der große Beitrag der Screening-Korrektur (verglichen mit ΔE) zeigen, daß auch dieses Paar ein ungeeigneter Kandidat für eine Energiemessung ist.

- \bar{p} -Mg-24 / Ag-K-Kante

Die Korrekturen sind klein, dafür ist die ABA die größte von allen Kandidaten. Daher ist dieser Fall, auch wegen der Struktur in der Silberkante, nicht für die Energiemessung geeignet.

Aus dieser Darstellung wird deutlich, daß drei Kandidaten besonders vielversprechend sind. Es sind dies:

Ge 70	/	Hg-K-Kante
Ca 42	/	Sm-K-Kante
Ti 46	/	La-K-Kante

Alle drei Kandidatenpaare zeichnen sich durch eine kleine ABA, geringe Beiträge der Korrekturen und eine glatte Absorptionskante aus. Daneben ist jeweils der maximal zulässige Fehler groß. Darum stellen sie sehr gute Fälle für die Energiemessung dar.

Bei der bisherigen Auswahl der Kandidaten wurde immer darauf geachtet, daß der Einfluß von Störungen, die nicht genau berechnet werden können, wie z.B. die starke Wechselwirkung oder die Intensität der "inneren Übergänge", klein ist. Sollen jedoch die Störungen selbst gemessen werden, bieten sich zwei andere Kandidaten für Untersuchungen mit der Methode der kritischen Absorption an:

- Der Ne-20 5-4 Übergang ist durch die starke Wechselwirkung schwach verbreitert und liegt im Bereich der Dysprosium K-Kante. Mit der Kantenmethode könnte die Breite der Komponenten mit ca. 50% Genauigkeit abgeschätzt werden.
- Der Cl-37 7-6 Übergang hat eine ausgeprägte Hyperfeinstruktur. Die HFS kann zwar mit der Kantenmethode nicht aufgelöst werden, jedoch lassen sich aus den Intensitätsverhältnissen bei verschiedenen Dicken Aussagen über die Intensitätsverteilung der Komponenten machen. Damit können z.B. Kaskaden-Programme überprüft werden.

KAPITEL 5. SCHLUSSBEMERKUNGEN

Die Untersuchungen in dieser Arbeit legen nahe, daß die Berechnung der Übergangsenergie von antiprotonischen Atomen mit Hilfe des beschriebenen Programms PBAR bis zu einer Genauigkeit von weniger als 1 eV möglich ist (sehr leichte Kerne sind davon noch ausgenommen). Deshalb steht zunächst die Überprüfung der auf theoretischem Wege gewonnenen Resultate für die Übergangsenergie an einigen Fällen im Vordergrund. Die gegebenen Vorschläge für Messungen der Energie von antiprotonischen Röntgenstrahlen durch kritische Absorption an K-Kanten sind für eine solche Überprüfung in den Grenzen von 1 eV Genauigkeit geeignet. Die experimentellen Arbeiten wurden in der Zwischenzeit aufgenommen. Nach der Verifikation der Resultate des Programms PBAR können dann Untersuchungen z.B. über die Kernpolarisierbarkeit oder über die Existenz von langreichweitigen starken Potentialen ausgeführt werden.

Das auf diesem Wege gewonnene tiefere Verständnis aller Beiträge zu den Energien der antiprotonischen Röntgenübergänge eröffnet die Möglichkeit, einen genauen Wert für die Masse des Antiprotons zu bestimmen, wobei die Fehlergrenzen deutlich unter den bislang gültigen erwartet werden können. Voraussetzung hierfür ist jedoch die absolute Bestimmung der Energie der Kanten, wie sie z.B. durch die Anwendung von Synchrotronstrahlung und eines Monochromators ausgeführt werden kann. Dann wird es auch möglich, die Folgerung aus dem CPT-Theorem über die Gleichheit der Massen von Proton und Antiproton zu überprüfen.

ANHANG A. MAGNETISCHE HYPERFEINSTRUKTUR

In diesem Teil wird der Beitrag der Hyperfeinstruktur zur Bindungsenergie berechnet. Die Zahlen über den Gleichheitszeichen weisen auf die Nummer des Formelblattes hin, auf dem die Zwischenschritte näher erläutert werden.

Ausgehend von der Dirac-Gleichung mit dem Pauli-Term wird eine Eigenwertgleichung entwickelt.

$$[\not{p} - e\mathcal{A} + \frac{\kappa e}{4m} \sigma_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - m_{\text{red}}] \Psi = 0$$

$$\text{mit } \sigma_{\mu\nu} F^{\mu\nu} = -2i \vec{\alpha} \vec{E} + \vec{\Sigma} \vec{B}$$

=> Eigenwertgleichung

$$E \Psi = [\vec{\alpha} \vec{p} + \beta m_{\text{red}} + V - \frac{i\kappa e}{2m_p} \vec{\gamma} \vec{E} - e \vec{\alpha} \vec{A} + \frac{\kappa e}{2m_p} \gamma_0 \vec{\Sigma} \vec{B}] \Psi$$

die beiden letzten Terme führen zur Hyperfeinstruktur und werden störungstheoretisch behandelt.

$$- \langle n\kappa\mu | e \vec{\alpha} \vec{A} | n\kappa\mu \rangle$$

und

$$\langle n\kappa\mu | \frac{\kappa e}{2m_p} \gamma_0 \vec{\Sigma} \vec{B} | n\kappa\mu \rangle$$

FORMELBLATT A

$$- \langle n\kappa\mu | e^{\vec{\alpha}\vec{A}} | n\kappa\mu \rangle$$

$$= e \int \frac{d^3 r}{r^2} (G \langle \kappa\mu |^* , -iF \langle -\kappa\mu |^*) \begin{pmatrix} 0 & \vec{\alpha}\vec{A} \\ \vec{\alpha}\vec{A} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G & | \kappa\mu \rangle \\ iF & | -\kappa\mu \rangle \end{pmatrix}$$

$$= 2ie \int_0^\infty dr GF \int \langle \kappa\mu | \vec{\alpha}\vec{A} | -\kappa\mu \rangle d\Omega$$

$$(2) \quad = 2i \int_0^\infty dr FG \frac{1}{2r^2} C [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \frac{-\kappa}{\kappa^2 - \frac{1}{4}}$$

$$= [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \frac{\kappa}{\kappa^2 - \frac{1}{4}} \frac{4\pi g\alpha}{2m_p} \int_0^\infty dr FG \frac{1}{r^2} \int_0^r r_N^2 \mu(r_N) dr_N$$

$$(4) \quad = [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \frac{\kappa}{\kappa^2 - \frac{1}{4}} \frac{g}{2m_p Z} \int_0^\infty dr FG \frac{dV}{dr}$$

FORMELBLATT B

$$\langle n\kappa\mu | \frac{\kappa e}{2m_p} \chi_0 \vec{\Sigma} \vec{B} | n\kappa\mu \rangle$$

$$= \frac{e\kappa}{2m_p} \int \frac{d^3 r}{r^2} (G \langle \kappa\mu |^*, -iF \langle -\kappa\mu |^*) \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \vec{B} & 0 \\ 0 & -\vec{\sigma} \vec{B} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G & | & \kappa\mu \rangle \\ iF & | & -\kappa\mu \rangle \end{pmatrix}$$

$$= \frac{e\kappa}{2m_p} \int_0^\infty dr \int d\Omega [G^2 \langle \kappa\mu | \vec{\sigma} \vec{B} | \kappa\mu \rangle - F^2 \langle -\kappa\mu | \vec{\sigma} \vec{B} | -\kappa\mu \rangle]$$

$$(1) \quad = \frac{e\kappa}{2m_p} \int_0^\infty dr \int d\Omega [(F^2+G^2) \langle \kappa\mu | \vec{\sigma} \vec{B} | \kappa\mu \rangle - 2F^2 \langle \kappa\mu | \vec{\sigma} \vec{r} \vec{B} \vec{r} | \kappa\mu \rangle]$$

$$(5,6) \quad = \frac{\kappa}{2m_p} \int_0^\infty dr \frac{G}{2r^3} [F(F+1)-I(I+1)-J(J+1)] \frac{1}{\kappa^{2-\frac{1}{4}}} [(F^2 + G^2)(\kappa+1) - 2F^2]$$

$$= \frac{\kappa}{2m_p} \frac{4\pi g\alpha}{2m_p} [F(F+1)-I(I+1)-J(J+1)] \frac{1}{\kappa^{2-\frac{1}{4}}} \\ \times \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{1}{r^3} [G^2(\kappa+1) + 2F^2(\kappa-1)] \int_0^r r_N^2 \mu(r_N) dr_N$$

$$(7) \quad = \frac{\kappa}{2m_p} \frac{4\pi g\alpha}{2m_p} [F(F+1)-I(I+1)-J(J+1)] \frac{1}{\kappa^{2-\frac{1}{4}}} \frac{1}{2} m_r \int_0^\infty \frac{1}{r^2} FG \int_0^r r_N^2 \mu(r_N) dr_N$$

$$(4) \quad = \frac{\kappa}{2m_p} \frac{g}{2m_p} [F(F+1)-I(I+1)-J(J+1)] \frac{1}{\kappa^{2-\frac{1}{4}}} \frac{m_r}{Z} \int_0^\infty dr FG \frac{dV}{dr}$$

FORMELBLATT 0

$$\begin{aligned} |\kappa| &= j + 1/2 \\ \kappa^2 - 1/4 &= j(j+1) \\ \kappa &= 1(1+1) - j(j+1) - 1/4 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_1^{\rightarrow} |\kappa\mu\rangle &= \kappa |\kappa\mu\rangle + |\kappa\mu\rangle \\ \hat{\sigma}_1^{\leftarrow} |\kappa\mu\rangle &= - |-\kappa\mu\rangle \end{aligned}$$

$$N = L + 3r(Sr) - S \quad (*)$$

$$\langle IJFM | IN | IJFM \rangle = \frac{(*)}{2} [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \frac{L(L+1)}{J(J+1)}$$

$$\langle IJFM | LI | IJFM \rangle = \frac{(8)}{4} [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \frac{L(L+1) + J(J+1) - S(S+1)}{J(J+1)}$$

$$\langle IJFM | IS | IJFM \rangle = \frac{(8)}{4} [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \frac{S(S+1) + J(J+1) - L(L+1)}{J(J+1)}$$

(*) Vergleiche: (ZIM76) S. 63 ff

FORMELBLATT 1

$$\begin{aligned}
 & \langle -\kappa\mu | \vec{\sigma} \vec{B} | -\kappa\mu \rangle \\
 = & \langle \kappa\mu | \vec{\sigma} \vec{r} \vec{\sigma} \vec{B} \vec{\sigma} \vec{r} | \kappa\mu \rangle \\
 = & \langle \kappa\mu | \vec{\sigma} \vec{r} (\vec{B} \vec{r} + i \vec{\sigma} (\vec{B} \times \vec{r})) | \kappa\mu \rangle \\
 = & \langle \kappa\mu | \vec{\sigma} \vec{r} \vec{B} \vec{r} + i \vec{\sigma} \vec{r} \vec{\sigma} (\vec{B} \times \vec{r}) | \kappa\mu \rangle \\
 = & \langle \kappa\mu | \vec{\sigma} \vec{r} \vec{B} \vec{r} + i \vec{r} (\vec{B} \times \vec{r}) - \vec{\sigma} (\vec{r} \times (\vec{B} \times \vec{r})) | \kappa\mu \rangle \\
 & \qquad \qquad \qquad = 0 \\
 & \qquad \qquad \qquad \sigma_i (\vec{r} \times (\vec{B} \times \vec{r})) \\
 = & \epsilon_{ijk} r_j \epsilon_{klm} B_l r_m \sigma_i \\
 = & (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{jl} \delta_{im}) \sigma_i r_j B_l r_m \\
 = & \vec{\sigma} \vec{B} r^2 - \vec{B} \vec{r} \vec{\sigma} \vec{r} \\
 = & \langle \kappa\mu | \vec{\sigma} \vec{r} \vec{B} \vec{r} - \vec{\sigma} \vec{B} + \vec{\sigma} \vec{r} \vec{B} \vec{r} | \kappa\mu \rangle \\
 = & 2 \langle \kappa\mu | \vec{\sigma} \vec{r} \vec{B} \vec{r} | \kappa\mu \rangle - \langle \kappa\mu | \vec{\sigma} \vec{B} | \kappa\mu \rangle
 \end{aligned}$$

Dabei wurde benutzt:

$$\begin{aligned}
 \vec{\sigma} \vec{r} | \kappa\mu \rangle &= - | -\kappa\mu \rangle \\
 \vec{\sigma} \vec{A} \vec{\sigma} \vec{B} &= \vec{A} \vec{B} + i \vec{\sigma} (\vec{A} \times \vec{B})
 \end{aligned}$$

FORMELBLATT 2

$$\langle \kappa\mu | \vec{\sigma} e^{\vec{A}} | -\kappa\mu \rangle$$

$$\begin{aligned} (3) &= \frac{4\pi g\alpha}{2m_p} \int_0^\infty r_N^2 \mu(r_N) dr_N \frac{1}{r^2} \langle \kappa\mu | \vec{\sigma}(\vec{I} \times \vec{r}) | -\kappa\mu \rangle \\ &= -C \frac{1}{r^2} \langle \kappa\mu | \vec{\sigma}(\vec{I} \times \vec{r}) \vec{\sigma} \vec{r} | \kappa\mu \rangle \\ &= -C \frac{1}{r^2} \langle \kappa\mu | \vec{r}(\vec{I} \times \vec{r}) + i\vec{\sigma} \vec{r} \times (\vec{r} \times \vec{I}) | \kappa\mu \rangle \\ &= -\frac{iC}{r^2} \langle \kappa\mu | -\vec{\sigma} \vec{I} + \vec{\sigma} \vec{r} \vec{r} \vec{I} | \kappa\mu \rangle \\ &= 2 \frac{iC}{r^2} (\langle \kappa\mu | SI | \kappa\mu \rangle - \langle \kappa\mu | Sr Ir | \kappa\mu \rangle) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} N &= L + 3 r(Sr) - S \\ r(Sr) &= 1/3 (N - L + S) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= 2 C \frac{i}{r^2} (\langle \kappa\mu | SI | \kappa\mu \rangle - \frac{1}{3} \langle \kappa\mu | IN | \kappa\mu \rangle + \frac{1}{3} \langle \kappa\mu | IL | \kappa\mu \rangle - \frac{1}{3} \langle \kappa\mu | IS | \kappa\mu \rangle) \\ &= 2 C \frac{i}{r^2} \frac{1}{3} \{ \langle \kappa\mu | 2 SI | \kappa\mu \rangle - \langle \kappa\mu | IN | \kappa\mu \rangle + \langle \kappa\mu | IL | \kappa\mu \rangle \} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (0) &= \frac{2i}{3r^2} C \frac{1}{4} [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \frac{1}{J(J+1)} \{S(S+1) + 3J(J+1) - 3L(L+1)\} \\ &= \frac{i}{2r^2} C [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \frac{1}{J(J+1)} \{J(J+1) - L(L+1) + \frac{1}{4}\} \end{aligned}$$

$${}^{(0)} = \frac{i}{2r^2} C [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \frac{-\kappa}{\kappa^2 - \frac{1}{4}}$$

FORMELBLATT 3

$$e\vec{A} = \frac{\vec{m} \times \vec{r}}{r^3} \quad ([JAC81] \text{ Formel 5.55})$$

mit

$$\vec{m} = \frac{4\pi g\alpha}{2 m_p} \vec{I} \int_0^r r_N \mu(r_N) dr_N$$
$$e\vec{B} = \frac{3\vec{r}(\vec{m}\vec{r}) - \vec{m}}{r^3} + \frac{8\pi}{3} \vec{m} \delta(r) \quad (\text{Jackson 5.56})$$

Da S-Niveaus bei antiprotonischen Atomen nicht interessant sind, wird die Delta-Funktion weggelassen.

$$e\vec{B} = \frac{4\pi g\alpha}{2 m_p} \int_0^r r_N \mu(r_N) dr_N \left(\frac{3\vec{r}(\vec{r}\vec{I}) - \vec{I}}{r^3} \right)$$

Als Konstante C wird definiert:

$$C = \frac{4\pi g\alpha}{2 m_p} \int_0^r r_N \mu(r_N) dr_n$$

FORMELBLATT 4

Punktkernelnäherung:

$$\mu(r_N) = \delta(r_N)$$

$$V(r) = -Z\alpha/r$$

$$dV(r)/dr = Z\alpha/r^2$$

$$\Rightarrow \frac{1}{r^2} \int_0^r r_N^2 \mu(r_N) dr_N$$

$$= \frac{1}{r^2} \frac{1}{4\pi}$$

$$= \frac{1}{Z\alpha} \frac{dV}{dr}$$

FORMELBLATT 5

$$\langle \kappa \mu | \vec{\sigma} \vec{B} | \kappa \mu \rangle$$

$$(3) \\ = C \langle \kappa \mu | \frac{3(\vec{\sigma} \vec{r} \vec{r} \vec{I}) - \vec{\sigma} \vec{I}}{r^3} | \kappa \mu \rangle$$

$$= 2C \frac{1}{r^3} \langle \kappa \mu | 3(Sr Ir) - SI | \kappa \mu \rangle$$

$$(0) \\ = 2 \frac{C}{r^3} \{ \langle \kappa \mu | NI | \kappa \mu \rangle - \langle \kappa \mu | LI | \kappa \mu \rangle \}$$

$$(0) \\ = \frac{C}{2r^3} [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \frac{1}{J(J+1)} \{L(L+1) - J(J+1) + S(S+1)\}$$

$$(0) \\ = \frac{C}{2r^3} [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \frac{\kappa+1}{\kappa^2 - \frac{1}{4}}$$

FORMELBLATT 6

$$\langle \kappa\mu | \overset{\rightarrow}{\sigma} \vec{r} e^{\vec{B} \cdot \vec{r}} | \kappa\mu \rangle$$

$$(3) = C \langle \kappa\mu | \overset{\rightarrow}{\sigma} \vec{r} \left\{ \vec{r} \left(\frac{3\vec{r}(\vec{r} \cdot \vec{I})}{r^3} - \vec{I} \right) \right\} | \kappa\mu \rangle$$

$$= \frac{2C}{r^3} \langle \kappa\mu | S r 2 I r | \kappa\mu \rangle$$

$$= \frac{4C}{r^3} \langle \kappa\mu | S r I r | \kappa\mu \rangle$$

$$(0) = \frac{4C}{r^3} \{ \langle \kappa\mu | N I | \kappa\mu \rangle - \langle \kappa\mu | L I | \kappa\mu \rangle + \langle \kappa\mu | S I | \kappa\mu \rangle \}$$

$$(0) = \frac{C}{3r^3} [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \frac{1}{J(J+1)} \{ 2 S(S+1) \}$$

$$(0) = \frac{C}{2r^3} [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \frac{1}{\kappa^2 - \frac{1}{4}}$$

FORMELBLATT 7

Umformung des Integrals über $G^2(1+\kappa)+F^2(1-\kappa)$ in ein Integral über das Produkt der Radialwellenfunktionen FG . Ausgangspunkt sind die gekoppelten Differentialgleichungen der Radialkomponenten:

$$\frac{d}{dr} G + \frac{\kappa}{r} G - (m_r + E - V)F = 0$$

$$\frac{d}{dr} F - \frac{\kappa}{r} F - (m_r + E - V)G = 0$$

Man führt die Substitution durch:

$$g = G/r$$

$$f = F/r$$

Die Radial-Gleichung lautet dann:

$$\frac{d}{dr} g = -(1 + \kappa) \frac{g}{r} + (m_r + E - V) f$$

$$\frac{d}{dr} f = -(1 - \kappa) \frac{g}{r} + (m_r - E + V) g$$

Integration der Produkte gg' und ff' nach dem Ort r ergibt:

$$(g' = dg/dr)$$

$$\int_0^{\infty} dr g'g = \int_0^{\infty} dr -(1 + \kappa) \frac{g^2}{r} + (m_r + E - V) fg = \frac{1}{2} g^2 \Big|_0^{\infty} = 0$$

$$\int_0^{\infty} dr f'f = \int_0^{\infty} dr -(1 - \kappa) \frac{g^2}{r} + (m_r - E + V) fg = 0$$

Diese zwei Integrale werden summiert:

$$\int dr (1 + \kappa) \frac{g^2}{r} + (1 + \kappa) \frac{f^2}{r} = \int dr 2m_r fg$$

Nach erneuter Durchführung der o.a. Substitution erhält man die Formel:

$$\int dr \frac{1}{r^3} [G^2 (1 + \kappa) + F^2 (1 - \kappa)] = \int dr \frac{2}{r^2} m_r FG$$

FORMELBLATT 8

$$\langle IJFM | LI | IJFM \rangle$$

Die Auswertung dieses Matrixelementes beschränkt sich auf die Reduktion auf einfachere Matrixelemente und das Auswerten von 6j-Symbolen.

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{\sqrt{(2F+1)}} \langle IJF | LI | IJF \rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{(2F+1)}} (-1)^{I+J+F} \begin{pmatrix} I & J & F \\ J & I & 1 \end{pmatrix} \langle I | I | I \rangle \langle J | L | J \rangle \\
 &= (-1)^{I+J+F} (-1)^{I+J+F+1} \frac{1}{2} \frac{I(I+1) + J(J+1) - F(F+1)}{\sqrt{[I(I+1)(2I+1)] J(J+1)(2J+1)}} \\
 &\quad \times \sqrt{[I(I+1)(2I+1)]} \langle SLJ | L | SLJ \rangle \\
 &= \frac{1}{2} \frac{I(I+1) + J(J+1) - F(F+1)}{\sqrt{[J(J+1)(2J+1)]}} (-1)^{S+L+J+1} (2J+1) \begin{pmatrix} J & L & S \\ L & J & 1 \end{pmatrix} \langle L | L | L \rangle \\
 &= \frac{1}{2} \frac{I(I+1) + J(J+1) - F(F+1)}{\sqrt{[J(J+1)(2J+1)]}} (-1)^{S+L+J+1} (2J+1) \langle L | L | L \rangle \\
 &\quad \times (-1)^{S+L+J+1} \frac{1}{2} \frac{J(J+1) + L(L+1) - S(S+1)}{\sqrt{[J(J+1)(2J+1)] L(L+1)(2L+1)}} \\
 &= \frac{1}{4} [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \frac{J(J+1) + L(L+1) - S(S+1)}{J(J+1)}
 \end{aligned}$$

$$\langle IJFM | S I | IJFM \rangle$$

Zur Auswertung dieses Matrixelementes muß man nur L und S zu dem vorher ausgewerteten Element vertauschen.

$$= \frac{1}{4} [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{J(J+1)}$$

ANHANG B. TABELLE DER KANTEN UND EMISSIONSLINIEN

Die folgende Tabelle zeigt alle gefundenen Paare von antiprotonischen Emissionslinien und K-Absorptionskanten in einem Energiebereich von

$$-10 \text{ eV} < E_K - E_X < 10 \text{ eV}$$

Es wurden jeweils nur die zirkularen Übergänge mit $l_f = n_f - 1$ berücksichtigt. Das Plus- oder Minuszeichen bei der Hauptquantenzahl n in der Tabelle gibt an, welche Feinstrukturkomponente betrachtet wird:

$$\begin{aligned} + : & \quad j = l + \frac{1}{2} \\ - : & \quad j = l - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

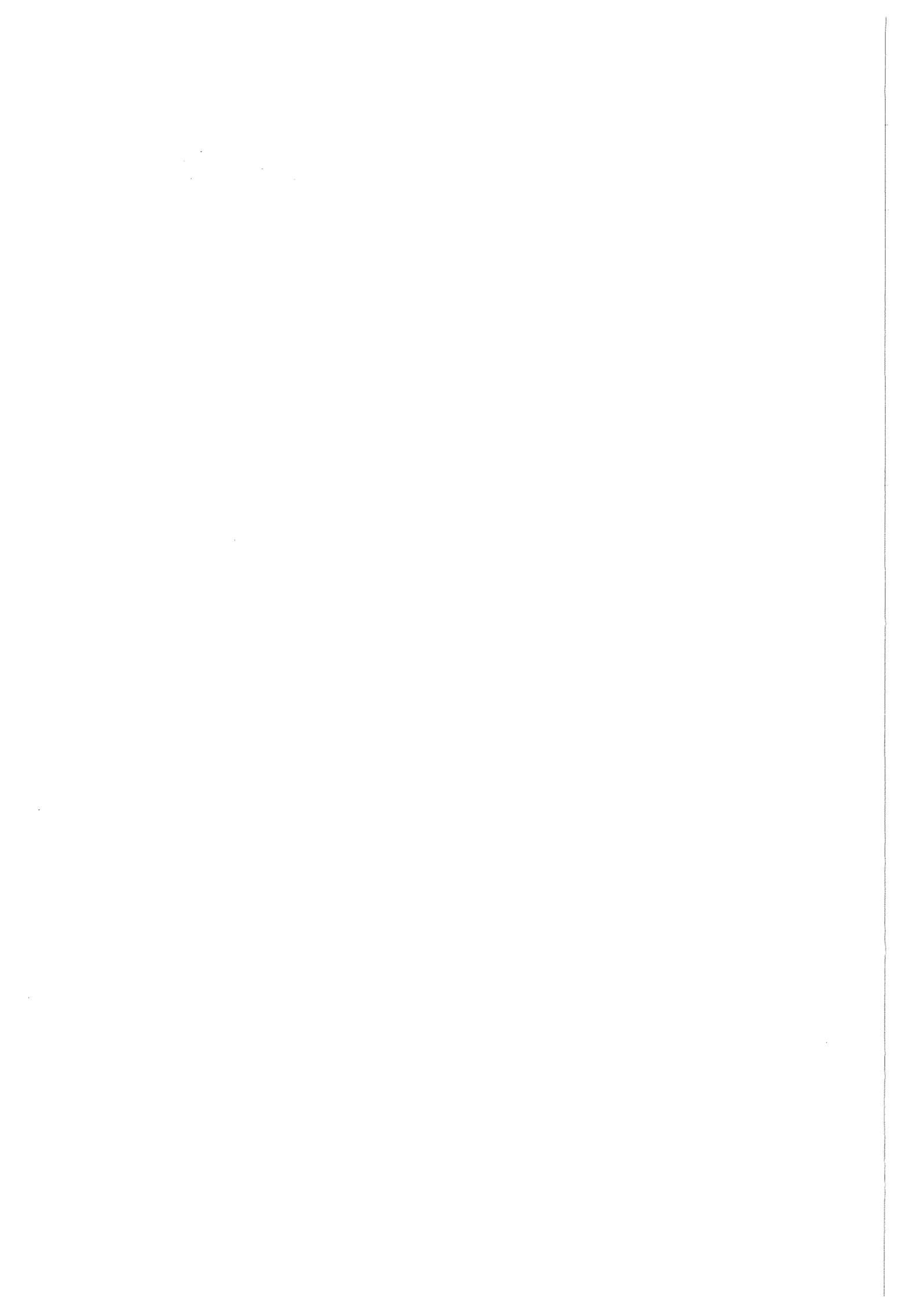
Kante	Energie keV	Breite eV	Kern	$E_K - E_X$ eV	n_i	-	n_f
92 U	115.62	96.1	204 Pb	-9.47	19	-	17 -
			208 Pb	-20.46	19	-	17 -
82 Pb	88.07	60.4	142 Nd	-0.44	17	+	15 +
			143 Nd	-4.79	17	+	15 +
			144 Nd	-9.09	17	+	15 +
			203 Tl	-25.45	16	+	15 +
80 Hg	83.08	54.6	70 Ge	9.64	9	+	8 +
			138 La	-26.25	13	+	12 +
79 Au	80.72	52.0	107 Ag	21.00	15	+	13 +
			107 Ag	-17.10	15	-	13 -
			109 Ag	7.14	15	+	13 +
78 Pt	78.38	49.3	152 Sm	8.70	18	-	16 -
			154 Sm	1.97	18	-	16 -

77 Ir	76.125	46.8	100 Mo	15.82	11 - - 10 -
76 Os	73.884	44.4	17 O	-10.05	4 - - 3 -
74 W	69.511	39.9	174 Hf	-13.53	16 + - 15 +
73 Ta	67.403	37.7	162 Er	1.42	20 - - 18 -
			164 Er	-3.68	20 - - 18 -
			166 Er	-8.67	20 - - 18 -
			167 Er	14.22	20 + - 18 +
			167 Er	-11.12	20 - - 18 -
			170 Er	7.05	20 + - 18 +
70 Yb	61.304	31.9	93 Nb	1.68	15 + - 13 +
			115 In	6.32	13 + - 12 +
69 Tm	59.340	30.1	70 Ge	-8.95	13 - - 11 -
			124 Xe	3.62	18 - - 16 -
			126 Xe	-4.00	18 - - 16 -
			128 Xe	8.55	18 + - 16 +
			128 Xe	-11.39	18 - - 16 -
			129 Xe	4.94	18 + - 16 +
			130 Xe	1.39	18 + - 16 +
			131 Xe	-2.11	18 + - 16 +
			132 Xe	-5.55	18 + - 16 +
			66 Dy	53.794	25.2
20 Ne	-26.69	5 - - 4 -			
184 Os	20.43	18 + - 17 +			
184 Os	-17.82	18 - - 17 -			
190 Os	11.15	18 + - 17 +			
192 Os	8.18	18 + - 17 +			
65 Tb	52.003	23.8	37 Cl	-10.85	7 + - 6 +
64 Gd	50.234	22.3	34 S	2.95	9 - - 7 -

63 Eu	48.52	21.0	174 Hf	-6.40	23 + - 21 +
			176 Hf	-9.60	23 + - 21 +
62 Sm	46.850	19.7	116 Cd	9.65	18 - - 16 -
			42 Ca	-6.65	8 + - 7 +
			21 Ne	2.27	7 + - 5 +
59 Pr	42.002	16.2	165 Ho	-0.08	23 + - 21 +
			165 Ho	-9.76	23 - - 21 -
			138 Ba	14.61	16 - - 15 -
58 Ce	40.453	15.1	133 Cs	-12.40	16 - - 15 -
57 La	38.934	14.1	90 Zr	10.44	17 + - 15 +
			209 Bi	-3.01	27 + - 25 +
			46 Ti	0.42	9 + - 8 +
56 Ba	37.453	13.2	141 Pr	5.89	22 - - 20 -
55 Cs	35.988	12.3	63 Cu	-9.22	11 + - 10 +
			41 K	-5.34	11 + - 9 +
54 Xe	34.582	11.4	103 Rh	-4.44	19 + - 17 +
53 I	33.167	10.6	50 Cr	6.58	13 + - 11 +
			50 Cr	-0.06	13 - - 11 -
51 Sb	30.483	9.16	51 V	-4.50	10 + - 9 +
			50 V	7.34	10 + - 9 +
			50 V	-5.86	10 - - 9 -
			63 Cu	-5.40	15 + - 13 +
			190 Pt	1.48	22 - - 21 -
			192 Pt	-0.20	22 - - 21 -
			194 Pt	-1.85	22 - - 21 -
			195 Pt	9.46	22 + - 21 +

			195 Pt	-2.67	22 - - 21 -
			196 Pt	8.65	22 + - 21 +
			196 Pt	-3.47	22 - - 21 -
			198 Pt	7.07	22 + - 21 +
			198 Pt	-5.05	22 - - 21 -
50 Sn	29.193	8.49	20 Ne	4.22	6 - - 5 -
49 In	27.930	7.91	25 Mg	-5.88	9 + - 7 +
			11 B	-4.44	4 + - 3 +
			121 Sb	-2.54	22 + - 20 +
			121 Sb	-6.85	22 - - 20 -
			123 Sb	-6.32	22 + - 20 +
48 Cd	26.714	7.28	162 Er	4.10	21 - - 20 -
			164 Er	2.08	21 - - 20 -
			166 Er	9.43	21 + - 20 +
			166 Er	0.10	21 - - 20 -
			167 Er	8.46	21 + - 20 +
			167 Er	-0.87	21 - - 20 -
			168 Er	7.50	21 + - 20 +
			168 Er	-1.83	21 - - 20 -
			170 Er	5.62	21 + - 20 +
			170 Er	-3.71	21 - - 20 -
47 Ag	25.519	6.75	62 Ni	8.54	12 - - 11 -
			64 Ni	4.74	12 + - 11 +
			64 Ni	-4.25	12 - - 11 -
			24 Mg	-6.12	7 + - 6 +
			138 La	-1.75	19 + - 18 +
			139 La	-3.09	19 + - 18 +
44 Ru	22.12	5.33	184 Os	4.27	24 + - 23 +
			184 Os	-2.09	24 - - 23 -
			186 Os	2.96	24 + - 23 +
			186 Os	-3.40	24 - - 23 -

187 Os	2.32	24 + - 23 +
187 Os	-4.04	24 - - 23 -
188 Os	1.69	24 + - 23 +
188 Os	-4.67	24 - - 23 -
189 Os	1.06	24 + - 23 +
189 Os	-5.30	24 - - 23 -
190 Os	0.43	24 + - 23 +
190 Os	-5.93	24 - - 23 -
192 Os	-0.79	24 + - 23 +
192 Os	-7.15	24 - - 23 -



VERZEICHNIS DER SYMBOLE

alle Rechnungen in natürlichen Einheiten: $\hbar = c = 1$

m_r : reduzierte Masse

m_p : Masse des Protons

m_N : Masse des Kerns

κ_p : anomales magnetisches Moment des Protons

α : Feinstrukturkonstante

$\vec{\sigma}$: Pauli - Spinmatrizen

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}$$

$$\vec{\gamma} = \beta \vec{\alpha}$$

$$\gamma_0 = \beta$$

$$\gamma^\mu = (\gamma_0, \vec{\gamma})$$

$$\not{p} = \gamma^\mu p_\mu \quad ; \quad p^\mu = (E, \vec{p})$$

$$\not{A} = \gamma^\mu A_\mu \quad ; \quad A^\mu = (\Phi, \vec{A})$$



LITERATURVERZEICHNIS

- ACH62 A.I.Achieser, W.B.Berestezki
Quantenelektrodynamik, VEB Edition, Leipzig, (1962) p.108
- AGA70 B.K.Agarwal, L.P.Verma
J. Phys. C3, 535 (1970)
- AGA76 B.K.Agarwal, C.B.Bhargava, A.N.Vishnoi, V.P.Seth
J. Phys. Chem. Sol 37, 725 (1976)
- AGA79 B.K.Agarwal
X-Ray Spectroscopy, Springer Series in Optical Sciences,
(1979) p.15
- AHR75 J.Ahrens, H.Borchert, K.H.Czock, H.B.Eppler, H.Gimm,
H.Gundrum, M.Kröning, P.Riehn, G.Sita Rau, A.Zieger, B.Ziegler
Nuc. Phys. A251, 479 (1975)
- AHR76 J.Ahrens, H.Gimm, A.Zieger, B.Ziegler
Il Nuovo Cimento 32a, 403 (1976)
- ARA74 J.Arafune
Phys. Rev. Lett. 32, 560 (1974)
- BOR82 E.Borie, G.Rinker
Rev. Mod. Phys 54, 67 (1982)

- BOR83 E.Borie
Phys. Rev. A28, 555 (1983)
- BRO75 L.Brown, R.Cahn, L.McLerran,
Phys. Rev. D12, 609 (1975)
- CAM52 M.Camac, A.D.McGuire, J.B.Platt, H.J.Schulte
Phys. Rev. 88, 134 (1952)
- CAU78 Y.Cauchois, C.Senemaud
Wavelengths of X-ray emission lines and absorption edges
International tables of selected constants, vol.18
Pergamon Press Oxford et.al., (1978)
- DAN79 H.Daniel
Z. Phys. A291, 29 (1979)
- DEV60 S.Devons, G.Gidal, L.M.Ledermann, G.Shapiro,
Phys. Rev. Lett. 5, 330 (1960)
- DIM71 J.O.Dimmock
Solid State Phys. 26, 103 (1971)
- ERI72 T.E.O.Ericson, J.Hüfner
Nuc. Phys. B47, 205 (1972)
- FAI75 R.W.Fairchild
Ph.D. thesis, Cornell Univ., (1975)

- GOL70 V.I.Goldanski, O.A.Karpukhin, A.V.Kutsenko, V.V.Pavlovskaya
Nuc. Phys. 18, 473 (1960)
- HUA75 E.Hu, Y.Asano, M.Y.Chen, S.C.Cheng., G.Dugar, L.Lidofsky,
W.Patton, C.S.Wu, V.Hughes, D.Lu
Nuc. Phys. A254, 403 (1972)
- JAC81 J.D.Jackson
Klassische Elektrodynamik, Walter de Gruyter, Berlin (1981)
p.211
- KÄL55 G.Källén, A.Sabry
K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Med. 29,
no. 17 (1955)
- KRA79 M.O.Krause, J.H.Oliver,
J. Phys. Chem. Ref. Data 8, 332 (1979)
- LUD80 D.C.Lu, L.Delker, G.Dugan, C.S.Wu, A.J.Caffrey, Y.T.Cheng,
Y.K.Lee
Phys. Rev. Lett. 45, 1066 (1980)
- LUM81 G.K.Lum, C.E.Wiegand, E.G.Kessler, R.D.Deslattes, L.Jacobs,
W.Schwitz, R.Seki
Phys. Rev. D23, 2522 (1981)
- PON73 L.I.Ponomarev
Ann. Rev. of Nucl. Sci. 23, 395 (1973)

- POT84 H.Poth
Physics with Antiprotonic Atoms
U.Gastaldi, R.Klapisch [eds.]
Proc. of a Workshop on Physics at LEAR with Low-Energy Cooled
Antiprotons,
held at Erice, May 9-16, 1982
Plenum Press, New York, (1984) p.567
- ROB77 P.Roberson, T.King, R.Kunselmann, J.Miller
Phys. Rev. C16, 1945 (1977)
- ROB78 B.L.Roberts
Phys. Rev. D17, 358 (1978)
- SCH63 K.Schnopper
Phys. Rev. 131, 2558 (1983)
- STO70 E.Storm, H.I.Israeli
Nuc. Data A7, 565 (1970)
- TIC48 H.K.Ticho
Phys. Rev. 48, 55 (1948)
- TOD73 I.T.Todorov
in: Properties of Fundamental Interactions, Part C, vol.9,
(1973) p.953
- UEH35 E.A.Uehling
Phys. Rev. 48, 55 (1935)

YEH67 H.C.Yeh, L.V.Azaroff
J. Appl. Phys. 38, 4034 (1967)

ZIM76 P.Zimmermann
Eine Einführung in die Theorie der Atomspektren,
B.I.-Wissenschaftsverlag, Mannheim (1976) p.63