
Coulomb-Explosion in pionischem Kohlenstoff

Messungen im Rahmen des Experiments

R-98-01 am PSI

Diplomarbeit

zur Erlangung des akademischen Grades

„Magister der Naturwissenschaften“

an der Fakultät für Naturwissenschaft und Mathematik
der Universität Wien.

Eingereicht von:

Alexander Gruber

Institut für Mittelenergiephysik
der Österreichischen Akademie der Wissenschaften

WIEN, SEPTEMBER 2004

Mein Lieblingszitat:

༄༅། མཁས་པ་སློབ་པའི་དུས་ན་སྤྲུག།
བདེ་བ་འདོད་ལ་མཁས་མི་སྲིད།།
བདེ་བ་རྒྱུ་ལ་ཆགས་པ་དེས།།
ཆེན་པོའི་བདེ་བ་ཐོབ་མི་སྲིད།།

(Aus dem Werk Sakya Legshe (ས་སྐུ་ལེགས་བཤད་) von Sakya Pandita Künga Gyaltzen (ས་སྐུ་
པཎ་ཌེ་ཏ་ཀུན་དགའ་རྒྱལ་མཚན་) (1182–1251)¹)

Ungefähre Übersetzung:

Wer Meister werden will, muß viel lernen.
Jener, der Zerstreuung sucht, kann kein Weiser werden.
Wer dem kleinen Glück anhaftet,
kann das Große nie erreichen.

© 2004

Diese Arbeit wurde gesetzt mit L^AT_EX 2_ε und cTibT_EX ohne Verwendung von Klebstoff und Schere.

¹Jahreszahlen aus: Shakabpa, Tsepon W.D. „Tibet—A Political History“; Yale Univ. Press, 1967

Zusammenfassung

Diese Arbeit zur Coulomb-Explosion in pionischen Atomen wurde im Rahmen des Experiments R-98-01 am Paul Scherrer Institut (PSI) in der Schweiz durchgeführt, welches die hadronische Verschiebung ε_{1s} und Verbreiterung Γ_{1s} des Grundzustandes in pionischem Wasserstoff mit bisher nicht erreichter Präzision (0,2% bzw. 1%) über die charakteristische Röntgenstrahlung ausgewählter Übergänge bestimmen wird.

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit einem Effekt, der Coulomb-Explosion, der während der Kaskade exotischer Teilchen in Molekülen auftritt. Dabei bezeichnet Coulomb-Explosion das rasche Aufbrechen der Bindung eines Moleküls nach dessen Ionisation. Durch die explosionsartig vergrößerte Geschwindigkeit der Fragmente werden die Röntgenlinien der aus den Molekülen hervorgehenden exotischen Atome verbreitert und ihre Intensitäten verändert.

Dieser Effekt wurde bisher nur einmal an exotischen Atomen gemessen ($\mu^{-16}\text{O}$ und $\pi^{-14}\text{N}$), da die Energieauflösung früherer Spektrometer nicht ausreichte, um diese Verbreiterung aufzulösen. Mit dem im Experiment R-98-01 verwendeten Bragg-Kristallspektrometer kann dieser Effekt nicht nur aufgelöst, sondern auch quantitativ bestimmt werden.

Die in dieser Arbeit beschriebenen Messungen beruhen auf einem Vergleich der Breite des radiativen Übergangs $\pi^{-12}\text{C}_{(5g \rightarrow 4f)}$ aus Methan (CH_4), welches zur Bestimmung der Antwortfunktion des Spektrometers diente, mit der Breite desselben Übergangs aus Azetylen (C_2H_2).

Aus diesem Vergleich der pionischen Kaskade in CH_4 und in C_2H_2 geht hervor, daß in C_2H_2 die $\text{C} \equiv \text{C}$ -Bindung durch Coulomb-Explosion aufbricht. Davor haben beide Kohlenstoffatome jeweils 1 bis 2 Elektronen durch das eingefangene Pion verloren. Die durch die Explosion verursachte erhöhte kinetische Energie (12,0 eV) des Fragments mit dem eingefangenen Pion verursacht einerseits eine Dopplerverbreiterung um 7% FWHM mit einem Doppleranteil im Linienprofil der (5 \rightarrow 4)-Röntgenübergänge von 271 meV Breite. Andererseits verursacht diese erhöhte Geschwindigkeit ($13,8 \cdot 10^3 \frac{\text{m}}{\text{s}}$) electron-refilling durch Stöße mit Nachbarmolekülen während der Lebensdauer des Niveaus $n_\pi = 5$ in $\pi^- \text{C}$ (mittlere Zeit zwischen zwei Stößen 294 fs). Dies erklärt die früher beobachteten druckabhängigen Effekte in myonischem Kohlenstoff und anderen Gasen als Folge des externen Auger-Effekts.

Entgegen der früheren Annahme wurden auch in CH_4 Anzeichen einer Dopplerverbreiterung der Spektrallinien gefunden. Dies wird durch später erfolgte Messungen der Antwortfunktion des Spektrometers mit heliumähnlichem Ar^{16+} bestätigt.

Aufgrund der im Experiment beobachteten potentiellen Energie des Moleküls C_2H_2 vor der Explosion (24,3 eV) wird davon ausgegangen, daß die Coulomb-Explosion sofort bei einem gegenseitigen Abstand der Kohlenstoff-Kerne von $1,203 \text{ \AA}$ stattfindet (Bindungslänge der $\text{C} \equiv \text{C}$ -Bindung in C_2H_2 im Gleichgewicht). Damit kann als Erklärung der Coulomb-Explosion bei exotischen Atomen der bei der laserinduzierten Coulomb-Explosion beobachtete zweistufige Prozeß, bei dem die Explosion des Moleküls erst bei einem gegenseitigen Abstand der Kerne von rund $4,5 \text{ \AA}$ erfolgt, ausgeschlossen werden.

Abstract

This work about the Coulomb-Explosion in pionic atoms was carried out within the framework of the experiment R-98-01 at the Paul Scherrer Institut (PSI) in Switzerland. The experiment R-98-01 will determine the hadronic shift ε_{1s} and width γ_{1s} of the ground state in pionic hydrogen with unprecedented precision (0.2% and 1%) by measurement of characteristic X-rays of selected transitions.

This work deals with an effect, the Coulomb-Explosion, which arises during the cascade of exotic particles in molecules. Coulomb-Explosion denotes the rapid break-off of the bonds of a molecule after its ionization. The X-ray lines of the exotic atoms coming out from the molecules are broadened by the explosively increased speed of the fragments and their intensities are changed.

So far this effect has been measured only once on exotic atoms ($\mu^{-16}\text{O}$ and $\pi^{-14}\text{N}$), because the energy resolution of former spectrometers was not sufficient enough to resolve this broadening. With the Bragg-crystal spectrometer used in the experiment R-98-01 the Coulomb-Explosion can not only be dissolved, but also determined quantitatively.

The measurements, which are described in this work, are based on a comparison of the width of the radiative transition $\pi^{-12}\text{C}_{(5g \rightarrow 4f)}$ from methane (CH_4), which was used for extracting the response function of the spectrometer, with the width of the same transition from acetylene (C_2H_2).

From this comparison of the pionic cascade in CH_4 and in C_2H_2 it follows that in C_2H_2 the $\text{C} \equiv \text{C}$ bond breaks up by Coulomb-Explosion. Before that, each carbon atom loses 1 to 2 electrons due to the captured pion. The kinetic energy (12.0 eV) of the fragment with the captured pion, which increases due to the explosion, causes on the one hand a Doppler broadening of around 7% FWHM with a Doppler-box in the profile of the ($5 \rightarrow 4$) X-ray transitions with a width of 271 meV. On the other hand this increased speed ($13.8 \cdot 10^3 \frac{\text{m}}{\text{s}}$) causes electron-refilling during the life time of the level $n_\pi = 5$ in $\pi^- \text{C}$ due to collisions with neighboring molecules (average time between two collisions 294 fs). This explains pressure-dependent effects in muonic carbon and other gases, which have been observed before, as a consequence of the external Auger-effect.

Also in CH_4 signs of a Doppler broadening of the spectral lines were found, contrary to earlier assumptions. This is corroborated by measurements of the response function of the spectrometer with helium-like Ar^{16+} , which were made at a later time.

Due to the potential energy of the molecule before the explosion (24.3 eV), which is observed in the experiment, it is assumed that the Coulomb-Explosion takes place immediately at a distance of the carbon nuclei from each other of 1,203 Å (equilibrium bonding length of the $\text{C} \equiv \text{C}$ bond in C_2H_2). Thus the two-stage process, which is observed in laser-induced Coulomb-Explosion, can be excluded as an explanation for the Coulomb-Explosion in exotic atoms. In the laser-induced case the explosion of the molecule takes place at a mutual distance of the nuclei of approximately 4.5 Å.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Exotische Atome in der heutigen Forschung	1
1.1.1	Forschung mit exotischen Atomen	2
1.1.2	Hadronische Atome	3
1.2	Coulomb-Explosion	4
1.2.1	Coulomb-Explosion allgemein	4
1.2.2	Untersuchung der pioninduzierten Coulomb-Explosion	5
2	Physikalische Grundlagen	7
2.1	Theorie der exotischen Atome	7
2.1.1	Exotische Atome im Bohr'schen Atommodell	7
2.1.2	Starke Wechselwirkung in hadronischen Atomen	8
2.1.3	Ziel des Experiments R-98-01	10
2.2	Abbremsung und Coulomb-Einfang von Pionen	12
2.2.1	Ablauf	12
2.2.2	Theorien des Einfangs	13
2.2.3	Einfang in Kohlenwasserstoffen	13
2.3	Die elektromagnetische Kaskade in exotischen Atomen	15
2.3.1	Die Kaskade im Allgemeinen	15
2.3.2	Die Kaskade für Atome mit $Z > 2$	17
2.4	Coulomb-Explosion	23
2.4.1	Coulomb-Explosion in Kohlenwasserstoffen	23
2.4.2	Auswirkungen der Coulomb-Explosion	24
2.5	Coulomb-Explosion durch andere Anregungsverfahren	27
2.5.1	Laserinduzierte Coulomb-Explosion	27
2.5.2	Coulomb-Explosion durch Ionenbeschuß	29
3	Experimentaufbau	31
3.1	Experimentkomponenten	31
3.2	Pionen- und Myonenproduktion	32
3.3	Die Zyklotronfalle	34
3.3.1	Aufbau der Zyklotronfalle	34
3.3.2	Einstellungen	37
3.4	Das Target	38

3.4.1	Aufbau der Targetzelle	38
3.4.2	Targettisch, Gassystem und Kryostat	42
3.5	Das Kristallspektrometer	44
3.5.1	Prinzip	44
3.5.2	Kristalle und mechanischer Aufbau	45
3.6	Das Detektorsystem	48
3.6.1	Funktionsweise von CCDs	48
3.6.2	Der verwendete Detektor	51
4	Experimentdurchführung	54
4.1	Einstellung der Experimentkomponenten	54
4.1.1	Führung des Pionenstrahls	54
4.1.2	Optimierung der Zyklotronfalle	54
4.1.3	Vorbereiten des Gastargets	54
4.1.4	Einstellung des Spektrometers	56
4.1.5	Bragg-Kristalle	56
4.1.6	Detektorsystem	56
4.2	Energiekalibration	57
4.3	Antwortfunktion des Spektrometers	58
4.4	Überlegungen zur Messung der Coulomb-Explosion	59
4.5	Durchführung der Messungen	60
4.6	Pionische Übergänge	60
5	Auswertung	63
5.1	Vorgangsweise bei der Datenanalyse	63
5.2	Voranalyse	63
5.2.1	Korrektur für Rauschen	63
5.2.2	Clusteranalyse	64
5.2.3	Fehlstellen der Pixelmatrix	66
5.2.4	Parameter der CCD-Matrix	66
5.3	Einlesen der CCD-Aufnahmen	67
5.3.1	Kurvenkorrektur	67
5.3.2	Zweidimensionales Positionsspektrum und Spektrum	68
5.4	Voigt-Fit der Spektren	69
5.4.1	Die Linienform	69
5.4.2	Vorgangsweise	70
5.5	Monte-Carlo Simulation der Spektren	71
5.5.1	Vorgangsweise	71
5.5.2	Die Form des Doppleranteils	72
5.5.3	Linienbreite von Methan	73
5.6	Abschließender Teil der Analyse	73
5.6.1	Berechnung der Coulomb-Explosion	73
5.6.2	Auswirkung der Coulomb-Explosion auf die Stoßzahl im Gas	73
5.6.3	Die Gesamtbreite der Spektrallinien	75

6	Ergebnisse der Messungen	76
6.1	Ergebnisse der Messungen im Dezember 2000 (PSI1)	76
6.1.1	Einstellungen	76
6.1.2	Fokussmessungen	77
6.1.3	Fit der Spektren von CH ₄ und C ₂ H ₂	78
6.1.4	Simulationen und Dopplerbreite	80
6.2	Ergebnisse der Messungen im April/Mai 2001 (PSI2)	84
6.2.1	Einstellungen	84
6.2.2	Fokussmessungen	85
6.2.3	Fit der Spektren von CH ₄ und C ₂ H ₂	85
6.2.4	Simulationen und Dopplerbreite	88
6.3	Endergebnis	91
6.3.1	Die Verbreiterung	91
6.3.2	Die Stoßzahl	94
6.3.3	Isotopenmischung	96
6.4	Diskussion	97
6.4.1	Die Coulomb-Explosion	97
6.4.2	Antwortfunktion	100
6.5	Zusammenfassung der Ergebnisse	101
7	Ausblicke	103
7.1	Zukünftige Messungen	103
7.2	Zukünftige Untersuchungen der Coulomb-Explosion in exotischen Atomen	103
A	Abschätzungen und Zahlenwerte	105
A.1	Dauer der Kaskade	105
A.2	Welcher Bindungsabstand?	107
A.3	Wahrscheinlichkeit $W_{\text{H}(\text{C}_2\text{H}_2)}^\pi$ des nuklearen Einfangs im p des H von C ₂ H ₂	108
A.4	In der Analyse verwendete Zahlenwerte	109
B	Programmcodes	110
B.1	Das Programm „SpeComp“	110
B.2	Das Programm „ParabMin“	111
B.3	Das Programm „Breite“	111
C	Kollaboration	112
D	Lebenslauf	113
E	Danksagung	114

Abbildungsverzeichnis

1.1	Schematische Ansicht eines Experiments zum Coulomb-Explosion-Imaging . . .	4
1.2	Simultane Messung von pionischem Wasserstoff und pionischem Sauerstoff . . .	6
2.1	Energieverteilung und Streuquerschnitte beim Einfang von Myonen	12
2.2	Pionen-Einfang in Hydriden	14
2.3	Prinzipielles Schema der Kaskade exotischer Atome	16
2.4	Einfang und Kaskade eines Pions in Kohlenstoff	18
2.5	Dominierende Übergänge in der Kaskade bei $Z > 2$	21
2.6	Coulomb-Explosion in Azetylen durch Einfang eines Pions	23
2.7	Spektren von myonischem Kohlenstoff aus CH_4 und C_2H_6	26
2.8	Potential für äußere Elektronen von I_2^+ in einem starken elektromagnetischen Feld	27
2.9	Doppler Verbreiterung von K-Auger-Elektronen-Übergängen in Kohlenstoff- und Stickstoffhaltigen Molekülen angeregt durch Ar^{12+} Beschuß	29
3.1	Aufsicht des Experimentaufbaus im πE5 -Areal am PSI	31
3.2	Beschleunigeranlage und Experimentierareale am PSI	32
3.3	Zyklotronfalle beim Aufbau des Experiments	35
3.4	Skizze der Funktionsweise der Zyklotronfalle	36
3.5	Blick in das Innere der Zyklotronfalle mit Targetzelle	37
3.6	Schematische Darstellung der Targetzelle mit den wichtigsten Bestandteilen . .	39
3.7	Targetzelle Modell H	40
3.8	Targetzelle Modell K	40
3.9	Konstruktionszeichnung der Targetzelle	42
3.10	Konstruktionszeichnung des Kühlsystems der Targetzelle	43
3.11	Prinzip der Messungen der pionischen Röntgenstrahlung	44
3.12	Bilderzeugung in der Johann-Anordnung	45
3.13	Einer der verwendeten Kristalle eingebaut in seinem Halter	46
3.14	Zeichnung des Detektorarms	47
3.15	Die 3 Bereiche einer „frame-transfer“ CCD	49
3.16	Aufbau und Querschnitt einer 3-Phasen CCD	50
3.17	CCD-Detektor vor dem Einbau in die CSD-Box	52
3.18	Quanteneffizienz der CCD22	52

4.1	Scan der Position des Targets in der Zyklotronfalle	55
4.2	Beispiel eines „Targets cans“	56
4.3	Röntgenübergänge in der Kaskade von pionischem Kohlenstoff	62
5.1	Unterscheidung zwischen Röntgenstrahlung und geladenen Teilchen in einer CCD	65
5.2	Untergrundunterdrückung durch topographische Pixelanalyse	65
5.3	Vergleich der Clustergrößen für Röntgenstrahlung verschiedener Energie	66
5.4	Verwendete Parameter bei der Bearbeitung der CCD-Aufnahmen	67
5.5	Effekt der Kurvenkorrektur auf das zweidimensionale Positionsspektrum und Spektrum	68
6.1	Fokusscan mit Methan im Dezember 2000	78
6.2	Spektrum von $\pi^-C_{(5\rightarrow 4)}$ von Methan (Dezember 2000)	81
6.3	Spektrum von $\pi^-C_{(5\rightarrow 4)}$ von Azetylen (Dezember 2000)	82
6.4	Simuliertes Spektrum von $\pi^-C_{(5\rightarrow 4)}$ von Azetylen im Dezember 2000	83
6.5	Spektrum von $\pi^-C_{(5\rightarrow 4)}$ von Methan (Mai 2001)	89
6.6	Spektrum von $\pi^-C_{(5\rightarrow 4)}$ von Azetylen (Mai 2001)	90
6.7	Simuliertes Spektrum von $\pi^-C_{(5\rightarrow 4)}$ von Azetylen im Mai 2001	92
6.8	Potentielle Energie $V_{C_2^+}$ gegen den Kernabstand r für verschiedene Ladungs- kanäle $q_1^+ \cdot q_2^+$	98
6.9	Verbreiterung Γ_D gegen den Kernabstand r für verschiedene Ladungskanäle $q_1^+ \cdot q_2^+$	98

Tabellenverzeichnis

1.1	Teilchen zur Bildung exotischer Atome	1
2.1	Einige Kenndaten wichtiger exotischer Atome	8
2.2	Relative Stärke der Kaskadenprozesse	18
2.3	Berechnung der zu erwartenden Werte von $V_{C_2}^+$, β , $T_{\pi C}$ und ΔE_{Dop}	25
3.1	Abmessungen und Eigenschaften der Targetzellen Modell H und K	41
4.1	Bindungslängen und -stärken einiger Kohlenwasserstoffe	59
4.2	Mit QED-Rechnungen erhaltene Energien der untersuchten Übergänge in pionischen Kohlenstoff	61
4.3	Braggwinkel und Dispersion von $\pi^{-12}C_{(5g \rightarrow 4f)}$ für Si 111 und Quarz 10 $\bar{1}$	61
4.4	Energien und Braggwinkel aller untersuchten exotischen Übergänge	61
6.1	Messungen im Dezember 2000	77
6.2	Ergebnisse der Fokusscans im Dezember 2000	77
6.3	Fit-Ergebnisse von Methan und Azetylen (Messung Dezember 2000)	81
6.4	Parameter der Simulationen der Daten von Dezember 2000	82
6.5	Ergebnisse der Simulationen von Methan und Azetylen im Dezember 2000	84
6.6	Liste der Messungen vom Mai 2001	85
6.7	Ergebnisse der Fokusscans im Mai 2001	86
6.8	Fit-Ergebnisse von Methan und Azetylen (Messung Mai 2001)	88
6.9	Parameter der Simulationen der Daten von Mai 2001	89
6.10	Ergebnisse der Simulationen von Methan und Azetylen im Mai 2001	92
6.11	Vergleich mit früheren Daten	100
6.12	Zusammenfassung der Ergebnisse der Coulomb-Explosion in Azetylen	101
A.1	Abschätzung der Dauer der Kaskade in π^-C	106
A.2	Wichtige Zahlenwerte der Analyse	109

Kurze Inhaltsangabe

Die Bestimmung der Coulomb-Explosion als Prozeß der Kaskade pionischer Atome und ihre Auswirkungen sind Gegenstand der vorliegenden Arbeit.

Kapitel 1 bildet eine grundlegende Einführung in die Physik exotischer Atome und der Coulomb-Explosion.

Kapitel 2 stellt die physikalischen Grundlagen exotischer Atome (Energieniveaus, Coulomb-Einfang, Kaskade) und der Coulomb-Explosion dar.

Kapitel 3 geht auf die Experimentkomponenten näher ein (Beschleuniger, Zyklotronfalle, Target, Kristallspektrometer, CCD-Detektor).

Kapitel 4 beschreibt vorbereitende Messungen des Experiments (Optimierung der Zyklotronfalle, Energiekalibration).

Kapitel 5 beschreibt die Vorgangsweise bei der Datenanalyse (Voranalyse, Fit, Monte-Carlo-Simulation).

Kapitel 6 präsentiert die Ergebnisse der Messungen und ihre Interpretation.

Kapitel 7 gibt einen Ausblick auf zukünftige Messungen auf Basis der mit dieser Diplomarbeit erhaltenen Ergebnisse.

Anhang A enthält einige nützliche Abschätzungen.

Anhang B erklärt die Funktionsweise der im Rahmen dieser Arbeit geschriebenen Programme.

Hervorgehoben sind Namen und hervorzuhebende Tatsachen. *Geneigt* geschrieben sind nach Meinung des Verfassers wichtige Begriffe, die man z.B. an anderer Stelle nachschlagen kann.

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Exotische Atome in der heutigen Forschung

Ein *exotisches Atom* ist ein gebundener oder quasi-stationärer Komplex, in dem mindestens ein Elektron in der Hülle durch ein anderes negatives Elementarteilchen, welches schwerer als ein e^- ist, ersetzt wird oder in dem ein *Nukleon* im Atom-Kern durch ein anderes positives oder neutrales Teilchen ersetzt wird [Ber1992]. Dieses Konzept wurde 1947 von *Fermi*, *Teller* und *Wheeler* [Fer1947, Whe1947] eingeführt.

Teilchen	m [MeV/c ²]	τ	Spin
e^+	0,510 998 902(21)	$> 4,6 \cdot 10^{26}$ a	1/2
μ^-	105,658 357(5)	$2,197 03(4) \cdot 10^{-6}$ s	1/2
π^-	139,570 18(35)	$2,603 3(5) \cdot 10^{-8}$ s	0
K^-	493,677(16)	$1,238 4(24) \cdot 10^{-8}$ s	0
\bar{p}	938,271 998(68) ¹	$> 7,0 \cdot 10^5$ a	1/2
Σ^-	1 197,449(30)	$1,479(11) \cdot 10^{-10}$ s	1/2
Ξ^-	1 321,31(13)	$1,639(15) \cdot 10^{-10}$ s	1/2

Tabelle 1.1: Teilchen zur Bildung exotischer Atome mit Masse, Lebensdauer, Spin. [PDG2002]

Experimentell von größtem Interesse und am intensivsten untersucht sind exotische Zweiteilchensysteme, die wasserstoffähnlich sind, wie *Antiwasserstoff* ($\bar{p}e^+$), *Positronium* ($Ps = e^+e^-$), *Myonium* ($My = \mu^+e^-$) oder *exotischer Wasserstoff* (x^-p , mit $x^- = \mu^-, \pi^-, K^-, \bar{p}$ oder Σ^-). Positronium-Atome werden durch Abbremsung von e^+ in gasförmigen oder flüssigen Targets oder einigen Metall-Oxid-Pulvern erzeugt [Ber1992], die anderen exotischen Atome durch Einfang abgebremster Teilchen — wie μ , π , K , *Hyperonen* (Σ, Ξ, \dots) oder \bar{p} — in atomare Orbitale.

Wichtig für die Bildung solcher Atome ist natürlich, daß die betreffenden Teilchen lange

¹folgt aus $m_p = 938,271 998(38)$ und $\frac{|m_p - m_{\bar{p}}|}{m_p} < 6 \cdot 10^{-8}$

genug existieren, um überhaupt gebundene Zustände formen zu können. Eine Auflistung der Teilchen, mit denen bisher exotische Atome produziert werden konnten, gibt Tab. 1.1 an.

1.1.1 Forschung mit exotischen Atomen

Die Forschung im Bereich der exotischen Atome läßt sich in drei Bereiche aufteilen:

- Physik der *hadronischen Atome* (allen voran pionische, kaonische und antiprotonische Atome) und der *Hyperkerne*² (z.B.: Bestimmung der Massen und magnetischen Momente [Man2001, Che1975, Hu1975], Bestimmung von Spin und Parität [Sch1983], exakte Messung der Effekte der starken Wechselwirkung [Got1998, Gua1998]).
- Physik der *myonischen Atome* und myonischen Moleküle (z.B.: *Myon-induzierte Kernspaltung* [Dia1963], *Myon-Katalysierte Kernfusion (μ CF)* [Bre1989], *Lamb-Verschiebung*³ in μ^-p [Kot2001, Kot2000], Suche nach seltenen Zerfällen mit Verletzung der *Leptonenzahl* [Mor1999]).
- Produktion von Antiwasserstoff $\bar{H} = (e^+\bar{p})$ (erstmalig 1996 gelungen [Oel1996]) und Vergleich seiner Eigenschaften mit Wasserstoff (Experimente ATHENA [Lan2002] und ATRAP [Gab2002a, Gab2002b]).

Das *Institut für Mittelenergiephysik der Österreichischen Akademie der Wissenschaften (IMEP)*, an dem diese Arbeit entstand, arbeitet in der Forschung in diesen Bereichen. Federführend war es z.B. in der Erforschung der μ CF mit Untersuchungen von myonischen Molekülen [Jei1992] und der *Kaskade* in myonischem Wasserstoff [Lau1997]. Laufende Experimente des Instituts sind die Messungen der Verschiebung und Verbreiterung des Grundzustandes aufgrund der starken Wechselwirkung in pionischem Wasserstoff am PSI⁴ [Got1998] (Experiment R-98-01) und in kaonischem Wasserstoff am LNF⁵ [Gua1998] (Experiment DEAR). Weitere Arbeiten zur Produktion von Antiwasserstoff wurden am CERN⁶ durchgeführt [Gab1997] (Experiment ATRAP).

Ein Nebenprodukt der Forschung mit exotischen Atomen ist der Aufbau eines Datensatzes von Kalibrationslinien für Energiemessungen von Röntgenstrahlung im unteren keV-Bereich (< 25 keV) [Ana2003]. Die natürlichen Linienbreiten der heute üblichen Röntgenstandards sind 10-mal größer als das Auflösungsvermögen der meisten Präzisions-Spektrometer und eignen sich deshalb nicht, um die *Antwortfunktion* solcher Spektrometer zu bestimmen. Außerdem haben sie *Satellitenlinien*, die eine asymmetrische Linienformen verursachen.

²Ein Proton oder Neutron des Kerns wird durch ein Hyperon (vor allem Λ -Teilchen) ersetzt.

³Beobachtete Verschiebung des Niveaus $2s_{\frac{1}{2}}$ gegenüber $2p_{\frac{1}{2}}$ um $\frac{1}{10}$ des Abstands $2p_{\frac{3}{2}} - 2p_{\frac{1}{2}}$ bedingt durch Strahlungskorrekturen des Leptons, Protons und des quantisierten elektromagnetischen Feldes (Vakuum polarisation, Selbstenergie), sowie durch den endlichen Protonradius.

⁴Paul Scherrer Institut, Villigen/AG, Schweiz. Interdisziplinäres Institut für Grundlagen- und angewandte Forschung mit Protonen-Beschleuniger und Synchrotronstrahlungsquelle SLS.

⁵Laboratori Nazionali di Frascati dell'INFN, Frascati, Italien. Italienisches Kernforschungsinstitut mit e^+e^- Collider DAΦNE.

⁶Centre Européenne pour la Recherche Nucléaire, Genf, Schweiz. Größtes Europäisches Kern- und Teilchenforschungszentrum.

Als Alternative bieten sich die Spektrallinien von wasserstoffähnlichen exotischen Atomen an (Energien mittels *QED* sehr genau berechenbar), da deren Linien sehr schmal, symmetrisch und reproduzierbar sind. Man muß nur gewährleisten, daß man Übergänge aus Regionen im Termschema beobachtet, wo Abweichungen von der Dirac-Gleichung, in der der Atomkern als Punkt angenommen wird (s. Gl. 2.6 und Gl. 2.7), vernachlässigbar sind. Ihre natürlichen Linienbreiten sind zwei bis drei Größenordnungen kleiner (z.B. $\pi^{-20}\text{Ne}_{(6h\rightarrow 5g)}$ mit 12 meV), als jene der *Fluoreszenzlinien*. Damit wären dann auch Messungen der Antwortfunktionen hochpräziser Spektrometer möglich und umgekehrt ließen sich die zuvor genannten Standards genau kalibrieren.

Eine weitere Möglichkeit, möglichst schmale Linien mit genau bekannter Energie zu erhalten, ist die Messung der Röntgenstrahlung von Ionen mit nur einem oder zwei e^- (wasserstoff- oder heliumähnliche Ionen), die in einem *Plasma* erzeugt werden (z.B. der M1-Übergang $^3S_1 \rightarrow ^1S_0$ in He-ähnlichen Ar^{16+} mit Dopplerverbreiterung < 40 meV).

Abweichungen der exotischen Atome von einem wasserstoffähnlichen abgeschlossenen System machen sie zu einem sensitiven Objekt der Forschung. Ihre Röntgenstrahlung liefert Information über den Einfangprozeß und den Zustand der Elektronenschale (Grad der Ionisation und Wiederauffüllen), sowie die Wechselwirkung dieser Systeme mit den umgebenden Atomen bzw. Molekülen. Präzisionsmessungen von Röntgenübergängen höherer Niveaus, bei denen der Atomkern noch als Punkt angenommen werden kann, erlauben eine Suche nach nicht-trivialen Abweichungen gegenüber Vorhersagen der QED bzw. die genaue Festlegung von Teilcheneigenschaften. In Regionen, wo der Überlapp der Wellenfunktionen des Teilchens und des Kerns groß ist, liefert andererseits die Messung dieser Wechselwirkung mit dem Kern neue Informationen.

Abgesehen von Fragestellungen der Grundlagenphysik kann die Forschung mit exotischen Atomen auch Antworten auf praktische Probleme geben. Als Beispiel erhält man genaue electron-refilling Wirkungsquerschnitte aus der Beobachtung der Intensitätsänderung der Übergänge mit dem Gasdruck. Diese Querschnitte sind in der Plasmaphysik von Interesse.

1.1.2 Hadronische Atome

Bei Einfang eines negativ geladenen *Hadrons* in ein Atom bilden sich wasserstoffähnliche Systeme, in denen neben der elektromagnetischen Wechselwirkung die starke Wechselwirkung eine wichtige Rolle spielt.

Die Untersuchung hadronischer Atome liefert wichtige Informationen über Eigenschaften der Kerne und der Hadronen und ihrer gegenseitigen Wechselwirkungen. Die Produkte der Reaktionen mit Neutronen und Protonen sind unterschiedlich und daher geben solche Messungen einen Aufschluß über die Verteilung der p und n im Kern, wie z.B. höhere Multipolmomente der Ladungsverteilung [Laa1988]. Besonders Experimente mit Wasserstoff sind hier wichtig, da sie direkt Information über die Wechselwirkung Hadron-Nukleon bei geringen Energien geben.

Diverse Experimente führen genaue Messungen der Röntgenübergänge der hadronischen Atome durch, um stark verbesserte Werte der Breite Γ und der Verschiebung ε der unteren

Niveaus (vor allem $(n_x, \ell_x = 1, s)$) zu liefern. Beide Größen sind proportional dem Imaginärteil $\Im_{(a)}$ und Realteil $\text{Re}_{(a)}$ der *Streulänge* a der Hadronen mit den Nukleonen. Und über diese erhält man ein besseres Verständnis der starken Wechselwirkung, z.B. der πN Kopplungskonstante $f_{\pi N}$. Die Experimente R-98-01 am PSI [Got1998] und DEAR am LNF [Gua1998] beschäftigen sich beide mit dieser Aufgabenstellung. Die Ziele dieser Experimente sind in 2.1.3 erläutert.

1.2 Coulomb-Explosion

1.2.1 Coulomb-Explosion allgemein

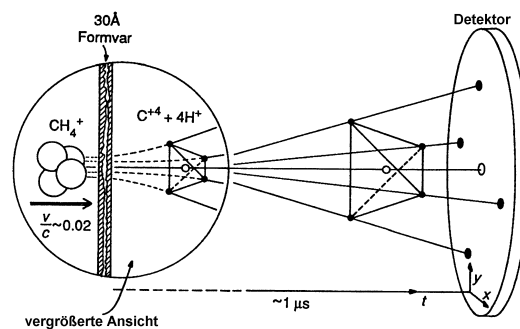
Coulomb-Explosion (s. auch 2.4) ist das rasche Aufbrechen der Bindung eines Moleküls nach dessen Ionisation. Dabei werden die Fragmente stark in jeweils entgegengesetzte Richtungen beschleunigt (analog zu einer „Explosion“). Vergleicht man die sich dabei ergebenden Geschwindigkeiten der Explosionspartner mit der thermischen Geschwindigkeit in einem idealen Gas, erahnt man die Kraft der elektromagnetischen Wechselwirkung, die für die Explosion verantwortlich ist.

Die Ionisation der Moleküle wird im allgemeinen hervorgerufen durch:

- Einfang exotischer Teilchen (in dieser Arbeit untersucht).
- Beschuß der Moleküle mit intensiver Laserstrahlung (Intensität ca. 10^{13} bis $10^{15} \frac{\text{W}}{\text{cm}^2}$) (s. 2.5.1)
- Beschuß mit schnellen Schwerionen (s. 2.5.2)
- Beschuß eines Targets mit ionisierten Molekülen (Coulomb-Explosion-Imaging)

Die Vorgänge bei der zweiten und dritten Methode sind experimentell gut erforscht und Theorien zu ihrer Erklärung liegen vor (s. 2.5).

Abbildung 1.1: Schematische Ansicht eines Experiments zum Coulomb-Explosion-Imaging. Die positiven Ionen stoßen einander ab und verwandeln so die Mikrostruktur in eine Makrostruktur, die mit einem Detektor präzise gemessen werden kann. Die gemessenen Parameter (x, y, t) jedes Fragments können in die ursprüngliche Molekülstruktur zurück gerechnet werden.



Man bedient sich des Phänomens der Coulomb-Explosion in der *physikalischen Chemie* zur Strukturuntersuchung von Molekülen mittels der Methode des *Coulomb-Explosion-Imaging* (CEI) [Gem1981, Vag1989]. Dabei werden die zu untersuchenden Moleküle beschleunigt (einige % der Lichtgeschwindigkeit) und dann durch eine dünne Folie (einige 10 \AA dick) geschossen.

In den Stößen mit den Atomen des Targets werden die Elektronen des Projektils gestrippt. Nach dieser Ionisation bricht die Bindung des Moleküles auf und die positiven Ionen explodieren aufgrund der Coulomb-Abstoßung. Die Messung aller Geschwindigkeitskomponenten der aus der Folie austretenden Fragmente liefert die Informationen, um die räumliche Struktur des gebundenen Moleküls zu beschreiben (s. Abb. 1.1).

Im Rahmen eines früheren Experiments einer Gruppe unserer Kollaboration ([Len1998]) wurde erstmals die Coulomb-Explosion während der Kaskade exotischer Atome direkt beobachtet [Sie1997, Sie2000]. Dabei wurde festgestellt, daß dieser Effekt zu einer Verbreiterung der Röntgenlinien im Spektrum exotischer Atome führt. Ein besseres Verständnis dieses Phänomens ist jedoch nötig, um die Spektren interpretieren zu können. Deshalb wurde die Coulomb-Explosion im Rahmen des Experiments R-98-01 [Got1998] vom Autor untersucht.

1.2.2 Untersuchung der pioninduzierten Coulomb-Explosion

Bisherige Messungen der Druckabhängigkeit der Kaskade exotischer Atome (s. 2.3.2) zeigten Hinweise auf den Effekt der Coulomb-Explosion, vor allem in N_2 . Jedoch konnte er bisher nie direkt nachgewiesen werden, da die experimentellen Apparaturen nicht präzise genug waren. Der Effekt lag unterhalb des Auflösungsvermögens der Spektrometer und es konnten keine *parallelen Übergänge* (s. 2.3.2) aufgelöst werden. Präzisere Apparate ermöglichen nun, dieses Phänomen direkt mittels der Linienbreite zu studieren. Mit dem verbesserten Spektrometer ist diese Explosion eindeutig durch Verbreiterung der gemessenen Röntgenlinien nachweisbar.

Da die Coulomb-Explosion während der Kaskade auftritt, hilft ihre quantitative Kenntnis entscheidend beim Verständnis der Zeitabläufe der Kaskade.

Das Experiment R-98-01 benötigt den Wert der Linienverbreiterung durch die Coulomb-Explosion für die angestrebte Präzision der Messung der hadronischen Verschiebung ε_{1s} (ca. 0,2%) und der hadronischen Verbreiterung Γ_{1s} (rund 1%) im pionischen Wasserstoff. Die hier vorgenommenen Messungen sind ein wesentlicher Beitrag zur Bestimmung der Spektrometerauflösung.

Direkten Nutzen bezieht das Experiment durch die Kenntnis des Wertes der Verbreiterung durch die Explosion für die Linie von O_2 (genauer: $\pi^-O_{(6h \rightarrow 5g)}$), deren Position — neben jener von $\pi^-{}^9Be_{(4f \rightarrow 3d)}$ — als in-situ Kalibration für die exakte Energiebestimmung des Übergangs $\pi^-H_{(3p \rightarrow 1s)}$ dient (nur $\Delta E \approx 6 \text{ eV}$; s. Abb. 1.2 und S. 58). Da die Messungen zur Bestimmung der Antwortfunktion des Spektrometers mit CH_4 (Methan) erfolgten, bot sich der Kohlenwasserstoff C_2H_2 (Azetylen bzw. Ethin) zur direkten Messung der Coulomb-Explosion an (s. 4.4). Aus der mit CH_4 gemessenen Antwortfunktion des Spektrometers läßt sich auf die durch Coulomb-Explosion verursachte Verbreiterung in $\pi^-{}^{16}O_{(6h \rightarrow 5g)}$ schließen.

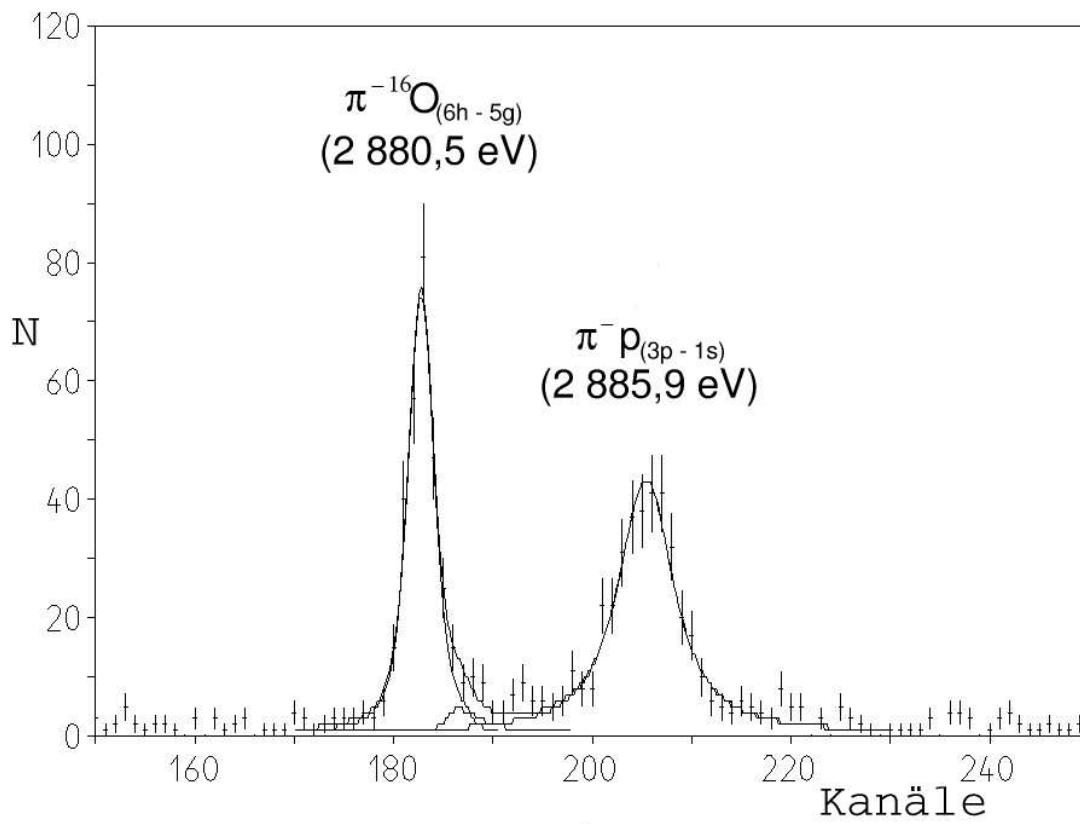


Abbildung 1.2: Simultane Messung von $\pi^{-}\text{H}_{(3p\rightarrow 1s)}$ und $\pi^{-16}\text{O}_{(6h\rightarrow 5g)}$ zur in-situ Kalibration der Energie des Übergangs in $\pi^{-}\text{H}$.

Kapitel 2

Physikalische Grundlagen

2.1 Theorie der exotischen Atome

2.1.1 Exotische Atome im Bohr'schen Atommodell

Ein exotisches Atom ist ein atomares System, in dem das Elektron durch ein schwereres negatives Elementarteilchen ersetzt wird. Am Anfang steht der Einfang des abgebremsten Teilchens (z.B. Pion - π^-) im Atom bzw. Molekül durch Verdrängung eines der äußersten Elektronen. Der mittlere Radius („Bohrradius“) des Orbitals, bei dem diese Überlappung der Wellenfunktionen stattfindet, bleibt annähernd gleich. Jedoch hat das neue Orbitalteilchen eine viel größere Masse. Da die Hauptquantenzahl n für wasserstoffähnliche Systeme im Bohr'schen Atommodell gemäß

$$r_n = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi \mu_x Z e^2} n^2 = \frac{n^2 \hbar c}{Z \mu_x c^2 \alpha} \quad (2.1)$$

mit der Wurzel des Massenverhältnisses beider Teilchen skaliert, also

$$n_x \approx n_e \sqrt{\frac{\mu_x}{\mu_e}} \quad (2.2)$$

mit der reduzierten Masse

$$\mu_x = \frac{m_x m_A}{m_x + m_A} \quad , \quad (2.3)$$

wird das Teilchen bei sehr hohem n_x eingefangen (z.B. wird ein π^- im Wasserstoff bei $n_\pi \approx 20$ eingefangen [Laa1988]). Im Kohlenstoff ergibt der Einfang an der Stelle eines Valenzelektrons ($n_e = 2$, L-Schale) $n_\pi \approx 31$. Das bedeutet auch, daß alle Bahnen des exotischen Atoms mit $n_x \leq \sqrt{\frac{\mu_x}{\mu_e}} = n_{eq}$ innerhalb der elektronischen K-Schale liegen. Ein π^- befindet sich also ab $n_\pi \approx 15$ innerhalb der Bahn der elektronischen K-Schale (s. letzte Spalte Tab. 2.1).

Da diese Teilchen eine größere Masse als m_e haben, sind die Bahnradien nach dem Atommodell von Bohr kleiner als im Wasserstoff und die Bindungsenergien der Niveaus B_n entsprechend größer ($R_A \dots$ Rydbergkonstante des jeweiligen Kerns):

$$B_n = -\frac{Z^2 \alpha^2 c^2 \mu_x}{2n^2} = -R_A \frac{Z^2}{n^2} \quad (2.4)$$

Die Bindungsenergie des Niveaus n bei jeweils gleichem Z ist

$$B_{n,x} = \frac{\mu_x}{\mu_e} B_{n,e} \quad (2.5)$$

Tab. 2.1 enthält die aus den Gl. 2.1, 2.3, 2.2 berechneten Kenndaten einiger wichtiger wasserstoffähnlicher exotischer Atome.

Atom	μ_x [MeV/c ²]	μ_x [m _e]	r_1 [fm]	r_1 [a _∞]	n_{eq}
H	0,5107	0,9994	52 949	1,000 58	1
e ⁺ e ⁻	0,2555	0,5	105 835	2	≈ 1
μ ⁺ e ⁻	0,5085	0,9951	53 178	1,004 92	1
μ ⁻ H	94,965	185,842	285	0,005 39	≈ 14
π ⁻ H	121,497	237,764	223	0,004 21	≈ 15
K ⁻ H	323,478	633,031	84	0,001 59	≈ 25
p̄H	469,136	918,076	58	0,001 1	≈ 30
Σ ⁻ H	526,067	1 029,488	51	0,000 96	≈ 32

Tabelle 2.1: Tabelle einiger wichtiger exotischer Atome mit reduzierter Masse μ_x , Bohrradius des jeweiligen 1s Niveaus und jenem n_x , dessen Radius demjenigen der e⁻ der K-Schale in H entspricht (= n_{eq}). $1 a_\infty = 1 \text{ Bohr} = 0,5291772083(19) \cdot 10^{-10} \text{ m} (\text{Å}) = 52917,72083(19) \text{ fm}$. [PDG2002]

Obwohl das Bohr'sche Atommodell nur eine Näherung der tatsächlichen Verhältnisse ist, lassen sich mit Gl. 2.4 die Energien der Niveaus B_n und somit die Energien der Übergänge recht gut berechnen. Die genauen, rein elektromagnetischen Energien liefert die relativistische Quantentheorie mit der *Dirac*-Gleichung für *Teilchen mit Spin* (z.B. Myon; kovariante Schreibweise; \hbar und $c = 1$, $E_\mu \dots 4$ -dim. Einheitsmatrix)

$$(i\gamma^\mu D_\mu - E_\mu \mu_x) \Psi \equiv [\gamma^\mu (i\partial_\mu - eA_\mu) - E_\mu \mu_x] \Psi = 0 \quad (2.6)$$

und die *Klein-Gordon*-Gleichung für *Spin-0-Teilchen* (z.B. Pion, Kaon; kovariante Schreibweise; \hbar und $c = 1$) [Mes1990]:

$$\left[\left(i\frac{\partial}{\partial t} - e\Phi \right)^2 - (-i\nabla - eA)^2 \right] \psi = \mu_x^2 \psi \quad \text{bzw.} \quad (2.7)$$

$$(D_\mu D^\mu + \mu_x^2) \psi \equiv [(\partial_\mu + ieA_\mu)(\partial^\mu + ieA^\mu) + \mu_x^2] \psi = 0$$

Weitere Korrekturen — wie Vakuumpolarisation, Selbstenergie, Renormierung der Masse, endliche Ausdehnung des Kerns, etc. — liefert die QED. Bei hadronischen Atomen ist außerdem die starke Wechselwirkung zu berücksichtigen.

2.1.2 Starke Wechselwirkung in hadronischen Atomen

Die Theorie der starken Wechselwirkung ist die QCD (Quanten-Chromo-Dynamik), welche die Wechselwirkungen von *fermionischen* Feldern (*Quarks*) mit der Eigenschaft „Farbe“ (3 Freiheitsgrade dieser Eigenschaft) mit „farbhältigen“ Eichfeldern (*Gluonen* als Austausch-Teilchen)

beschreibt. Der heute gültigen Theorie nach bestehen alle Hadronen aus solchen Quarks. Die Beschreibung der QCD bei niedrigen Energien führt zur *Chiralen Störungstheorie* (χ PT - Chiral Perturbation Theory).

Der Einfluß der starken Wechselwirkung in hadronischen Atomen nimmt bei zunehmender Entfernung der Teilchen ab. Daher kann man am Anfang der Kaskade (s. 2.3) annehmen, daß das Boson nur durch das Coulomb Potential des punktförmigen Kerns beeinflusst wird. Wenn das Hadron in Orbitalen ankommt, in denen seine Wellenfunktion signifikant mit jener des Kerns überlappt (vor allem untere s- und p-Niveaus), werden starke Wechselwirkung und endliche Größe des Kerns wichtig. Die Energieniveaus werden aufgrund der Ladungsverteilung im Kern gegen geringere Bindung verschoben ($\varepsilon > 0$). Eine zusätzliche Verschiebung (anziehend oder abstoßend) gegenüber jenen Energien, die aus der rein elektromagnetischen Wechselwirkung folgen würden (welche mittels QED recht genau berechnet werden können), kommt aufgrund der starken Wechselwirkung des gebundenen Hadrons mit dem Kern zustande. Weiters existiert das exotische Atom nur sehr kurz in solchen Zuständen, da alle Prozesse der starken Wechselwirkung zur Absorption des eingefangenen Teilchens führen. Dadurch werden die Niveaus verbreitert (Breite Γ). Außerdem wird durch diese Absorption die Population des nächsten Niveaus verringert. [Laa1988]

Im Rahmen der Potentialtheorie zur Beschreibung von hadronischen Atomen mit Spin 0 fügt man in Gl. 2.7 ein „*Optisches Potential*“ (V_S) ein, welches die starke Wechselwirkung zwischen Hadron und Kern beschreibt. Die dadurch modifizierte Klein-Gordon Gleichung lautet somit (statt in kovarianter, in Potential-Schreibweise) [Laa1988]:

$$\left[\nabla^2 - \mu_x^2 + (E - V_C(\vec{r}))^2 \right] \psi(\vec{r}) = 2\mu_x V_S(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \quad (2.8)$$

Bei Vernachlässigung von V_S und mit $V_C = \frac{Z\alpha}{r}$ (Coulomb Potential) ergeben sich die Eigenwerte der Energie bei punktwiser Ladungsverteilung im Kern ohne starke Wechselwirkung $E_{n,\ell}^{pkt}$. Die Bindungsenergien dieser Zustände sind dann

$$B_{n,\ell}^{pkt} = E_{n,\ell}^{pkt} - \mu_x. \quad (2.9)$$

Das Teilchen, welches das e^- ersetzt, ist in einem wasserstoffähnlichen Zustand gebunden, die Wechselwirkung mit dem Kern kann als Streuung bei Relativenergie Null (genauer: knapp unterhalb der Grenze der Streuung freies Teilchen-Nukleon) betrachtet werden. Wegen der geringen Energien (Größenordnung MeV) sind nur die ersten Terme dieser Teilchen-Nukleon Wechselwirkung wichtig (s-, p-Wellen-Streuung). Dadurch können pionische Atome Information über die Pion-Nukleon Wechselwirkung am *Streulimit* liefern. Bei Reaktionen an der Schwelle Bindung/Streuung besteht ein Zusammenhang zwischen der *Streuphase* η und der Streulänge a (dem Wirkungsquerschnitt für s-Wellen-Streuung bzw. der Übergangswahrscheinlichkeit proportional) und den Parametern des optischen Potentials [Rin1985]. Die Größen V_S , η und a sind aufgrund der endlichen Lebensdauer des exotischen Atoms (Absorption) komplexe Größen.

Speziell die π^- -N Wechselwirkung wird zumeist in der Impulsapproximation behandelt. Die π^- -Wellenfunktion $\Psi(\vec{r})$ ist dann die Summe aus einfallender Welle $\phi(\vec{r})$ und den gestreuten

Wellen, die von jedem Streuzentrum ausgehen. In *erster Näherung* setzt man $\Psi_{(\vec{r})} \approx \phi_{(\vec{r}, \vec{x})}$ (einfallende Welle auf ein Nukleon an Position x). Da die Streuung der π^- an gebundenen Nukleonen in dieser Approximation so behandelt wird, als geschähe sie an freien Teilchen, erhält man die π - N Streuamplitude im Bereich geringer Energien als $(\vec{k}', \vec{k} \dots$ Impuls gestreutes & einfallendes π^- ; $\vec{t} \dots$ Isospin π ; $\vec{\tau} \dots$ Isospin Kern; $\sigma \dots$ Spin Kern):

$$f_{(\vec{k}, \vec{k}')} = b_0 + b_1 \vec{t} \cdot \vec{\tau} + [c_0 + c_1 \vec{t} \cdot \vec{\tau}] \vec{k} \cdot \vec{k}' + i\sigma_i (\vec{k}' \times \vec{k}) [d_0 + d_1 \vec{t} \cdot \vec{\tau}] \quad (2.10)$$

Die Koeffizienten $b_0, b_1, c_0, c_1, d_0, d_1$ hängen von der isoskalaren s -Wellen Streulänge a_{2t} und dem isovektoriellen Streuvolumen $a_{2t, 2J}$ ab:

$$b_0 = \frac{1}{3}(a_1 + 2a_3) \quad b_1 = \frac{1}{3}(a_3 - a_1) \quad (2.11)$$

$$c_0 = \frac{1}{3}(4a_{33} + 2a_{31} + 2a_{13} + a_{11}) \quad c_1 = \frac{1}{3}[(2a_{33} + a_{31}) - (2a_{31} + a_{11})] \quad (2.12)$$

Wendet man die Gleichung

$$(\Delta + k^2)\psi_{(\vec{r})} = -2\mu_x V_{S(\vec{r})}\psi_{(\vec{r})} \quad (2.13)$$

auf die so entwickelte π^- -Wellenfunktion an, erhält man das optische Potential erster Ordnung nach *Kisslinger* [Kis1955].

Eine verbesserte Rechnung bricht die Entwicklung von Ψ in der *zweiten Ordnung* ab, wodurch man das optische Potential zweiter Ordnung nach *Ericson* und *Ericson* erhält [Eri1966].

Wenn das Teilchen dann die unteren Niveaus erreicht, berücksichtigt man die endliche Größe des Kerns (durch Änderungen in $V_{C(\vec{r})}$ ausgedrückt).

Löst man Gl. 2.8 mit diesen Potentialen $V_{S(\vec{r})}$ und $V_{C(\vec{r})}$, erhält man die komplexen Eigenwerte der Energie mit den Niveaushiftungen $\varepsilon_{n,\ell}$ und Niveaubreitungen $\Gamma_{n,\ell}$

$$E_{n,\ell} = E_{n,\ell}^{pkt} - \varepsilon_{n,\ell} - \frac{i}{2}\Gamma_{n,\ell} \quad (2.14)$$

Solange der Einfluß der starken Wechselwirkung die Bindungsenergien $E_{n,\ell}$ nur gering ändert, lassen sich $\varepsilon_{n,\ell}$ und $\Gamma_{n,\ell}$ störungstheoretisch berechnen. Mit dem Ansatz, daß $\psi_{(\vec{r})}$ wasserstoffähnlich ist, erhält man für die s -Niveaus die *Deser*-Beziehung [Des1954] ($a^h \dots$ hadronische Streulänge)

$$\varepsilon_{ns} - \frac{i}{2}\Gamma_{ns} = \frac{-2\pi}{\mu_x} |\Psi_{ns(0)}|^2 a^h \quad (|a^h| \ll r_1) \quad (2.15)$$

2.1.3 Ziel des Experiments R-98-01

Der Zusammenhang dieser Theorie der optischen Potentiale mit der moderneren Chiralen Störungstheorie χ PT (und damit dem Standardmodell) liegt in der zuvor erwähnten π - N Streuamplitude am Streulimit ($E = 0$) (Gl. 2.10), die von Interesse für die Niedrig-Energie-QCD ist. Da die Theorie der optischen Potentiale eine Näherung der QCD bei niedrigen Energien ist, setzen die experimentell bestimmten Größen (Streulängen und *effektive Reichweiten*) die Parameter der χ PT fest. Genaue experimentelle Werte solcher Größen sind daher ein wichtiger Test für die Methoden der χ PT.

Hier setzt das Experiment R-98-01 an mit dem Ziel einer wesentlichen Verbesserung der Präzision der hadronischen Breite Γ_{1s} (1%, bisher 9%) und der hadronischen Verschiebung ε_{1s} (0,2%, bisher 0,7%). Beide Observablen sind nach Gl. 2.15 verbunden mit der hadronischen Streulänge, die direkt in die π -N Streuamplitude eingeht.

Zerlegt man Gl. 2.15 nach Realteil Re und Imaginärteil \Im , sieht man, daß $\frac{\varepsilon_{1s}}{E_{1s}}$ direkt proportional zur „hadronischen Streulänge bei Energie 0“ a_{el}^h (Synonym für elastische Streuung $\pi^- + p \rightarrow \pi^- + p$) ist und daß $\frac{\Gamma_{1s}}{E_{1s}}$ quadratisch von der „hadronischen Ladungsaustausch-Streulänge“ a_{inel}^h (Synonym für inelastische Streuung $\pi^- + p \rightarrow \pi^0 + n$) abhängt [Des1954]. Diese beiden Streulängen bestehen aus Linearkombinationen der bei der Streuamplitude eingeführten s-Wellen Streulängen a_{2t} [Got1998, Des1954].

$$a_{el}^h = \frac{2a_1 + a_3}{3} \equiv a^+ + a^- \equiv b_0 - b_1 \quad (2.16)$$

$$a_{inel}^h = \frac{\sqrt{2}(a_1 - a_3)}{3} \equiv \sqrt{2}a^- \equiv -\sqrt{2}b_1 \quad (2.17)$$

Letztere sind wiederum verbunden mit der geradzahligen und der ungeradzahligen Isospin-Streulänge a^+ und a^- durch

$$a^+ = \frac{a_1 + 2a_3}{3} \equiv b_0 \quad (2.18)$$

$$a^- = \frac{a_1 - a_3}{3} \equiv -b_1 \quad (2.19)$$

Messungen von ε_{1s} in pionischem Wasserstoff ergeben den präzisesten Wert von a_{el}^h . Die gegenwärtige Genauigkeit von 10% in Γ_{1s} ist aber für die genaue Bestimmung von a^- nicht ausreichend.

Eine wesentliche Motivation des Experiments besteht in einer genaueren Bestimmung des Pion-Nukleon Sigma Terms $\sigma_{\pi N}$, der über die χ PT mit den Massen des $\frac{1}{2}^+$ Baryon-Oktetts verbunden ist und der durch a^+ bestimmt werden kann [Gas1988]. Weiters sind die Pion-Zerfallskonstante f_π und die Pion-Nukleon Kopplungskonstante $g_{\pi N}$ mit den π -N Streulängen verbunden. Die Zerfallskonstante f_π ist direkt mit a^- (bzw. b_1) über das *Tomozawa-Weinberg* Theorem verknüpft [Tom1966, Wei1966]. Die *Goldberger-Miyazawa-Oehme* Summenformel verbindet ebenfalls die ungeradzahlige Isospin-Streulänge a^- mit $g_{\pi N}^2$ [Gol1955]. Beide Konstanten sind wiederum miteinander über die *Goldberger-Treiman* Relation verbunden [Eri1988]. Somit legt eine Präzision der hadronischen Breite um 1% diese beiden Größen mit entsprechender Genauigkeit fest. Außerdem läßt sich die *Goldberger-Treiman* Diskrepanz bestimmen, die von $g_{\pi N}$ und f_π abhängt [Gas1988]. Der somit ermittelte Wert kann mit dem aus der χ PT folgenden Wert verglichen werden. Zusätzlich ist diese Diskrepanz in einfachster Näherung ident mit oben erwähntem $\sigma_{\pi N}$ [Ste1995].

Das Ergebnis dieses Experiments wird somit eine Überprüfung der Methoden der χ PT mit bisher nicht erreichter Genauigkeit erlauben und wird neue theoretische Berechnungen von a^- in höheren Ordnungen stimulieren.

Weiters wird das Ergebnis einen genauen Test von Rechnungen der hadronischen Eigenschaften des Pion-Nukleon-Systems am Streulimit ermöglichen. Durch Vergleich mit den Re-

sultaten aus Streuexperimenten läßt sich feststellen, ob die in diesen Experimenten durchgeführte Extrapolation zum Streulimit korrekt ist.

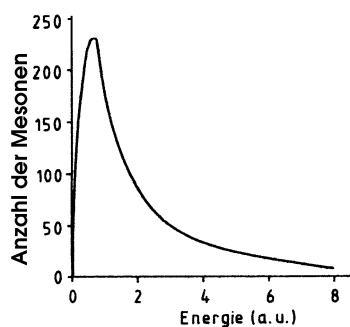
2.2 Abbremsung und Coulomb-Einfang von Pionen

2.2.1 Ablauf

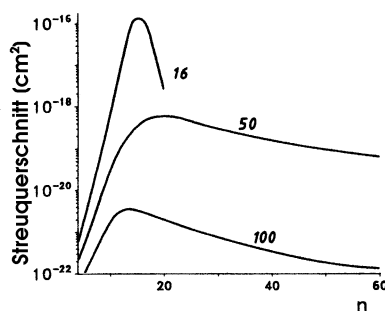
Die negativen Pionen werden nach dem Eintritt in Materie mit nicht-relativistischen Energien durch Kollisionen mit e^- abgebremst. Direkte Wechselwirkung mit den Kernen spielt hier noch keine Rolle. Üblicherweise wird der Energieverlust pro Weglänge mit der *Bethe-Bloch*-Formel beschrieben [Har1989a]:

$$-\frac{dE}{dx} = C \frac{Zz^2}{A\beta^2} \left\{ \left[\ln \left(\frac{2m_e c^2 \beta^2}{I(1-\beta^2)} \right) - \beta^2 - \sinh \frac{C}{Z} \right] + L_1 z + L_2 z^2 \right\} \quad (2.20)$$

$C \dots$ Konstante; $Z \dots$ Ordnungszahl; $A \dots$ Atommasse; $z \dots$ Ladung exotisches Teilchen; $\beta \dots$ Geschwindigkeit exotisches Teilchen; $I \dots$ Ionisationspotential; $L_1 \dots$ Barkas-Effekt¹; $L_2 \dots$ Bloch-Term



(a) Energieverteilung beim Einfang (μ^- in $Z = 40$).
1 a.u. = $1 R_A \approx 13,6$ eV



(b) Abhängigkeit des Streuquerschnitts σ von der Hauptquantenzahl der ersten gebundenen Zustände für μ^- mit 16, 50 und 100 eV in He.

Abbildung 2.1: Energieverteilung und Streuquerschnitte beim Einfang von exotischen Teilchen (hier dargestellt für μ^-) [Har1989a].

Der anschließende Coulomb-Einfang geschieht bei Pion-Energien, die dem ersten Ionisationspotential des Elements entsprechen, also bei einigen 10 eV (s. Abb. 2.1(a)). Der weitaus dominante Effekt ist der Einfang durch Emission von Auger-Elektronen, während radiativer Einfang vernachlässigbar ist. Der Radius des ersten gebundenen Zustandes des exotischen Teilchens ist etwa der Radius des Orbits des emittierten e^- . Das bedeutet für H und He (nur Emission von K-Elektronen) Werte für n_x , die aus der letzten Spalte in Tab. 2.1 folgen (s. Abb. 2.1(b)). In Atomen mit höherem Z geschieht der Einfang durch Emission von e^- aus

¹Unterschiedlicher Energieverlust für positive und negative Ladungen durch Verschiebung der Elektronen aufgrund des Feldes des Projektils

der L- oder M-Schale. Das bedeutet sehr hoch angeregte atomare Niveaus² (auf jeden Fall $n_x \gg 20$). Man geht generell von einer auf wenige Hauptquantenzahlen n_x konzentrierten Verteilung der Teilchen aus.

Die experimentellen Ergebnisse für die atomare Einfangwahrscheinlichkeit werden durch etliche Modelle, von denen einige im folgenden Abschnitt aufgeführt sind, recht gut wiedergegeben.

2.2.2 Theorien des Einfangs

Die Beschäftigung mit den Vorgängen des Einfangs reicht an die Anfänge der Entdeckung exotischer Atome zurück. Erste Berechnungen von *Fermi* und *Teller* [Fer1947, Whe1947] basierten auf klassischen und semi-klassischen Berechnungen des Energieverlustes eines μ^- in Materie (unterschiedlich für Metalle, Isolatoren und Gase).

Semi-empirische Rechnungen von *Schnewly*, *Pokrowsky* und *Ponomarev* [Sch1978] ergaben, daß der Einfangquerschnitt σ des negativen Teilchens mit dem leicht gebundenen Hüllenelektron (grundlegende Annahme des Modells) von Z , aber auch von der Bindungsenergie E_e und der Quantenzahl n_e des betroffenen e^- abhängt. Demgemäß werden die meisten Teilchen zuerst in molekularen Orbitalen eingefangen. Dann wandern sie zu jenem Atom im Molekül, welches die größere Elektronegativität hat. Anschließend regen sich in atomaren Orbitalen vor allem über Auger-Prozesse ab. Aus diesem Modell erhält man auch die beobachtete periodische Abhängigkeit der Einfangwahrscheinlichkeit von Z .

Weitere Verbesserung in der Übereinstimmung mit experimentellen Daten brachte eine quantenmechanische Berechnung des Problems auf Grundlage des obigen Modells [Egi1984]. In dieser Theorie ist der Einfangquerschnitt neben Z , E_e und n_e auch vom Drehimpuls ℓ_e des e^- abhängig. Für den Großteil der Atome des Periodensystems liegen die Effekte aufgrund des Einflusses der chemischen Bindungen in der Größenordnung der experimentellen Unsicherheiten und sind deshalb vernachlässigbar.

2.2.3 Einfang in Kohlenwasserstoffen

Jedoch spielt in Molekülen mit wasserstoffhaltigen Verbindungen der Art von Hydriden $Z_m H_n$ — so wie in den hier untersuchten Molekülen CH_4 und C_2H_2 — die Art der chemischen Bindung ($Z - H$ Bindung) sehr wohl eine wichtige Rolle [Hor1981]. Stellvertretend seien die Untersuchungen des „ π AX Projekts“ [Shi2000] erwähnt, die in Studien des Einfangs von π^- vor allem in Kohlenwasserstoffen [Shi1996] diese Abhängigkeit erforschten.

Die Wahrscheinlichkeit W_H^π , daß ein π^- , welches in einer Probe mit in Molekülen gebundenen H Atomen vom p eingefangen wird (nuklearer Einfang, Reaktion $p\pi^- \rightarrow n\pi^0 \rightarrow n + 2\gamma$), ist gegenüber der Wahrscheinlichkeit des Einfangs in reinem H_2 reduziert (Konvention $W_{H(H_2)}^\pi = 1$, $W_H^\pi \propto Z^{-3}$ für $Z < 10$) und stark von den Eigenschaften der chemischen Bindung, speziell von der Kovalenz der $Z - H$ Bindung, abhängig [Hor1981].

²Obwohl eigentlich nur für wasserstoffähnliche Systeme gültig, kann das entsprechende n_x grob aus Gl. 2.1 und 2.2 abgeschätzt werden.

Ein Modell zur Erklärung für den Einfang und die Abregung des π^- in Hydriden ist in Abb. 2.2 dargestellt. Durch Emission von Valenzelektronen werden die π^- zuerst in einem hoch angeregten molekularen Orbital eingefangen ($\pi^-Z_mH_n$) (I) und kommen dann in einem zweiten Schritt durch Auger Emission von „inneren“ Elektronen in ein atomares Orbital eines der beiden Bindungspartner. Dabei kann das Teilchen im H nur eingefangen werden, wenn es das e^- des H, welches die $Z-H$ Bindung aufbaut, durch Auger-Einfang ersetzt (II). Wird das Teilchen im H-Atom eingefangen, kann es aber durch *internen Transfer* zum schwereren Atom entlang der gemeinsamen Bindungsachse durchtunneln (III oben). Bricht die Bindung auf, bewegt sich das neutrale π^-H durch das Material oder Gas (III unten). Dann kann durch Stöße das π^- ebenfalls zu einem schwereren Atom überwechseln (*externer Transfer*: $\pi^-H + Z' \rightarrow \pi^-Z' + p$, IV unten), oder es wird nach der Kaskade im p des H absorbiert ($\pi^-H \rightarrow n + 2\gamma$) und verschwindet (IV oben).

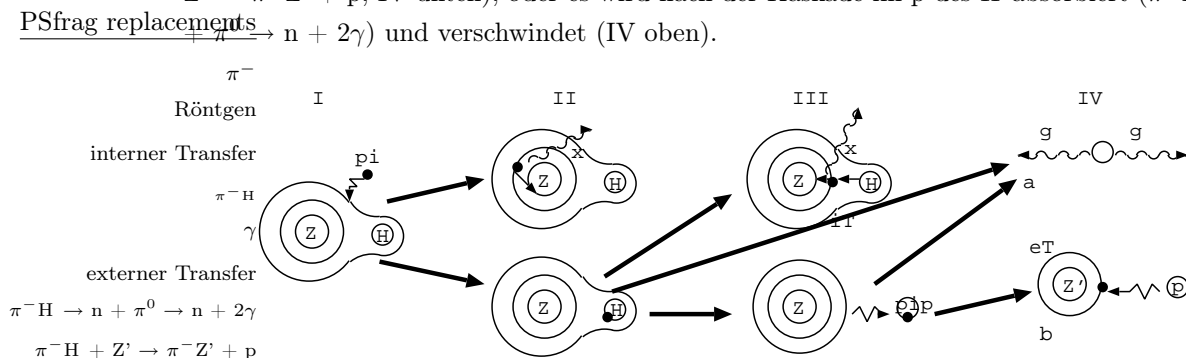


Abbildung 2.2: Modell für den π^- Einfang in Hydriden ($Z-H$), z.B. CH_4 , C_2H_2 . Nähere Erläuterungen im Text.

Die Pionen, die dem Atom Z durch internen oder externen Transfer zugeführt werden, nehmen an der Kaskade in diesem Atom teil. Dadurch verändert sich die Intensität Y der pionischen Röntgenstrahlung von Z abhängig davon, ob ein Transfer stattfindet oder nicht. Diese Transferreaktionen treten in diatomaren Molekülen mit gleichen Konstituenten (z.B. N_2) nicht auf. Somit ist die Intensität der Röntgenstrahlung abhängig von der chemischen Zusammensetzung des Moleküles (z.B. Y_{π^-O} von $O_2 \neq Y_{\pi^-O}$ von H_2O).

Der externe Transfer (gemessen in Gasmischungen $H_2 + X$ und $C_mH_n + X$ ($X \dots$ Edelgas)) verläuft in angeregten Zuständen des π^-H , da die Lebensdauer des $1s$ Zustandes dieses exotischen Atoms nur $< 10^{-15}$ s beträgt [Shi1996]. Vergleicht man Messungen dieses Prozesses aus Gasmischungen ($H_2 + Z$) mit jenen aus Gasmischungen ($C_mH_n + Z$), so bemerkt man, daß die π^- der π^-H Atome, die aus $\pi^-C_mH_n$ -Molekülen entstanden sind, mit einer zweimal geringeren Rate zum selben Atom Z transferiert werden, als die π^- der π^-H Atome, die aus π^-H_2 -Molekülen entstanden sind. Dieser Effekt dürfte daher herrühren, daß die π^-H Atome in Molekülen mit gebundenem H in einem weniger stark angeregten Zustand gebildet werden als in H_2 , und somit der Transfer-Wirkungsquerschnitt verkleinert und der nukleare Einfang verstärkt wird [Hor1981].

Beide Transfermethoden (intern und extern) sind experimentell schwer voneinander zu unterscheiden. Daher konnten ihre relative Häufigkeiten noch nicht quantifiziert werden.

Die Wahrscheinlichkeit W_H^π des nuklearen Pion-Einfanges im H-Kern von Hydriden Z_mH_n

ist u.a. abhängig von der Kovalenz der $Z - H$ Bindung (Symmetrie des gemeinsamen e^- -Paares in der Bindung), ihrer Energie und der Bindungsstärke der $Z - Z$ Bindung (einfache, doppelte oder dreifache Bindung). In CH_4 werden $W_{\text{H}(\text{CH}_4)}^\pi = 2,78 \pm 0,06\%$ [Pet1976] der gestoppten π^- im p des π^- -H Atoms eingefangen. Das bedeutet, daß $W_{\text{C}(\text{CH}_4)}^\pi = 97,22 \pm 0,06\%$ der π^- durch Einfang in ein atomares Orbital des C, internen Transfer oder externen Transfer im C nuklear eingefangen werden. Für $W_{\text{H}(\text{C}_2\text{H}_2)}^\pi$ konnte in der Literatur kein experimenteller Wert gefunden werden. Eine Abschätzung dieses Parameters ergibt aufgrund der kovalenten Dreifachbindung $\text{HC} \equiv \text{CH}$ $W_{\text{H}(\text{C}_2\text{H}_2)}^\pi \lesssim 0,3\%$ (s. A.3). Somit stehen mehr als 99,7% der im C_2H_2 -Molekül eingefangenen π^- für die Kaskade im C und für die Coulomb-Explosion zur Verfügung.

2.3 Die elektromagnetische Kaskade in exotischen Atomen

2.3.1 Die Kaskade im Allgemeinen

Als *Kaskade* bezeichnet man die Abfolge der verschiedenen Prozesse der Abregung des exotischen Atoms beginnend beim Einfang des Elementarteilchens in den hochangeregten ersten stationären Zustand bis hin zum Grundzustand (bei myonischen Atomen) bzw. bis zu dem Zustand, von dem aus der nukleare Einfang im Kern mit anschließender Absorption erfolgt (bei hadronischen Atomen). Sie hängt stark von den Experimentparametern ab (Dichte des Targets) und liefert wichtige Informationen über die Teilcheneigenschaften, die Wechselwirkung mit dem Kern, Dynamik des Systems, etc. Die theoretische Beschreibung beruht auf dem „Standard-Cascade-Modell (SCM)“ und seinen Erweiterungen ([Jen2002a]), sowie einem weiteren Modell ([Fai1999]). Alle Modelle beinhalten eine Vielzahl an möglichen Prozessen zur Abregung des exotischen Atoms.

Folgend seien diese Effekte aufgeteilt nach solchen, die das exotische System isoliert betreffen und nach Kollisionsprozessen (s. auch Abb. 2.3):

Interner Auger Effekt ist für $Z > 1$ die Abregung durch Emission eines Hüllenelektrons aus dem Atom und dominiert unmittelbar nach dem Einfang am Beginn der Kaskade. Zumeist finden zirkulare (s. S. 19) p-Übergänge $[(n_x, \ell_x) = (n_{x,i}, n_{x,i} - 1) \rightarrow (n_{x,i} - 1, n_{x,i} - 2)]$ wesentlich schneller als s-Übergänge $[(n_x, \ell_x) = (n_{x,i}, n_{x,i} - 2) \rightarrow (n_{x,i} - 1, n_{x,i} - 2)]$ statt [Bur1953].

Radiative Abregung ist die Abregung durch Strahlungsübergänge des exotischen Teilchens und überwiegt in der letzten Phase der Kaskade, wenn nur noch wenige Elektronen vorhanden sind. Die Messung der Energien und Intensitäten der ausgesandten Röntgenstrahlung sind die wichtigsten Quellen von Informationen über Kaskadenprozesse in exotischen Atomen.

Nuklearer Einfang: Am Ende der Kaskade kommt es bei hadronischen Atomen zum Überlapp der Wellenfunktion des Elementarteilchens und des Kerns und somit zum nuklearen Einfang.

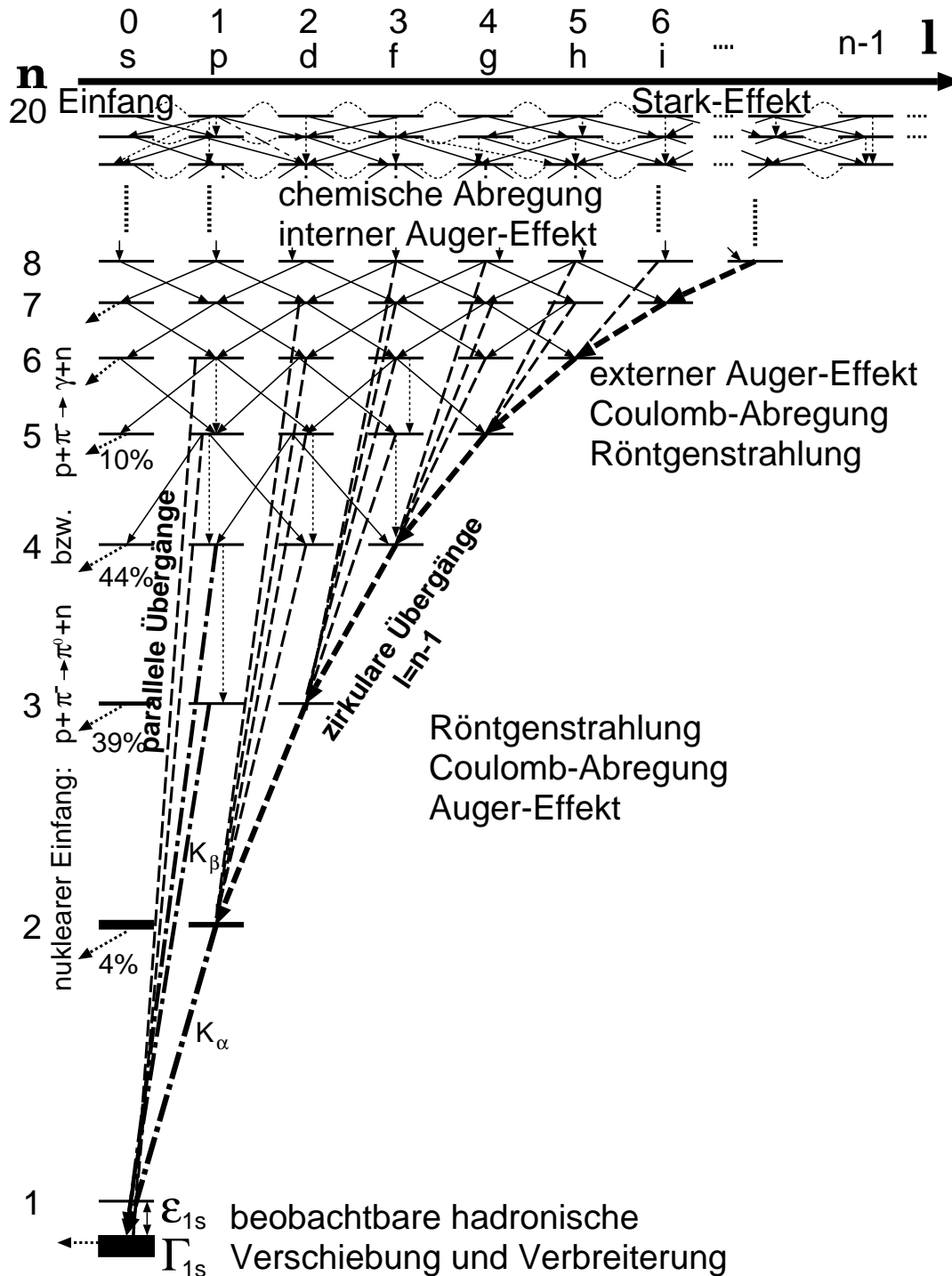


Abbildung 2.3: Hier abgebildet ist ein prinzipielles Termschema eines exotischen Atoms am Beispiel des π^-H . Die Pfeile bedeuten die häufigsten Übergänge in der Abregung des Systems. Man unterscheidet den oberen Teil der Kaskade nach dem Einfang ($n_x > n_{x,c}$), den mittleren Teil, der vom externen Auger Effekt und der Coulomb-Abregung beherrscht wird, und den letzten Teil der Kaskade (in π^-H ab $n_{x,c} \approx 5$), in dem die Strahlungsübergänge überwiegen. Die Werte für die nukleare Absorption stammen aus [Mar1989].

Die folgenden stoßabhängigen Prozesse der Kaskade treten nur bei exotischem Wasserstoff, eventuell noch bei Helium, auf. Sie seien der Vollständigkeit halber hier angeführt:

Externer Auger Effekt ist die Abregung durch Emission eines Hüllenelektrons aus einem Nachbaratom. Dies geschieht vor allem bei großer Dichte, d.h. bei vielen Stößen.

Beim **Stark Effekt** durchdringt das neutrale exotische Atom aufgrund seiner elektrischen Neutralität die Elektronenhülle eines Nachbaratoms. Die Coulombfelder dieser Nachbarn induzieren „Stark-Oszillationen“, die die Bahndrehimpulszustände ℓ mit *gleicher* Hauptquantenzahl n_x mischen.

Coulomb-Abregung ist die Abregung von neutralen exotischen Atomen bei Stößen im Coulombfeld eines Nachbaratoms. Die beim Übergang $\Delta n = -1$ gewonnene innere Anregungsenergie wird auf die kinetische Energie der Stoßpartner aufgeteilt.

Chemische Abregung bezeichnet die Summe der dominanten Prozesse im oberen Teil der Kaskade, die zu einem Aufbrechen der Molekülbindung durch Anregung der Rotations- und Vibrationszustände führen.

Während der Kaskade treten Effekte auf, die keine Abregung für das exotische System bringen und auf die in dieser Arbeit speziell eingegangen wird. Ihre Untersuchung (v.a. Coulomb-Explosion) liefert wertvolle Information über den Ablauf der Kaskade und den Zustand des exotischen Atoms:

Coulomb-Explosion tritt bei exotischen Molekülen auf. Dabei wird das exotische System beschleunigt als Folge des Aufbrechens der molekularen Bindung nach dem Entfernen von Valenzelektronen (z.B. durch Auger-Effekt nach Einfang eines negativen Teilchens). Aufgrund der elektrostatischen Abstoßung der so ionisierten Atome werden die Fragmente (also auch das exotische System) stark beschleunigt.

Durch **electron-refilling** wird die Elektronenhülle des exotischen Moleküles wieder aufgefüllt. Die e^- können einerseits aus höheren Schalen des Atoms stammen, andererseits aus Ladungsaustausch-Reaktionen durch Stöße mit Nachbaratomen bzw. -molekülen.

Die Dauer der Kaskade für π^- (abzw. μ^-) liegt für Gase in der Größenordnung von 10^{-12} s und in Festkörpern im Bereich von 10^{-9} s. Zwei Messungen der Zeit bis zur Absorption von π^- in flüssigem Wasserstoff ergaben $t_{exp} = 1,2_{-0,5}^{+1,2}$ ps [Fie1960] bzw. $2,3 \pm 0,6$ ps [Doe1963]. Weiters berechnete [Bur1953] die Zeit für den Übergang von $n_{\mu^-} = 8$ auf das 1s-Niveau in Brom zu $t_{theo} = 0,004$ ps und in C $t_{theo} = 0,09$ ps.

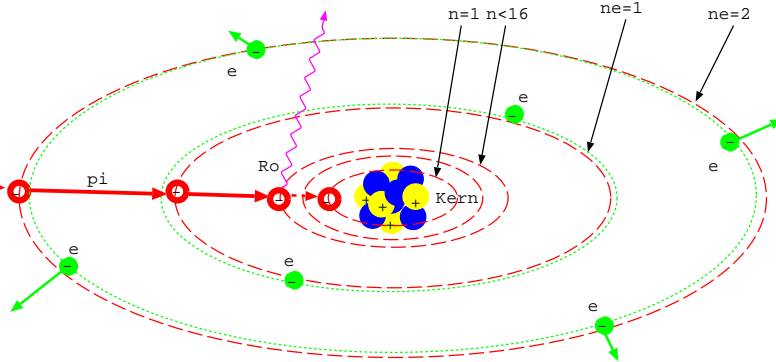
2.3.2 Die Kaskade für Atome mit $Z > 2$

Nachfolgend ist die Kaskade pionischer Atome an den Molekülen CH_4 und C_2H_2 , die Gegenstand dieser Arbeit sind, ausgeführt.

Nach dem Einfang des π^- im Molekül oder Atom befindet es sich in einem sehr hoch gelegenen Niveau und es beginnt mit der Kaskade der Abregungsprozesse (s. Abb.2.4). Vor allem am Beginn der Kaskade findet die Abregung durch Emission von Hüllenelektronen statt (*interner Auger Effekt*). Kommt das exotische Atom durch Stoßprozesse einem Nachbaratom nahe genug, kann die Abregung auch durch *externen Auger-Effekt* vor sich gehen. Die Wahrscheinlichkeit dafür ist aber kleiner als jene für die Emission der internen e^- .

PSfrag replacements

e^-
 π^-
 Kern
Abbildung 2.4: 1
 Einfang und
 Kaskade; $n_i = 15$
 $n_e = 15$
 $n = 31$
 Kohlenstoff



Wenn nach einigen Auger-Übergängen die Energie nicht mehr ausreicht, um eine Abregung über diesen Effekt zu bewirken, oder wenn alle Elektronen ionisiert wurden, sind nur noch Strahlungsübergänge möglich. Diese radiativen Kaskadenprozesse erfolgen innerhalb des Bohrradius der K-Elektronen. Daher kann der Einfluß der Elektronenschale vernachlässigt werden. Weiters ist in der Betrachtung leichter Atome auch die endliche Ausdehnung des Kerns vernachlässigbar.

Die emittierte Röntgenstrahlung kann mittels Röntgenspektroskopie direkt nachgewiesen werden.

Die Kaskade bei Atomen mit $Z > 2$ ist im wesentlichen durch das Konkurrenzverhalten des Auger-Effekts mit den radiativen Übergängen gekennzeichnet. Die meisten anderen in 2.3.1 erwähnten Prozesse, die bei H und He eine entscheidende Rolle spielen, sind hier nur von geringer Bedeutung [Har1989b] — wie aus Tab.2.2 ersichtlich ist.

Kern	Int. Aug.	X-Ray	Nukl. Einf.	Ext. Aug.	Stark Mix.	Coul. Abr.	Chem. Abr.	Coul. Expl.	e^- Ref.
H	w	m	m	s	s	s	s	w	w
He	m	m	m	s	m	w	-	w	w
$Z > 2$	s	m	m	(m)	w	w	(w)	(m)	(s)

Tabelle 2.2: Relative Stärke der Prozesse in der Kaskade exotischer Atome in Abhängigkeit der Kernladung. [Jen2002b]

s...starker Effekt, m...mittelmäßig, w...schwach, ()... nur für Moleküle

Wesentlich erschwert wird die Beschreibung der Kaskade durch die Bildung exotischer Ionen, die mit Molekülen und anderen Ionen chemisch reagieren können. Die Details der Abregung hängen sehr stark von der molekularen Struktur des Materials ab. Allen Materialien ist

aber gleich, daß die exotischen Atome schneller zu thermischen Energien abgebremst werden als bei $Z = 1$, da die Wirkungsquerschnitte der elastischen Streuung groß ($\approx 10^{-15} \text{ cm}^2$) sind [Men2001]. Allerdings wirkt die Coulomb-Explosion dem entgegen.

Im *oberen Teil* der Kaskade ($n_x \geq n_{eq}$) bewegt sich das eingefangene Teilchen auf einer fast klassischen Bahn und verliert Energie durch Wechselwirkung mit den Elektronen und durch Abstrahlung von Bremsstrahlung, wobei man einen kontinuierlichen Energieverlust annehmen kann. *Zirkulare Zustände*, d.h. Niveaus mit $\ell_x = n_x - 1$, werden sehr schnell erreicht. Die Kaskade ist für hohe n_x vollkommen durch den Auger-Effekt dominiert.

Im *unteren Teil* der Kaskade erreicht das Teilchen Orbits mit $n_x \leq n_{eq}$, deren Bohrradius kleiner als jener der K-Elektronen ist. Die Berechnung dieses nun wasserstoffähnlichen Problems wird quantenmechanisch durchgeführt. Schon Rechnungen von *Burbidge* [Bur1953] zeigten, daß auch hier der Auger-Effekt in Konkurrenz zur radiativen Abregung steht, worauf im folgenden Abschnitt näher eingegangen wird.

Direkte experimentelle Untersuchungen zum oberen Teil der Kaskade existieren nicht, da die emittierten Auger-Elektronen nur Energien von einigen wenigen keV haben und daher äußerst schwer nachweisbar sind. Somit muß man sich auf Simulationen der Kaskade stützen.

Strahlungs- und Auger-Übergänge

Wie in Tab. 2.2 zu sehen ist, sind die Strahlungsübergänge und Auger-Übergänge die vorherrschenden Prozesse der Kaskade von exotischen Atomen mit $Z > 2$.

Charakteristisch für Übergänge durch den Auger-Effekt ist, daß der Sprung zwischen den Niveaus den kleinsten Wert ($\Delta n_x = -1$) annimmt. Falls jedoch nach einigen Auger-Prozessen die Energie des Überganges nicht genügt, um eines der restlichen e^- freizusetzen, sind auch Übergänge mit größerem Δn_x möglich. Das führt dann auch für Auger-Übergänge zur Bevölkerung hoher ℓ_x -Niveaus. Multipole von Monopol- bis Oktupol-Übergängen werden in die Rechnungen einbezogen, jedoch sind Dipol-Übergänge (Auswahlregel $\Delta \ell_x = \pm 1$) die häufigsten. Damit ist die Verschiebung der Drehimpulse ℓ_x in beide Richtungen gleich verteilt.

Im Gegensatz dazu bevorzugen die radiativen Übergänge eine möglichst große Änderung Δn_x mit Änderungen von $\Delta \ell_x = \pm 1$ (vor allem -1 , Auswahlregel für Dipolstrahlung), wodurch die Verteilung der Zustände zu kleineren Drehimpulsen hin verschoben wird (s. Abb. 2.3). Dabei handelt es sich vor allem um elektrische Multipol-Strahlung, da magnetische Multipol-Übergänge bei gleicher Multipolarität mehr als eine Größenordnung langsamer sind, sodaß überwiegend Dipolstrahlung emittiert wird. Quadrupol-Übergänge spielen nur in den letzten Übergängen myonischer Atome mit hohem Z eine Rolle, da die exotischen Teilchen in hadronischen Atomen mit hohem Z schon in höheren Niveaus absorbiert werden. Es bilden sich Serien von Übergängen, die von gleichem ℓ_x mit verschiedenen $n_{x,i}$ ausgehend den gleichen Grundzustand $n_{x,f}$ mit $\ell_x - 1$ bevölkern (Lyman-, Balmer-, Paschen-Serien, ...). Strahlungsübergänge treten vor allem von inneren Niveaus ($\ell_x \ll n_x$) aus auf, da dort Δn_x groß ist.

Experimente unterstützen die Annahme, daß unterhalb einer gewissen Ordnungszahl Z die Elektronen während der Kaskade einzeln nacheinander von den äußeren bis in die inneren

Schalen aus dem Atom entfernt werden, sodaß am Ende fast komplette Ionisation erreicht wird [Sim1988, Sim1994].

Die Raten der Dipol-Strahlungsübergänge für exotische Atome mit $Z > 2$ skalieren mit den Raten aus atomaren Wasserstoff durch

$$\Gamma_{x,n_i\ell_i \rightarrow n_f\ell_f}^{rad,Z} = \mu_x Z^4 \Gamma_{e^-,n_i\ell_i \rightarrow n_f\ell_f}^{rad,H} \quad (2.21)$$

Die radiativen Übergangswahrscheinlichkeiten ($\hbar W_{rad} = \Gamma_{rad}$) für zirkulare Übergänge ergeben [Sim2003]:

$$W_{rad}[s^{-1}] = \frac{\alpha^5 c^2}{3\hbar} Z^4 m_x \frac{2^{4n_x} n_x^{2n_x-4} (n_x-1)^{2n_x-2}}{(2n_x-1)^{4n_x-1}} \quad (2.22)$$

$$= 5,355\,001\,868 \cdot 10^9 \frac{m_x}{m_e} Z^4 2^{4n_x} \left[\frac{n_x(n_x-1)}{(2n_x-1)(2n_x-1)} \right]^{2n_x} \frac{2n_x-1}{n_x^4 (n_x-1)^2}$$

$$W_{rad}[s^{-1}] \approx 10,71 \cdot 10^9 \frac{m_x}{m_e} \frac{Z^4}{n_x^5} \quad (\text{Näherungsformel für hohe } n_x) \quad (2.23)$$

Die Raten der internen p-Auger und s-Auger Übergänge sind in [Bur1953] angegeben:

$$W_{p-A} \propto \frac{1}{3} \left(\frac{Z-1}{Z} \right)^2 \frac{\pi m_e \epsilon^4}{\mu_x^2 \hbar^3} \quad W_{s-A} \propto \left(\frac{Z-1}{Z} \right)^4 \frac{\pi m_e \epsilon^4}{\mu_x^4 \hbar^3} \quad (2.24)$$

Das Verhältnis der Raten der Emission von K-Elektronen und der Raten des radiativen Übergangs ist gegeben durch [Har1989b]:

$$\frac{\Gamma_{Aug}}{\Gamma_{rad}} = \frac{\frac{N_K}{2} \sigma_{\gamma e(E)}^{(Z-1)}}{(Z-1)^2 \sigma_T} \quad (2.25)$$

Dabei ist $\sigma_{\gamma e(E)}^{(Z-1)}$ der photoelektrische Wirkungsquerschnitt bei Energie E für ein Atom mit $Z-1$, N_K die Besetzungszahl der K-Schale und $\sigma_T = \frac{8\pi e^4}{3m_e^2 c^4}$ der Thomson Wirkungsquerschnitt (s. Tab. A.2), wobei nur Monopol- und Dipol-Terme berücksichtigt sind.

Am Beginn der Kaskade (hohes n_x) dominiert vor allem Auger-Abregung, da die Übergangsenergien ΔE klein sind. Am Ende der Kaskade, wenn nur noch wenige Elektronen vorhanden sind (z.B. sind fast alle μ^- -Ne und μ^- -Ar Atome komplett ionisiert, wenn das μ^- $n_\mu = 5$ erreicht hat [Bac1989]), oder wenn ΔE so groß wird, daß $\Gamma_{rad} > \Gamma_{Aug}$ wird, überwiegen die Strahlungsübergänge (s. Abb. 2.3) mit möglichst großem Δn_x . Diese können dann durch Röntgenspektroskopie direkt beobachtet werden. Die Raten der Strahlungsübergänge nehmen rasch mit steigendem $n_{x,i}$ ab, der schnellste Übergang erfolgt von $2p \rightarrow 1s$.

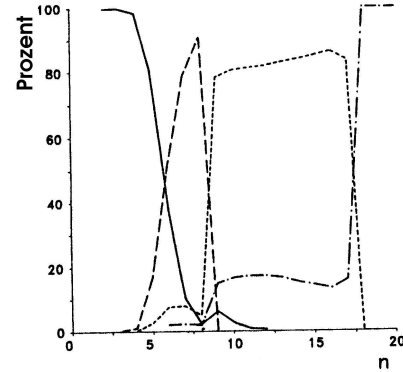
Am Beispiel der Abb. 2.5 sieht man, daß im gleichen Stadium der Kaskade meistens ein Prozeß über die anderen konkurrierenden Prozesse dominiert.

Die zirkularen Niveaus³ werden durch beide Mechanismen bevölkert (s. Abb. 2.3). Ist das exotische Teilchen in einem zirkularen Zustand, führt dies zu einer schrittweisen Abregung $(n, \ell) = (n_{x,i}, n_{x,i} - 1) \rightarrow (n_{x,i} - 1, n_{x,i} - 2)$. Speziell Strahlungsübergänge mit großen Δn_x

³Niveaus mit $\ell = n - 1$

Abbildung 2.5: Dominierende Übergänge in der Kaskade bei $Z > 2$ (hier μ^- Fe). Aufgetragen ist der Beitrag der verschiedenen Prozesse in Abhängigkeit der Hauptquantenzahl. [Har1989b]

—... Röntgenstrahlung - - -... K-Auger-Effekt
 - - -... L-Auger-Effekt - · - · -... M-Auger-Effekt



führen zu diesen Niveaus und verlangsamen damit die Kaskade, da nur noch Übergänge mit $\Delta n_x = -1$ auf das folgende zirkulare Niveau möglich sind. Gegen Ende der Kaskade finden daher fast nur noch zirkulare Dipolübergänge statt („zirkulare Kaskade“). Treten im Spektrum ausschließlich zirkulare Übergänge auf, kann angenommen werden, daß alle e^- emittiert wurden.

Für $Z > 6$ (Kohlenstoff) ist $\Gamma_{Aug} > \Gamma_{rad}$, d.h. die Dauer der Kaskade ist durch die Strahlungsrate des ersten und damit auch langsamsten radiativen Übergangs bestimmt, wenn keine Elektronen mehr für Auger-Prozesse vorhanden sind. Diese Strahlungsrate liegt bei 10^{-10} s^{-1} für leichte bis 10^{-14} s^{-1} für schwere Atome.

Falls die K-Schale voll besetzt ist, dann steigt die Hauptquantenzahl des höchsten Zustandes, bei dem $\Gamma_{Aug} \approx \Gamma_{rad}$ ist, langsam mit Z an. Der Bereich dieser Zustände liegt bei den meisten Atomen zwischen $n_x \approx 7$ und $n_x \approx 3$.

Die Dichteabhängigkeit der Kaskade

Sind alle e^- vorhanden, hat der Auger-Effekt die größte Wahrscheinlichkeit. Es hängt aber stark von der atomaren Struktur und dem chemischen und physikalischen Zustand des Targets ab, ob die durch die emittierten e^- verarmten Niveaus wieder schnell genug aufgefüllt werden. Im einfachsten Fall betrachtet man nur Emission und Wiederauffüllen in der K-Schale [Kni1983]. Kompliziertere Modelle beinhalten auch das Auffüllen in der L-Schale und andere Effekte. Die Rate des electron-refilling ist gegeben durch [Bac1989]

$$\lambda_{ref} = \rho v \sigma_{ecap} \quad (2.26)$$

mit der Targetdichte ρ , Geschwindigkeit der ionisierten exotischen Atome v und dem Wirkungsquerschnitt für Elektronen-Einfang σ_{ecap} .

Das Verhältnis der Röntgenintensitäten von *parallelen Übergängen*⁴ bzw. Serien-Übergängen⁵ zur Intensität des jeweiligen zirkularen Überganges (z.B. $\frac{5f \rightarrow 4d}{5g \rightarrow 4f}$) ist von der Anzahl der für den Auger-Effekt zur Verfügung stehenden Elektronen abhängig, da nur die radiativen Übergänge rasch auf eine zirkulare Kaskade führen.

⁴Übergänge $(n_i, \ell_i) \rightarrow (n_i - 1, \ell_i - 1)$ mit $\ell_i < n_i - 1$

⁵ $(n_i, \ell_i) \rightarrow (n_f, \ell_f)$ mit $\Delta n > 1$ und $\ell_f = n_f - 1$

Dieses Verhältnis sinkt bei abnehmender Gasdichte. Das ist bedingt durch das verringerte Wiederauffüllen der Schalen aufgrund der reduzierten Zahl von Stößen mit Nachbarmolekülen, da bei sinkendem Druck p die Teilchendichte n abnimmt und somit die mittlere freie Weglänge \bar{l} gemäß

$$\bar{l} = \frac{1}{\sqrt{2}n\sigma} \quad (2.27)$$

zunimmt (n... Teilchendichte, σ ... Streuquerschnitt). Das führt dazu, daß die Kaskade bereits vor einem Stoßprozeß beendet ist. Bei geringem Druck verlieren deshalb leichte Atome sämtliche Elektronen durch Auger-Effekt, bevor ein Stoß mit einem Nachbaratom möglich ist. Zur weiteren Abregung sind daher nur noch radiative Kanäle möglich. Diese führen schnell durch ihre größeren Δn_x auf eine zirkulare Kaskade mit steigender Rate in den zirkularen Übergängen und sinkender Rate in den parallelen bzw. Serien-Übergängen [Kir1999].

Im anderen Fall, wenn die Kaskade zum Zeitpunkt des Stoßes mit einem Nachbaratom noch nicht beendet ist, werden die Niveaus mit $\ell_x \ll n_x$ bevölkert. Dies erhöht das Verhältnis der Intensität der parallelen bzw. Serien-Übergänge zu den zirkularen Übergängen. In Gasen mit größerem Z können die fehlenden K- und L-Elektronen aus höheren Schalen ersetzt werden, weswegen diese Abhängigkeit der Röntgenintensitäten vom Druck weniger ausgeprägt ist.

Je höher also die Atomdichte ist, desto höher ist die Wahrscheinlichkeit für Auger-Übergänge, die das eingefangene Teilchen davon abhalten, zirkulare Orbits zu erreichen. Damit sind die parallelen bzw. Serien-Übergänge bei hoher Dichte häufiger.

Diese Dichteabhängigkeit der Intensitätsverhältnisse der Röntgenlinien wurde erstmals bei myonischen Atomen bei hohen Drücken nachgewiesen [Kni1983, Ehr1983]. Einatomige Gase (Edelgase) zeigen bei Zimmertemperatur unterhalb von ca. 10 bar keine Änderung des Intensitätsverhältnisses mehr, d.h. die Kaskade ist schon abgeschlossen bevor ein Stoß mit electron-refilling erfolgt. Zum Beispiel hat antiprotonisches Kr unter 50 mbar Auffüllungsrate von 10^9 s^{-1} , während die radiativen Raten mehr als 10^{10} s^{-1} betragen. Währenddessen ist bei Drücken über 10 bar das electron-refilling von der gleichen Größenordnung, wie die Emission durch Auger-Effekt. Zum Beispiel wurde die Auffüllungsrate der Niveaus von μAr^{10+} bei 5 bar zu $5 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$ bestimmt. Das ist vergleichbar mit den Strahlungsraten bei $n_\mu \approx 10^{12}$ [Har1989b]. Bei mehratomigen Gasen liegt diese Schwelle jedoch bei weniger als 0,5 bar, d.h. die Stoßzahl ist in diesem Bereich (< 10 bar) 20-mal größer als bei einatomigen Gasen, bzw. die Zeit zwischen den Stößen entsprechend kleiner. Dieser Unterschied im Verhalten der Gase mit dieser Verringerung dieses Schwellwerts war ein Hinweis auf den zu erwartenden Effekt der Coulomb-Explosion [Kni1983]. Das heißt, daß die Coulomb-Explosion das electron-refilling und damit die Druckabhängigkeit der Kaskade um mehr als eine Größenordnung verstärkt.

Vergleiche mit Rechnungen zeigen, daß die Moleküle noch nicht fragmentiert sind, wenn das exotische Teilchen n_{eq} (s. 2.1) erreicht. Die Kaskade geht im oberen Teil innerhalb des Moleküles vor sich, bevor das Molekül durch die Abstoßung der freigelegten Kernladungen bei geringerem n_x durch die Coulomb-Explosion zerstört wird.

Zusammenfassend sieht man, daß der Abregungsprozeß die Elektronenhülle Schale um Schale ionisiert, wodurch frühzeitig ein hoher Ionisationsgrad erreicht wird. Das Röntgenspektrum der exotischen Atome ist einerseits eine Funktion des chemischen Zustandes (beteiligte

Elemente und Molekülstruktur), andererseits vom physikalischen Zustand des Targets abhängig (Dichte, Atomgröße bei Mischungen u.s.w.). Diese Zusammenhänge resultieren aus dem Coulomb-Einfang, der vom Einfangquerschnitt σ und der Flußdichte der einfallenden Teilchen abhängt. Die Abhängigkeit beider Parameter von der Energie der Teilchen wird durch die Elektronenstruktur des Targetmaterials bestimmt. Außerdem ist die Kaskade der Abregungsprozesse sensitiv auf die Dichte des Materials. Die Hauptquantenzahl n_x der Niveaus, die nach Emission von Auger-Elektronen wieder aufgefüllt werden und die Rate dieses electron-refilling beeinflussen das Konkurrenzverhalten zwischen Auger- und radiativen Übergängen. Dadurch ergeben sich die Intensitätsverteilungen der Röntgenstrahlung bei gegebener Population der ℓ_x -Zustände nach dem Einfang.

2.4 Coulomb-Explosion

Die Coulomb-Explosion von exotischen Atomen tritt bei Experimenten fast immer auf (allerdings je nach Molekül mit unterschiedlicher Intensität), da die meisten Targetgase in molekularer Form vorliegen (H_2 , O_2 , N_2 , ...). Jedoch war sie bisher bei der Erforschung exotischer Atome aufgrund der geringen Energieauflösung der Detektoren nicht direkt meßbar.

2.4.1 Coulomb-Explosion in Kohlenwasserstoffen

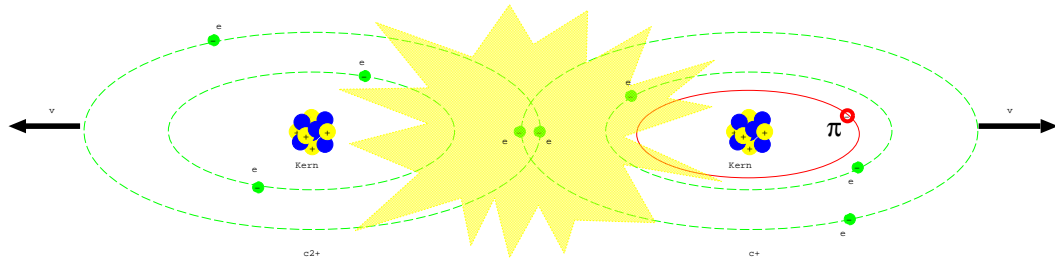


Abbildung 2.6: Coulomb-Explosion in C_2H_2 durch Einfang eines Pions.

Ein Kohlenwasserstoff-Molekül (hier speziell Azethylen C_2H_2 bzw. Methan CH_4) fängt ein π^- unter Emission von Valenzelektronen ein. Durch Auger-Effekt werden weitere Elektronen emittiert. Aufgrund der abstoßenden Coulombkraft werden die nun nicht mehr elektrisch abgeschirmten Kerne stark in entgegengesetzte Richtungen beschleunigt, wodurch die Molekülbindung aufbricht (s. Abb. 2.6). Das π^- bleibt bei einem der Kerne „haften“. Das exotische System πC bekommt eine erhöhte kinetische Energie $T_{\pi C}$, die vom Coulomb Potential $V_{C_2^+}$ der Abstoßung resultiert. Dabei wird für $V_{C_2^+}$ ein einfaches Coulomb Potential für Punktladungen angenommen.

$$V_{C_2^+}(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1^+ q_2^+}{r} e^2 \quad (2.28)$$

Durch die Explosion erhält das exotische Atom die kinetische Energie

$$T_{\pi C} = \frac{m_{\pi C} \vec{v}_{\pi C}^2}{2} . \quad (2.29)$$

und es erhöht sich die kinetische Energie des anderen Fragments, T_C , bzw. seine Geschwindigkeit \vec{v}_C . Aus der (klassischen) Impulserhaltung folgt im Falle von zwei Explosionsfragmenten

$$\vec{v}_C = -\frac{m_{\pi C}}{m_C} \vec{v}_{\pi C}, \quad (2.30)$$

mit der Kernmasse m_C von ^{12}C (per Definition 12·u), und der Masse $m_{\pi C}$ von pionischem Kohlenstoff ($m_C + m_\pi - \text{Bindungsenergie}$).

Das Potential $V_{C_2^+}$ teilt sich gemäß dem Verhältnis der Massen der beiden Fragmente (s. Tab. A.2) auf:

$$V_{C_2^+} = T_{\pi C} + T_C \quad (2.31)$$

Somit läßt sich aus der gemessenen Dopplerverbreiterung über die daraus deduzierte kinetische Energie $T_{\pi C}$ auf die Größe des abstoßenden Potentials $V_{C_2^+}$ schließen und damit der Ladungszustand des Moleküls bei der Explosion berechnen.

2.4.2 Auswirkungen der Coulomb-Explosion

Die erhöhte Geschwindigkeit des exotischen Systems hat zwei Konsequenzen für das Röntgenspektrum der pionischen Kaskade:

1. Das exotische Atom hat zum Zeitpunkt der Explosion das Ende der Kaskade noch nicht erreicht. Die erhöhte Geschwindigkeit \vec{v} führt zu einer Verschiebung der Frequenz ν der Röntgenstrahlung gegenüber der Ruhefrequenz ν_0 durch den Doppler Effekt im nicht-relativistischen Fall $\beta \ll 1$.

$$\nu = \nu_0 (1 \pm \beta) \quad \text{mit} \quad \beta = \frac{v_x}{c} \quad (2.32)$$

Da die Explosion der Moleküle im Gas isotrop in den Raumwinkel 4π erfolgt, sind die Geschwindigkeitsvektoren \vec{v} im Raum gleich verteilt. Sichtbar wird allerdings nur die Komponente v_x in Richtung des Spektrometers. Dies führt im Linienspektrum wegen $E = h\nu$ summiert über alle Frequenzverschiebungen zu einer Doppler-Verbreiterung der Röntgenlinien mit der Energie E_0 .

$$\frac{\Delta E_{Dop}}{E_0} = \frac{\Delta\nu}{\nu_0} = \beta \quad \text{wobei} \quad \Delta\nu = |\nu - \nu_0| \quad (2.33)$$

Mit der über die Verbreiterung bestimmten Geschwindigkeit β ist der Zusammenhang zur kinetischen Energie des Fragments $T_{\pi C}$ und dem Coulomb Potential vor der Explosion $V_{C_2^+}$ gegeben.

Tab. 2.3 schätzt die zu erwartenden Werte der Verbreiterung im Falle von C_2H_2 unter Annahme verschiedener Ladungszustände der beiden Bruchstücke ab (berechnet mit Gl. 2.28–2.33 unter der Annahme $m_C = m_{\pi C}$).

Durch einen numerischen Vergleich mit der mittleren kinetischen Energie E_{th} eines Gases aus Kohlenstoffatomen bzw. dessen mittlerer thermischer Geschwindigkeit $v_{th} = 635,42 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ bei 295 K kann man auf die Stärke der Coulombabstoßung zurückschließen.

q_1^+	q_2^+	$q_1^+ q_2^+$	$V_{C_2}^+$ [eV]	$\beta \cdot 10^{-6}$	v_x [m/s]	$T_{\pi C}$ [eV]	ΔE_{Dop} [meV]	Γ_D [meV]
1	1	1	12,0	32,5	9 749,6	5,98	96,7	193,4
1	2	2	23,9	46,0	13 788,1	12,0	136,8	273,6
2	2	4	47,9	65,0	19 499,3	23,9	193,4	386,8
2	3	6	71,8	79,7	23 881,6	35,9	236,9	473,8
3	3	9	107,7	97,6	29 248,9	53,9	290,1	580,2
3	4	12	143,6	112,7	33 773,7	71,8	335,0	670,0
4	4	16	191,5	130,1	38 998,6	95,8	386,9	773,8
4	5	20	239,4	145,4	43 601,7	119,7	432,5	865,0
5	5	25	299,2	162,6	48 748,2	149,6	483,6	967,2
5	6	30	359,1	178,1	53 401,0	179,5	529,7	1 059,4

Tabelle 2.3: Berechnung des Coulomb Potentials $V_{C_2}^+$ zweier ionisierter $\pi^{-12}C$ Atome mit Ionisationsgrad q_1^+ bzw. q_2^+ , der resultierenden Geschwindigkeit der Fragmente nach der Coulomb-Explosion, sowie der Dopplerverschiebung ΔE_{Dop} der Röntgenlinie. Der dadurch verursachte Doppler-Anteil (Dopplerbox) in der Breite der Linie beträgt $\Gamma_D = 2 \Delta E_{Dop}$.

2. Außerdem verkleinert sich für das exotische Atom die mittlere freie Flugzeit \bar{t} bis zum nächsten Stoß, womit die Anzahl der Stöße pro Zeiteinheit ansteigt. Daher ist die Stoßzahl stark erhöht und vergleichbar mit der Stoßzahl bei hohen Drücken. Ist die Kaskade noch nicht abgeschlossen, bevor ein Stoß mit einem Nachbarmolekül erfolgt, hat dies Auswirkungen auf die Intensitätsverhältnisse im Spektrum. Für das Targetgas (hier C_2H_2), welches als ideales Gas angenommen werden kann, erhält man die mittlere Flugzeit $\bar{\tau}$ bzw. die mittlere Stoßzahl \bar{Z} aus der kinetischen Gastheorie mit der mittleren freien Weglänge \bar{l} aus Gl. 2.27 und der mittleren thermischen Geschwindigkeit der Maxwell'schen Geschwindigkeitsverteilung

$$\bar{c} = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}} \quad (2.34)$$

durch

$$\bar{\tau} = \frac{\bar{l}}{\bar{c}} = \frac{1}{\bar{Z}}. \quad (2.35)$$

Durch die Coulomb-Explosion hat das exotische Atom πC eine stark erhöhte Geschwindigkeit v_x . Jedoch ändert sich für die Stöße des exotischen Atoms mit den Molekülen des Targetgases die mittlere freien Weglänge \bar{l} nicht, da die Gesamtzahl der Atome n gleich bleibt (Gl. 2.27). Dadurch verkürzt sich die Flugzeit zwischen zwei Stößen \bar{t} . Dies beeinflusst die Kaskade des exotischen Teilchens (s. 2.3.2), da zum Zeitpunkt des Stoßes die Abregung des hoch angeregten Systems noch nicht beendet ist. Bei den Stößen der stark ionisierten Fragmente mit den Nachbarmolekülen wandern aufgrund des hohen Ionisationsgrades Hüllenelektronen zum exotischen System. Diese Elektronen stehen bei der Abregung des noch in einem höheren Niveau n_x befindlichen π^- wieder für Auger Prozesse zur Verfügung, sofern sich das π^- noch nicht in einem zirkularen Niveau befindet. Dadurch werden die Bahndrehimpulszustände mit $\ell_x < n_x - 1$ stärker bevölkert und die schrittweise Abregung der zirkularen Kaskade nimmt ab. Dies drückt sich durch ein Ansteigen der Linienintensitäten der parallelen bzw. Serien-Übergänge gegenüber

der Intensitäten der zirkularen Übergänge aus.

Damit kann erklärt werden, daß bei diatomaren Gasen (z.B. N_2) der Wert des Druckes, ab dem die Kaskade bereits vor dem Stoß abgeschlossen ist, rund 20 mal geringer ist als bei einatomaren Gasen. Weiters ersieht man daraus, daß bei diatomaren Gasen die Spektrallinien der Serien-Übergänge intensiver sind als bei den entsprechenden monoatomaren Gasen (s. Abb. 2.7).

Aus der Verbreiterung der Röntgenlinien und der Geschwindigkeitskomponente v_x läßt sich die freie Flugzeit \bar{t} abschätzen. Durch einen Vergleich dieser Flugzeit mit der Dauer der Kaskade bekommt man einen Einblick in die zeitlichen Abläufe der Kaskade. Dies beantwortet die Frage, ob die Kaskade vor dem Stoß mit einem Nachbaratom bereits beendet ist.

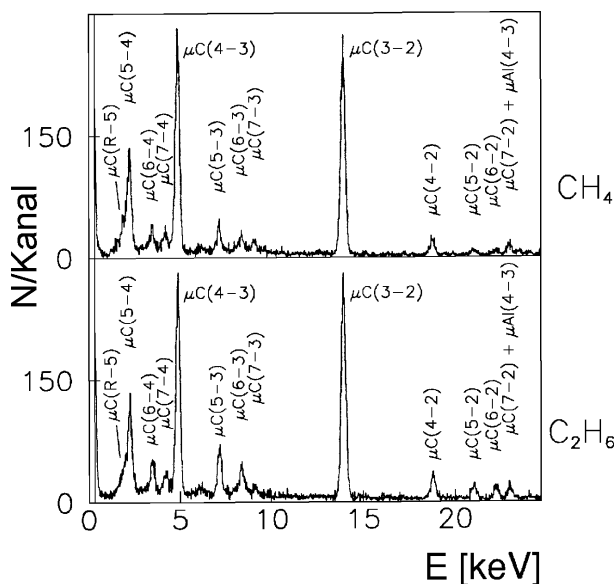


Abbildung 2.7: Spektren von μC in CH_4 (13,3 mbar) und C_2H_6 (6,7 mbar). Sichtbar sind die intensiveren Linien der Serien-Übergänge in C_2H_6 (z.B. $6 \rightarrow 4$, $6 \rightarrow 3$, $5 \rightarrow 3$, $6 \rightarrow 2$, $5 \rightarrow 2$, $4 \rightarrow 2$) verglichen mit jenen von CH_4 . [Kir1999]

Eine grobe Abschätzung ergibt für \bar{t} einen Wert von $5,25 \cdot 10^{-8}$ m (aus Gl. 2.27, 2.34, 2.35). Dafür wurde die Annahme gemacht, daß es sich um ein ideales Gas bei NTP (273 K, 1 bar, $2,68 \cdot 10^{25}$ Moleküle/ m^3) handelt mit 2 \AA Atomradius ($n = 2$ in Gl. 2.1). Der Wert für \bar{t} bei 1 mbar ist $5,25 \cdot 10^{-5}$ m und bei 1000 bar $5,25 \cdot 10^{-11}$ m. Der Wert \bar{c} wurde für N_2 ($28 \frac{g}{mol}$) ermittelt zu $\bar{c} \approx 450 \frac{m}{s}$. Daraus ergeben sich die Werte von $\bar{\tau}$ zu: $1,2 \cdot 10^{-10}$ s (1 bar), $1,2 \cdot 10^{-7}$ s (1 mbar), $1,2 \cdot 10^{-13}$ s (1000 bar).

Hinweise auf die Coulomb-Explosion wurden bisher nur aus der Dichteabhängigkeit der Intensitätsverhältnisse gefunden. Vor allem in myonischem und pionischem N_2 hat sich die Kaskade viel stärker druckabhängig erwiesen als z.B. in $\pi^- Ne$. Dies wird durch die Explosion der Fragmente im N_2 erklärt.

In exotischen Atomen wurde die Coulomb-Explosion bisher nur einmal direkt untersucht [Sie1997, Sie2000]. Um die detaillierten Vorgänge bei der Explosion zu verstehen, sei im folgenden Abschnitt eine Beschreibung der Effekte der laserinduzierten Coulomb-Explosion und der Explosion durch Schwerionenbeschuß durchgeführt.

2.5 Coulomb-Explosion durch andere Anregungsverfahren

2.5.1 Laserinduzierte Coulomb-Explosion

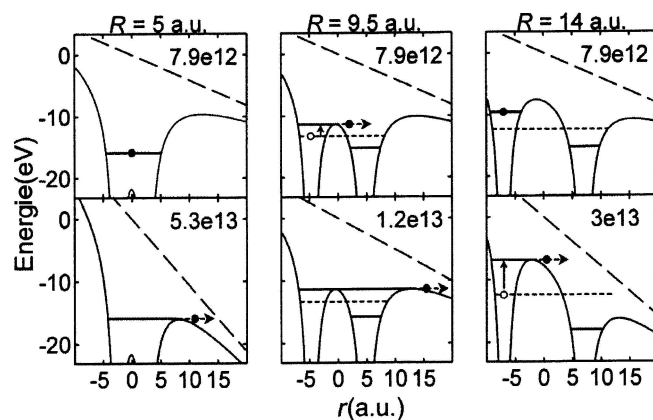
In den Experimenten wird ein diatomares Targetgas (ca. 10^{-6} mbar Druck) mit hochintensiver ($> 10^{13}$ – $10^{15} \frac{\text{W}}{\text{cm}^2}$), gepulster (100 fs–2 ps) Laserstrahlung (400–800 nm Wellenlänge) beschossen. Damit wird die Coulomb-Explosion der Moleküle kontrolliert herbeigeführt. Gemessen werden die kinetischen Energien der Fragmente (*kinetic energy release* – KER), die für den jeweiligen Ladungszustand $q_1^+ \cdot q_2^+$ zum Zeitpunkt der Explosion typisch sind. Die Abhängigkeit dieser freigesetzten Energie von den Parametern Wellenlänge λ , Pulszeit t_p , Intensität I_L wurde z.B. in [Lud1997, Sch1999] untersucht. Bei hohen Ladungszuständen sind diese KER-Werte nur gering von der Laserintensität I_L und der Pulszeit t_p abhängig. Jedoch sind für alle Aufbruchskanäle die KER-Werte nur Bruchteile der zu erwartenden theoretischen Werte. Dabei geht man vom einfachen Modell der Explosion aus dem Gleichgewichtsabstand $R = R_e$ der Kerne im Grundzustand des neutralen Moleküls mittels Coulombenergie $E_e = \frac{q_1^+ q_2^+}{R}$ aus. Die KER-Werte betragen für Cl_2 70%, N_2 47%, O_2 42%, I_2 75% vom jeweiligen theoretischen Wert.

Mehrere Modelle wurden entwickelt, um diese Diskrepanz zu erklären.

Modell von Chelkowski und Bandrauk

Chelkowski und *Bandrauk* [Che1995] entwickelten ein Zwei-Stufen Modell basierend auf einem festgestellten Maximum der Ionisationsrate im Feld des Lasers als Funktion des Kernabstandes bei einem Kernabstand $R = R_c \approx 4,5 \text{ \AA}$. Eine gesteigerte Instabilität des Moleküles durch Verlust mehrerer e^- bei R_c ist für die geringeren Werte der kinetischen Energien der Fragmente verantwortlich. Bei $I_L > 10^{14} \frac{\text{W}}{\text{cm}^2}$ sind die Ionisationsraten so schnell ($\approx 10^{14} \text{ s}^{-1}$), daß die Elektronenemission kürzer dauert, als die Bewegung der Kerne.

Abbildung 2.8: Potential für äußere e^- von I_2^+ in einem starken elektromagnetischen Feld (Laserintensität z.B. $7,9 \cdot 10^{12} \frac{\text{W}}{\text{cm}^2}$) bei 3 verschiedenen Abständen der Kerne zur Veranschaulichung der erhöhten Ionisationswahrscheinlichkeit bei R_c . [Pos1996a]



Im Gleichgewicht bei R_e sind die e^- des Moleküles frei beweglich zwischen den Kernen, sind aber wegen dem hohen Ionisationspotential (s. Abb. 2.8) schwer ionisierbar. Dieses wird erst bei sehr hohen Intensitäten durch das Feld des Lasers in die Nähe des Niveaus des Elektronen gedrückt. Bei größerem Kernabstand R können die e^- bei der Bewegung von einem Kern zum

anderen genug kinetische Energie im elektrischen Feld des Lasers gewinnen, um die Barriere beim zweiten Kern zu überwinden (*Tunneleffekt*) und zu entweichen. Dieser Mechanismus ist aber nur möglich, wenn die interne Barriere zwischen den beiden Kernen (die mit steigendem R zunimmt), dies nicht verhindert. Diese beiden gegenläufigen Trends legen die Vermutung nahe, daß es für ein spezifisches elektrisches Feld einen spezifischen Abstand R gibt, bei dem die Ionisation einen Maximalwert erreicht. Bei diesem kritischen Abstand R_c haben die e^- die besten Bedingungen, um den internen und den externen Potentialwall zu überwinden. Zusätzlich muß sich aber auch das elektrische Feld schneller ändern, als die Zeit für den Übergang zurück in den ursprünglichen Potentialtopf (Laserzykluszeit $<$ Tunnelzeit).

Die Rechnungen von *Chelkowski* und *Bandrauk* ergaben tatsächlich eine gesteigerte Ionisationsrate bei $R \approx 4,5 \text{ \AA}$ und weiters wurde festgestellt, daß der Wert R_c nicht von der Intensität und der Ladung abhängt. Dies stimmt mit den experimentellen Beobachtungen überein. Für die optimalen Werte des elektrischen Feldes und der kritischen Distanz erhielten die Autoren:

$$E_{opt} = 0,129 I_p^2 q^+ \quad R_c = \frac{4,07}{I_p} \quad (2.36)$$

$I_p \dots$ Ionisationspotential des neutralen Atoms; $q^+ \dots$ Ladung des Ions. Damit berechneten sie $R_c[\text{\AA}] = 4,25$ für Cl_2 , $3,8$ für N_2 , $4,05$ für O_2 und $5,3$ für I_2 .

1. Zuerst verliert, symmetrisch auf die Kerne aufgeteilt, das Molekül $2Q = 1-6 e^-$ im Gleichgewichtsabstand R_e des neutralen Moleküles A_2 .
2. Aufgrund der Ionisation erfolgt eine erste Coulomb-Explosion der beiden Ladungen Q von $R = R_e$ nach $R = R_c \cong 4,5 \text{ \AA}$, bei der die Energie $E_1 = Q^2(\frac{1}{R_e} - \frac{1}{R_c})$ frei wird.
3. Kommt der Kernabstand nahe R_c verliert das Molekül rasch weitere k Elektronen.
4. Die endgültige Explosion der Ladungen q_1^+ und q_2^+ setzt die Energie $E_2 = \frac{q_1^+ q_2^+}{R_c}$ frei, die gemessen wird.

Somit ist die gesamte Coulomb Energie

$$E_C = Q^2 \left(\frac{1}{R_e} - \frac{1}{R_c} \right) + \frac{q_1^+ q_2^+}{R_c}, \quad (2.37)$$

mit den experimentell beobachtbaren Ladungen q_1^+ und q_2^+ . Aus der Ladungserhaltung $q_1^+ + q_2^+ = 2Q + k$ folgt für die Ionisation

$$Q = \frac{q_1^+ + q_2^+ - k}{2}. \quad (2.38)$$

Der einzige freie Parameter ist k , wobei $k \cong 2Q$ (gleiche Anzahl an e^- gehen bei R_e und R_c verloren) die beste Übereinstimmung mit den experimentellen Daten gab.

Auch *J. H. Posthumus* entwickelte ein Modell zur Erklärung der geringeren Explosionsenergie, welches diese Theorie unterstützt [Pos1996a, Pos1996b].

Eine andere Theorie [Cor1995] erklärt die laserinduzierte Coulomb-Explosion im für die vorliegende Arbeit wichtigen Molekül C_2H_2 als instantane Explosion mit erhöhtem Kernabstand $R > R_e$. Im Gegensatz zu einem 2-stufigen Prozeß könnte dieser durch Deformation der

Molekülstruktur, Einstellen der Molekülachse entlang des Laserfeldes und durch Schwingungen resultieren.

Interessant ist die Frage, ob die laserinduzierte Coulomb-Explosion mit der Coulomb-Explosion während der exotischen Kaskade vergleichbar ist, bzw. ob es sich bei letzterer ebenfalls um einen zweistufigen Prozeß handelt.

2.5.2 Coulomb-Explosion durch Ionenbeschuß

In diesen Experimenten wird ein gasförmiges Target (Gasjet mit ca. 10^{-2} mbar Druck) mit hochionisierten Schwerionen im Energiebereich von einigen keV bis zu einigen hundert MeV beschossen. Gemessen werden entweder die Energien, der von den Fragmenten emittierten Auger-Elektronen [Man1976], oder die kinetischen Energien der Fragmente [Sgm2000, Tar2000], die durch starke elektrische Felder aus dem Kollisionsbereich extrahiert werden.

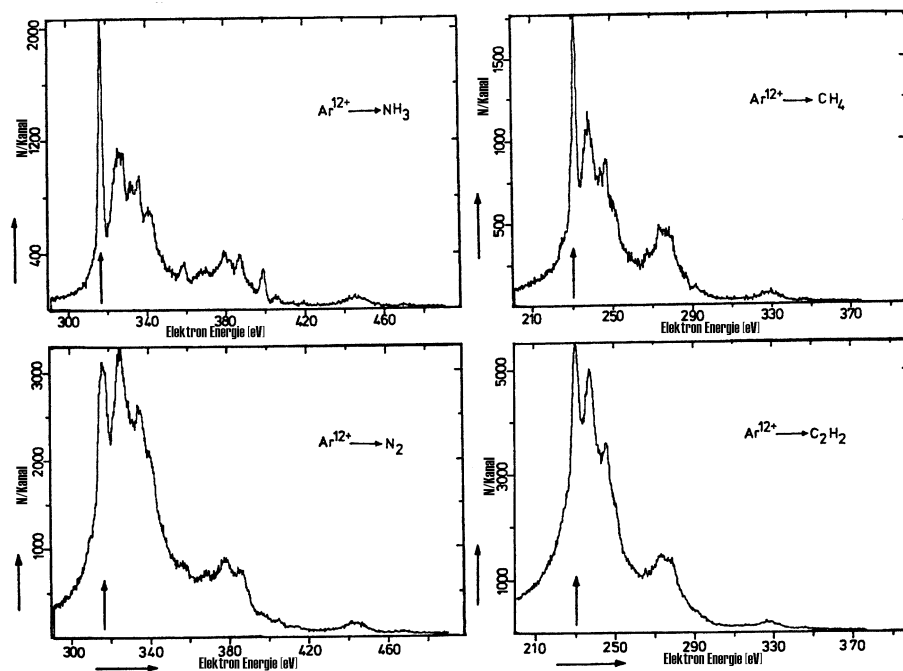


Abbildung 2.9: K-Auger-Elektronen-Übergänge in C- und N-hältigen Molekülen angeregt durch 56 MeV Ar^{12+} Beschuß. Der Pfeil markiert den metastabilen $1s2s2p \rightarrow 1s^2$ Übergang [Man1976]. Man erkennt die Verbreiterung der Linien durch Coulomb-Explosion der diatomaren Moleküle.

Die K-Auger Spektren von Atomen in verschiedenen Verbindungen haben signifikant unterschiedliche Linienbreiten, vor allem Linienbreiten von *metastabilen* Zuständen (s. Abb. 2.9). In einfachen Molekülen, wie Ne, NH_3 oder CH_4 erklärt sich die gemessene Linienbreite durch die Auflösung des Spektrometers ΔE_{SP} und die Doppler-Verbreiterung ΔE_{coll} aufgrund des Impulstransfers vom Projektil auf die Targetkerne während der Kollision. In komplexeren Molekülen sind diese Linienbreiten durch eine zusätzliche kinematische Verbreiterung ΔE_{CE}

vergrößert. Der Grund dafür ist die elektromagnetische Abstoßung der Kerne mit ähnlichen Massen, d.h. Coulomb-Explosion.

Wie in 2.4.2 ausgeführt, kann man aus der Verbreiterung der Spektrallinien auf die bei der Explosion frei werdende potentielle Energie des Moleküles bzw. auf dessen Ladungszustand oder dessen Elektronenkonfiguration schließen [Har1978].

Durch den Beschuß werden vorübergehend molekulare Ionen infolge Ionisation, Einfang oder Anregung erzeugt. Diese sind mehrfach geladen und instabil und zerfallen in atomare Ionen. Bei diatomaren Molekülen wird die Ladung gleichmäßig auf beide Fragmente aufgeteilt, da die Neuordnung der e^- viel schneller ist als die Coulomb-Explosion. Das Coulomb-Explosion-Modell (CEM) erklärt auf sehr anschauliche Weise die Werte der kinetischen Energien der Fragmente. Neuere Messungen zeigen jedoch Strukturen in den KER-Verteilungen [Sgm2000], sodaß nicht mehr ein einziger Wert der Energie bei der Explosion, wie im CEM vorhergesagt, zur Erklärung reicht. Bei niedrigen Kollisionsgeschwindigkeiten müssen außerdem 3-Körper Wechselwirkungen mit einbezogen werden, die im CEM nicht berücksichtigt werden. Eine Verfeinerung des CEM betrachtet angeregte Zustände von molekularen Ionen (Schwingungen, Vibrationen), die durch die Kollision mit dem schnellen Projektil besetzt werden. Die Molekülbindung bricht dann aus diesen Zuständen heraus auf, wobei diese Zustände gegenüber dem Grundzustand erhöhte Energien besitzen. Dadurch werden mehrere einander überlagernde Peaks im KER-Spektrum eines Ladungszustandes $q_1^+ \cdot q_2^+$ verursacht. In Summe führt dies auf eine größere Breite der KER-Verteilung [Tar2000], als im CEM zu erwarten wäre.

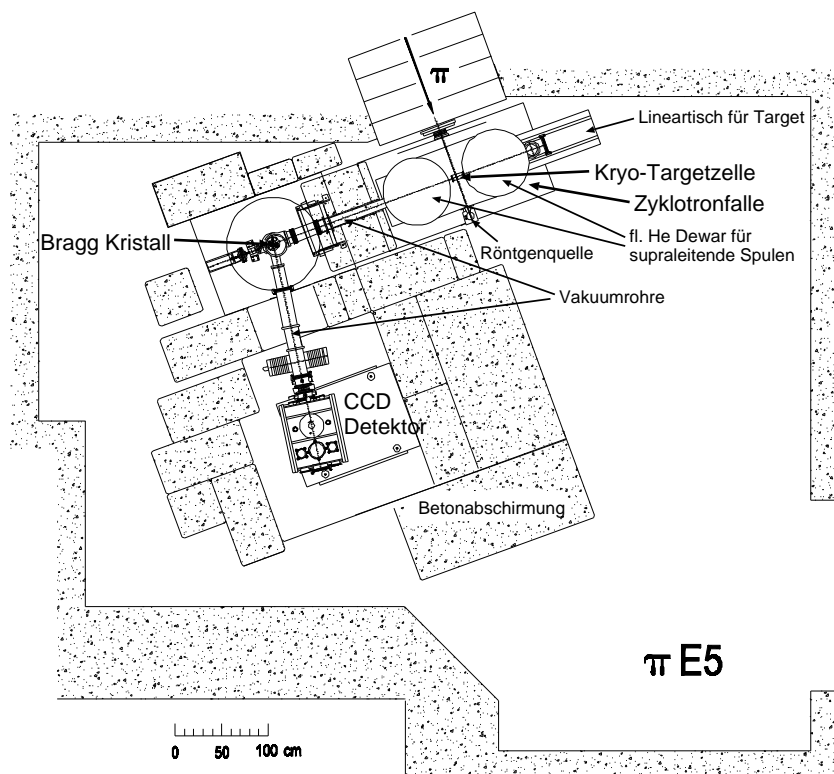
Kapitel 3

Experimentaufbau

3.1 Experimentkomponenten

Die in dieser Arbeit beschriebenen Messungen wurden im Rahmen des Experiments R-98-01 am Paul Scherrer Institut (PSI) in Villigen (CH) durchgeführt (s. Fußnote S.2). Dieses Institut besitzt den weltweit stärksten Niedrigenergie-Pionenstrahl. Abb. 3.1 zeigt den Aufbau des Experiments in Aufsicht.

Abbildung 3.1: Aufsicht des Experimentaufbaus im $\pi E5$ -Areal am PSI. Die 4 wesentlichen Komponenten sind hervorgehoben. Eine Betonabschirmung umgibt Vakuumröhren, Kristalltopf und Detektor.



Eine *Zyklotronfalle* wurde zum Einfangen und Bremsen der π^- an dieser Forschungseinrichtung entwickelt (näheres s. 3.3) und im vorliegenden Experiment verwendet. Durch ein mehrere Tesla starkes Magnetfeld (*supraleitende Spulen*) werden die π^- in einem mit Gas

gefüllten Zylinder abgebremst und so eine hohe Stoppdichte erreicht.

Im Gas der Targetzelle (genaueres s. 3.4) werden die abgebremsten π^- eingefangen und es wird die elektromagnetische Kaskade angeregt. Die Röntgenstrahlung wird durch ein dünnes Fenster in Richtung Kristall emittiert.

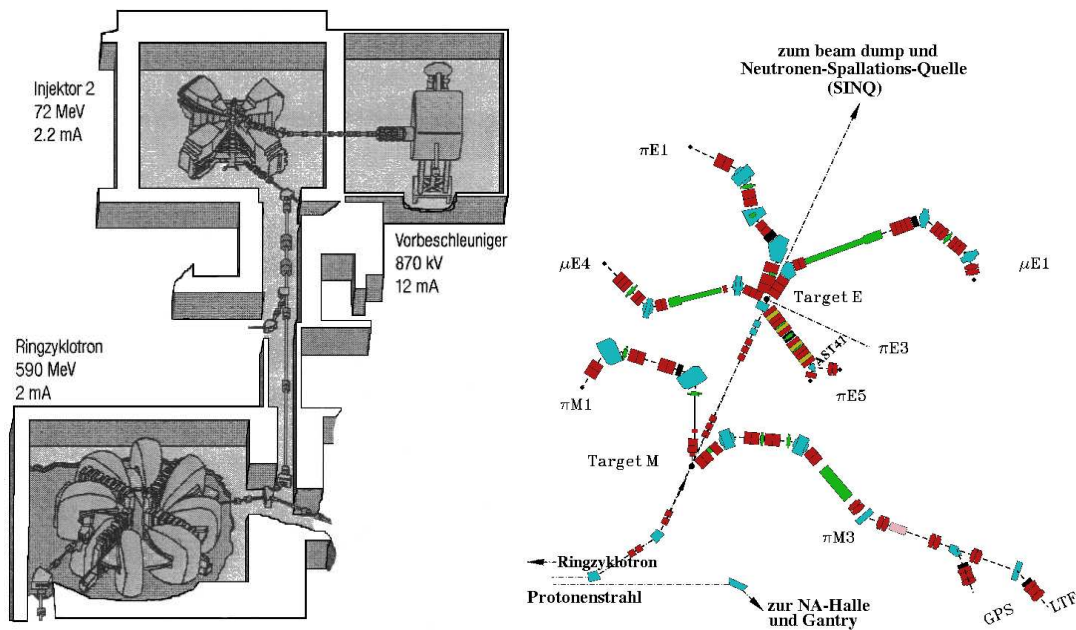
Das hochauflösende *Kristallspektrometer* (s. 3.5) wandelt durch *Bragg-Reflektion* die Energiemessung in eine Winkel- bzw. Ortsmessung um. Aufgrund der geringen Rate der pionischen Röntgenstrahlung verwendet man ein doppelt fokussierendes Spektrometer mit einem sphärisch gekrümmten Kristall. Die genaue Positionierung des Kristalls und des Spektrometers wird durch eine hochpräzise Winkelführung mit Mikrometereinstellung gewährleistet.

Die reflektierten Röntgenquanten werden im Detektor (s. 3.6) nachgewiesen. Der Ortsnachweis erfordert eine gute örtliche Auflösung und aufgrund der geringen Rate eine effektive Unterdrückung des Untergrunds. *CCD-Chips* (Charge-Coupled-Device) haben sich durch die Erfüllung beider Forderungen für die Messung exotischer Röntgenstrahlung sehr gut bewährt.

Die Steuerung des Experiments erfolgt durch Fernsteuerung aller relevanten Parameter (Magnete des Pionenstrahls, Kühlung des Targets, Positionierung Kristall und Detektor).

Im folgenden sei auf die wichtigen Teile des Experiments näher eingegangen.

3.2 Pionen- und Myonenproduktion



(a) Dreistufige Beschleunigung des Protonenstrahls im PSI Zyklotronkomplex.

(b) Experimentierareale am PSI mit sekundären Teilchenstrahlen für Pionen und Myonen.

Abbildung 3.2: Layout der Beschleunigeranlage und der Experimentierhalle am PSI.

Am PSI ist ein *isochrones Ringzyklotron* mit acht räumlich getrennten Magneten (Spi-

ralsektoren) und vier zwischen den Magneten angeordneten *Hochfrequenzresonatoren* (Injektionsenergie 72 MeV, 50,63 MHz Beschleunigerfrequenz, Durchmesser 15 m) installiert. Dieser Beschleuniger liefert den weltweit intensivsten Protonenstrahl von rund 2 mA mit 590 MeV Energie (0,2% FWHM Energiebreite, 19,75 ns Pulsperiode, 0,3 ns Pulsbreite; s. Abb. 3.2(a)). Die Vorbeschleunigung geschieht mit einem *Cockroft-Walton Vorbeschleuniger* (auf 60 keV durch Extraktion aus Ionenquelle und auf 810 keV durch Gleichspannungs-Beschleunigungsstrecke) und einem kleineren Ringzyklotron mit vier Sektormagneten (Injektor 2, 870 keV \rightarrow 72 MeV). Im Juli 2000 erreichte man einen maximalen Protonenstrom von 2 mA [Sch2002]. Im Routinebetrieb bleibt der Strahlstrom auf 1,8 mA ($1,12 \cdot 10^{16}$ p/s) begrenzt, um die HF-Kavitäten thermisch nicht zu überlasten. Durch Beschuß von rotierenden Graphittargets (Target M und Target E) werden Sekundärstrahlen (Pionen- und Myonenstrahlen) erzeugt, die durch Magnete in die Experimentareale weitergeleitet werden (s. Abb. 3.2(b)). Außerdem werden mit den Protonen eine *Gantry* für die Behandlung von tiefliegenden Tumoren und die *Neutronen-Spallations-Quelle* SINCQ versorgt.

Die Meßzeiten werden gering gehalten, indem vom Beschleuniger eine hohe Pionenrate in das Meßsystem gebracht wird, die optimal genutzt werden muß. Aus diesem Grunde wurde für das Experiment das Areal π E5 ausgewählt, welches vom weltweit intensivsten Niedrigenergie-Pionenstrahl beliefert wird. Die technischen Daten des Strahls im Areal sind [For1996]:

- Länge 10,4 m
- Austrittshöhe des Strahls 155,5 cm
- Strahlimpuls 10–120 $\frac{\text{MeV}}{c}$
- Impulsakzeptanz 10% FWHM
- Impulsaufösung in der Mitte des Transferkanals 2% FWHM
- Winkelaufösung 450 mrad (H) \times 120 mrad (V)
- Strahlquerschnitt im Fokus 15 mm (H) \times 20 mm (V)
- π^- Fluß bei vollem Strahlimpuls $2 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1} \text{ mA}^{-1}$

Beim Experiment zum pionischen Wasserstoff ist die Strahlführung für die Injektion in die Zyklotronfalle auf einen Impuls von $112 \frac{\text{MeV}}{c}$ mit einer Impulsbreite von 3% eingestellt. Bei einem Protonenstrom von ca. 1,6 mA im Primärstrahl beträgt die Strahlintensität $1,9 \cdot 10^9 \pi^- / \text{s}$ bei offenen Strahlbegrenzern (Schlitzen).

Da aber durch Stöße im π E5-Kanal auch viele e^- erzeugt werden, müssen diese durch Einstellen der strahlbegrenzenden Schlitze am Erreichen der Zyklotronfalle gehindert werden. Daher ist die Pionenrate begrenzt auf mehrere $10^8 \pi^- / \text{s}$. Weiters werden die π^- beim Durchgang durch das $125 \mu\text{m}$ dicke Kaptan[®]-¹Fenster in die Zyklotronfalle abgebremst und absorbiert.

¹Bernsteinfarbene, transparente Polydiphenyloxid-pyromellithimid (Polyimid) Folie ($[\text{C}_{22}\text{H}_{10}\text{N}_2\text{O}_5]_n$). Sie ist nicht entflammbar, mechanisch und thermisch stabil, beständig gegen Chemikalien und Lösungsmittel hat sehr hohe elektrische Durchschlagsfestigkeit. Verwendet vor allem als Isolationsmaterial in Elektroindustrie und Luftfahrt. [Röm1979]

Etwa $2 \cdot 10^8 \pi^- / \text{s}$ gelangen in die Falle, die auf eine Impulsakzeptanz von $82 \frac{\text{MeV}}{c}$ eingestellt ist.

Bei den Messungen muß besonderes Augenmerk auf die Abschirmung der experimentellen Apparatur gelegt werden. Durch die relativ große Öffnung der Vakuumkammer und die geringen Umlenkwinkel gibt es in der Nähe des Umlenkmagneten AST41 einen hohen Neutronen-Untergrund, der von der Absorption der π^- im Umgebungsmaterial herrührt. Es werden etwa 10^{10} n/s erzeugt, davon rund $150 \frac{\text{n}}{\text{mA cm}^2 \text{ s}}$ mit Energien $> 120 \text{ MeV}$. Die niederenergetischen n erzeugen eine Strahlenbelastung von $0,05 \frac{\text{Sv}}{\text{h mA}}$.

Deshalb ist das gesamte Setup mit Ausnahme der Zyklotronfalle von Betonblöcken umgeben. Zwischen Zyklotronfalle und CCD Detektor befindet sich mehr als 1 m Beton zur Abschirmung. Spezielle Betonformteile umgeben das Vakuumrohr zwischen Falle und Kristallbehälter. Eine Untergrund-Unterdrückung von 90% kann damit erreicht werden.

Diese Betonabschirmung (100 t) bewirkt weiters eine sehr effiziente Temperaturstabilisierung ($\pm 0,5 \text{ K}$).

3.3 Die Zyklotronfalle

Das herkömmliche Verfahren zur Herstellung exotischer Atome ist das Abbremsen der negativ geladenen Teilchen in Materie, meist in Gasen mit geringem Druck. Die Abbremsung wird durch statistische Prozesse bestimmt und führt zu einer Aufweitung des Strahls. Nicht alle Teilchen stoppen mit gleicher Reichweite, sondern innerhalb einer Verteilung, die durch die Reichweitenbreite δR längs und die Aufweitung $\Delta\Theta_{x,y}$ quer zur Strahlrichtung charakterisiert ist. Erfahrungsgemäß ist $\Delta\Theta_{x,y} \approx 2\delta R$. Zumeist ist ein wohldefiniertes, kleines Stoppvolumen selbst bei geringer Dichte der stoppenden Materie nötig. Diese einander widersprechenden Forderungen können durch diese herkömmliche Methode des Abbremsens nicht erfüllt werden.

Wird die Teilchenbahn in einem schwach fokussierenden Magnetfeld spiralförmig aufgewickelt, erhält man die gewünschte kleine Stoppverteilung. Dies ist die prinzipielle Arbeitsweise der Zyklotronfalle, die speziell für solche Experimente entwickelt wurde. Durch die fokussierenden Eigenschaften des Feldes gelangen die Teilchen in das Zentrum der Zyklotronfalle, wo sie stoppen und exotische Atome bilden.

Speziell beim Experiment R-98-01 muß der Strahl sehr schnell auf kleine Teilchenenergien abgebremst werden, da das π^- mit einer Halbwertszeit von ca. 26 ns zerfällt (s. Tab. 1.1). Um trotz des geringen Drucks im Target (s. 3.4) eine große Stoppdichte zu erreichen, wird zum Abbremsen und Stoppen der Pionen eine Zyklotronfalle [Sim1992] verwendet (s. Abb. 3.3).

3.3.1 Aufbau der Zyklotronfalle

Das Prinzip der Zyklotronfalle ist in Abb. 3.4 dargestellt. Der Strahl der geladenen Teilchen wird in einem durch zwei große Helmholtzspulen (*split-coil* Anordnung) erzeugten, spiegel-symmetrischen, schwach fokussierenden Magnetfeld durch *Degrader* abgebremst. Durch diese Abbremsung im Magnetfeld wird der Strahl auf eine Spiralbahn gezwungen, die ihn so ins Zentrum der Falle führt, in dem das Target angebracht ist. Es fokussiert den Strahl radial und axial auf das Zentrum der Falle. Dabei verlangen die Bedingungen für Fokussierung in radialer

Abbildung 3.3:
Die Zyklo-
tronfalle beim
Aufbau des
Experiments.
Sichtbar
sind die zwei
He-Dewars
für die su-
praleitenden
Magnete.



und axialer Richtung $0 < n < 1$ mit dem Feldindex $n = -\frac{r}{B} \frac{\partial B}{\partial r}$. Damit wird eine konzentrierte Stoppverteilung im Target auch bei geringen Gasdichten erreicht. Über ein zentrales Bohrloch (Durchmesser 120 mm) in der Mittelachse wird die Röntgenstrahlung emittiert und kann mit einem Detektor oder einem Kristallspektrometer nachgewiesen werden.

Durch die Verwendung von supraleitenden Magneten werden die Dimensionen der Falle klein gehalten. Aus der Bewegung der Teilchen im Zyklotronfeld mit dem Modell eines Quasipotentials [Sim1988] ersieht man, daß Strahlteilchen mit einem Impuls $p_0 \leq 123 \frac{\text{MeV}}{c}$ eingefangen werden können.

Das Zyklotronfeld akzeptiert einen Maximalimpuls p_{max} von in diesem Feld auf Kreisbahnen befindlichen Teilchen. Dies entspricht gemäß

$$r = \frac{p}{eB} \quad (3.1)$$

einem Radius r_{max} . Bedingt durch den radialen Verlauf des Feldes müssen die Teilchen auf dem Weg zur Injektionsregion einen gewissen Weg durch das Randfeld zurücklegen. Das bedeutet, daß sie einen Strahlimpuls p_0 haben müssen, der über dem von der Zyklotronfalle akzeptierten Impuls p_{max} liegt. In der Praxis hat sich ein Wert von $p_0 \approx 1,7 \cdot p_{max}$ [Sim1994] bewährt. Die Teilchen werden bei einem Radius r_{ein} in die Zyklotronfalle geleitet, der nahe dem maximal erlaubten Radius für stabile Umlaufbahnen im Magnetfeld ist, meist $r_{ein} \approx 0,9 \cdot r_{max}$. Ein Moderator entsprechender Dicke (z.B. Be oder CH₂) bremst die Teilchen von p_0 ab auf einen Impuls in einer Gleichgewichtsbahn mit nur wenig geringer als

$$p(r_{ein}) = eB r_{ein}. \quad (3.2)$$

So werden *Betatron Oszillationen* um die Gleichgewichtsbahn angeregt, womit die Anzahl der Teilchen in den ersten Umläufen ohne den Moderator zu treffen, maximiert wird. Mit linearem Setup für die Abbremsung (Reichweite R , Reichweitenstreuung δR) erhält man ein Stoppvolumen von

$$V_{lin}^{Stop} = 4(\delta R)^3, \quad (3.3)$$

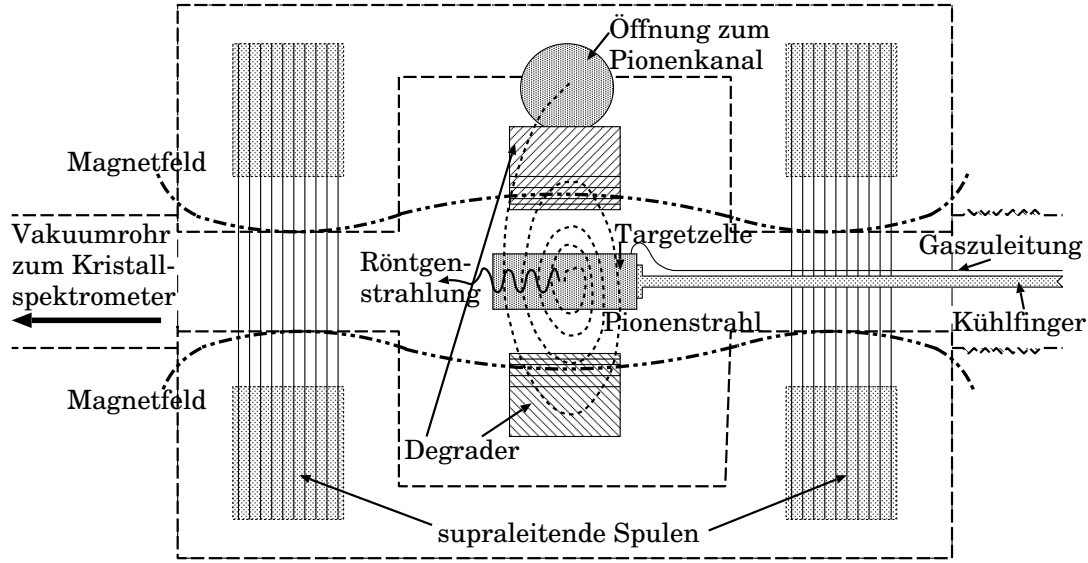


Abbildung 3.4: Skizze der Funktionsweise der Zyklotronfalle. Der aus dem Beschleunigerkanal einfallende Teilchenstrahl wird von den Degradern abgebremst, bis die Teilchen im Gas der Targetzelle gestoppt werden. Die in der Kaskade der exotischen Atome produzierte Röntgenstrahlung trifft durch das Vakuummrohr auf den Detektor oder den Kristall.

da die Querausdehnung der Stoppverteilung in der Regel doppelt so groß ist wie die Reichweitenstreuung. Durch das spiralförmige Aufwickeln der Teilchenbahn im Magnetfeld ab dem Radius r_{ein} entspricht dieser Injektionsradius der Reichweite R . Für einen idealen Strahl hätte man dann in der Mittelebene des Feldes die radiale Ausdehnung

$$\delta r_{Stop} = r_{ein} \frac{\delta R}{R}. \quad (3.4)$$

Somit resultiert für die Zyklotronfalle ein Stoppvolumen von

$$V_{Zykl}^{Stop} = 2\pi(\delta r_{Stop})^3 = 2\pi \left(r_{ein} \frac{\delta R}{R} \right)^3. \quad (3.5)$$

Bei einem realen Strahl mit endlicher Impulsauflösung und endlichen Einschufwinkeln wirken die Betatron-Oszillationen einer Strahlaufweitung bei abnehmenden Radius entgegen, da sich ihre Amplituden in radialer und in axialer Richtung wie der mittlere Radius, d.h. wie der Impuls, skalieren [Sim1992]. Insgesamt legt die Impulsaufweitung Δp die radiale Verbreiterung Δr fest. Die radiale Aufweitung des Strahls am Beginn der Abbremsung ergibt die radiale Ausdehnung der Stoppverteilung. Die axiale Ausdehnung der Stoppdistribution ist doppelt so groß wie die anfängliche axiale Breite des Strahls.

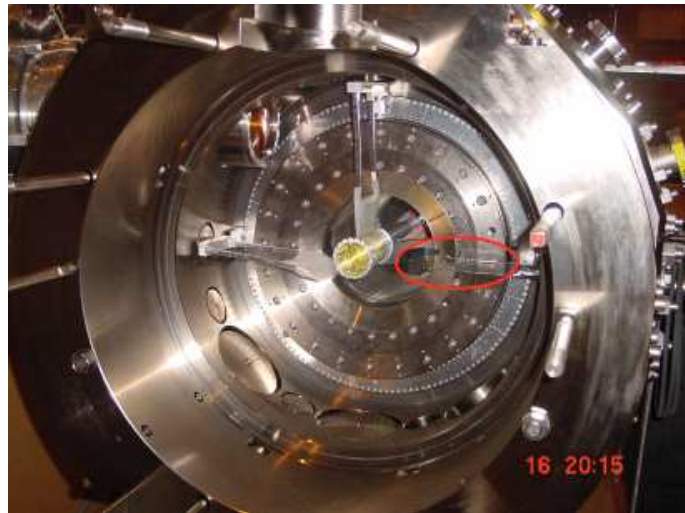
Gegenüber der klassischen Stoppanordnung (Target mit Degrader) ergibt sich ein Gewinn in der Stoppdichte um Faktoren von 10^4 bis 10^6 . Limitierend wirken die Lebensdauer der Teilchen (μ^- , π^-) und die Qualität der Teilchenstrahlen. Typische Dimensionen für π^- -Strahlen sind 100 mm^2 , während \bar{p} -Strahlen nur 1 mm^2 umfassen.

Die supraleitenden Spulen erzeugen ein Feld mit einem Durchmesser von 290 mm und einem Injektionsradius von 120 mm. Das Magnetfeld hat die Form einer magnetischen Flasche

mit $B_{max} = 4,5 \text{ T}$ in der Mittelebene ($z = 0, r = 0$) und $B_{min} > 2 \text{ T}$. Die Magnetspulen sind in einem Reservoir mit flüssigem He (ca. 4 K) eingebettet, welches mit flüssigem N_2 thermisch abgeschirmt wird. Das Magnetfeld ist nach außen hin abgeschirmt, sodaß an der Frontseite in Höhe der Achse nur noch ca. 0,3-0,4 T, je nach Plazierung des Sensors, meßbar sind.

Ein Szintillator (T3) dient zur Bestimmung der Strahlposition und wird auch für die Einstellung der Magnete und der den Pionenstrahl begrenzenden Schlitze eingesetzt. Er wirkt als Detektor für die durchtretenden Teilchen und dient zusätzlich als Degrader. Er ist 70 mm lang, 30 mm breit und besteht aus drei Schichten Polyethylen und einem 28 mm dicken Block aus hochverdichtetem Graphit. Ein Einblick in das Innere der Zyklotronfalle ist in Abb. 3.5 gegeben.

Abbildung 3.5: Blick in das Innere der Zyklotronfalle mit eingebauter Targetzelle. Links oberhalb des Targets sieht man das Eintrittsfenster des Pionenstrahls (125 μm Kapton[®], 148 mm Durchmesser) und die beiden Degrader. Rot markiert befindet sich rechts neben der Targetzelle der Szintillator T3.



Die radial montierten und verschiebbaren Degrader (138 mm lang, 60 mm breit) im Innern der Falle bestehen aus 10 Schichten von rund 200 μm dicken Polyethylen-Plättchen, die keilförmig zusammengesetzt sind. Beim Durchgang verlieren die Teilchen kinetische Energie (s. Gl. 2.20) und bremsen auf diese Weise ab, wobei sich ihr Umlaufradius im Magnetfeld der Spulen verringert. Die Reichweite des Strahls kann so über Zahl und Dicke der Degrader, sowie über die Anzahl der Durchgänge pro Degrader gesteuert werden. Man muß allerdings bedenken, daß jeder Durchgang der π^- durch Materie eine Strahlaufweitung verursacht und ein Überschreiten der optimalen Anzahl an Degradern somit eine Vergrößerung der Stopprate verursacht. Befinden sich zu wenig Degrader im Strahlengang, sinkt wiederum die Stopprate und damit auch die Ausbeute an Röntgenstrahlung, weil die Energie der π^- bei Eintritt in das Gastarget zu hoch ist.

3.3.2 Einstellungen

Mit der hier verwendeten Zyklotronfalle kann ein Verhältnis $\frac{p_0}{p_{max}} < 1,7$ eingestellt werden. Im Experiment ist die Zyklotronfalle auf einen Impuls der akzeptierten Teilchen p_{max} von etwa $82 \frac{\text{MeV}}{c}$ eingestellt, wobei die eintreffenden π^- einen Impuls $p_0 = 112 \frac{\text{MeV}}{c}$ besitzen.

Insgesamt gelangen $2 \cdot 10^8 \pi^- / \text{s}$ in die Zyklotronfalle. Während des Abbremsens geht ein gewisser Teil verloren, sodaß man in der Umgebung von T3 etwa $4 \cdot 10^7 \pi^- / \text{s}$ mißt. Davon werden etwa 3% im Gas in der Targetzelle gestoppt ($1,2 \cdot 10^6 \pi^- / \text{s}$). Berechnungen zur Optimierung der Konfiguration der Magnetfeldes und der Abbremsung sagten eine Stopprate von $3 \cdot 10^5 \pi^- / \text{s}$ in 1 bar H voraus. Für die verwendeten Targetdichten erhält man eine π^- -Stopprate in H und anderen Gasen von etwa 10^6 s^{-1} . In einem Experiment mit 1 bar N_2 wurden $1,2 \cdot 10^6 \pi^- / \text{s}$ gemessen [Len1998].

Während der Messungen lag die übliche Rate der durch T3 gehenden Teilchen bei $2,5 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$ (10^{10} h^{-1}), d.h. die T3-Rate gab annähernd die Stopprate im Target wieder.

Während der Datennahme wurde die Zyklotronfalle evakuiert, wobei der Druck bei gefülltem Target etwa $10^{-5} - 10^{-6} \text{ mbar}$ (abhängig von der Temperatur des Targetgases) betrug. Grund dafür war die Temperaturabhängigkeit der Permeation durch die Targetwände.

3.4 Das Target

Für die präzise Spektroskopie exotischer Atome sollte möglichst das Wiederauffüllen der Schalen durch Stöße mit Nachbaratomen (electron-refilling) verhindert und die Verluste durch Selbstabsorption der Röntgenstrahlung vermindert werden. Experimente zeigten [Kir1999], daß sich das electron-refilling (s. S. 17) nur durch Messungen im mbar-Bereich wirklich ausschalten läßt. Da bei diesen geringen Dichten jedoch die Röntgenausbeuten zu gering sind, verwendet man als Kompromiß ein Gastarget mit Drücken von $< 10 \text{ bar}$, sodaß refilling gemindert und die Selbstabsorption unterbunden wird, und trotzdem noch genügend Intensität sichtbar ist.

Bei den Messungen zu $\pi^- \text{H}$ ist man am Einfluß der Coulomb-Abregung auf die Kaskade interessiert und hat deshalb ein und denselben Übergang ($\pi^- \text{H}_{(3p \rightarrow 1s)}$) bei verschiedenen Teilchendichten, d.h. bei verschiedenem Druck im Target von 1 bar bis 40 bar und bei flüssigem H_2 (entspricht 1700 bar) gemessen. Diese Dichten wurden durch Abkühlen der Targetzelle auf etwa 25 K erreicht.

3.4.1 Aufbau der Targetzelle

Aus dem oben genannten ergaben sich folgende Anforderungen an die Targetzelle (s. Abb. 3.6):

- Druckfestigkeit $> 3 \text{ bar}$ gegen Vakuum.
- Abkühlung bis auf eine Temperatur von einigen K, damit die Messungen bei einer Dichte äquivalent zu 30 bar bei Normaltemperatur (295 K) und bei flüssigem H_2 (äquivalent zu 1700 bar bei 295 K) durchgeführt werden konnten.
- Leichtbauweise, da sie am Ende eines etwa 80 cm langen Kühlarmes befestigt war.
- Die Wände der Targetzelle sollten möglichst dünn und aus leichtem Material (Z klein) sein, damit die gemessene Position der Stopprate nicht durch Absorption der π^- beeinflusst werden würde.

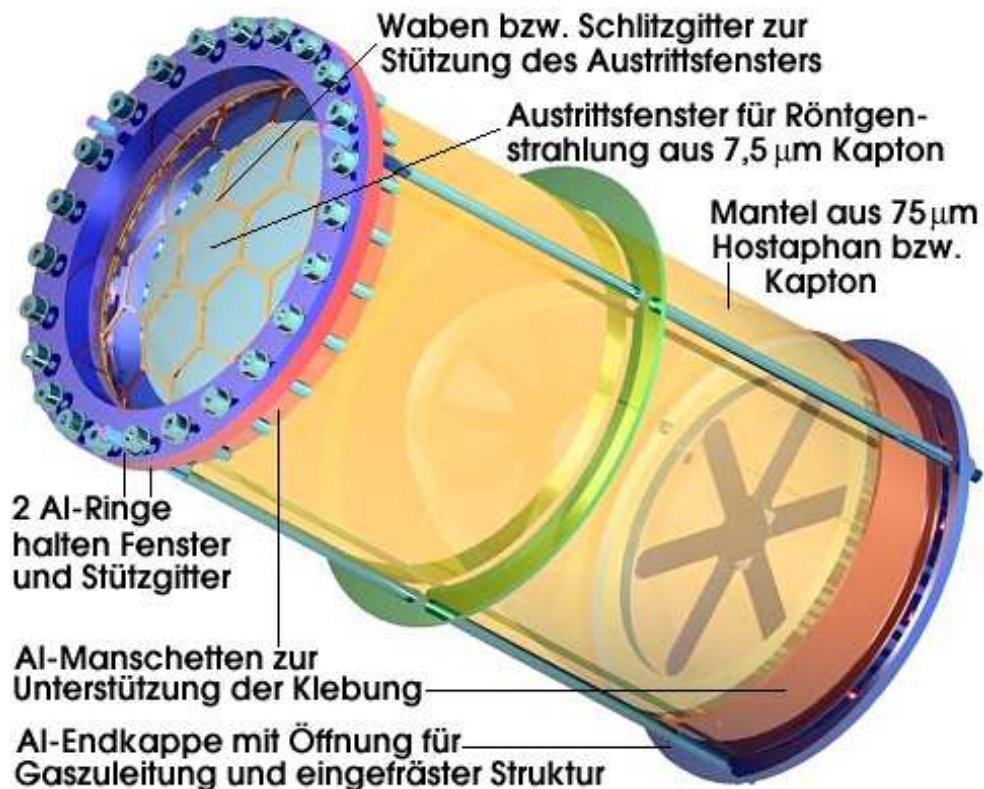


Abbildung 3.6: Schematische Darstellung der Targetzelle mit den wichtigsten Bestandteilen. Die Struktur der Endkappe dient zum Verringern des Gewichts und zur Vergrößerung der Oberfläche beim Abkühlen.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden am *IMEP* Targetzellen entwickelt, die den oben genannten Anforderungen entsprechen. Ausführliche Tests zum Materialverhalten, zur Druckstabilität, zu den Abkühlleistungen und zur Permeation von Kapton[®] und Hostaphan^{®2} wurden ausgeführt [Gru2000]. Es wurden zwei leicht unterschiedliche Typen von leichtgewichtigen zylindrischen Targetzellen hergestellt (s. Abb. 3.9 mit exakten Bemaßungen) — im folgenden „Modell H“ und „Modell K“ genannt — von denen jeweils mehrere Exemplare angefertigt wurden. Tab. 3.1 faßt die Eigenschaften beider Modelle zusammen.

Die am Ende des Kühlfingers angeschraubte Endkappe hat zur besseren Kühlleistung 6 Lamellen eingefräst zur Reduktion des Gesamtgewichts und zur Verbesserung der Kühlleistung (größere Oberfläche) und sie hat eine Öffnung für die Gaszuleitung. Das den Zylinder abschließende Fenster für die Röntgenstrahlung (zum Kristall hin) ist auf Kapton[®] 30HN limitiert, um die Absorption der niedrigerenergetischen Röntgenstrahlung in der Folie zu minimieren. Das 7,5 µm dicke Fenster, welches mit Indium (In) abgedichtet ist, wird durch ein Gitter gegen zu große Ausbeulung gestützt. Sowohl der Mantel, als auch seine Verbindungen zu den Aluminium-Teilen sind geklebt. Um die longitudinale Ausdehnung der Zelle bei Drücken von

²Farblose, transparente Polyethylenterephthalat (PETP) Folie. Sie ist wasserundurchlässig, unempfindlich gegen Chemikalien und Fette und Öle, hat hohe thermische und mechanische Beständigkeit und hervorragende elektrische Isolationseigenschaften. Verwendet als reprographisches Trägermaterial und als Elektroisolation. [Röm1979]

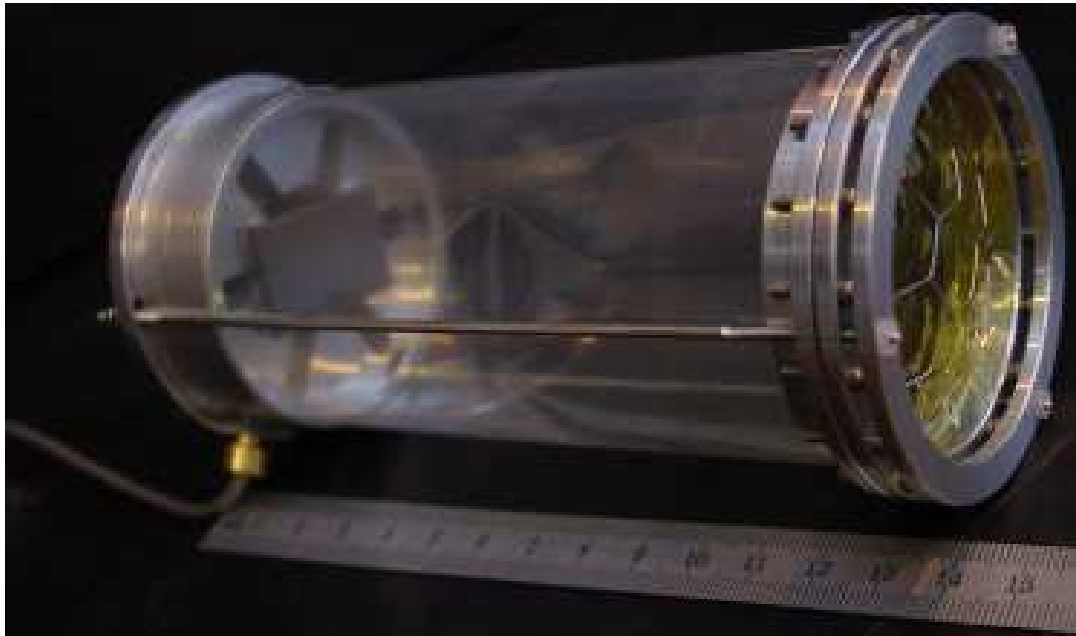


Abbildung 3.7: Targetzelle Modell H mit Mantel aus $75\ \mu\text{m}$ dicker Hostaphan[®]-Folie und wabenförmigem Gitter vor dem Austrittsfenster.

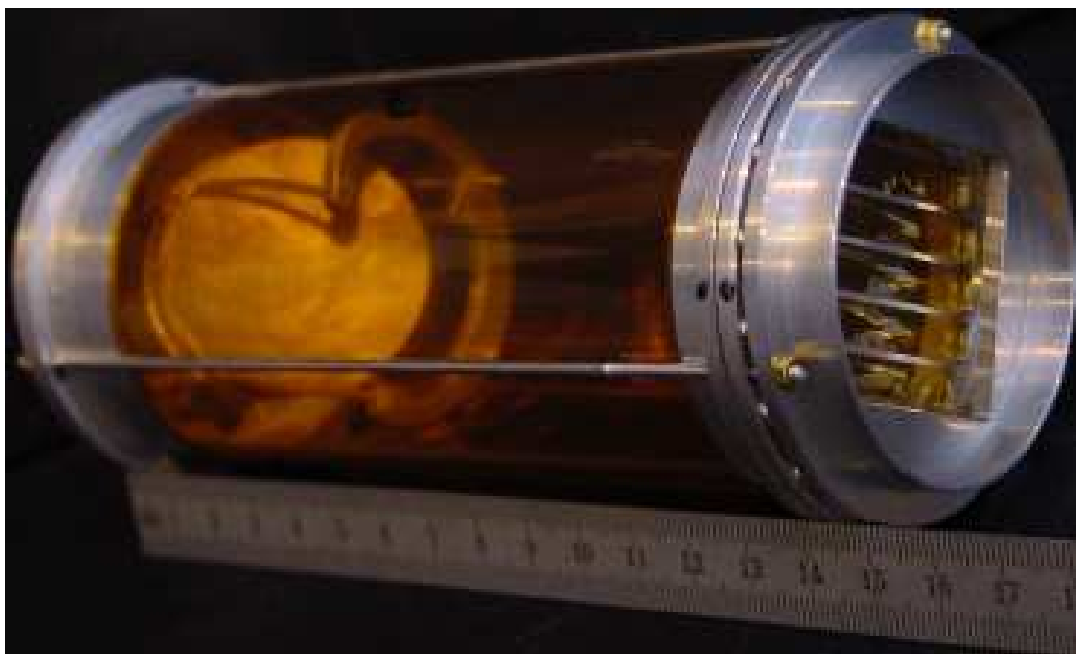


Abbildung 3.8: Targetzelle Modell K mit Mantel aus $75\ \mu\text{m}$ dicker Kapton[®]-Folie und schlitzförmigen Stützgitter vor dem Austrittsfenster. Sichtbar sind auch die zu Eichzwecken eingebauten Be-Folien (s. S. 58).

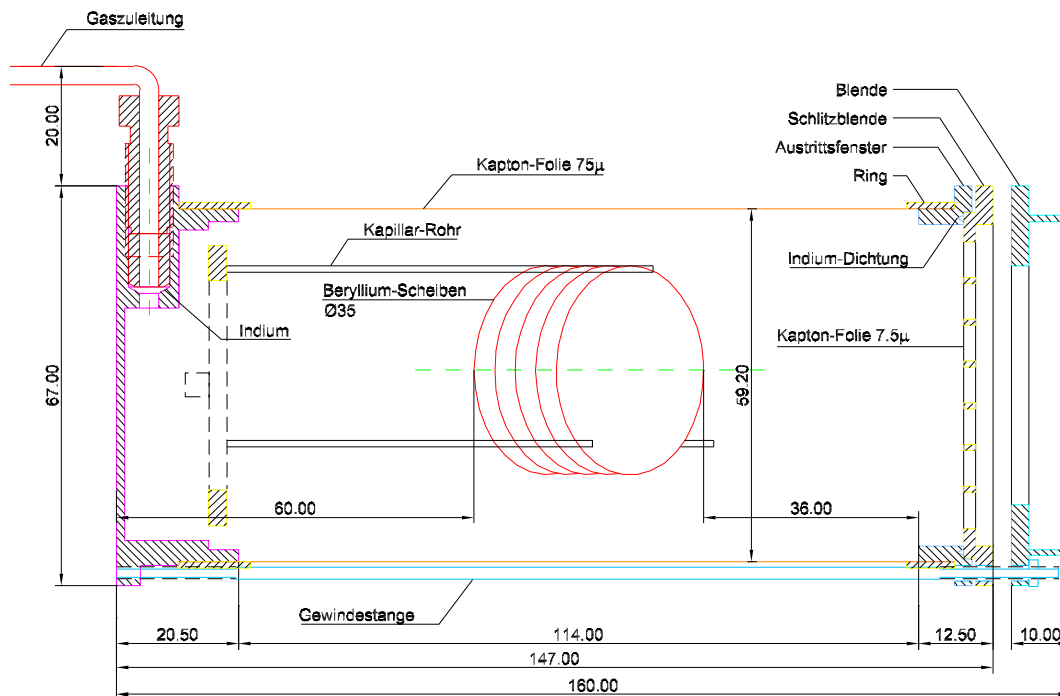
	Modell H (Abb. 3.7)	Modell K (Abb. 3.8)
Durchmesser	59 mm	59 mm
Länge	120 mm	145 mm
Volumen	340 cm ³	362 cm ³
Gewicht	142 g	< 200 g
Mantel	75 μ m dickes Hostaphan [®] RN75 [Hostaph, Rin1996]	75 μ m dickes Kapton [®] 300HN [Kapton, Rin1996]
Fenster	7,5 μ m dickes Kapton [®] 30HN	7,5 μ m dickes Kapton [®] 30HN
Stützstruktur des Fensters	0,4 mm dickes, aus Nirostablech geätztes, wabenförmiges Gitter	2 mm dickes, aus Aluminium (AlMgSi0,5 bzw. AlMgSi1) gefrästes Gitter mit 6 Schlitzten
Metallteile (Endkappe, Ringe)	Pb-freies Aluminium (AlMgSi0,5 bzw. AlMgSi1)	Pb-freies Aluminium (AlMgSi0,5 bzw. AlMgSi1)
Klebstoff	Zwei-Komponenten Epoxidharz (Araldit [®] Standard) @ 60–90 °C	Zwei-Komponenten Epoxidharz (Araldit [®] Standard) @ 60–90 °C
Ar-Permeation	$(1,94 \pm 0,16) \cdot 10^{-18} \frac{\text{mol}}{\text{mm s mbar}}$	$(2,02 \pm 0,03) \cdot 10^{-19} \frac{\text{mol}}{\text{mm s mbar}}$
He-Permeation	$(5,68 \pm 0,25) \cdot 10^{-17} \frac{\text{mol}}{\text{mm s mbar}}$	
Leckrate @ ZT	$(3,55 \pm 0,02) \cdot 10^{-5} \frac{\text{mbar l}}{\text{s}}$ bei 0,6 bar He	$(1,128 \pm 0,006) \cdot 10^{-6} \frac{\text{mbar l}}{\text{s}}$ bei 1 bar Ar
Leckrate @ 21 K	$(2,72 \pm 0,15) \cdot 10^{-6} \frac{\text{mbar l}}{\text{s}}$ bei 2,3 bar He	$< 10^{-8} \frac{\text{mbar l}}{\text{s}}$ bei 0,5 bar He

Tabelle 3.1: Abmessungen und Eigenschaften der Targetzellen Modell H und K.

einigen bar zu verhindern, sind Endkappe und Fenster-Ring mit 3 Gewindestangen (3 mm Durchmesser) aus reinem Aluminium verbunden. Die Gaszuleitung besteht aus einem Rohr aus rostfreien Stahl mit 3 mm Durchmesser. Das Anschlußstück zur Targetzelle ist mit Indium abgedichtet.

Im Rahmen der Entwicklung der Targetzellen wurden in Wien ausführliche Tests zum Materialverhalten von Kapton[®]- und Hostaphan[®]-Folien gemacht (Ausbeulung und Berstdruck), sowie Studien zum Berstverhalten und zur Druckfestigkeit geklebter Kapton[®]- und Hostaphan[®]-Verbindungen ausgeführt. Außer in der Verarbeitung wurden bei den verwendeten Klebstoffen (UHU plus endfest 300, Araldit[®] Standard, Araldit[®] Rapid) keine Unterschiede bezüglich der Festigkeit der Klebeverbindungen festgestellt.

Verschiedenste Bauweisen von Targetzellen wurden vor allem hinsichtlich der Druckfestigkeit des Materials und der Klebeverbindungen getestet. Bei den Tests der im Experiment verwendeten Modelle der Targetzellen hielt die Klebestelle des Zylindermantels bei Zimmertemperatur 3,6 bar (Modell H mit 36 μ m Hostaphan[®]-Fenster) und 4,2 bar (Modell K) Überdruck gegen Luft stand. Bei der im Experiment verwendeten Konfiguration (Modell H, Fenster aus 7,5 μ m Kapton[®]) wurde eine Druckfestigkeit der Fenster bis 2,5 bar Überdruck verifiziert. Zur Sicherheit ging man bei den Messungen bei Zimmertemperatur nie über 2,1 bar Targetdruck (gegen Vakuum) hinaus.



Material: $\text{AlMgSi}_{0,5}$ / AlMgSi
 Volumen: $V = \text{ca. } 362 \text{ cm}^3$

Abbildung 3.9: Konstruktionszeichnung der Targetzelle, Modell K, mit Bemaßungen in mm.

Weitere Studien betrafen das Abkühlverhalten, die Permeation und die Leckrate der Targetzellen mit verschiedenen Gasen. Die Werte dieser Parameter sind aus Tab. 3.1 zu entnehmen.

Ein eigener Artikel über diese Entwicklungsarbeiten und Tests ist geplant.

3.4.2 Targettisch, Gassystem und Kryostat

Die Targetzelle ist am Ende eines etwa 80 cm langen Kühlarms aus Cu montiert und dieser steht in thermischen Kontakt mit dem Kühkopf, der von einem *APD Cryogenics* Kryostat mit geschlossenem He-Kreislauf gekühlt wird (Kühlleistung von 8 W bei 20 K). Das gesamte Targetsystem ist auf einem „Tisch“ befestigt, der an die Zyklotronfalle montiert ist. Es läßt sich auf zwei Schienen am Targettisch bewegen, sodaß die Targetzelle selbst bei hochfahrenen Magneten und ohne Brechen des Vakuums in die Zyklotronfalle eingefahren werden kann (s. Abb. 3.10). Gewährleistet wird dies durch zwei flexible Metallbälge zwischen Falle und Kühlstation. Auf diese Weise kann die Zelle auch bis zur maximalen Dehnung der Bälge aus dem Zentrum der Falle herausgezogen werden. In dieser Position ist sie im Bohrloch geschützt, und es können Metallplättchen zur Kalibration ohne Brechen des Vakuums von oben in die Wechselwirkungsregion der Falle eingeführt werden.

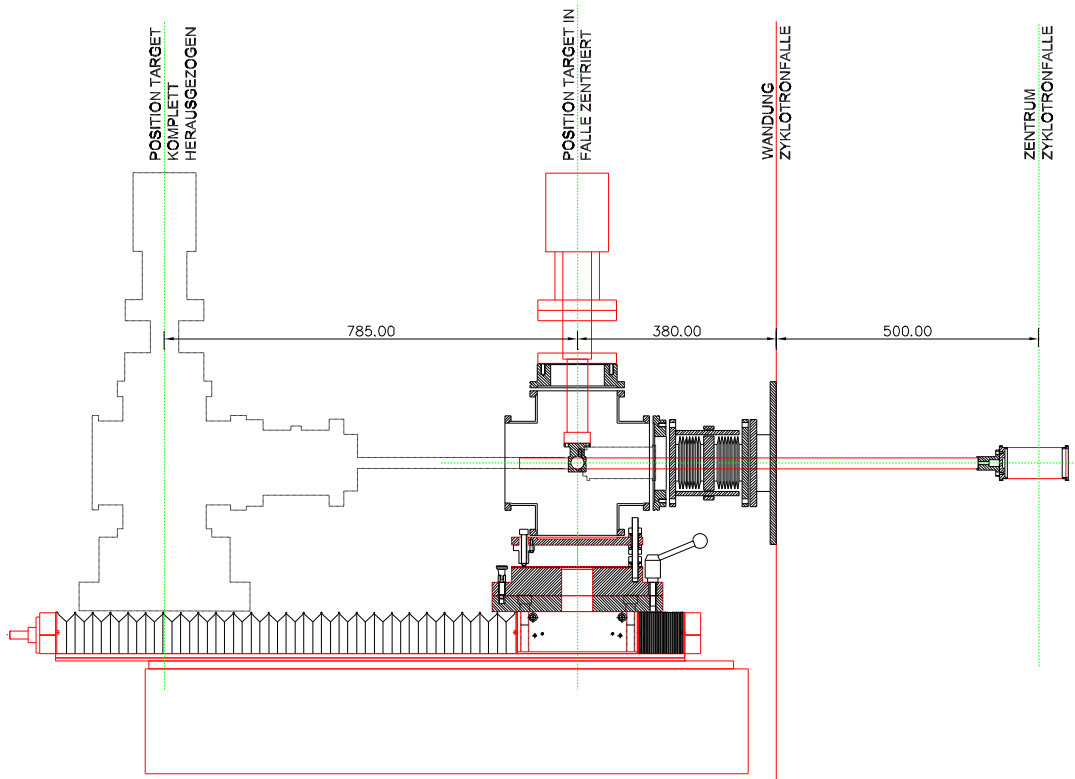


Abbildung 3.10: Konstruktionszeichnung des Kühlsystems der Targetzelle. Der gesamte Aufbau läßt sich durch Drehen eines Handrades genau positionieren. Gestrichelt eingezeichnet ist die Position bei komplett herausgefahrenem Target.

Die Targetzelle kann über eine Gaszuleitung (Al-Rohre mit 3 mm Durchmesser) gefüllt werden. Mittels einer an diese Zuleitung angeschlossenen Membranpumpe wird der Targetdruck verändert bzw. die Zelle evakuiert.

Für Messungen mit hohen Drücken (> 2 bar) im Target muß die Targetzelle auf ≤ 100 K mit dem Kryostat abkühlen. Die Temperatur wird von zwei *Cernox* Keramik-Sensoren gemessen, einer in der Nähe des Kryostats, der andere in der Nähe des Targets. Beide Sensoren werden mit einem *Genesis PC 2001* Temperaturkontroller der Firma *Scientific Instruments Inc* betrieben.

Weiters ist ein Heizelement am Kühlfinger montiert, welches über den Temperaturkontroller geregelt wird und damit die Temperatur der Targetzelle stabilisiert. Für die Auslese der Sensoren und die Steuerung der Temperatur des Targets ist dieses Gerät mit einem Computer in der Meßhütte verbunden.

Die minimal erreichte Targettemperatur betrug im Experiment R-98-01 weniger als 15 K.

3.5 Das Kristallspektrometer

Um Röntgenübergänge mit sehr hoher Energieauflösung zu messen (im Bereich von meV) wird ein Kristallspektrometer verwendet. Es funktioniert nach dem Gesetz der *Bragg'schen Reflexion*, um die Energiemessung in eine Ortsmessung umzuwandeln:

$$n\lambda = 2d \sin \vartheta_B \quad (3.6)$$

$$\text{mit } \lambda = 2\pi \frac{\hbar c}{E} \quad (3.7)$$

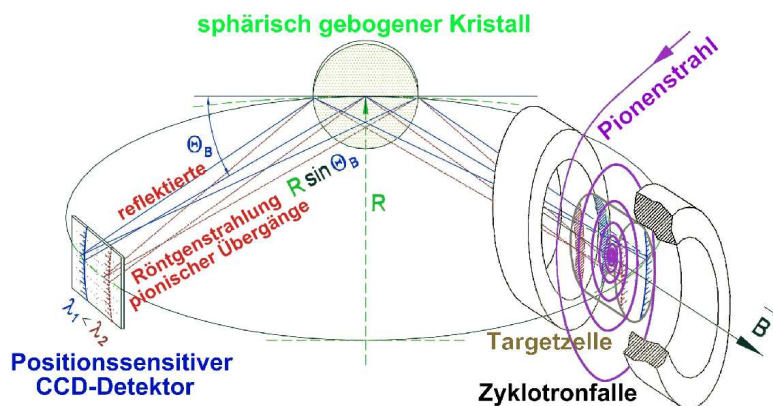
Hieraus ersieht man, welche Wellenlänge λ bzw. Energie E eines unter dem Winkel ϑ_B zur Kristalloberfläche auf das Kristallgitter eintreffenden Strahles bei der Streuung an den Gitteratomen (Netzebenenabstand d) zu *konstruktiver Interferenz* führt.

Alle im Experiment R-98-01 durchgeführten Messungen der exotischen Röntgenstrahlung werden in erster Ordnung der Bragg-Reflexion ($n = 1$) durchgeführt.

3.5.1 Prinzip

Abbildung 3.11:

Prinzip der Messungen der pionischen Röntgenstrahlung. Durch den sphärisch gekrümmten Kristall werden die Röntgenstrahlen auf den Detektor fokussiert.



Da die zu messenden Röntgenquanten im Bereich niedriger Energien von 1–20 keV liegen, wird das Spektrometer als Reflexionsspektrometer betrieben. Durch eine zylinderförmige Krümmung des Kristalls wird bei ausgedehnten Quellen, wie sie auch in diesem Experiment vorliegen, erreicht, daß divergente Strahlenbündel gleicher Wellenlänge λ fokussiert und auf einen Punkt am Detektor abgebildet werden (s. Abb. 3.11). Um zusätzlich eine vertikale Fokussierung zu erreichen, werden sphärisch gekrümmte Kristalle verwendet. Damit wird die Abbildungshöhe der ausgedehnten Röntgenquelle verringert. Dies ist bei dem verwendeten CCD-Detektor von Vorteil. Eine detaillierte Beschreibung der Optik mit sphärisch gekrümmten Kristallen findet man in [Egg1965].

Konkret wird in diesem Experiment ein doppelt-fokussierendes Kristallspektrometer in der *Johann-Anordnung* [Joh1931] verwendet. Quelle, Kristall und Detektor liegen dabei am *Rowlandkreis*, dessen Durchmesser D dem Krümmungsradius R_K der Netzebenen des sphärisch geformten Kristalls entspricht (s. Abb. 3.12). Alle auf dem Kreis befindlichen Punkte der Quelle werden wieder auf den Kreis am Ort des Detektors reflektiert, und zwar gemäß ihrer Energie nach Richtungen selektiert. Das mit dem zweidimensionalen Detektor gemessene Ortsspektrum liefert nach Eichung durch Projektion auf die X-Achse das Energiepektrum der

Röntgenübergänge. Die Abbildung des gebogenen Kristalls auf die flachen CCDs verursacht gekrümmte Linien. In der Auswertung wird diese Krümmung und die dadurch verursachte Linienverbreiterung im zweidimensionalen Ortsspektrum korrigiert (s. 5.3.1). Aus Gl. 3.6 erhält man durch Ableitung nach der Energie die Winkeldispersion

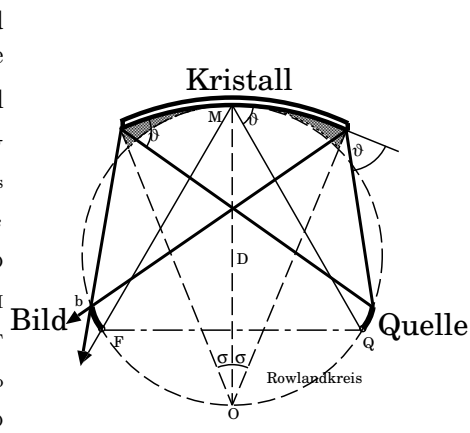
$$\frac{d\vartheta}{dE} = -\frac{\tan \vartheta_B}{E} \tag{3.8}$$

und

$$\frac{dx}{dE} = -R_K \sin \vartheta_B \frac{\tan \vartheta_B}{E} \tag{3.9}$$

die Dispersion über den Ort x am Detektor in Abhängigkeit des Braggwinkels ϑ_B angibt.

Abbildung 3.12: Bilderzeugung in der Johann-Anordnung mit ausgedehnter Quelle. Aufgrund unterschiedlicher Radien von Kristall und Rowlandkreis (grauer Bereich) kommt es zu einer leichten asymmetrischen Defokussierung.



Nun berührt, wie aus obiger Beschreibung zu ersehen ist, der Kristall den Rowlandkreis nur an einem Punkt in der Kristallmitte, da der Durchmesser des Krümmungskreises des Kristalls doppelt so groß ist, wie der Durchmesser des Rowlandkreises. Je weiter die Gitterebenen von diesem Kreis abweichen, desto stärker ist im Prinzip das Bild defokussiert. Dies äußert sich in der *Johann-Verbreiterung*, die eine zusätzliche, asymmetrische Verbreiterung der Spektrallinien um 10^{-3} – 10^{-4} auf der Hochenergieseite verursacht (s. Abb. 3.12).

Weitere Korrekturen zu Bragg's Gesetz werden u.a. durch den Biegeprozess und die Brechung der Röntgenstrahlung innerhalb des Kristalls (Korrekturfaktor BI) verursacht. Da $BI \approx 30''$ ist, muß diese Brechungsindex-Korrektur für die Einstellung des Spektrometers und in der Analyse berücksichtigt werden.

3.5.2 Kristalle und mechanischer Aufbau

Kristalle mit den am genauesten bekannten Eigenschaften in der benötigten Energieregion bestehen aus Si und SiO_2 . Für den Bereich unterhalb 3,3 keV kommen nur die Netzebenen 111 in Si, sowie 100 und $10\bar{1}$ in Quarz in Frage. Für die durchgeführten Messungen wurden zwei Kristalle verwendet [Got1998]:

1. Ein Si-Kristall (Bezeichnung Z13), der in 111 Richtung seines *reziproken Gitters* geschnitten ist ($2d = 6,271\,201\,6(18) \text{ \AA}$ bei $22,5^\circ\text{C}$), mit 100 mm Durchmesser, 0,3 mm Dicke und einem Krümmungsradius von $R_K = 2\,982,5 \pm 0,6 \text{ mm}$.

2. Ein Quarz-Kristall (SiO_2 , Bezeichnung Z20), der in $10\bar{1}$ Richtung geschnitten ist ($2d = 6,686\,277(4)\text{ \AA}$ bei $22,5^\circ\text{C}$), mit 100 mm Durchmesser, 0,2 mm Dicke und einem Krümmungsradius $R_K = 2\,982,5 \pm 0,6\text{ mm}$.

Kristallblöcke aus Si bzw. Quarz wurden poliert und dann in $300\text{ }\mu\text{m}$ dicke Scheiben parallel zu den Netzebenen geschnitten. Unter Druck wurden diese auf eine *konkave* Trägerlinse aus Glas, die auf den gewünschten Krümmungsradius geschliffen wurde, angeheftet (s. Abb. 3.13). Sie haften daran ausschließlich durch *Adhäsionskräfte*; ein Kleben hätte die optischen Eigenschaften verschlechtert. Aufgrund der gewünschten Genauigkeit der Messung wurden die Kristalle temperaturstabilisiert in einem massiven Behälter (Kristalltopf) installiert.



Abbildung 3.13: Einer der verwendeten Kristalle eingebaut in seinem Halter. Der Motor links oben dient zur Variation des vertikalen Kippwinkels. Zur Einstellung von ϑ_B wird der Halter samt Kristall im Kristalltopf gedreht.

Die Verbindung zwischen der Zyklotronfalle und dem Kristalltopf ist starr. Der Kristall befindet sich 2100 mm vom Zentrum der Zyklotronfalle. Der Kristall ist in diesem Behälter mit seiner Drehachse auf einem starren Tragarm montiert, an dessen anderen Ende das Detektorsystem befestigt ist. Er kann relativ zu diesem Arm über einen Winkeldecoder mit einer Genauigkeit von $\pm 0,12''$ auf den Braggwinkel eingestellt werden. Während der Datennahme wird die Einstellung über eine Piezo-Kalibrierung kontrolliert und automatisch korrigiert. Aufgrund dieser Konstruktion bleibt beim Drehen des Arms die Verbindungsachse zwischen Kristall und Detektor fixiert.

Der Detektorarm selbst kann über einen Winkeldecoder und einen Linearmotor mit $\pm 1''$ um die Kristallachse (auf $1\text{ }\mu\text{m}$ reproduzierbar) gedreht werden. Ein Metallbalg als Verbindung zwischen Kristalltopf und Detektorarm erlaubt Winkeländerungen des Arms bis zu 10° ohne Brechen des Vakuums oder ohne Umbau.

Der Behälter, in dem sich der CCD-Detektor und die nachgeschaltete Elektronik befindet, ist auf einem Lineartisch am Ende des Tragarms angebracht (s. Abb. 3.14). Dieser Lineartisch lässt sich nach vor und zurück bewegen und erlaubt so die Einstellung der CCD auf die Fokallänge der gemessenen Röntgenenergie.

Erste Messungen mit der ECRIT wurden im Februar 2002 mit dem Übergang (${}^3S_1 \rightarrow {}^1S_0$)³ (3103,7 eV, Lebensdauer 0,21 μ s) von He-ähnlichen Ar^{16+} , der eine Dopplerverbreiterung von weniger als 40 meV hat, durchgeführt. Die Energieauflösung der beiden Kristalle Z13 und Z20 wurde mit 418 meV bzw. 444 meV ermittelt [Sim2002].

Kristall und Zyklotronfalle verwenden ein gemeinsames Vakuumsystem. Der Druck im Vakuumgefäß des Bragg Kristalls betrug während der Messungen etwa 10^{-6} mbar.

Die Ereignisraten der gemessenen Röntgenstrahlung lagen im Bereich von $1,1 \pm 0,2 \frac{\text{Events}}{\text{hC}}$ (π^-O) bis $25,1 \pm 0,7 (\pi^-C) \frac{\text{Events}}{\text{hC}}$ (C...über eine Aufnahme summierter Protonenstrom beim Target E). Für den Übergang $\pi^-{}^{12}\text{C}_{(5g \rightarrow 4f)}$ wurden pro CCD-Aufnahme 70 Ereignisse (Schwankungsbreite von rund $\pm 70\%$) gemessen.

3.6 Das Detektorsystem

Der Detektor muß aufgrund der geringen Ereignisrate (Röntgenausbeute bei 2,8 bar: $Y_{K\alpha}^{\pi\text{H}} = 7,52 \pm 1,17\%$, $Y_{K\beta}^{\pi\text{H}} = 4,55 \pm 0,89\%$, $Y_{K\gamma}^{\pi\text{H}} = 2,49 \pm 0,86\%$ [Rus1995]) eine hohe Nachweiswahrscheinlichkeit für weiche Röntgenstrahlung (bis 20 keV) besitzen. Weiters muß er eine gute Ortsauflösung und Energieauflösung haben, sowie gute Unterdrückung des Untergrundes ermöglichen.

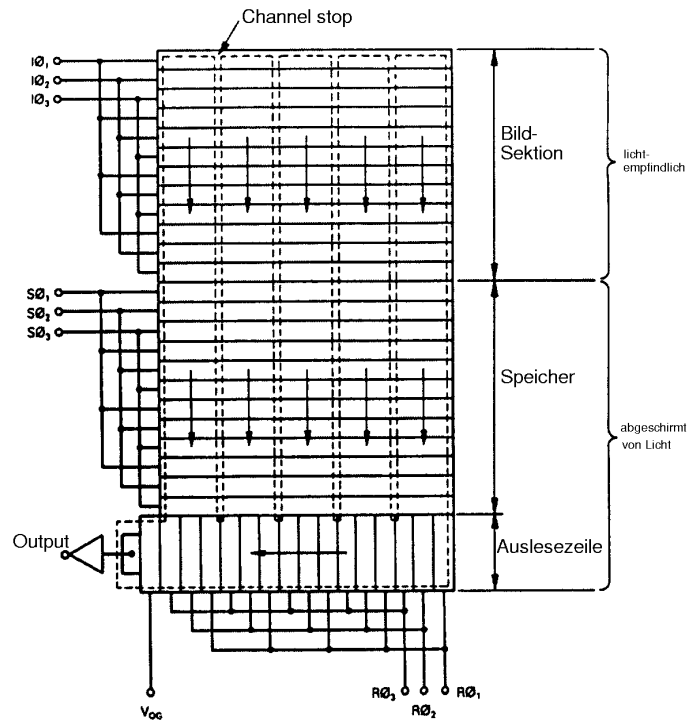
Aus diesen Gründen haben sich CCD Chips als Detektoren für Röntgenstrahlung in diesem Energiebereich sehr gut bewährt [Cat1979]. Ihre Ortsauflösung ist durch die Pixelgröße gegeben (10–40 μm), die Energieauflösung beträgt < 150 eV bei ${}^{55}\text{Mn}$ (5,898 keV) [Nel2002b]. Die stark energieabhängige CCD-Effizienz hat ein Maximum bei ca. 2,5 keV und kann durch tiefere Verarmungszonen stark verbessert werden. Außerdem läßt sich mit ihnen eine sehr effektive Unterdrückung des Untergrundes, meist Gammateilchen und hadronische Teilchen, durchführen. Ein Nachteil ist, daß sie aufgrund ihrer Funktionsweise keine Zeitmarke setzen und so kein schnelles Triggersignal erzeugt werden kann. Dies spielt für das gegenständliche Experiment keine Rolle.

3.6.1 Funktionsweise von CCDs

Ein CCD Chip ist ein *Halbleiter*-Photonendetektor, dessen photosensitive Seite eine Struktur aus 10–40 μm kleinen Bildpunkten (genannt „*Pixel*“) besteht. Diese Pixel sind in einer Matrix mit Reihen und Spalten angeordnet. Üblicherweise ist sie aus p-Si gefertigt, und besteht aus einer Bild-Sektion, einem Speicher und einem Ausleseregister mit Vorverstärker (s. Abb. 3.15). In den Pixeln werden eingehende oder durchgehende Photonen entsprechend ihrer Energie durch *Photoeffekt* in Ladung konvertiert und diese Ladung wird gespeichert. Es erfolgt der Ladungstransport von der Bild-Sektion in den Speicher und zeilenweise Verschiebung in das Ausleseregister. Die Ladungen werden nacheinander zum Ausgang transferiert und in der nachfolgenden Elektronik mittels ADC digitalisiert.

³Übergang $1s2s \rightarrow 1s^2$

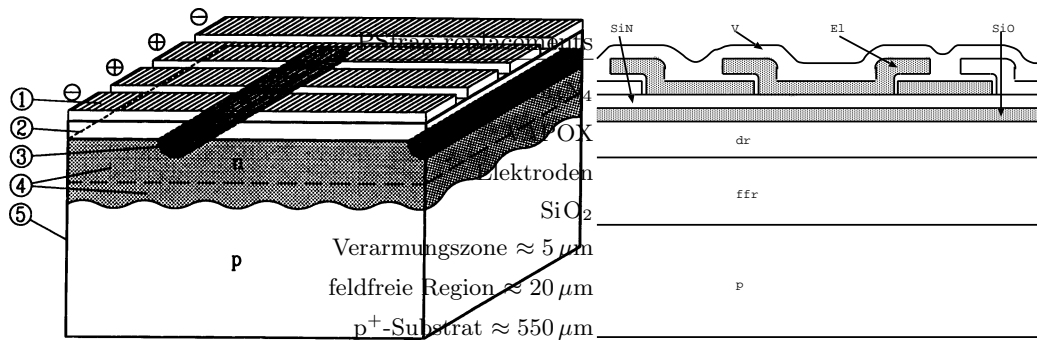
Abbildung 3.15: Die drei Bereiche einer typischen „frame-transfer“ CCD. Während die Bild-Sektion dem Röntgenlicht ausgesetzt ist, sind Speicher und Auslesezeile abgeschirmt. Eingezeichnet sind auch die Richtungen, in denen die gespeicherten Ladungen mittels der 3-Phasen-Spannungen $I01$, $I02$, $I03$, $S01$, $S02$, $S03$ in die Auslesezeile verschoben werden, wo sie dann Pixel mittels der Spannungen $R01$, $R02$, $R03$ in die Elektronik ausgelesen werden. [Nel2002b]



Die Absorption eines Röntgenquants im Si-Kristallgitter resultiert zu etwa 92% [Nel2002b] in der K-Elektronen-Emission des Si-Atoms. Quanten geringerer Energie wechselwirken auch mit höheren Schalen (L, M, ...). Das so angeregte Si-Atom kann sich durch Auger-Effekt oder durch Emission eines Fluoreszenzphotons abregen. Das Photoelektron führt sekundäre Ionisationen aus, bis nicht mehr genügend Energie übrig ist, um Elektronen vom Valenzband ins Leitungsband zu heben. Somit werden N e^- -Loch Paare bei einem durchschnittlichen Energieverlust von 3,68 eV pro Paar erzeugt. Röntgenstrahlung mit 3 keV hat in Si eine Absorptionstiefe von $4 \mu\text{m}$ und produziert rund 800 e^- -Loch Paare pro Pixel [Sig1994].

Eine typische CCD (s. Abb. 3.16) besteht aus niederohmigem ($50 \Omega \text{cm}$), $25 \mu\text{m}$ dickem Si auf einem $550 \mu\text{m}$ dicken p^+ -Si Substrat. Diese Si-Oberfläche ist isoliert mit einer $0,1 \mu\text{m}$ dicken Schicht SiO_2 und einer $0,1 \mu\text{m}$ dicken Schicht Siliziumnitrid (Si_3N_4). Auf diesen isolierenden Schichten sind Elektroden aus polykristallinem n-Si aufgebracht, mit einer isolierenden Zwischenschicht SiO_2 . Eine dünne Lage aufgedampftes SiO_2 (VAPOX) schützt und isoliert die Oberfläche der CCD. Das Si-Substrat ist geerdet oder liegt auf einem Potential über Erde. CCDs der Firma MAT (Marconi Applied Technologies), die auch die verwendete CCD22 herstellte, haben typischerweise eine Substratspannung von 3–6 V [Nel2002b].

Eine Reihe Pixel besteht üblicherweise aus drei Elektroden („3-Phasen CCD“), so auch die in dieser Arbeit verwendeten CCD22. Legt man eine positive Spannung (Gatespannung) an eine der Elektroden (zumeist Phase 2), erzeugt man damit einen $5 \mu\text{m}$ tiefen Bereich unterhalb der Elektrode, der eine geringe Zahl an Löchern hat (Verarmungszone) und dessen Tiefe die Effizienz der Chips bestimmt, sowie eine $25 \mu\text{m}$ tiefe feldfreie Region. Die Schicht n⁺-Si unterhalb der SiO_2 -Lage modifiziert das elektrostatische Potential dieses verarmten Bereiches, sodaß Ladung abseits der Oberfläche erzeugt und gespeichert werden kann. In horizontaler



(a) Pixelstruktur einer CCD: (1) Elektroden, (2) Isolator, (3) channel stop, (4) Verarmungszone, (5) Si-Substrat. [Sig1994]

(b) Querschnitt durch den Aufbau einer 3-Phasen CCD.

Abbildung 3.16: Aufbau und Querschnitt durch eine 3-Phasen CCD samt Pixelstruktur.

Richtung ist es dieses Potential, welches die Ladungen in Position hält; in vertikaler Richtung sind sog. „channel stops“ (stark dotierte, elektrisch inaktive p-Bereiche) implantiert, die ein Entweichen der e^- verhindern. Die Ausdehnungen der Elektrodengruppen und der Abstand zwischen den channel stops definiert die Größe eines Pixels.

Erzeugung und Speicherung der Ladungen wird für eine gewisse Zeit, die „Integrationszeit“ oder „Belichtungszeit“, erlaubt, während der die CCDs der Röntgenstrahlung ausgesetzt sind. Diese Zeit darf nicht zu lange sein, um zu verhindern, daß das Pixel während der Belichtung ein zweites Mal getroffen wird. Durch Aufrechterhalten der Spannung (z.B. 10 V) an der Elektrode (z.B. Elektrode 2) wird die generierte Ladung im Potentialtopf des Pixels gehalten. Reduziert man diese Spannung nach Ende der Belichtungszeit auf 0 V und erhöht gleichzeitig die Spannung an der benachbarten Elektrode 3 (Kreuzungspunkt bei 50 % der Amplitude, Anstiegszeit 500 ns, Signaldauer 10 μ s), wandert der Potentialtopf und damit auch die Ladung von der ersten zur zweiten Elektrode. Senkt man das Potential an Elektrode 3 und erhöht gleichzeitig jenes von Elektrode 1 (jede dritte Elektrode ist leitend miteinander verbunden), so wird die Ladung durch diese Wechsellspannung mit entsprechender Phase von einer Zeile zur Nächsten transportiert. Durch diese 3-phasige Pulssequenz gelangt die Ladung von der Bild-Abteilung in den Speicher und weiter, bis sie an einer Zeile von Pixeln anlangt, die im rechten Winkel an die letzte Zeile des Speichers gekoppelt ist, das Ausleseregister (s. Abb. 3.15). Nach 20–30 ms ist der „frame-transfer“ (Transfer der Ladung vom Bild in den Speicher) vollendet und die Belichtung kann erneut beginnen. Der Speicher und die Ausleseeinheit sind mit einem lichtundurchlässigen Material abgedeckt und werden während der nächsten Belichtungszeit ausgelesen.

Jedes einzelne Pixel der Auslesezeile wird nacheinander zu einem ladungssensitiven Verstärker transportiert und in der nachfolgenden Elektronik, die sich etwas entfernt befindet, verstärkt und ausgewertet. Eine typische Sensitivität der Auslesung ist ca. $1 \frac{\mu\text{V}}{e^-}$. Ist die Ladung des Pixels gemessen und in eine Spannung konvertiert, wird der Ausgangs-FET zurück-

gesetzt für die Messung des nächsten Pixels.

Bei Raumtemperatur wäre Dunkelstrom der größte Beitrag zum Untergrundrauschen der CCD. Dunkelstrom ist die thermische Erzeugung von Ladung ohne Photoionisation (kein Lichteinfall), wenn also die thermische Anregung des Si-Gitters genügt, um ein e^- ins Leitungsband zu heben. Bei 20°C resultiert ein typischer Dunkelstrom von $3,5\text{ nA}$ in der Erzeugung von $\approx 20\,000 \frac{e^-}{\text{Pixel s}}$ bei $22 \times 22 \mu\text{m}$ Pixelgröße [Var1990]. Dieser Strom würde ein Pixel, dessen Potential maximal $100\,000 e^-$ fassen kann, binnen $2\text{--}3\text{ s}$ „anfüllen“ und somit die ganze CCD innerhalb dieser Zeit sättigen. Deshalb müssen bei Anwendungen für die Röntgenspektroskopie die CCDs gekühlt werden. Der Dunkelstrom wird somit auf $\approx 0,015 \frac{e^-}{\text{Pixel s}}$ reduziert und ist vernachlässigbar, wenn sie auf -100°C (173 K) abgekühlt werden.

Andere Quellen des Untergrundes sind die statistische Variation der Anzahl der produzierten e^- -Loch Paare, Ladungsverlust im Transferprozeß (Ladungstransfer-Effizienz üblicherweise $\geq 99,9995\%$), thermische Variation des Potentials beim Zurücksetzen der Auslesediode und Untergrund des Ausgangs-FETs.

Die Energieauflösung einer CCD ist von diesen Rauschquellen abhängig [Sig1994]:

$$\Delta E[\text{eV}] = 3,68 \sqrt{N^2 + \frac{FE_\gamma}{3,68}} \quad (3.10)$$

(F... Fano-Faktor (= 0,11); E_γ ... Röntgenenergie; N... gesamtes Ausleserauschen)

Elektronische Schaltungen versorgen die CCDs mit den entsprechenden Spannungen und Taktgeber generieren die Phasen der Transfersignale. Die Ausgangssignale werden durch einen auf dem Chip befindlichen Verstärker bearbeitet und von Ladung in Spannung umgewandelt. Danach werden sie durch einen Signalprozessor, üblicherweise mit der Methode des *correlated double sampling*, geleitet. Zuletzt werden die Signale in einem ADC digitalisiert und in einem Computer gespeichert.

3.6.2 Der verwendete Detektor

Die im Experiment verwendeten CCDs (Typ CCD22) (s. Abb. 3.17) [Nel2002a, Nel2002c] wurden speziell für Satelliten-basierte Röntgenastronomie⁴ entwickelt⁵ und werden auch für Röntgenspektroskopie im Bereich $1\text{--}10\text{ keV}$ eingesetzt. Im speziellen wurde dieser CCD-Typ entwickelt, um Messungen mit hoher Quanteneffizienz zu ermöglichen (zu erwartende Raten < 100 Röntgenereignisse/h), da Standard CCDs eine geringe Quanteneffizienz bei niedrigen und bei hohen Energien haben (s. Abb. 3.18).

Um die Effizienz für hohe Energien ($> 4\text{ keV}$) zu maximieren, bestehen CCD22 aus $80\ \mu\text{m}$ dickem, hochohmigen ($4000\ \Omega\text{ cm}$) Si über dem Substrat. Bei Anlegen der Gatespannung erreicht man eine Tiefe der sensitiven Zone von $30\text{--}40\ \mu\text{m}$ und eine entsprechende feldfreie Zone von $40\text{--}50\ \mu\text{m}$. Um die Effizienz bei niedrigen Energien ($< 2\text{ keV}$) zu optimieren, wurde eine

⁴European Photon Imaging Cameras (EPIC) an Bord des XMM-Newton Röntgenteleskops.

⁵Raumforschungszentrum, Institut für Physik und Astronomie der Universität Leicester, England, gemeinsam mit Firma MAT.

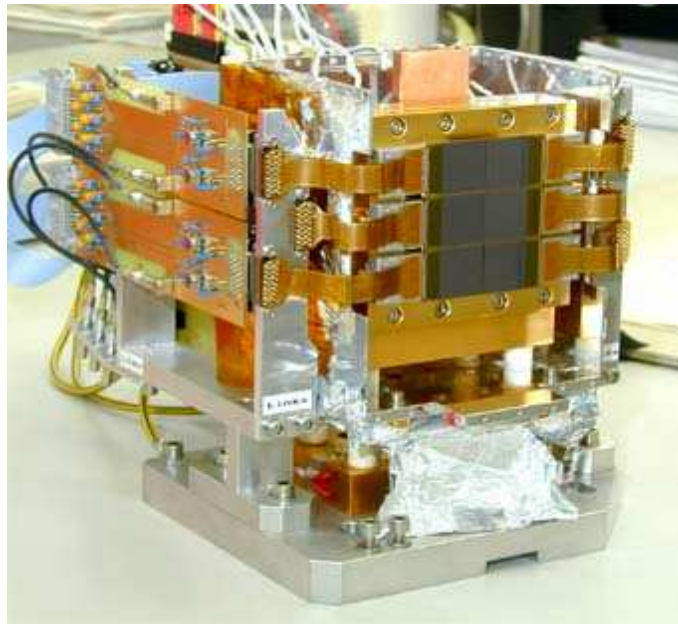
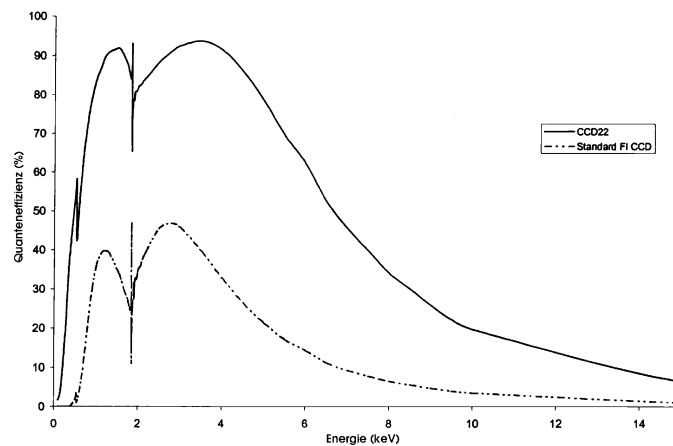


Abbildung 3.17: Blick auf die CCD-Matrix. Die drei CCD-Paare werden durch Federn auf einen Kühlfinger aus Cu gedrückt, welcher in ein Reservoir mit flüssigem N_2 eintaucht.

Abbildung 3.18: Quanteneffizienz (QE) ist das Prozent-Verhältnis detektierter zur Anzahl der einfallenden Röntgenphotonen. Absorption von Quanten in der Elektrodenstruktur bestimmt das Niedrigenergieverhalten, Absorption im Substrat das Hochenergieverhalten. [Nel2002b]



Struktur offener Elektroden entwickelt, in der die Breiten der Elektroden 1 und 2 stark reduziert sind und Elektrode 3 weggeätzt ist. Dadurch ist die Absorption in der Elektrodenstruktur stark reduziert. Die Chips haben eine Energieauflösung von ≈ 140 eV bei 3 keV. Ihre Effizienz beträgt $\approx 80\%$ bei 1,6 keV und $\approx 90\%$ bei 3 keV. Der Bildbereich besteht aus 600×600 Pixeln (jeweils $40 \times 40 \mu\text{m}$). Das ergibt eine Bildfläche von 24×24 mm pro CCD. Der Speicher besteht aus 600×602 Pixeln (jeweils $39 \times 12 \mu\text{m}$), wodurch die CCD kompakter wird. Der Ausleseregister ist in jeweils 305 Pixel pro Hälfte geteilt, sodaß die Ladung an beiden Seiten ausgelesen werden kann [Nel2002b].

Der Detektor besteht aus 6 CCD22, die in zwei Spalten zu je drei Reihen angeordnet sind (s. Abb. 3.17). Damit ist die gesamte Bildfläche 1200 Pixel (48 mm) breit und 1800 Pixel (72 mm) hoch und beinhaltet $2,26 \cdot 10^6$ Pixel (bzw. 3456 mm^2). Der Abstand zwischen den Spalten ist $\approx 600 \mu\text{m}$, zwischen den Reihen $\approx 730 \mu\text{m}$. Die Chips sind zueinander parallel angeordnet. Die Abweichungen von der Parallelität sind maximal 7 mrad. Die CCDs sind mit ihrem Träger auf einem Kühlfinger aus Cu montiert, der in einen Dewar mit flüssigem N_2

eintaucht und sie so auf $-100 \pm 0,5^\circ\text{C}$ (173 K) in einem Vakuum von 10^{-7} mbar hält. Kontrolliert wird die Temperatur durch PT100 Sensoren.

Nach Ablauf der Belichtungszeit wird zuerst bei allen 6 CCDs gleichzeitig die Ladung von der Bildsektion in den jeweiligen Speicher geschoben (< 20 ms). Danach erfolgt die Auslesung für die 3 Chips einer Spalte (CCD 1,2,3 mit Sequenzer1 parallel ausgelesen) und für die zweite Spalte anschließend (CCD 4,5,6 mit Sequenzer2). Die übliche Auslesezeit beträgt 30 s pro Spalte, insgesamt etwa eine Minute. Die beiden Reihen zu je drei Chips werden so abwechselnd ausgelesen, mit einem 12-bit ADC digitalisiert und die Daten in einem PC verarbeitet. Dadurch erhält man einen kontinuierlichen Datenstrom mit geringer Integrationszeit. Die Verarbeitungszeit für ein Bild ist hauptsächlich durch die Aufarbeitung der Daten limitiert (online Korrekturroutinen). Eine Aufnahme während des Experiments umfaßt üblicherweise 60 Bilder und dauert etwa 1 h.

Die CCDs sind mit der Ausleseelektronik und dem Dewar auf einem Lineartisch am Ende des Detektorarms befestigt (s. Abb. 3.14) und können auf diesem für die Optimierung der Fokalposition um 85,8 mm mittels eines Motors verschoben werden. Die Signale werden direkt im Areal in einen PC eingelesen, der über die serielle Schnittstelle mit einem zweiten Satz Peripherie (Tastatur, Maus, Monitor) in der Meßhütte verbunden ist. Von dort aus wird die Datenaufnahme gesteuert und einer ersten Analyse zugeführt.

Der Detektor ist vom Vakuum in den Strahlrohren durch ein $5\ \mu\text{m}$ dickes Fenster aus aluminisiertem Mylar[®] ($\text{C}_5\text{H}_4\text{O}_2$) getrennt. Dieses Trenn-Fenster ist gegen Überdruck durch eine automatische Bypass-Konstruktion (s. Abb. 3.14) gesichert, die geschlossen wird, wenn der Druck in den Strahlrohren über 10^{-3} mbar steigt. Im Falle eines kompletten Ausfalls des Spektrometer-Vakuums schließt das Ventil vor dem Fenster und öffnet der Bypass, sodaß das Fenster von beiden Seiten bepumpt wird. Der Druck in der Detektorbox betrug während der Messungen rund 10^{-7} mbar.

Kapitel 4

Experimentdurchführung

4.1 Einstellung der Experimentkomponenten

4.1.1 Führung des Pionenstrahls

Über ein PC-Programm lassen sich die Parameter der Strahlführung der Pionen kontrollieren. Diese sind die Stromstärke in den strahlführenden Magneten und die Öffnung der strahlbegrenzenden Schlitze.

Aus den Erfahrungen mit dem vorangegangenen Experiment zur Messung der Pionenmasse [Man2001] waren die optimalen Parameter bekannt. Sie wurden mit der Rate des Szintillators T3 überprüft.

4.1.2 Optimierung der Zyklotronfalle

Nach dem Aufbau der mechanischen Teile und der elektrischen Verkabelung wird das Kühlsystem mit flüssigem He und N₂ gefüllt. Nach Erreichen der Arbeitstemperatur von 3 K wird Strom bis zum Maximalwert von 126 A in die nun supraleitenden Spulen geleitet. Die Stabilität des Magnetfeldes und des Kühlsystems muß fortlaufend überprüft werden.

Der Plastiksintillator T3 kann anfangs zur exakten Positionierung des π^- -Strahls genutzt werden und liefert Informationen über die Wirkung der Degrader im Inneren der Falle (s. 37), da man einzelne Umlaufzyklen als zeitversetztes Signal beobachtet.

4.1.3 Vorbereiten des Gastargets

Nachdem das Targetsystem mitsamt dem Kühlmechanismus aufgebaut ist, wird es in die Zyklotronfalle und innerhalb dieser in die optimale Position gebracht. Ist die Falle geschlossen und evakuiert, wird das Target mit Gas gefüllt und werden die Magnetfelder hochgefahren.

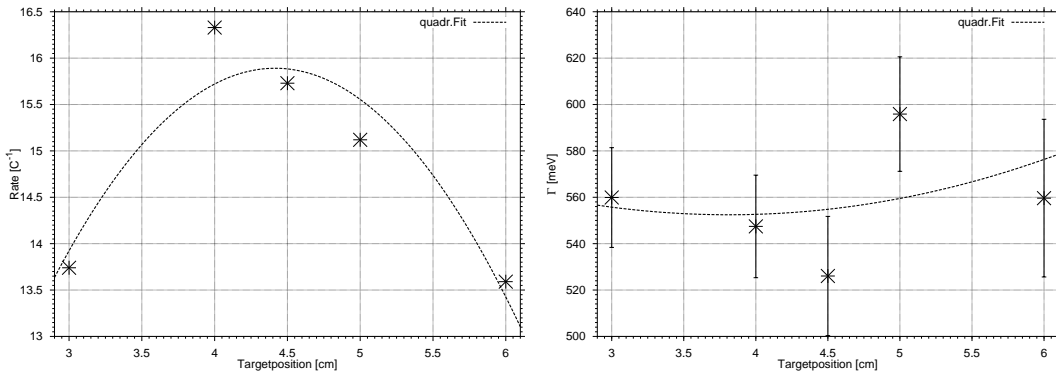
Beim Wechsel der Gasart wird die Targetzelle und die Gaszuleitung von Molekülen der vorhergehenden Gasart durch Evakuieren und Spülen gereinigt.

Für die Messungen pionischer Röntgenstrahlung ($\pi^-H_{(3p \rightarrow 1s)}$, $\pi^-H_{(4p \rightarrow 1s)}$, $\pi^-H_{(2p \rightarrow 1s)}$, $\pi^-O_{(6h \rightarrow 5g)}$, $\pi^-Be_{(4f \rightarrow 3d)}$) mit kryogenischem Target wird die Targetzelle durch den APD Kryostat gekühlt. Die Auslese und Steuerung der Targettemperatur wird mit einem Temperaturregler (*Genesis PC 2001*), der durch ein „LabVIEW™“-Programm gesteuert wird, durchgeführt. In der Kühlphase ist das Heizelement am Kühlfinger ausgeschaltet. Um eine bestimmte, im Programm eingestellte Temperatur T_{set} zu halten, steuert der Temperaturregler bei Erreichen von T_{set} den Heizelement-Strom, um ein Unterschreiten von T_{set} zu verhindern. Nach Erreichen eines Gleichgewichtes zwischen Kühlung und Heizung wird die Temperatur auf $\pm 0,1$ K gehalten.

Zum Aufwärmen des Targets schaltet man den Kryostat aus und erwärmt das Target mit dem Heizelement bis zum Erreichen von $T_{set} \approx 300$ K.

Das Abkühlen der Targetzelle von Zimmertemperatur auf 30 K dauert rund 10 Stunden und bis zur Temperatur von flüssigem H_2 16 Stunden. Das Aufwärmen des Systems von 30 K auf Raumtemperatur dauert etwa 4 Stunden.

Die im Targetgas erzeugten Röntgenquanten müssen noch einige cm durch das Gas zurücklegen, bevor sie in die Vakuumstrecke gelangen. Wegen Selbstabsorption durch Stöße mit den Gasatomen wird die Röntgenausbeute vermindert. Deshalb wurden vor den eigentlichen Messungen einige Tests zur Ermittlung der günstigsten Targetposition gemacht. Um die Intensität zu optimieren, wurde das mit CH_4 gefüllte Target in Schritten von 10 mm verschoben. Die Rate der Röntgenstrahlung des Übergangs $\pi^-^{12}C_{(5g \rightarrow 4f)}$ wurde im relevanten Energie- und Positionsbereich gemessen und auf den Protonenstrom normiert (s. Abb. 4.1). Aufgrund dieser Messungen wurde die optimale Targetposition in der Zyklotronfalle so gewählt, daß sich das erste Drittel des Targetzylinders in der Symmetrieebene der Falle befindet (auf der Skala Position „4 cm“) (s. Abb. 3.10).



(a) Rate der Röntgenstrahlung aufgetragen über der Position des Targets in der Zyklotronfalle.

(b) Breite Γ der Linie $\pi^-^{12}C_{(5g \rightarrow 4f)}$ über der Position des Targets in der Zyklotronfalle.

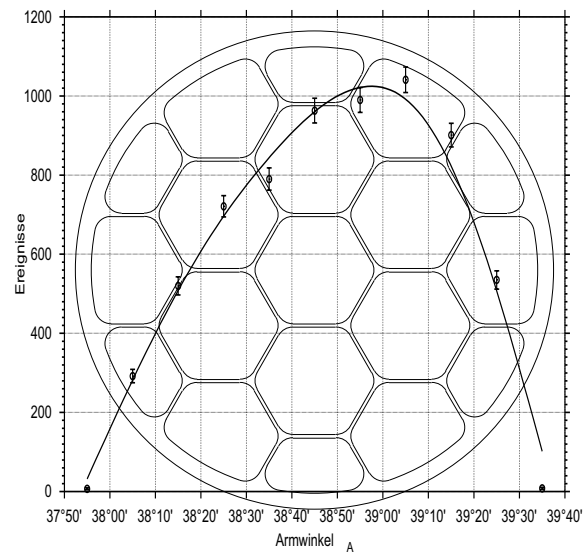
Abbildung 4.1: Messungen der Rate und der Breite des $\pi^-^{12}C_{(5g \rightarrow 4f)}$ -Überganges von CH_4 bei verschiedenen Positionen des Targets in der Zyklotronfalle. Im Nullpunkt der Skala ist das Fenster der Targetzelle in der Symmetrieebene der Falle. Die Kurven sind ein quadratischer Fit der Meßdaten.

4.1.4 Einstellung des Spektrometers

Während des Aufbaus läßt sich das Spektrometer durch die auf der Grundplatte eingravierte Winkelskala mit einer Genauigkeit von $\pm 0,5^\circ$ positionieren. Die Ausrichtung der Spektrometergeometrie geschieht vor Einbau des Targets in die Zyklotronfalle durch einen Laser in Targetposition, dessen Reflexion am Kristall auf die Detektorposition ausgerichtet wird. Danach wird der Lineartisch für die Fokallänge kalibriert. Mit dem Steuerungs-PC wird der Lineartisch in die verschiedenen Positionen für die einzelnen Meßgruppen gefahren und die Ist- und Soll-Position nachgemessen und angeglichen. Sämtliche Einstellungen des Spektrometers lassen sich bei Strahlbetrieb über einen PC in der Meßhütte mit einer Steuerungssoftware („LabVIEW™“) kontrollieren und korrigieren.

Vor Start einer Meßreihe wird nach Einstellen des berechneten Braggwinkels ϑ_B der Detektorarm systematisch auf einige $10'$ links und rechts des erwarteten Reflexes gesetzt. So durchfährt man das Target („Targetscan“) mit Fluoreszenzstrahlung (angeregt mittels Röntgenröhre) oder pionischer Röntgenstrahlung, um sicher zu gehen, daß der Detektor direkt in die Mitte des Targetfensters trifft (s. Abb. 4.2). Zum selben Zweck kann der Kristall auch um die horizontale Achse gekippt werden („Tilt-angle Messung“).

Abbildung 4.2: Scan der Targetzelle durch systematische Veränderung der Winkeinstellung des Spektrometers („Targetscan“). Aufgetragen ist die Intensität gegen den eingestellten Armwinkel Θ_A . Unterlegt ist die verwendete Stützstruktur, um die Position des Maximums der Intensitätsverteilung zu veranschaulichen (Messung mit 800 mbar Ar im Target und einer Beschleunigungsspannung von 25 kV in der Röntgenröhre). Die Messpunkte wurden durch eine Splinefunktion interpoliert.



4.1.5 Bragg-Kristalle

Als Bragg-Kristalle wurden in den Messungen ein Si und ein Quarz-Kristall (s. 3.5.2) verwendet. Diese waren mit einer Schlitzblende (Breite 60 mm, Höhe 95 mm) abgedeckt. Dies reduziert zwar die optisch aktive Kristalloberfläche auf 57 cm^2 (Verlust von 20% in der Ereignisrate), verringert jedoch die Johannverbreiterung erheblich [Sie2000].

4.1.6 Detektorsystem

Für Messungen muß die Temperatur der CCDs stabilisiert werden, da sonst das elektronische Rauschen der Chips mit steigender Temperatur stark zunimmt (s. S. 51). Man erkennt das

am vermehrten Auftreten von Clustern¹ im zweidimensionalen Ortsspektrum. Man kann im CCD-Auswerteprogramm defekte Pixel, die bei jeder Aufnahme einen Ladungsinhalt anzeigen, anzeigen lassen und deren Position in der Pixelmatrix abspeichern, um sie in der weiteren Analyse zu eliminieren. Fehlstrukturen treten vor allem am Rande der CCDs auf.

Über das Programm „XCAM CCD Image Display“, welches die CCDs steuert, wird Spannung an die CCDs angelegt. Nach 1–2 Stunden wird ein stabiler Betriebszustand erreicht und die Messung gestartet.

Die richtige Funktionsweise der sechs CCDs läßt sich durch eine Messung mit einer ca. 35 mm vor die Chips gesetzten Al-Maske mittels Bestrahlung mit einer ⁵⁵Fe-Röntgenquelle (emittiert ⁵⁵Mn-Röntgenstrahlung bei 5,898 keV) überprüfen. Sie besteht aus einem Muster aus 150 μ m breiten Schlitzen.

4.2 Energiekalibration

Da mit dem Kristallspektrometer nur Relativmessungen (d.h. Abstand von Linien zueinander im ortsempfindlichen Detektor) durchgeführt werden können, dienen Spektrallinien von Fluoreszenztargets zur Energiekalibrierung und zur Einstellung der Winkel. Um die gemessenen Spektrallinien absoluten Braggwinkeln ϑ_B zuordnen zu können, werden die Winkeldifferenzen zu diesen Fluoreszenzlinien, deren Energien bekannt sind, bestimmt. Allerdings sind deren Linienbreiten relativ groß (einige eV), sodaß zur Feinjustierung ein „Targetscan“ durchgeführt werden muß.

Zu jeder zu messenden π^- -H-Linie wurde vorab ein Fluoreszenzübergang mit ähnlichem Winkel ausgesucht. Diese Messungen werden mit hoher Rate durchgeführt und haben sehr geringen Untergrund, sodaß kurze Belichtungszeiten von einigen Minuten genügen. Sie eignen sich auch für Stabilitätsuntersuchungen des Gesamtaufbaus (Bestrahlung von Zn-, Ga- und Ge-Plättchen mit einer Röntgenröhre).² Aufgrund ihrer im Vergleich zu den Linienbreiten pionischer Übergänge großen Linienbreiten eignen sich Röntgenfluoreszenzübergänge jedoch nicht für präzise Energiekalibrationen (besser als einige ppm).

Die Kalibration für den Übergang $3p \rightarrow 1s$ in π^- -H (s. Tab. 4.4) erfolgte durch Bestrahlung der mit Ar gefüllten Targetzelle mit einer Röntgenröhre (s. Abb. 3.1) (Fluoreszenzlinien Ar- $K\alpha_1$:³ 2 957,685 eV und Ar- $K\alpha_2$:⁴ 2 955,63 eV [XDB2001]).

Prinzipiell ist es möglich, daß π^- auch in der Wandung der Targetzelle stoppen, da Kapton[®] auch C, N und O enthält ($[\text{C}_{22}\text{H}_{10}\text{N}_2\text{O}_5]_n$), und dadurch ein Röntgenhintergrund entsteht. Es konnte allerdings in einem früheren Experiment [Sie1997] gezeigt werden, daß keine signifikante Anzahl π^- in der Wand der Targetzelle stoppen, sodaß kein erhöhter Untergrund aufgrund dieses Effekts zu erwarten war.

¹Damit sind aneinanderliegende Pixel bezeichnet, die einen Ladungsinhalt oberhalb einer zuvor gesetzten Schwelle haben.

²Erschütterungen in der Experimentierhalle verursachten Sprünge in der Position der Spektrallinien auf den CCDs.

³Übergang $2p_{\frac{1}{2}} \rightarrow 1s_{\frac{1}{2}}$

⁴Übergang $2p_{\frac{3}{2}} \rightarrow 1s_{\frac{1}{2}}$

4.3 Antwortfunktion des Spektrometers

Die genaue Charakterisierung des Kristallspektrometers und die Bestimmung der Antwortfunktion des Kristalls ist wichtig, um die erwünschte Genauigkeit im Experiment zu erreichen. Darum werden Tests und Kalibrationen mit und ohne Pionenstrahl durchgeführt:

1. Die Qualität der Kristalle ist durch das Auflösungsvermögen und ihre Reflektivität gegeben. Beide Eigenschaften wurden bei den verwendeten Kristallen am ESRF⁵ gemessen, jedoch noch im planaren Zustand. Die Reflexionseigenschaften von gebogenen Kristallen hängen vom Biegeprozeß und ihrer geometrischen Form ab. Deshalb müssen beide Parameter für die gekrümmten Kristalle gemessen werden. Um diese Messungen in möglichst kurzer Zeit (einige Stunden) mit optimaler Genauigkeit durchführen zu können, wird eine ECRIT [Bir2000] als Hochraten-Röntgenquelle verwendet. Röntgenübergänge in wasserstoffähnlichen und He-ähnlichen Atomen mit Breiten in der Ordnung von 10 meV werden in dieser ECRIT erzeugt.
2. Die Resultate aus den Messungen der Röntgenstrahlung der ECRIT werden mit jenen der Messungen der pionischen Röntgenstrahlung ohne Verbreiterung durch Coulomb-Explosion verglichen. Diese pionischen Linien sollten durch starke Wechselwirkung nicht beeinflusst sein (Übergänge mit $n_\pi > 4$) und durch elektronische Abschirmung oder Doppler Effekte nicht verbreitert sein. Daher kommen nur Atome mit $Z < 11$ in Frage. Zur Messung der Antwortfunktion wurde der Übergang $\pi^-^{12}\text{C}_{(5g \rightarrow 4f)}$ in CH_4 gewählt.
3. Die Bestimmung der Antwortfunktion könnte gleichzeitig mit der eigentlichen Messung durchgeführt werden. Dazu müßte neben der Messung des zu untersuchenden Übergangs die parallele Messung weiterer pionischer Linien (vor allem Atome höherer Ordnungszahl) ermöglicht werden. Dafür müssen die Kalibrationslinien auf den Detektor zusammen mit der zu messenden Linie reflektiert werden, ohne daß der Arm des Spektrometers bewegt wird. Über die Dispersionsformel (Gl. 3.9) mit dem Krümmungsradius R_K des Kristalls erhält man

$$\Delta E = \frac{E_0 |\Delta x|}{\tan(\vartheta_B + BI) \sin(\vartheta_B + BI) R_K} \quad , \quad (4.1)$$

den Energieabstand ΔE eines Punktes von der Referenzlinie mit der Energie E und Braggwinkel ϑ_B , sowie der Brechungsindex-Korrektur BI (s. 3.5.1), wenn der Punkt $|\Delta x|$ Kanäle im Spektrum entfernt ist.

So kann man den Energiebereich ΔE , der von der Detektorbreite Δx abgedeckt wird, berechnen. Mit den 48 mm Breite des Detektors ergibt das im günstigsten Falle ($\pi^- \text{H}_{(3p \rightarrow 1s)}$) rund 84 eV. Außer für $\pi^- \text{H}_{(3p \rightarrow 1s)}$ existieren für keinen der untersuchten pionischen Übergänge geeignete pionischen Kalibrationslinien. Die in-situ Kalibration für $\pi^- \text{H}_{(3p \rightarrow 1s)}$ wurde mit den Übergängen $\pi^-^{16}\text{O}_{(6h \rightarrow 5g)}$ (s. Abb. 1.2), $\pi^-^{18}\text{O}_{(6h \rightarrow 5g)}$ und $\pi^-^9\text{Be}_{(4f \rightarrow 3d)}$ (Energien s. Tab. 4.4) durchgeführt (s. Abb. 3.8).

⁵European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, Frankreich

4.4 Überlegungen zur Messung der Coulomb-Explosion

Das Kohlenstoff-Atom hat 4 zur Molekülbindung beitragende Valenzelektronen (L-Schale). In Tab. 4.1 sind die Stärken der Bindungen und die Bindungslängen in den untersuchten Systemen angegeben [CRC1994]. Die Länge der C₂-Bindung von Azetylen C₂H₂ im Gleichgewicht beträgt $R_{C_2} = 1,203 \text{ \AA}$, wobei es sich hier um eine kovalente Dreifachbindung handelt ($C \equiv C$).

Molekül	Bindung	Länge [Å]	Bindungsstärke [kJ/mol]
CH ₄	H – CH ₃	1,087 ±0,001	438,5 ±1,5
C ₂ H ₂	HCC – H	1,060 ±0,001	556,1 ±2,9
C ₂ H ₂	HC ≡ CH	1,203 ±0,001	965 ±8
C ₂	C – C	1,2425±0,0001	607 ±21
CH	C – H	1,1199±0,0001	338,32
C ₂ H ₂ ⁺	C ≡ C	1,273	
C ₂ H ₂ ⁺	C – H	1,096	

Tabelle 4.1: Bindungslängen und Bindungsstärken der in diesen Untersuchungen relevanten Kohlenwasserstoffe [CRC1994].

Um die Stärke des Einflusses der Coulomb-Explosion auf die Röntgenübergänge abzuschätzen, vergleicht man die Linienbreite des Überganges des zu untersuchenden Moleküles (hier $n_{\pi^-} = 5g \rightarrow 4f$ in $\pi^{-12}\text{C}$) mit jener eines einatomaren Gases, welches nicht der Coulomb-Explosion unterliegt. Edelgase eignen sich sehr gut, oder besser ein leichtes Molekül derselben Atomart (z.B. NH₃ für den Vergleich mit N₂ oder — wie in diesen Messungen eingesetzt — CH₄ für den Vergleich mit C₂H₂). Durch den Vergleich der Linienbreiten exotischer Atome desselben Elements mit und ohne Explosion vermeidet man systematische Fehler resultierend aus der Dispersion des Detektors.

Das Molekül C₂H₂ mit 2 Kohlenstoffatomen unterliegt der Coulomb-Explosion. Aufgrund der Beschleunigung der C-Ionen kommt es zu einer Dopplerverbreiterung der Spektrallinien aus den radiativen Übergängen.

Bei CH₄ ist die Coulomb-Explosion unterdrückt, da die H-Atome recht schwach an den Kohlenstoff gebunden sind (s. Tab.4.1), sodaß die Bindungen schon mit dem Einfang des Pions mit hoher Wahrscheinlichkeit aufbrechen. Außerdem könnten nur die H-Ionen das π^- C System in diesem Fall beschleunigen. Da aber das Massenverhältnis so klein ist (bei CH₄ 1:12 bis 1:15, je nachdem wieviele H-Atome noch im Molekül vorhanden sind), wurden bei der Planung der vorliegenden Arbeit die Auswirkungen des Aufbrechens der Wasserstoffbrücken als vernachlässigbar abgeschätzt.

Die H-Atome werden nach dem Einfang des π^- emittiert. Die gesamte Kaskade geht innerhalb von 10^{-12} – 10^{-15} s vor sich. Daher sind die Zeitunterschiede zwischen dem Lösen der einzelnen C-H Bindungen klein. Somit kann man davon ausgehen, daß das CH₄ Molekül

gleichzeitig alle 4 H-Atome verliert. Da dieses Molekül symmetrisch ist, würden sich etwaige Beiträge zu einer Geschwindigkeit \vec{v} des C gegenseitig aufheben. Aufgrund des schnellen Ablaufs des ganzen Vorganges ist nicht anzunehmen, daß sich nach der Emission des ersten Elektrons ein stark asymmetrisches CH_4^+ Ion [Vag1986] bilden kann, bzw. nach dem Entfernen des ersten H-Atoms genügend Zeit für die restlichen Kerne bleibt, um ihre gegenseitigen Positionen zu verändern und so ein CH_3^- Radikal zu bilden, welches eine andere Bindungslänge hat ($1,08 \pm 0,01 \text{ \AA}$ [CRC1994]).

Analoge Überlegungen treffen auch auf die C-H Bindungen des linearen Moleküles C_2H_2 [Zaj1991] zu.

4.5 Durchführung der Messungen

Nach Füllen des Gastargets wurde das Spektrometer mit dem Steuerungs-PC in der Meßhütte auf den Übergang eingestellt, d.h. zunächst wurde ϑ_B eingestellt und dann der Reflex der Quelle mittels eines „Targetscans“ auf eine geeignete Position am Detektor gesetzt.

Das Aufnehmen und Übertragen jedes Bildes (frame), dauerte rund 60 s. Das Bild von jeder CCD wurde am PC, der die CCDs steuert, in einer Datei abgespeichert. Eine Aufnahme umfaßte 60 frames, und wurde über das Programm „XCAM CCD Image Display“ durchgeführt. Insgesamt wurden 60 frames in 6 Dateien akkumuliert. Erst dann wurde die Aufnahme beendet. Bei 60 frames dauerte dieser Vorgang etwa 1 h.

Jede Aufnahme wurde nach Ende der Datennahme auf einen anderen PC kopiert, und dort mit dem CCD-Auswerteprogramm „csd“ ein zweidimensionales Bild des Kristallreflexes erzeugt. Dieses Bild erlaubte eine schnelle optische Kontrolle der Messung. Danach wurde dieses zweidimensionale Bild auf die X-Achse projiziert und so das Intensitätsspektrum erzeugt. Es wurden Messungen durchgeführt, d.h. Aufnahmen aufaddiert, bis die für die geforderte Genauigkeit in der Spektrallinie nötige Intensität erreicht war. Alle Messungen dafür werden als „Meßblock“ bezeichnet, welcher eine Datennahmezeit von einigen Tagen bis zu einer Woche umfaßte.

4.6 Pionische Übergänge

Der Großteil der Strahlzeit wurde den Messungen der Übergänge in pionischem Wasserstoff gewidmet. Die hier beschriebenen Messungen an $\pi^- \text{C}$ wurden jeweils vor den H-Messungen in 1–2 Wochen durchgeführt. In Tab. 4.2 und Abb. 4.3 sind die durch QED-Rechnungen erhaltenen Energien der untersuchten Übergänge in $\pi^- \text{C}$ angegeben. Der Braggwinkel und die Dispersion für den zirkularen Übergang $\pi^-^{12}\text{C}_{(5g \rightarrow 4f)}$ in den beiden verwendeten Kristallen ist aus Tab. 4.3 zu entnehmen. Weiters sind in Tab. 4.4 die Daten aller bisher im Experiment R-98-01 untersuchten pionischen Übergänge angegeben.

Target	Übergang	Energie [eV]
$\pi^{-12}\text{C}$	5g \rightarrow 4f	2 973,826 41
$\pi^{-12}\text{C}$	5f \rightarrow 4d	2 975,246 2
$\pi^{-12}\text{C}$	5d \rightarrow 4p	2 977,964 2
$\pi^{-13}\text{C}$	5g \rightarrow 4f	2 976,661 8

Tabelle 4.2: Mit QED-Rechnungen erhaltene Energien der in dieser Arbeit untersuchten Übergänge in $\pi^{-}\text{C}$.

$\pi^{-12}\text{C}_{(5g\rightarrow 4f)}$					
Kristall	ϑ_B	$\vartheta_B + BI$	$\frac{\Delta E}{\Delta(\vartheta+BI)}$ [$\frac{\text{meV}}{''}$]	$\frac{\Delta E}{\Delta x}$ [$\frac{\text{eV}}{\text{mm}}$]	$\frac{\Delta E}{\Delta x}$ [$\frac{\text{meV}}{\text{Ch}}$]
Si111	41°40'05,05''	41°40'28,03''	16,20	1,684 65	67,385 83
Qu10 $\bar{1}$	38°34'31,20''	38°34'58,04''	18,08	2,004 03	80,161 35

Tabelle 4.3: Braggwinkel, Winkel inklusive Brechungsindex-Korrektur und Dispersion des Überganges $\pi^{-12}\text{C}_{(5g\rightarrow 4f)}$ für Si111 und Quarz10 $\bar{1}$.

pion. Atom	Übergang	Energie [eV]	Kristall	ϑ_B
$\pi^{-}\text{H}$	2p \rightarrow 1s (+ ε_{1s})	2 436,614	Z13 - Si111	54°13'54,78''
$\pi^{-}\text{H}$	3p \rightarrow 1s (+ ε_{1s})	2 885,928	Z13 - Si111	43°14'26,74''
$\pi^{-}\text{H}$	3p \rightarrow 1s (+ ε_{1s})	2 885,928	Z20 - Quarz10 $\bar{1}$	39°58'52,59''
$\pi^{-}\text{H}$	4p \rightarrow 1s (+ ε_{1s})	3 043,202	Z13 - Si111	40°30'57,09''
$\pi^{-9}\text{Be}$	4f \rightarrow 3d	2 844,116	Z13 - Si111	44°02'16,44''
$\pi^{-9}\text{Be}$	4d \rightarrow 3p	2 846,1	Z13 - Si111	
$\pi^{-16}\text{O}$	6h \rightarrow 5g	2 880,506	Z13 - Si111	43°20'31,37''
$\pi^{-16}\text{O}$	6h \rightarrow 5g	2 880,506	Z20 - Quarz10 $\bar{1}$	40°04'17,68''
$\pi^{-16}\text{O}$	8i \rightarrow 6h	2 860,0	Z13 - Si111	
$\pi^{-16}\text{O}$	8i \rightarrow 6h	2 860,0	Z20 - Quarz10 $\bar{1}$	
$\pi^{-18}\text{O}$	6h \rightarrow 5g	2 883,488	Z20 - Quarz10 $\bar{1}$	40°01'18,29''
$\pi^{-18}\text{O}$	8i \rightarrow 6h	2 865,0	Z20 - Quarz10 $\bar{1}$	

Tabelle 4.4: Energien und Braggwinkel aller im Experiment R-98-01 untersuchten Übergänge in pionischen Atomen. Für $\pi^{-}\text{C}$ s. Tab. 4.2 und 4.3.

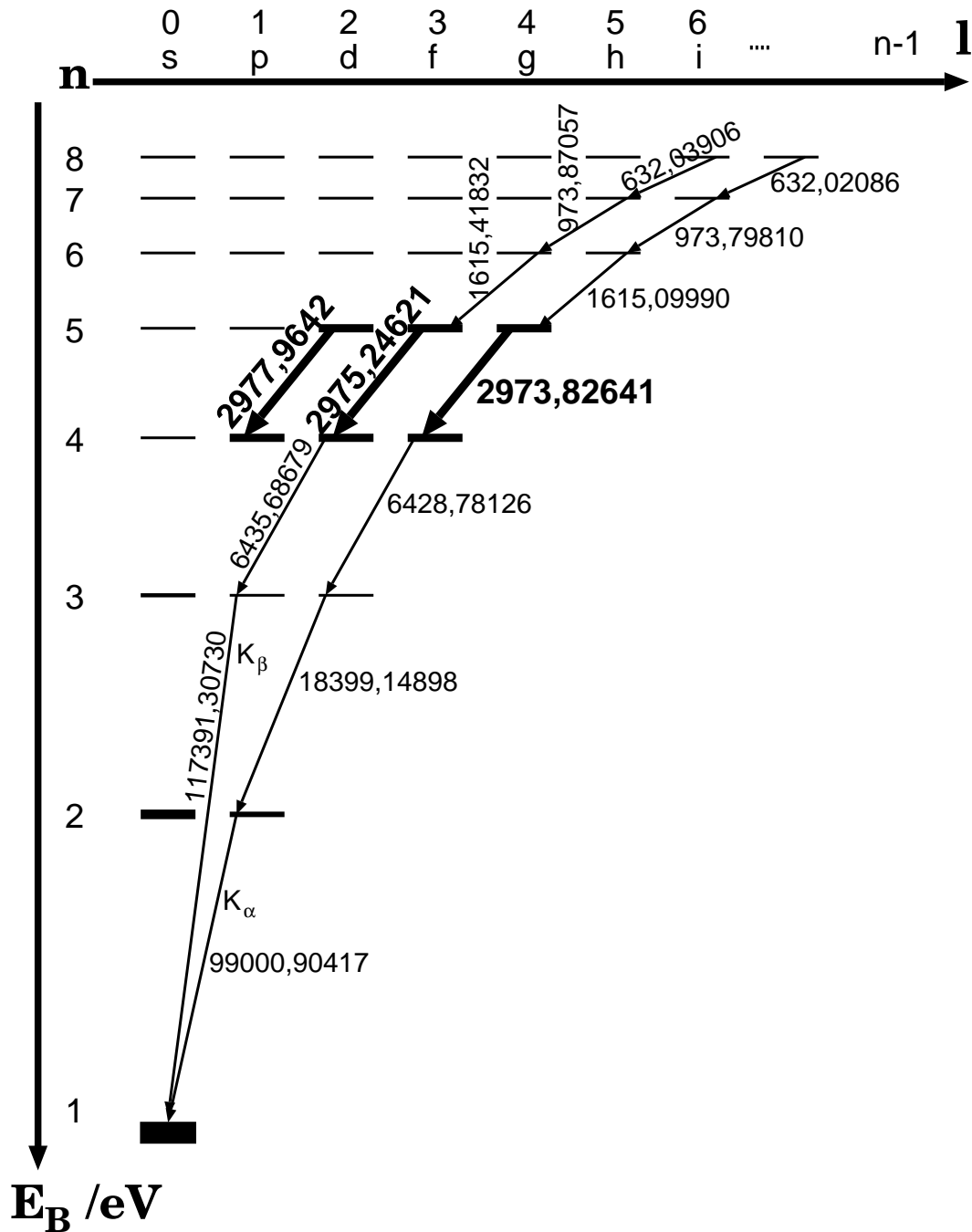


Abbildung 4.3: Röntgenübergänge in der Kaskade von $\pi^{-12}\text{C}$. Fett hervorgehoben sind die in dieser Arbeit gemessenen Übergänge. Die Zahlen bedeuten die berechneten Energien in eV der Strahlungsübergänge aus QED-Rechnungen [Ind2000].

Kapitel 5

Auswertung

5.1 Vorgangsweise bei der Datenanalyse

Die Auswertung eines Meßblocks besteht im Experiment R-98-01 aus folgenden Schritten:

Voranalyse: Bestimmung des Rauschpegels, des *noise-peaks*, der *Cluster-Energieschwellen* und Eliminieren der defekten Pixel.

Hauptanalyse: Durchführung der Clusteranalyse, Setzen der Energiefenster für alle 6 CCDs, Durchführung der Kurvenkorrektur des Reflexes im zweidimensionalen Spektrum und Abspeichern des auf die X-Achse projizierten, eindimensionalen Spektrums.

Datenfit: Einlesen des Ortspektrums und numerischer Fit der Peaks im interessierenden Bereich. Daraus erhält man die gesuchten Intensitäten und Breiten der Linien.

Für die vorliegende Arbeit wurde die Auswertung noch um einen vierten Schritt erweitert:

Monte-Carlo-Simulation: Simulation des Ortspektrums mit aus dem Datenfit folgenden Parametern und Vergleich mit den Meßdaten. Hieraus erhält man die durch die Coulomb-Explosion verursachte Verbreiterung der Röntgenlinien.

5.2 Voranalyse

5.2.1 Korrektur für Rauschen

Nachdem die optimalen Betriebsparameter der CCD-Detektoren erreicht worden sind, werden mit der ^{55}Fe -Quelle einige Aufnahmen zu je einem Bild gemacht. Im Steuerungsprogramm der CCDs „XCAM“ können diese Spektren für jeden Chip einzeln angezeigt werden.

Daraus gewinnt man die Intensität des statistischen Rauschpegels jeder einzelnen CCD, sowie die Position und Breite des *noise-peaks* in ADC-Kanälen. Falls sich bei weiteren Aufnahmen diese Parameter nicht mehr ändern, speichert man den Wert für die jeweilige CCD ab. Alle nachfolgenden Bilder werden um diese Werte korrigiert und erst dann in die 6 Dateien abgespeichert.

Das Betreiben der CCDs mit möglichst maximaler Frame-Rate reduziert die Anzahl der Untergrundereignisse pro Bild, hat aber Auswirkungen auf die Datenmenge. Nimmt man an, daß 2 Bytes pro Pixel abgespeichert werden (12-bit Digitalisierung), so benötigt ein volles Bild ($360\,000 \text{ Pixel/CCD} \times 2 \text{ Bytes} \times 6 \text{ CCDs}$) 4,2 MB Speicherplatz. Dies summiert sich bei 1 frame/min zu 5,9 GB Daten pro Tag. Diese während 2–3 Monaten Strahlzeit angesammelten Datenmengen lassen sich nur schwer bearbeiten oder über Netzwerke transferieren. Daher wurde eine Datenkomprimierung im Steuerungsprogramm „XCAM“ eingefügt.

Bei der Kalibration jeder CCD wird im Programm „XCAM“ die Position des Ausleserausgangs und seine Standardabweichung ermittelt. Daraus wird ein Grenzwert berechnet (Position des noise-peaks + 3 oder 5 Standardabweichungen). Nur CCD-Pixelsignale, die einen Wert über dieser Grenze haben, werden abgespeichert. Für jeden Pixel über dieser Grenze werden 5 Byte gespeichert (3 für die Position, 2 für die Energie). Im Gegensatz zu den Rohdaten ($360\,000 \text{ Pixel/CCD}$) gibt es für ein komplettes so bearbeitetes 6-CCD-Bild nur in der Größenordnung 2000 Pixel pro Minute. Das reduziert die Datenrate auf 10 kB/min oder 586 kB/h oder 13,8 MB/d; also um einen Faktor > 430 [Nel2002c].

Eine stichprobenartige Überprüfung des Rauschpegels während der Messungen wird ebenfalls durchgeführt.

5.2.2 Clusteranalyse

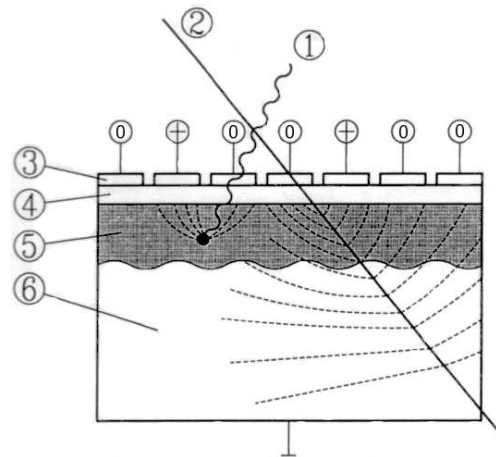
Eine sehr wirksame und einfache Art der Unterdrückung des Untergrundes bei CCD-Detektoren ist die Clusteranalyse [Lau2002]. Sie ermöglicht es erst, CCDs als Niedrigenergie-Röntgendetektoren in Umgebungen mit starker Hintergrundstrahlung einzusetzen.

Sie unterscheidet echte Röntgenereignisse von der Untergrundstrahlung oder dem elektronischen Rauschen im Detektor. Sie beruht auf der Untersuchung der zweidimensionalen, topologischen Strukturen von Pixeltreffern, die oberhalb einer zuvor gesetzten ADC-Schwelle („*Clusterschwelle*“) liegen.

Ladung, die in der Elektrodenstruktur der CCD erzeugt wird, wird nicht gesammelt und bildet eine $1,5 \mu\text{m}$ dicke tote Schicht auf der Oberfläche. Ladungen, die im p-Substrat entstehen, diffundieren und gehen verloren. Ladungen, die innerhalb der Verarmungszone erzeugt werden, bleiben normalerweise innerhalb des Pixels, wo das Röntgenquant auftrifft. Andererseits breiten sich aber Ladungen, die in der feldfreien Region entstehen, weiter aus, wo sie entweder verloren gehen oder in mehreren Pixeln gesammelt werden (s. Abb. 5.1).

Trotz des kleinen Öffnungswinkels des Detektors gegenüber dem Target (10^{-4} srad) wäre die Untergrundrate selbst bei bester Abschirmung rund 100 s^{-1} . Die Ereignisrate für pionische Röntgenstrahlung ist aber nur maximal $2 \cdot 10^{-2} \text{ s}^{-1}$. Denn die meisten Untergrundereignisse werden von rund $10^8 \pi^-/\text{s}$ verursacht, die im Strahlrohr bis zu 2 m vor der Zyklotronfalle stoppen und durch Streuvorgänge hochenergetische geladene Teilchen, Neutronen oder Gammastrahlung erzeugen. Diese hochenergetischen Teilchen ionisieren Materie stärker als Röntgenstrahlung (Absorptionslänge für $> 6 \text{ keV}$ -Röntgenstrahlung in Si ist $\approx 45 \mu\text{m}$). Somit wird eine erhebliche Anzahl der einfallenden Teilchen unterhalb der Verarmungszone ($\approx 30 \mu\text{m}$) ab-

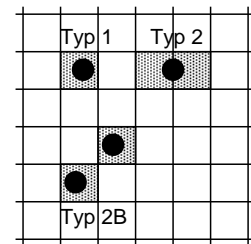
Abbildung 5.1: Im Gegensatz zur Röntgenstrahlung hinterlassen geladene Teilchen einen Ionisationspfad entlang des gesamten Weges (≈ 80 e^- -Loch Paare pro μm). Ladung, die im Substrat entsteht, breitet sich isotrop aus und erzeugt ein Halo um das zentrale Pixel. (1) Röntgenstrahlung, (2) geladenes Teilchen, (3) Elektroden, (4) Isolator, (5) Verarmungszone, (6) Substrat. [Sig1994]



sorbiert. Dadurch breitet sich die erzeugte Ladung aus und diese Ereignisse werden in Clustern mehrerer, aneinanderliegender Pixel abgebildet, wie auch Abb. 5.3 zeigt.

Im Gegensatz dazu wird niedrigerenergetische Röntgenstrahlung im keV-Bereich nur in einzelnen Pixeln (*single pixel* Ereignisse) oder in zwei Pixeln mit gemeinsamer Kante (Ladungsaufteilung) abgebildet.

Abbildung 5.2: Untergrundunterdrückung durch topographische Pixelanalyse. Für die Auswertung werden nur die angeführten drei Typen von Ereignissen verwendet.



Somit reduziert sich der Untergrund dramatisch, wenn man als gültige Treffer nur einzelne Pixel (Typ 1), zwei Pixel mit gemeinsamer Kante (Typ 2) oder eventuell noch diagonale Zweiertreffer (Typ 2B) akzeptiert, ohne daß in den umgebenden Pixeln Ladung über der Clusterschwelle auftritt (s. Abb. 5.2). So haben die in dieser Arbeit gemessenen Spektren ein Verhältnis von Signal:Untergrund von rund 500:1.

Dieses Prinzip limitiert aber auch die Belichtungszeit für ein Bild, da bei langer Belichtung mit der Zeit immer mehr aneinander liegende Pixel getroffen werden. Dadurch werden 1- und 2-Pixel-Treffer nicht mehr als solche identifizierbar. Diese aneinander liegenden Einzeltreffer werden in diesem Fall nicht gezählt. Wegen der großen Anzahl von Ereignissen im Hauptreflex werden dort mehr solcher Treffer verworfen, als im Untergrundbereich daneben.

Die Clusteranalyse wird automatisch beim Einlesen der Daten in das CCD-Analyseprogramm „csd“ vorgenommen.

Bei den in dieser Arbeit untersuchten Übergängen nahe 3 keV ergab die Datenauswertung üblicherweise einen Anteil von 75%:25% an Typ 1:Typ 2 Treffern.

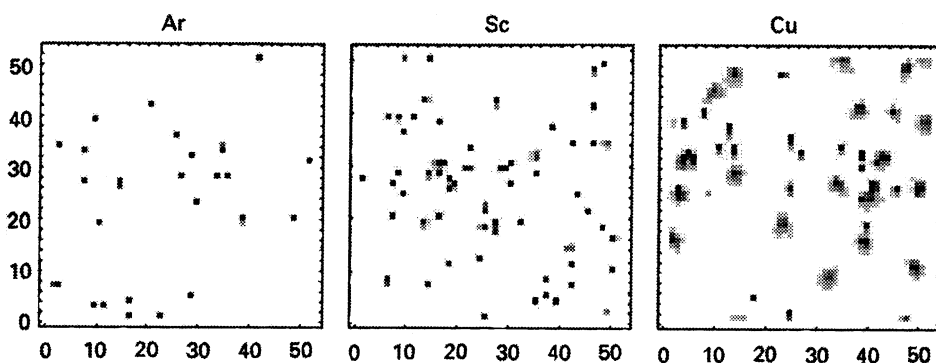


Abbildung 5.3: Vergleich der Clustergrößen für Röntgenstrahlung der Energien 2,96 keV (Ar), 4,1 keV (Sc) und 8,04 keV (Cu). Jedes Bild zeigt einen 50×50 Pixel (λ 40 μm) großen Ausschnitt aus dem Zentrum des Reflexes. Der Anstieg in Multi-Pixel-Ereignissen für die Röntgenstrahlung aus Cu ist deutlich sichtbar. [Nel2002c]

5.2.3 Fehlstellen der Pixelmatrix

In den gespeicherten Aufnahmen wird auch festgehalten, wie oft jedes Pixel getroffen wird. Ist die Anzahl der Treffer für ein Pixel ungewöhnlich groß (z.B. so viele Treffer, wie Bilder in der Aufnahme — üblicherweise 60), so handelt es sich mit größter Wahrscheinlichkeit um eine Fehlstelle in der Pixelmatrix, bei der das Pixel von sich aus Ladung erzeugt, obwohl kein Photon konvertiert wurde. Auch fluktuierende Pixel, die statistisch ansprechen, sind möglich. Defekte werden während des Produktionsprozesses oder durch Strahlenschäden hervorgerufen. Vor allem am Rande der CCDs treten solche Fehlstellen bedingt durch Transferrauschen oder Leckströme auf.

Im CCD-Auswerteprogramm ist eine Option beinhaltet, mit der man die Position dieser defekten Pixel abspeichert, nachdem angegeben wurde, ab welcher Trefferzahl ein Pixel als defekt gilt. Ist diese Option aktiviert, so werden die so markierten Pixel beim Einlesen der Daten nicht berücksichtigt.

5.2.4 Parameter der CCD-Matrix

Die 6 CCDs können nicht vollkommen exakt Kante an Kante auf den Träger angebracht werden. Die Röntgenreflexe überstreichen jedoch die 3 Chips einer Spalte des Detektors und so ist die exakte Bestimmung der Peakpositionen im Spektrum von der genauen Kenntnis der gegenseitigen Abstände der CCDs in x- und y-Richtung und den Abweichungen ihrer gegenseitigen parallelen Anordnung abhängig. Diese Parameter wurden mittels der auf S. 57 erwähnten Al-Maske bestimmt [Hen2003]. In Abb. 5.4 sind die so gemessenen Winkel und Abstände angegeben, die als Parameter im CCD-Analyseprogramm in die Auswertung der in der vorliegenden Arbeit beschriebenen Messungen einfließen.

```

### -- CCD ORIENTATION AND OFFSETS
Current Settings:
CCD Number          ADC Offset
-----
| 4 | 1 |           | 0 | 0 |
-----
| 5 | 2 |           | 0 | 0 |
-----
| 6 | 3 |           | 0 | 0 |
-----

x-Displacement      y-Displacement      Rotation [mrad]
-----
|-14.545 | -2.585 |      | 21.108 | 22.535 |      | -1.720 | -0.094 |
-----
|-14.637 | -0.990 |      | 12.225 | 10.904 |      | -2.984 | -0.343 |
-----
|-16.410 | 0.000 |      | 1.270 | 0.000 |      | -6.534 | 0.000 |
-----

```

Abbildung 5.4: Parameter der gegenseitigen x - und y -Abstände in [Ch], sowie der Verdrehung der CCDs für die der Bearbeitung der CCD-Aufnahmen.

5.3 Einlesen der CCD-Aufnahmen

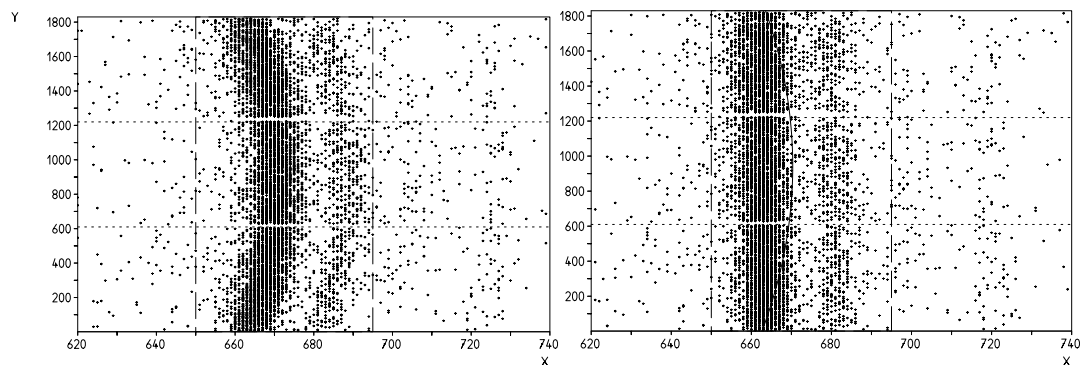
Im folgenden wird die Datenanalyse exemplarisch erklärt. Nach der Voranalyse und dem Suchen nach den optimalen Parametern wählt man einen Meßblock aus den Daten aus. Die einzelnen Aufnahmen à (zumeist) 60 Bilder werden in das Analyseprogramm „csd“ eingelesen. In diesem Programm setzt man die in 5.2.4 bestimmten Parameter und speichert sie in einer Datei zur wiederholten Verwendung ab. Die Summe aller eingelesenen Aufnahmen wird mit dem zweidimensionalen Positionsspektren optisch kontrolliert. Für jede CCD werden die Energiefenster um den zu messenden Übergang gesetzt. Im zweidimensionalen Positionsspektrum wird der Ausschnitt („ x/y -cut“) um diesen Reflex gewählt. Danach bestimmt man die Anzahl der Ereignisse innerhalb dieser Fenster und das Verhältnis von Ein-Pixel- zu Zwei-Pixel-Treffern.

Weiters muß für die Abbildung der Röntgenlinie eine Kurvenkorrektur durchgeführt werden, da für die Bragg Streuung ein sphärisch gekrümmter Kristall verwendet wird. Deshalb ist die geometrische Abbildung ebenfalls gekrümmt und muß korrigiert werden (s. Abb. 5.5). Nach der Kontrolle, ob der Reflex im zweidimensionalen Positionsspektrum nachweislich vertikal ist, projiziert man diesen Reflex auf die Achse der Dispersion (X-Achse). Das so gebildete korrigierte Spektrum wird abgespeichert und in ein anderes Programm namens „fitos“ für den Fit der Daten eingelesen.

5.3.1 Kurvenkorrektur

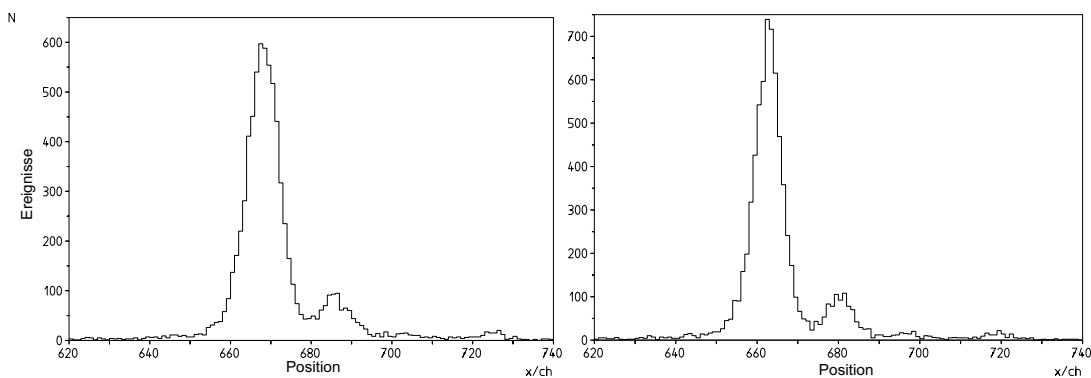
Der Reflex der Röntgenquelle ist zu niedrigen Energien hin gebogen, sodaß eine Verzerrung des Linienprofils im eindimensionalen Ortspektrum aufscheint (s. Abb. 5.5). Um Position und Breite des Reflexes zu erhalten, wird die Krümmung im Programm durch eine Parabelfunktion $f(x) = A + Bx + Cx^2$ korrigiert.

Beim Ausrechnen der Kurvenkorrektur werden die CCDs in eine je nach Intensität einstellbare Anzahl von Scheiben parallel zur Achse der Dispersion geschnitten (max. 12 pro CCD) und jeweils ein Daten-Schwerpunkt berechnet. Dann wird durch diese Schwerpunkte eine Kurve 2. Ordnung gefittet. Damit werden die Parameter A, B, C und ihre statistischen



(a) zweidimensionales Positionsspektrum ohne Kurvenkorrektur.

(b) zweidimensionales Positionsspektrum4 mit Kurvenkorrektur.



(c) Spektrum ohne Kurvenkorrektur.

(d) Spektrum mit Kurvenkorrektur.

Abbildung 5.5: Effekt der Kurvenkorrektur. Zu sehen sind das zweidimensionale Positionsspektrum und darunter das auf X projizierte Spektrum von π^-C mit der Hauptlinie von $\pi^-^{12}C_{(5g \rightarrow 4f)}$ (Summenspektren aus 99 Aufnahmen à 60 frames, entsprechend 105 Stunden Daten); links ohne Kurvenkorrektur, rechts mit aktiver Kurvenkorrektur.

Fehler σ_A , σ_B , σ_C berechnet. Dieser erste Kurvenfit berücksichtigt alle Ereignisse, die innerhalb des x/y -cuts liegen. Die Anpassung der Parabel ist jedoch sensitiv auf den Untergrund und deshalb muß man ein begrenztes Fitintervall relativ für alle Stützpunkte für einen erneuten Fit festlegen. Da das Ganze damit zu einem iterativen Prozeß wird, führt man diese Prozedur unter Verändern der Breite dieser Region aus, bis sich die Kurvenparameter nicht mehr ändern. Die Durchführung der Kurvenkorrektur bedeutet, daß jeder Punkt x gemäß $f(x)$ neu berechnet wird. Für die Anpassung des Reflexes ist ausreichende Statistik und geringer Untergrund nötig.

5.3.2 Zweidimensionales Positionsspektrum und Spektrum

Nachdem die Kurvenkorrektur durchgeführt wurde, ändert sich die zweidimensionale Abbildung des Röntgenreflexes entsprechend Abb. 5.5(a) und 5.5(b).

In einem weiteren Unterpunkt des Programms kann nun das Spektrum erzeugt werden, wie es in Abb. 5.5(d) zu sehen ist. Dieses Spektrum muß man für den folgenden Datenfit im Fitprogramm in einem spezifischen Format (GRAPHX-[Rud1993]) abspeichern.

5.4 Voigt-Fit der Spektren

Als nächster Schritt der Analyse wird das zuvor erzeugte und gespeicherte Spektrum in das Fitprogramm „fitos“ eingelesen. In diesem Programm werden durch χ^2 -Minimierung (s. Gl. 5.7) bei Variation der Gaußbreite Γ_G die optimalen Parameter der Spektrallinien ermittelt. Gefittet wird eine Voigt-Verteilung, d.h. eine Faltung aus Gauß- und Lorentz-Verteilung. Die Gesamtbreite der Linie setzt sich in diesem Fit somit aus einem Gaußanteil und einem Lorentzanteil zusammen.

5.4.1 Die Linienform

Die experimentelle Linie Y_{exp} setzt sich in ihrer Form aus der Faltung mehrerer Anteile zusammen, die aus den physikalischen Prozessen ihrer Entstehung erklärbar sind:

$$Y_{exp} = Y_{nat} \otimes Y_{Spek} \otimes Y_{Dop} \quad (5.1)$$

Dabei bedeuten die einzelnen Beiträge:

Y_{nat} ist die natürliche Linienform des Übergangs, die nur geringen Anteil (≈ 10 meV) an der Gesamtbreite hat. Die elektronische Linie wäre durch eine Gaußkurve zu beschreiben. Durch die starke Wechselwirkung des π^- mit dem Kern in den unteren Niveaus weitet sich das Profil für tief liegende Übergänge zu einem Lorentzprofil auf.

Y_{Spek} ist die Antwortfunktion des Spektrometers und ist in ihrer Gesamtheit durch ein Voigtprofil zu beschreiben. Sie besteht ihrerseits aus der „rocking curve“ des Kristalls, der geometrischen Verbreiterung durch die *Johann*-Defokussierung (s. S. 45) und einer Verbreiterung durch Abbildungsfehler.

Y_{Dop} ist die Doppler-Verbreiterung aufgrund der Coulomb-Explosion bzw. Coulomb-Abregung und kann am ehesten durch ein Rechteck-Profil beschrieben werden [Got2001].

Die verschiedenen physikalischen Prozesse erzeugen also keine „reine“ Linienform, sondern bestehen selbst aus einer Verknüpfung mehrerer Profile. Daher ist es nicht möglich, die Anteile dieser physikalischen Prozesse in der Linienbreite durch einen Fit des gemessenen Spektrums zu bestimmen.

Der Einfachheit halber wird im Modell die gemessene Linienform durch die Faltung der Einzel-Profile (Gauß-, Lorentz-, Rechteckprofil) beschrieben. Dabei wird das Gauß-Profil Y_G als der Beitrag der Antwortfunktion des Spektrometers betrachtet. Daher kann in allen Fits die Breite Γ_G für alle Röntgenlinien konstant gehalten werden.

Das gemessene Spektrum besteht gemäß diesem Modell aus Spektrallinien, die durch ein dopplerverbreitetes Voigt-Profil (Faltung von Gauß- und Lorentzprofil; Y_V) beschrieben werden können:

$$Y_{exp} = Y_G \otimes Y_L \otimes Y_D \quad (5.2)$$

mit

$$\text{Gauß } Y_G = Y_0 + A_G \cdot e^{-\frac{(E-E_0)^2}{2\Gamma_G^2}} \quad (5.3)$$

$$\text{Lorentz } Y_L = Y_0 + \frac{2A_L}{\pi} \frac{\Gamma_L}{4(E-E_0)^2 + \Gamma_L^2} \quad (5.4)$$

$$\text{Doppler } Y_D = \begin{cases} 0 & \text{für } E < E_0 - \Delta E_{Dop} \\ A_D & \text{für } E \in (E_0 - \Delta E_{Dop}, E_0 + \Delta E_{Dop}) \\ 0 & \text{für } E > E_0 + \Delta E_{Dop} \end{cases} \quad (5.5)$$

$$\text{Voigt } Y_V = Y_G \otimes Y_L = Y_0 + A_V \frac{2 \ln 2}{\pi^{3/2}} \frac{\Gamma_L}{\Gamma_G} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2} dt}{\left(\sqrt{\ln 2} \frac{\Gamma_L}{\Gamma_G}\right)^2 + \left(\sqrt{4 \ln 2} \frac{E-E_0}{\Gamma_G} - t\right)^2} \quad (5.6)$$

A... Amplitude, Y_0 ... Untergrund, E_0 ... Peakposition, Γ_G ... Gaußbreite, Γ_L ... Lorentzbreite, $\Gamma_D = 2 \Delta E_{Dop}$... Breite der Dopplerbox

5.4.2 Vorgangsweise

Mit dem in das Fitprogramm eingelesenen Spektrum wird ein erster Fit durchgeführt, um Startwerte der Peakposition und Peakbreite für den Fit zu gewinnen.

Im Programm läßt sich der Fitbereich und die Anzahl der Peaks durch Bitschalter angeben. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden jeweils vier Peaks in den Spektren bestimmt. Außerdem kann man angeben, welcher Fitparameter fixiert oder variabel sein soll. Der Fitalgorithmus berechnet χ^2 [Pre1992]

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \left(\frac{y_{i,Daten} - y_{(x_i; a_1, \dots, a_M)}}{\sigma_i} \right)^2 \quad (5.7)$$

mit den gesetzten Parametern (a_1, \dots, a_M) nach einem wählbaren Modell ($y_{(x_i, Parameter)}$, hier Gauß- oder Poissonverteilung). Nach einer Berechnung verändert der Algorithmus die Werte dieser Parameter schrittweise und berechnet χ^2 erneut. Dieses iterative Verfahren durchläuft entweder eine zuvor gesetzte Anzahl von Schleifen oder stoppt vor Erreichen dieser Zahl, wenn das Minimum von χ^2 (d.h. χ_{min}^2) erreicht ist. Es kann jedoch nicht gleichzeitig Gaußbreite G und Lorentzbreite L frei veränderbar gesetzt werden, sondern es muß immer G fixiert sein.

Für die Analyse der Spektren wird G auf einen festen Wert G_1 eingestellt (und zwar für alle vier Peaks derselbe Wert) und die Fitprozedur gestartet. Der sich so ergebende Wert $\chi_{min(G_1)}^2$ wird festgehalten und das Spektrum ausgegeben. Danach ändert man die Breite auf einen anderen Wert G_2 und startet die Fitprozedur erneut. Auf diese Weise untersucht man einen Bereich von G auf der Suche nach dem Minimum von $\chi_{min(G)}^2$, d.h. $\chi_{min(G_{min})}^2$. Trägt man χ_{min}^2 gegen G auf, erhält man eine Parabel mit einem entsprechenden Minimum bei $G_{min} = \Gamma_G$.

Zur Erleichterung dieser Suche nach G_{min} dient das Programm „ParabMin“ (s. Anhang B.2). Es berechnet durch Angabe der Koordinaten dreier Punkte die Koeffizienten der durch sie hindurch gehenden Parabel, die Koordinaten des Minimums und jener Punkte, die 1σ zu beiden Seiten des Minimums liegen. Auf diese Weise wird Γ_G und dessen statistischer Fehler σ_{Γ_G}

ermittelt. Letztere Größe erhält man durch Suche nach dem Wert G_σ mit

$$\chi_{min(G_\sigma)}^2 = \chi_{min(G_{min})}^2 + 1 \quad (5.8)$$

und

$$\sigma_{\Gamma_G} = G_\sigma - G_{min}. \quad (5.9)$$

Dieses Γ_G und die für jeden Peak aus dem entsprechenden Fit folgenden Werte der Peakposition x_c , Lorentzbreite Γ_L , Intensität I und Amplitude A sind somit der beste Fit für das jeweilige Spektrum mit einem Voigt-Modell. Die Werte von Γ_G und Γ_L für CH_4 und C_2H_2 sind das Ziel dieser Fitprozeduren.

Die gesamte Analyse wird in ADC-Einheiten (Channels „Ch“) durchgeführt. Die entsprechenden Ergebnisse lassen sich auf Energiewerte (meV) umrechnen. Dafür verwendet man den korrigierten Braggwinkel $\vartheta_B + BI$ des Überganges $\pi^{-12}\text{C}_{(5g \rightarrow 4f)}$ [Got2001] und berechnet über Gl. 4.1 die Dispersion $\frac{\Delta E}{\Delta x}$ in $\frac{\text{eV}}{\text{mm}}$ bzw. in $\frac{\text{meV}}{\text{Ch}}$ (über die Pixelgröße ($40 \mu\text{m}$)). Die Ergebnisse sind der Tab. 4.3 zu entnehmen.

In der vorliegenden Arbeit wird dieser Wert der Dispersion über den ganzen, der Breite des Detektors entsprechenden, Energiebereich verwendet, obwohl er im Prinzip nur für die Energie dieses einen zirkularen Übergangs gültig ist. Für die zu bestimmende Breite der Spektrallinien ist diese Vereinfachung unerheblich. Der daraus resultierende systematische Fehler ist klein gegenüber dem statistischen Fehler.

Diese Analyse-Fitprozedur wird jeweils für die π^- -C-Spektren von CH_4 und C_2H_2 durchgeführt. Wie zu erwarten war, sind die Linien in C_2H_2 breiter, als jene in CH_4 . Die Differenz läßt sich aus der Dopplerverbreiterung durch Coulomb-Explosion im Komplex $\text{C} \equiv \text{C}$ erklären. Jedoch ist der wahre Wert der Dopplerverbreiterung (Γ_D) im Spektrum mit dem Rest der Linienform (Voigt-Profil) gefaltet und läßt sich nicht durch einen Fit mit „fitos“ bestimmen. Aus diesem Grund müssen beide Spektren mit einer Monte-Carlo Simulation untersucht und mit den Meßdaten verglichen werden.

5.5 Monte-Carlo Simulation der Spektren mit Dopplerverbreiterung

Nach Extrahieren der optimalen Werte des Fits werden die Spektren durch Monte-Carlo Rechnungen mit dem im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Programm „SpeComp“ (s. Anhang B.1) simuliert. So kann die Verbreiterung aufgrund des Dopplereffekts bestimmt werden, da das Programm „fitos“ diesen zusätzlichen Anteil in der Linienbreite nicht berücksichtigt. Der die Daten optimal beschreibende Wert der Dopplerbreite D ($D_{min} = \Gamma_D$) wird durch Minimierung von χ^2 unter Verwendung von D als freier Parameter ermittelt.

5.5.1 Vorgangsweise

In den in „csd“ als Textdateien abgespeicherten Spektren muß man zuerst alle Peaks, die weit außerhalb des interessierenden Bereiches liegen (durch Rauschen der CCDs oder defekte Pixel

verursacht), bearbeiten, da sie den Ablauf des Programmes stören.

Immer gleich bleibende Parameter sind als Konstanten im Programmcode von „SpeComp“ vermerkt, sodaß bei den Berechnungen nur mehr die Werte der Gauß-, Lorentz- und Dopplerbreiten eingegeben werden müssen. Um die Statistik zu verbessern, werden die Spektren mit jeweils 100-facher Ereigniszahl gegenüber den Daten generiert. Dadurch ist auch der Untergrund y_0 verschoben und man muß zuerst den optimalen Eingabewert für den Untergrund der Simulation (Variable „xb1“) suchen. Bedingung ist, daß nach Normierung auf die Ereigniszahl des gemessenen Spektrums der Wert des Untergrundes der Simulation wieder jenem Untergrund y_0 entspricht, der aus den Fits extrahiert wurde.

Danach startet man die Simulation und sucht, ähnlich wie bei den Fits mit „fitos“, nach χ_{min}^2 bei Veränderung der Dopplerbrite D (Variable „Dop“). Wiederum erhält man eine Parabel, wenn man $\chi_{(D)}^2$ über D aufträgt. Das Programm „ParabMin“ (s. Anhang B.2) erleichtert die Suche nach D_{min} und der Unsicherheit $\sigma_{D,stat}$. Auf diese Weise erhält man den Wert der Breite des Doppleranteils im Linienprofil und dessen statistischen Fehler $D_{min} \pm \sigma_{D,stat} = \Gamma_D \pm \sigma_{\Gamma_D}$, sowohl im π^- -C-Spektrum von C_2H_2 , als auch im Spektrum von CH_4 , wo ja $\Gamma_D^{CH_4} = 0$ angenommen wird (s. auch 5.5.3).

Entscheidend für die Simulation ist, daß als Eingabe für die Variablen „gamg“ (G) und „gaml“ (L) in beiden Fällen (CH_4 und C_2H_2) die Werte der Breiten aus dem Fit von CH_4 entnommen werden. Dem zugrunde liegt die Annahme, daß die Verbreiterung im Spektrum von C_2H_2 nur durch Vergrößerung der Dopplerbrite Γ_D (d.h. $\Gamma_D^{C_2H_2}$) erfolgen kann.

Nun sind aber die aus dem Fit einfließenden Parameter ihrerseits mit Unsicherheiten behaftet. Um den daraus resultierenden systematischen Fehler in $\Gamma_D^{C_2H_2}$ zu berechnen, führt man für C_2H_2 weitere sechs Simulationen durch mit den Werten $(\Gamma_G \pm \sigma_G, \Gamma_L, y_0)$; $(\Gamma_G, \Gamma_L \pm \sigma_L, y_0)$; $(\Gamma_G, \Gamma_L, y_0 \pm \sigma_{y_0})$. Die Differenz des maximalen Wertes der Dopplerbrite D aus diesen Simulationen zum Wert von D_{min} ist der systematische Fehler $\sigma_{D,syst} = \sigma_{\Gamma_D,syst}$. In der Analyse faßt man den statistischen und den systematischen Fehler der Dopplerbrite von C_2H_2 zusammen als

$$\sigma_{\Gamma_D^{C_2H_2}} = \sqrt{\sigma_{\Gamma_D,syst}^2 + \sigma_{\Gamma_D,stat}^2}. \quad (5.10)$$

Dieses $\Gamma_D^{C_2H_2}$ ist die Verbreiterung des Doppleranteils aufgrund der Coulomb-Explosion im Spektrum von C_2H_2 . Die Hälfte dieses Wertes entspricht jener Verbreiterung ΔE_{Dop} im Spektrum, die verursacht wird durch die durch die Coulomb-Explosion bedingte zusätzliche kinetische Energie $T_{\pi C}$ des π^- -C.

5.5.2 Die Form des Doppleranteils

Die Doppler Verbreiterung der Linien aufgrund der Coulomb-Explosion wird im Modell durch eine Faltung der natürlichen Linie mit einer Rechtecksbox um die Energie E_0 beschrieben (s. Gl. 5.5). Haben die auseinanderfliegenden Fragmente wohldefinierte kinetische Energien, so ist diese Box ein Rechteck mit scharfen Kanten.

Die Breite Γ_D dieser Box ist abhängig von den Ladungszuständen q_1^+ und q_2^+ , die die Ionen beim Aufbrechen der Molekülbindung haben können. Die Ladungszustände ergeben unterschiedliche Werte für das abstoßende Coulomb Potential $V_{C_2^+}$ gemäß Gl. 2.28 und daher

auch verschiedene Geschwindigkeiten für das exotische Atom. So erzeugt jeder Ladungszustand eine Stufe im Linienprofil. Es ist aber nicht klar, wie die verschiedenen Dopplerboxen einander überlagern. Einerseits könnten die Boxen mit abnehmendem Ladungszustand (d.h. sie werden schmaler) an Intensität gewinnen. Dann würde ihre Überlagerung ein stufenförmiges Gaußprofil ergeben. Andererseits könnten die Intensitäten aller Rechtecke ungefähr gleich sein. Dann würde die größte Dopplerbox alle anderen Stufen abdecken und nur diese im Spektrum aufscheinen.

Das Problem der Form von Y_{Dop} läßt sich auf die Frage zusammenfassen, ob sich dieser Beitrag zur Linienbreite durch ein einfaches Rechteck darstellen läßt (in Gl. 5.5 angedeutet), oder ob eine Struktur vorzufinden ist. In früheren Messungen wurde versucht, mit einer Vielzahl von Formen für Y_{Dop} Spektren zu simulieren [Sie2000]. Hierbei ergab die Form eines einzigen Rechtecks die beste Angleichung an die Daten.

Eine Möglichkeit, dies konkret zu untersuchen, ist der Durchlauf der Simulation mit und ohne Dopplerverbreiterung. Wie erwähnt, ergäbe die Überlagerung mehrerer Boxen ein stufenförmiges Gaußprofil für Y_{Dop} . In diesem Fall führt die Faltung von Y_{Dop} mit Y_G zu einer breiteren Gaußkurve, da beide Anteile dasselbe Profil besitzen. Indem man in der Simulation die Variable „Dop“ auf 0 setzt, kann man den nun verbreiterten Gauß-Anteil auf diese Art erklären. Falls also das χ^2 der Simulation mit $D = 0$ kleiner ist, als jenes mit gesetztem Parameter $D > 0$, so ist von einer Struktur im Profil der Dopplerverbreiterung auszugehen.

5.5.3 Linienbreite von Methan

Eine andere Frage ist, ob die Linienform von CH_4 vollkommen ohne Beitrag einer Rechtecksbox, also $\Gamma_D^{\text{CH}_4} = 0$, ist. Wie schon auf S. 59 erwähnt, ist in Methan keine signifikante Doppler-Verbreiterung zu erwarten, aber nicht gänzlich auszuschließen. Im Prinzip könnte in der Linienform von CH_4 ein kleiner Beitrag mit $\Gamma_D^{\text{CH}_4} > 0$ vorhanden sein.

5.6 Abschließender Teil der Analyse

5.6.1 Berechnung der Coulomb-Explosion

Aus der so gewonnenen Verbreiterung $\Gamma_D^{\text{C}_2\text{H}_2} = 2 \Delta E_{Dop}^{\text{C}_2\text{H}_2}$ lassen sich die Geschwindigkeit $\beta_{\pi\text{C}}^{\text{C}_2\text{H}_2}$ (Gl. 2.33), die kinetische Energie $T_{\pi\text{C}}^{\text{C}_2\text{H}_2}$ (Gl. 2.29) und die potentielle Energie $V_{C_2^+}$ (Gl. 2.31) berechnen. Weiters kann der Ionisationszustand des Azethylen-Moleküles vor der Explosion $q_1^+ q_2^+$ und der internukleare Abstand $r = R$ (Gl. 2.28) zum Zeitpunkt des Aufbrechens der Bindung abgeschätzt werden. Im Falle von $\Gamma_D^{\text{CH}_4} \neq 0$ kann man die Größen $\Delta E_{Dop}^{\text{CH}_4}$, $\beta_{\pi\text{C}}^{\text{CH}_4}$ und $T_{\pi\text{C}}^{\text{CH}_4}$ abschätzen. Diese Rechnungen werden in 6.3.1 durchgeführt.

5.6.2 Auswirkung der Coulomb-Explosion auf die Stoßzahl im Gas

Nachdem man aus den Fits und Simulationen die Dopplerverbreiterung in C_2H_2 erhalten hat, kann man die Geschwindigkeit β bzw. $v_{\pi\text{C}}$, die ein π^- -C-Atom nach dem Aufbrechen der $\text{C} \equiv \text{C}$ -Bindung in C_2H_2 hat, berechnen. Mithilfe dieser Geschwindigkeit läßt sich dann die

mittlere Flugzeit $\bar{\tau}$ zwischen zwei Stößen bzw. die mittlere Stoßzahl \bar{Z} (s. Gl. 2.35) der π^- -C-Atome im Gas ermitteln. Interessant ist hierbei vor allem der Vergleich mit den Werten von C_2H_2 bei Raumtemperatur (290 K). Die Methodik dieser Abschätzung sei hier beschrieben, die Ergebnisse finden sich in 6.3.2.

Zuerst muß man die freie Weglänge \bar{l} , die mittlere thermische Geschwindigkeit der Maxwell'schen Geschwindigkeitsverteilung \bar{c} (s. Gl. 2.34), die mittlere Stoßzahl \bar{Z} und die mittlere freie Flugzeit $\bar{\tau}$ für C_2H_2 -Moleküle bei Zimmertemperatur (290 K) berechnen. Die Dichte ρ des Gases bei dem durch das Experiment gegebenen Druck kann man aus einer Tabelle in [ALE1976] entnehmen. Mittels des Molekulgewichtes M_r (s. Tab. A.2) läßt sich diese in die Teilchendichte n umrechnen über ($N_A \dots$ Loschmidt-Zahl)

$$n = \frac{\rho N_A}{M_r} \quad (5.11)$$

Zieht man die Kubikwurzel aus n , erhält man die Anzahl der Gasteilchen entlang eines Meters. Das Reziproke davon ist die mittlere Distanz zwischen zwei Molekülen, d.h. \bar{l} :

$$\bar{l} = \frac{1}{\sqrt[3]{n}} \quad (5.12)$$

Rechnet man M_r in die Dimension kg um, kann man mit Gl. 2.34 die mittlere thermische Geschwindigkeit der Maxwell'schen Geschwindigkeitsverteilung \bar{c} bei $T = 290$ K berechnen. Aus Gl. 2.35 ergibt sich schlußendlich die mittlere Stoßzahl \bar{Z} und die mittlere freie Flugzeit $\bar{\tau}$ der C_2H_2 -Moleküle zwischen aufeinanderfolgenden Stößen beim jeweiligen Druck.

Da im Vergleich nur wenige π^- -C-Atome im C_2H_2 -Gas vorhanden sind, bleibt für diese die mittlere freie Weglänge \bar{l} gleich. Allerdings ist ihre Geschwindigkeit $v_{\pi C}$ (Ergebnis aus den Fits) wesentlich höher, als die thermische Geschwindigkeit der C_2H_2 -Moleküle. Deswegen ist ihre Stoßzahl \bar{Z} stark erhöht und die freie Flugzeit $\bar{\tau}$ wesentlich geringer. Diese Tatsache hat, wie in 2.4.2 erwähnt, weitreichende Konsequenzen auf die weitere Kaskade der π^- im Kohlenstoffatom.

Weiters läßt sich umgekehrt die Dichte ρ bzw. der Druck im C_2H_2 -Gas berechnen, der herrschen müßte, um unter normalen Umständen (also ohne Coulomb-Explosion) die Werte $\bar{Z}_{\pi C}$ bzw. $\bar{\tau}_{\pi C}$ zu erreichen. Es sind dafür allerdings Werte zu erwarten, die mehrere Größenordnungen über der unter normalen Umständen erzeugbaren Dichte liegen. Daher geht man hier vom Modell der punktförmigen Gasmoleküle, welches den oben durchgeführten Überlegungen zu Grunde liegt, ab, und leitet diese Teilchendichte auf Basis der kinetischen Gastheorie her.

Nimmt man für den Stoß zwischen zwei C_2H_2 -Molekülen das simple Modell zweier harter Kugeln mit gleichem Radius ($r_1 = r_2$), so wird der Streuquerschnitt σ in Gl. 2.27 ($d_{\text{C}_2\text{H}_2} \dots$ Durchmesser von C_2H_2 , s. Tab. A.2) zu

$$\sigma = (r_1 + r_2)^2 \pi = \pi d^2 \quad (5.13)$$

Setzt man in Gl. 2.35 die Gl. 2.27 und obiges σ ein und schreibt dies nach n an, so erhält man

$$n_{oCE} = \frac{\bar{Z}}{\sqrt{2}\pi d^2 \bar{c}} = \frac{1}{\sqrt{2}\pi d^2 \bar{c} \bar{\tau}} \quad (5.14)$$

für die Teilchendichte n_{oCE} . Diese wird über Gl. 5.11 in die entsprechende Massendichte umwandelt und aus der entsprechenden Druck-Dichte-Tabelle in [ALE1976] interpoliert man den zu dieser Dichte bei 290 K gehörenden Druck.

5.6.3 Die Gesamtbreite der Spektrallinien

Aus dem Fit mit „fitos“ erhält man den Gauß- und Lorentzanteil im Profil der Röntgenlinien. Es erwies sich aber während der Analyse als nicht trivial, aus diesen Anteilen auf die Gesamtbreite der Linie rückzuschließen. Denn nimmt man an, daß das Linienprofil durch eine reine Voigt-Verteilung zu beschreiben ist, so kann man die Gesamtbreite Γ_T aus beiden Anteilen berechnen mit [Ind2001]:

$$\Gamma_T = \frac{\Gamma_L + \sqrt{\Gamma_L^2 + 4\Gamma_G^2}}{2} . \quad (5.15)$$

Die mit dieser Formel berechneten Breiten waren aber etwas mehr als 1 Ch zu klein, entsprechend je nach Dispersion ≥ 70 meV. Die FWHM ist durch die Zahl der Datenpunkte ab/bis zur halben Amplitude grob bestimmbar. Dies wird mit dem im Anhang B.3 beschriebenen Programm „Breite“ in vom Modell des Linienprofils unabhängiger Weise durchgeführt. So bestimmt man z.B. die Breite der Linie $\pi^{-12}\text{C}_{(5g \rightarrow 4f)}$ aus der Messung mit CH_4 im Mai 2001 mit obiger Formel zu 519 meV (einfaches addieren von Gauß- und Lorentzanteil ergibt 601 meV), während sich entsprechend der Kanalzahl 629 meV ergibt.

Dies bestätigt, daß die in „fitos“ gemachte Annahme eines reinen Voigt-Profiles der Röntgenlinien nicht haltbar ist, sondern den Doppleranteil beinhalten muß.

Im folgenden Kapitel werden deshalb für die Breiten der Spektrallinien die Werte Γ_G und Γ_L aus der Analyse mit „fitos“ angegeben, während die Gesamtbreite Γ aus der Bearbeitung des Spektrums mit dem Programm „Breite“ und der statistischen Fehler σ_Γ aus einem Gaußfit stammt.

Kapitel 6

Ergebnisse der Messungen

6.1 Ergebnisse der Messungen im Dezember 2000 (PSI1)

6.1.1 Einstellungen

Die Messungen wurden von 3. bis 6. Dezember 2000 am PSI mit den folgenden Einstellungen durchgeführt:

- Kristall Z13 - Si111 mit Krümmungsradius $R_K = 2982,5 \pm 0,6$ mm
- Schlitzblende vor dem Kristall mit 60 mm Breite
- Energien der Spektrallinien, s. Tab. 4.2
- Einstellungen für $\pi^{-12}\text{C}_{(5g\rightarrow 4f)}$:
 - Fokus: Position „lin.tab.“ 51,1 (1985,1 mm, entspricht Position 51,12 der Skala am Lineartisch („lin.tab.“))
 - Winkel Kristall: $\Theta_C = 42^\circ 10'$ ($\equiv \vartheta_B$)
 - Winkel Arm: $\Theta_A = 39^\circ 19' 58''$
- Dispersion bei $\pi^{-12}\text{C}_{(5g\rightarrow 4f)}$: $1,684\,645\,8 \frac{\text{eV}}{\text{mm}} = 1,684\,645\,8 \frac{\text{meV}}{\mu\text{m}} \cdot 40 \frac{\mu\text{m}}{\text{Ch}} = 67,385\,83 \frac{\text{meV}}{\text{Ch}}$
- Messungen bei Raumtemperatur 295 ± 1 K ($\approx 23^\circ\text{C}$)
- Targetzelle Modell H mit $7,5 \mu\text{m}$ Kapton[®]-Fenster und Stützstruktur mit Waben
- Targetdruck p_{TZ} :
 - CH_4 : $1\,498 \pm 5$ mbar
 - C_2H_2 : 508 ± 5 mbar

6.1.2 Fokussmessungen

Wie in Kapitel 4 erwähnt, wurden vor den eigentlichen Messungen vorbereitende Messungen durchgeführt. Nach einem Targets캔 (s. S. 56) war zwar der Detektor optimal auf das Target ausgerichtet, jedoch war es nötig, die berechnete Position des Fokus im Spektrometer zu überprüfen. Dazu nahm man in verschiedenen Abständen Kristall - Detektor Meßdaten auf, jeweils mit CH_4 als Targetfüllung. Ziel war es, über Bestimmung des Minimums der Breite der Linie von $\pi^{-12}\text{C}_{(5g\rightarrow 4f)}$ die richtige Fokusposition herauszufinden. Die eigentliche Datennahme fand dann in dieser Position des Lineartischs statt.

Diese Messungen wurden sowohl am PSI, als auch in Wien ausgewertet. Dazu wurden die Daten in Meßblöcke gemäß den jeweiligen Detektorpositionen eingeteilt. Jeder Meßblock wurde nacheinander mit „csd“ und „fitos“ bearbeitet. Die CCD-Dateien wurden in das CCD-Analyseprogramm eingelesen und gemäß 5.3.1 eine Kurvenkorrektur, sowie gemäß dem in Kapitel 5.3 Beschriebenen das Spektrum generiert. Dieses wurde in „fitos“ nach den in 5.4 erwähnten Methoden gefittet. Die Namen der Meßblöcke waren: „Position 1“, „Position 2“, „Position 3“. Die Positionen der CCDs und die Nummern der Dateien zu den Meßpaketen sind aus Tab. 6.1 zu entnehmen. Position 3 war nahe dem berechneten Abstand Kristall - Fokus von 1985,12 mm („lin.tab.“ = 51,1).

Gas	Position	„lin.tab.“	Datei-Nr	Datum	Q_p [C]
CH_4	Position 1	62,06	pic_0038–pic_0050	5.12.2000	67,49
	Position 2	57,07	pic_0012–pic_0024	3.12.2000	65,75
	Position 2	57,07	pic_0003–pic_0011	3.12.2000	24,16
C_2H_2	Position 3	52,04	pic_0025–pic_0037	4.12.2000	63,84
	Position 3	52,06	pic_0051–pic_0059	5./6.12.2000	47,82

Tabelle 6.1: Messungen im Dezember 2000.

Die Ergebnisse dieser Messungen sind aus Tab. 6.2 und Abb. 6.1 ersichtlich.

Position	3	2	2	1	2 gem.
Abstand vom Fokus [mm]	0,94	5,97	5,97	10,96	5,97
Γ [meV]	569	547	664	592	644
σ_Γ [meV]	13	28	13	13	12
Γ_G [meV]	464	383	429	434	
σ_{Γ_G} [meV]	33	97	34	44	
Γ_L [meV]	164	271	242	258	
σ_{Γ_L} [meV]	13	32	15	16	
$\pi^{-12}\text{C}_{(5g\rightarrow 4f)}$ -Ereignisse/Coulomb	23,2	16,0	25,1	23,4	
$\sigma_{\text{Er}}/\text{C}$	0,6	0,9	0,7	0,6	

Tabelle 6.2: Breite, Gaußanteil, Lorentzanteil und Intensität der $\pi^- \text{C}$ Linien bei den Fokusscans im Dezember 2000. Die letzte Spalte ist die mit Gl. 6.2 gemittelte Breite der Messungen in Position 2.

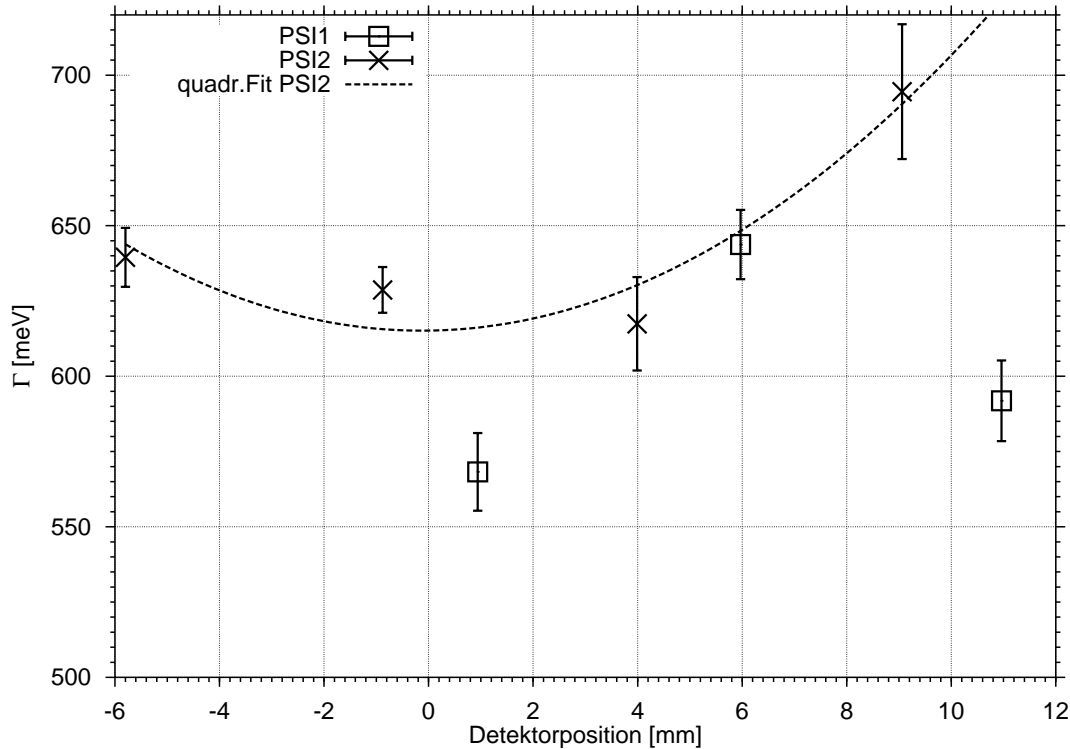


Abbildung 6.1: Breite der Röntgenlinie $\pi^{-12}\text{C}_{(5g \rightarrow 4f)}$ aus CH_4 mit verschiedenen Abständen Kristall - Detektor („Fokusscan“).

6.1.3 Fit der Spektren von CH_4 und C_2H_2

Nachdem bestätigt war, daß bei Messungen im berechneten Fokus tatsächlich die geringste FWHM auftritt, wurde die weitere Analyse der Daten ausgeführt. Zuerst seien folgend noch wichtige Einstellungen und Parameter der Messung und des Fits von CH_4 in der Position 3 angegeben:

- Messung:
 - Messung bei „lin.tab.“ 52,04
 - Ladung: 63,835 C
 - Meßzeit: 13,8 Stunden
 - Winkel Kristall: $\Theta_C = 42^\circ 10'$
 - Winkel Arm: $\Theta_A = 39^\circ 19' 58''$
 - Targetdruck: $p_{TZ} = 1\,498 \pm 5$ mbar
 - Temperatur: 295 ± 1 K ($\approx 23^\circ\text{C}$)
- Parameter in „csd“:
 - common lower energy threshold: Kanal 500

- Abspeichern der Position defekter Pixel ausgeschaltet
- Kurvenkorrektur:
 - * $A = 932,33 \pm 0,33$
 - * $B = 1,826 \cdot 10^{-2} \pm 8,8 \cdot 10^{-4}$
 - * $C = -7,51 \cdot 10^{-6} \pm 4,6 \cdot 10^{-7}$
 - * $NDF = 33; \chi^2/NDF = 1,12$ (NDF...Zahl der Freiheitsgrade)
- Energiebereich für CCD1 – CCD6: 980–1120
- x/y-cut: $\Delta x : 910\text{--}1020$; $\Delta y : 1\text{--}1830$
- Parameter in „fitos“:
 - max. Anzahl der Iterationen: 29 bzw. 30
 - konstanter Untergrund
 - Fitregion Kanal 800–1100
 - Bitschalter für Peak 1–4:
 - * Position und Höhe: Bitschalter 0 (wird individuell gefittet)
 - * Niedrigenergieregion und Hochenergieregion: Bitschalter -2 (deaktiviert)
 - * Gauß-FWHM: Bitschalter -1 (fix gesetzt)
 - * Lorentz-FWHM: Bitschalter 6 (Lorentz-Parameter aller 4 Peaks mit demselben Wert gefittet)
 - Anzahl der Parameter: 10
 - $NDF = 291$

Es wurden nochmals alle Aufnahmen von CH_4 in der Position 3 in das CCD-Analyseprogramm eingelesen, eine Kurvenkorrektur und ein Spektrum (s. Abb. 6.2) erzeugt, welches mit „fitos“ gefittet wurde. Die Einstellungen während dieser Prozeduren kann man aus obiger Auflistung entnehmen.

Die Analyse der Aufnahmen mit C_2H_2 im Target erfolgte auf die gleiche Weise, wie jene der Daten von CH_4 , also gemäß 5.3 und 5.4. Die Parameter (inkl. Kurvenkorrektur) in „csd“ und „fitos“ waren dieselben, wie bei der Analyse von CH_4 in Position 3 (s. obige Liste). Die davon abweichenden Werte bei der Messung selbst waren:

- Ladung: 47,82 C
- Meßzeit: 9,56 Stunden
- Targetdruck: $p_{TZ} = 508 \pm 5$ mbar

Bei der Untersuchung des C_2H_2 -Spektrums mit „fitos“ wurde Γ_G auf den Wert von Γ_G in CH_4 in Position 3 eingestellt (s. Tab. 6.3) und Γ_L frei veränderbar gesetzt. Dahinter steckte die Annahme, daß die Antwortfunktion des Spektrometers im Gaußprofil, und die Dopplerbox der Verbreiterung mit dem Lorentzprofil gefaltet aufscheinen würde. Die Gesamtbreite Γ wurde

separat durch Bestimmung der Anzahl der Kanäle zwischen den Punkten mit halber Peakhöhe und ihr statistischer Fehler σ_Γ durch einen Gaußfit des Spektrums ermittelt (s. 5.6.3).

Tab. 6.3 gibt die Ergebnisse der Fits der Spektren des Komplexes $\pi^-C_{(5\rightarrow4)}$ aus CH_4 und C_2H_2 an. Die Prozentwerte sind die Intensitäten der parallelen Übergänge bzw. $\pi^-^{13}\text{C}_{(5\text{g}\rightarrow4\text{f})}$ im Vergleich zum zirkularen Übergang $\pi^-^{12}\text{C}_{(5\text{g}\rightarrow4\text{f})}$. Die Energien der Peaks 2, 3, und 4 (Spalte 2 und 4) wurden aus den Peakpositionen im Fit (Parameter $x_{c,2}$ bis $x_{c,4}$ in [Ch]) über die Differenzen zur Position $x_{c,1}$ der Linie $\pi^-^{12}\text{C}_{(5\text{g}\rightarrow4\text{f})}$ berechnet und mit der konstanten Dispersion $67,38583 \frac{\text{meV}}{\text{Ch}}$ in eV umgerechnet:

$$x_{c,i} [\text{eV}] = E_0 [\text{eV}] + (x_{c,i} [\text{Ch}] - x_{c,1} [\text{Ch}]) \cdot \frac{\Delta E}{\Delta x} \left[\frac{\text{eV}}{\text{Ch}} \right] \quad \text{für } i = 2, 3, 4 \quad (6.1)$$

In Abb. 6.2 und 6.3 sind beide Spektren dargestellt. Da die Energien der Übergänge als bekannt vorausgesetzt wurden (s. Tab. 4.2), wurde der Einfachheit halber die Achse der Dispersion in der Einheit der ADC-Kanäle [Ch] belassen.

Durch Vergleich der Fits ergab sich eine Verbreiterung des Spektrums in C_2H_2 gegenüber CH_4 von

$$\Delta\Gamma = 40 \pm 22 \text{ meV bzw. um } 7,0\%.$$

6.1.4 Simulationen und Dopplerbreite

Mit den aus Tab. 6.4 ersichtlichen Werten der Fitparameter wurden die Simulationen des CH_4 - und des C_2H_2 -Spektrums mit dem Programm „SpeComp“ (s. Anhang B.1) durchgeführt.

Diese Monte-Carlo Simulationen geschahen gemäß den Erklärungen in 5.5.1. Das Ergebnis dieser Rechnungen und der Vergleich mit den Daten ergab für CH_4 :

$$\Gamma_D^{\text{CH}_4} = 0,90 \pm 0,95 \text{ Kanäle} \quad \text{mit} \quad \chi_{min}^2 = 69,34 \quad \text{und} \quad (\chi^2/NDF)_{min} = 0,630$$

Wie bereits in 5.5.3 erwähnt, ist es nicht auszuschließen, daß auch CH_4 einen gewissen Doppleranteil in der Linienform besitzt. Das obige Ergebnis weist darauf hin, obwohl die statistische Signifikanz dieser Aussage geschmälert ist.

Die in 5.5.2 beschriebene Überprüfung der Form des Doppleranteils als reines Gaußprofil ergab $\chi^2 = 70,06$ und $\chi^2/NDF = 0,637$ bei $\Gamma_D = 0$ und $\Gamma_G = 6,58$ Kanälen bzw. $\Gamma_G = 443 \text{ meV}$. Aufgrund der fast identen Werte von χ^2 kann das Modell der Form des Dopplerprofils als Rechteckbox nicht unterschieden werden von der Annahme einer Struktur im Profil der Dopplerverbreiterung. Wegen seiner Einfachheit bildete ersteres Modell weiterhin die Basis der vorliegenden Analyse.

Die Simulationen des Spektrums aus C_2H_2 wurden wie in 5.5.1 durchgeführt. Die Werte der Eingabeparameter für „SpeComp“ sind aus Tab. 6.4 zu entnehmen. Hierfür wurde

$$\Gamma_D^{\text{C}_2\text{H}_2} = 4,18 \pm 1,30 \pm 0,98 \text{ Kanäle} \quad \text{mit} \quad \chi_{min}^2 = 82,09 \quad \text{und} \quad (\chi^2/NDF)_{min} = 0,813$$

	CH ₄			C ₂ H ₂		
	Wert	Fehler	Intensität	Wert	Fehler	Intensität
y_0 [Ch]	0,64±	0,06		0,46±	0,05	
Γ [meV]	569 ±	13		609 ±	18	
Γ_G [meV]	449 ±	36		449 ±	36	
Γ_L [meV]	174 ±	15		231 ±	22	
$x_{c,1}$ [eV]	2973,83±	0,01		2973,83±	0,01	
I_1	1235 ±	37	100%	814 ±	31	100%
$x_{c,2}$ [eV]	2975,24±	0,03		2975,23±	0,05	
I_2	178 ±	16	(14,4±1,3)%	70 ±	11	(8,4±1,3)%
$x_{c,3}$ [eV]	2976,58±	0,08		2976,66±	0,13	
I_3	27 ±	7	(2,2±0,6)%	16 ±	6	(2±0,7)%
$x_{c,4}$ [eV]	2978,44±	0,07		2978,35±	0,22	
I_4	29 ±	7	(2,4±0,6)%	8 ±	5	(1±0,5)%
Rate [Er/C]	23,0 ±	0,7		19,4 ±	0,7	

Tabelle 6.3: Fit-Ergebnisse der Spektren von CH₄ und C₂H₂ (Messung Dezember 2000).

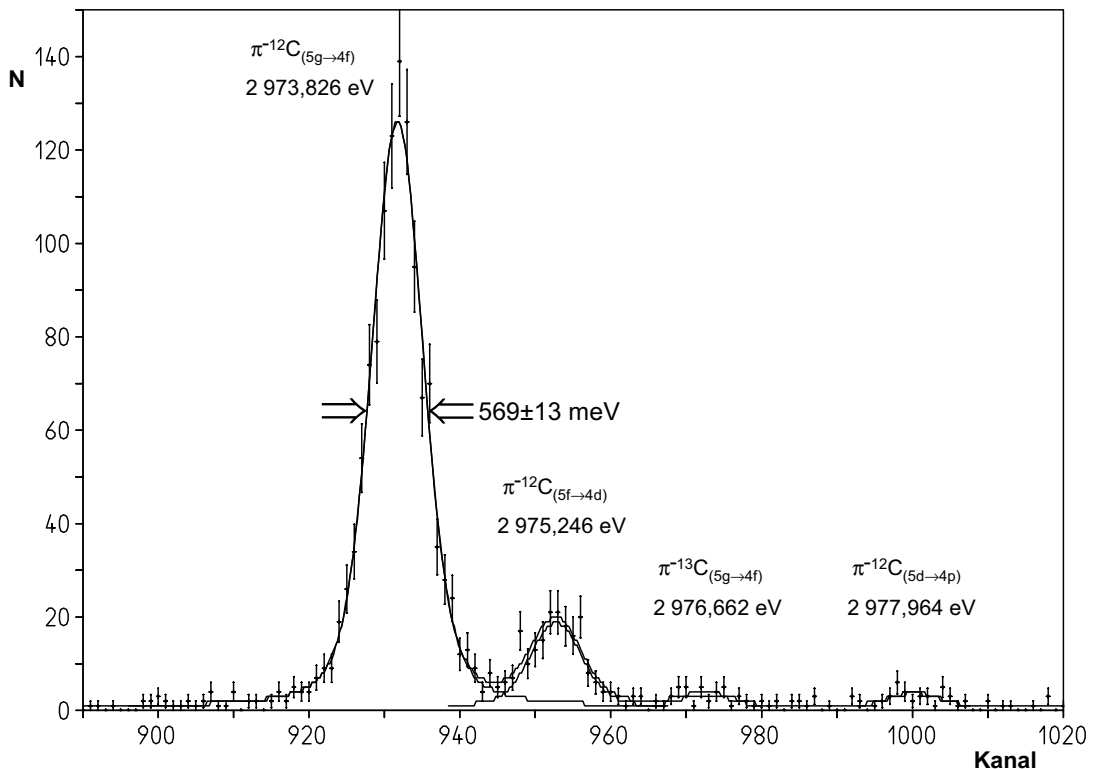


Abbildung 6.2: Spektrum der Übergänge von $\pi^{-}\text{C}_{(5 \rightarrow 4)}$ von CH₄ (Messung Dezember 2000). Eingezeichnet ist die ermittelte Breite der Linien und die Energien (s. Tab. 4.2). Meßzeit 13,8 h.

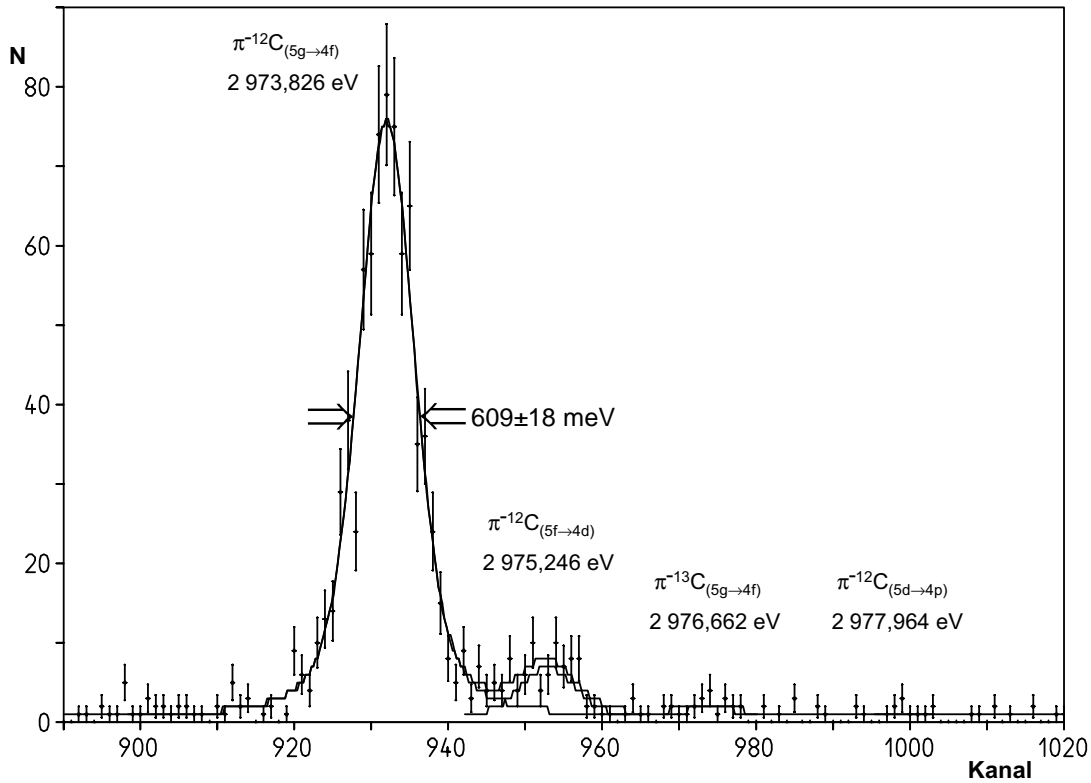


Abbildung 6.3: Spektrum der Übergänge von $\pi^-C_{(5 \rightarrow 4)}$ von C_2H_2 (Messung Dezember 2000). Eingezeichnet ist die ermittelte Breite der Linien und die Energien (s. Tab. 4.2). Meßzeit 9,56 h.

Parameter		Wert CH_4	Wert C_2H_2	Einheit
xl(1)	$x_{c,1}$	931,72	932,002	Ch
xl(2)	$x_{c,2}$	952,731	952,889	Ch
xl(3)	$x_{c,3}$	972,549	974,152	Ch
xl(4)	$x_{c,4}$	1 000,219	999,225	Ch
trial(1)	I_1	123 505	81 385	
trial(2)	I_2	17 831	6 987	
trial(3)	I_3	2 745	1 617	
trial(4)	I_4	2 943	810	
xb1	y_0	62,85	$45,37^{+6,43}_{-4,97}$	
gamg	Γ_G	6,662	$6,662 \pm 0,53$	Ch
gaml	Γ_L	2,578	$2,578 \pm 0,22$	Ch

Tabelle 6.4: Parameter der Monte-Carlo Simulationen der Spektren von Dezember 2000.

erhalten. Die zweite Unsicherheit hierbei ist der systematische Fehler $\sigma_{\Gamma_D, syst}$, dessen Berechnungsweise auf S. 72 beschrieben ist.

Auch bei C_2H_2 wurde die Form des Doppleranteils überprüft und es ergab sich $\chi^2 = 82,2$ und $\chi^2/NDF = 0,814$ bei $\Gamma_D = 0$ und $\Gamma_G = 7,26$ Kanälen bzw. $\Gamma_G = 489$ meV. Auch hier ist das Modell der Rechteckbox nicht unterscheidbar von der Annahme einer Struktur in der Dopplerverbreiterung und wurde der Einfachheit halber für die Analyse beibehalten.

Tab. 6.5 faßt die Breiten der jeweiligen Anteile in den Spektren zusammen und Abb. 6.4 zeigt das mit diesen Parametern simulierte Spektrum (Linie) und den Vergleich mit den Daten (Kreise).

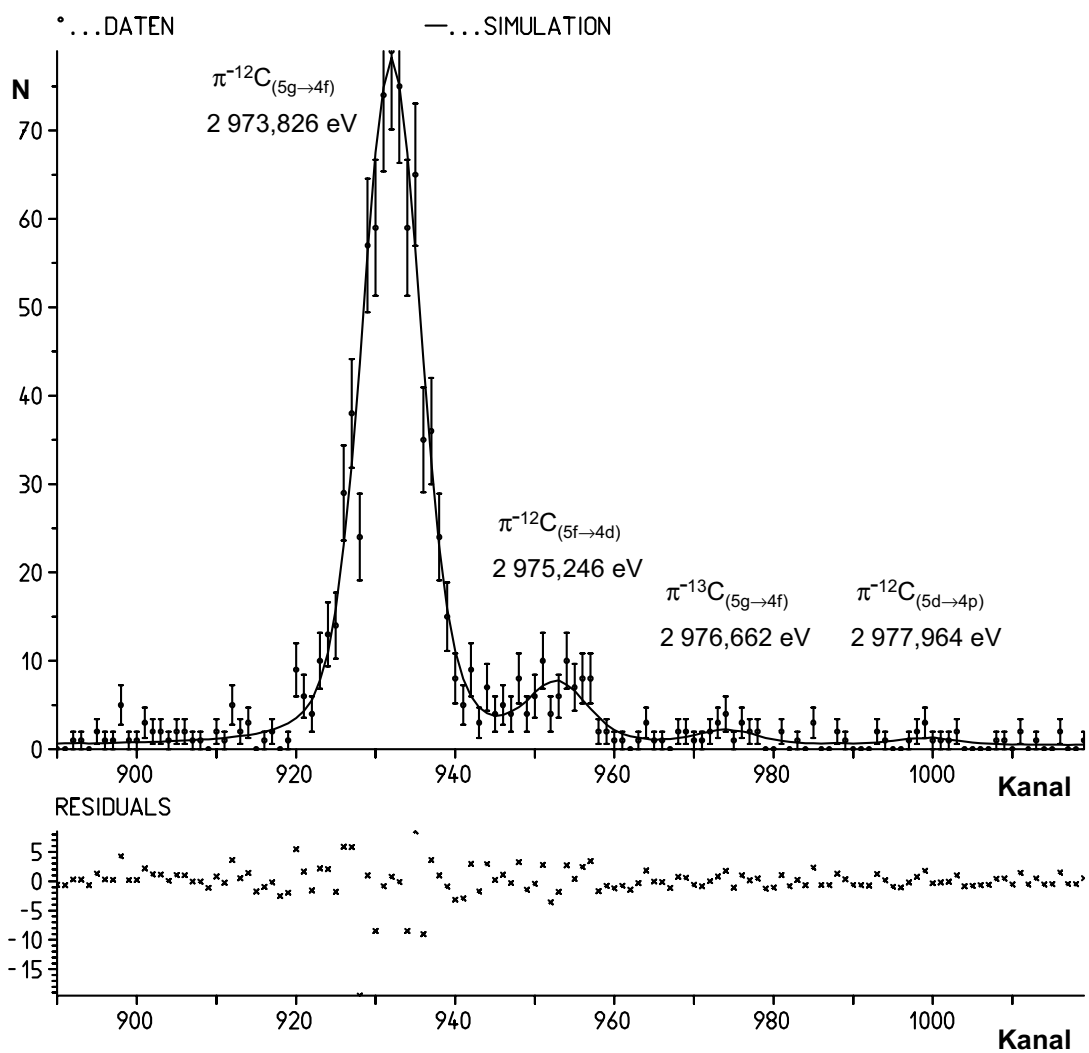


Abbildung 6.4: Monte-Carlo Simulation des Spektrums der Übergänge $\pi^-C_{(5 \rightarrow 4)}$ von C_2H_2 aufgenommen im Dezember 2000. Die Übereinstimmung der Simulation mit den Daten ist aus dem Feld „Residuals“ (Meßdaten minus Simulation) ersichtlich.

Wie in 5.5.1 beschrieben, wurde der statistische und der systematische Fehler gemäß Gl. 5.10 zusammengefaßt. Das ergab für den Doppleranteil in C_2H_2 :

	CH ₄		C ₂ H ₂			Einh.
	Wert	stat.Fehler	Wert	stat.Fehler	syst.Fehler	
Γ_G	6,662±	0,530	6,662±	0,530		Ch
Γ_L	2,578±	0,220	2,578±	0,220		Ch
Γ_D	0,90 ±	0,95	4,18 ±	1,30	± 0,98	Ch
Γ_G	449	± 36	449	± 36		meV
Γ_L	174	± 15	174	± 15		meV
Γ_D	60	± 64	282	± 87	± 66	meV

Tabelle 6.5: Ergebnisse der Simulationen der Spektren von CH₄ und C₂H₂ im Dezember 2000.

$$\Gamma_D^{C_2H_2} = 4,2 \pm 1,6 \text{ Kanäle bzw. } \Gamma_D^{C_2H_2} = 282 \pm 109 \text{ meV.}$$

6.2 Ergebnisse der Messungen im April/Mai 2001 (PSI2)

6.2.1 Einstellungen

Die hier untersuchten Messungen wurden von 10. bis 23. Mai 2001 am PSI mit den folgenden Einstellungen durchgeführt:

- Kristall Z20 - Quarz10 $\bar{1}$ mit Krümmungsradius $R_K = 2982,5 \pm 0,6$ mm
- Schlitzblende vor dem Kristall mit 60 mm Breite
- Energien der Spektrallinien, s. Tab. 4.2
- Einstellungen für $\pi^{-12}C_{(5g \rightarrow 4f)}$:
 - Fokus: Position „lin.tab.“ 56,5 (entspricht 1861,8 mm)
 - Winkel Kristall: $\Theta_C = 39^\circ 07'$ ($\equiv \vartheta_B$)
 - Winkel Arm: $\Theta_A = 45^\circ 20'$
- Dispersion bei $\pi^{-12}C_{(5g \rightarrow 4f)}$: $2,004\,033\,7 \frac{\text{eV}}{\text{mm}} = 2,004\,033\,7 \frac{\text{meV}}{\mu\text{m}} \cdot 40 \frac{\mu\text{m}}{\text{Ch}} = 80,161\,35 \frac{\text{meV}}{\text{Ch}}$
- Messungen bei Raumtemperatur 294 ± 1 K ($\approx 22^\circ\text{C}$)
- Targetzelle Modell K mit 7,5 μm Kapton[®]-Fenster und Stützstruktur mit Schlitzen
- Targetdruck p_{TZ} :
 - CH₄: $1\,400 \pm 10$ mbar
 - C₂H₂: 754 ± 5 mbar

6.2.2 Fokussmessungen

Während die Targetzelle bei den Messungen im Dezember 2000 in der Zyklotronfalle fixiert war, konnte sie im Mai 2001 innerhalb der Falle positioniert werden (wie auf Seite 43 beschrieben). Zunächst wurden Messungen der Linienbreite von $\pi^{-12}\text{C}_{(5g\rightarrow 4f)}$ bei verschiedenen Stellungen des Targets in der Falle durchgeführt. Die Messungen und ihre Ergebnisse sind auf Seite 55 näher erläutert.

Nach dem darauf folgenden Targetscan (s. S. 56) war der Detektor auf das optimal eingestellte Target ausgerichtet. Danach wurde die berechnete Position des Fokus im Spektrometer überprüft. Dazu nahm man Daten in verschiedenen Abständen Kristall - Detektor und bestimmte die Breite der Linie von $\pi^{-12}\text{C}_{(5g\rightarrow 4f)}$ in Abhängigkeit der Position des Detektors. Die eigentliche Datennahme fand dann in der Einstellung mit der minimalsten Linienbreite statt.

Diese Messungen wurden in Wien analysiert. Jeder, gemäß der jeweiligen Detektorposition eingeteilte, Meßblock wurde, wie schon zuvor, mit „csd“ und „fitos“ bearbeitet. Die CCD-Dateien wurden in das CCD-Analyseprogramm eingelesen und eine Kurvenkorrektur durchgeführt (s. 5.3.1) sowie das Energiespektrum (s. 5.3) erzeugt. Dieses wurde in „fitos“ nach der in 5.4 beschriebenen Vorgangsweise gefittet. Die Meßblöcke sind bezeichnet: „Position 1“, „Position 2“, „Position 3“ und „Position 4“. Die Positionen der CCDs und die Nummern der Dateien zu den Meßpaketen sind aus Tab.6.6 zu entnehmen. Position 3 war nahe dem berechneten Abstand Kristall - Fokus von 1 861,8 mm („lin.tab.“ = 56,5).

Gas	Position	„lin.tab.“	Datei-Nr	Datum	Q_p [C]
CH ₄	Position 1	65,56	piC_0120 – piC_0129	19./20.5.2001	54,35
	Position 2	60,49	piC_0087 – piC_0101	17./18.5.2001	80,30
	Position 3	55,62	piC_0130 – piC_0170	20.–22.5.2001	253,05
	Position 4	50,72	piC_0102 – piC_0119	18./19.5.2001	93,58
	Position 4	50,70	piC_0060 – piC_0074	13./14.5.2001	78,35
C ₂ H ₂	Position 3	55,62	piC_0171 – piC_0182	22./23.5.2001	78,03

Tabelle 6.6: Messungen im Mai 2001.

Die Ergebnisse dieser Messungen sind aus Tab. 6.7 und Abb. 6.1 ersichtlich. Aufgrund von statistischen Abweichungen ist die minimale Breite der $\pi^{-12}\text{C}_{(5g\rightarrow 4f)}$ -Linie nicht bei 0 mm Detektorposition (im Fokus) gemessen worden. Grob betrachtet, müßte sich Γ abhängig von der Detektorposition wie eine Parabel verhalten. Tatsächlich ergab ein Fit durch die Meßpunkte mit einer quadratischen Funktion (gestrichelte Linie in Abb. 6.1) ein Minimum der Linienbreite im Fokus.

6.2.3 Fit der Spektren von CH₄ und C₂H₂

Auch hier zeigte sich, daß die berechnete Fokusposition die geringste Linienbreite erzeugt und die für diese Arbeit wichtigen Aufnahmen in der Nähe der Idealposition durchgeführt worden waren. Somit konnte die weitere Analyse der Daten durchgeführt werden. Folgend

Position	4	4	3	2	1	4 gem.
Abstand vom Fokus [mm]	-5,80	-5,78	-0,88	3,99	9,06	-5,80
Γ [meV]	643	637	629	618	695	640
σ_{Γ} [meV]	14	14	8	15	22	10
Γ_G [meV]	447	422	416	472	445	
σ_{Γ_G} [meV]	36	35	20	34	60	
Γ_L [meV]	169	168	185	120	248	
σ_{Γ_L} [meV]	16	15	9	16	26	
$\pi^{-12}\text{C}_{(5g\rightarrow 4f)}$ -Ereignisse/Coulomb	12,7	10,2	12,5	9,7	10,1	
$\sigma_{\text{Er}}/\text{C}$	0,4	0,3	0,2	0,4	0,5	

Tabelle 6.7: Breite, Gaußanteil, Lorentzanteil und Intensität der π^-C Linien bei den Fokusscans im Mai 2001. Die letzte Spalte ist die über Gl. 6.2 gemittelte Breite der Messungen in Position 4.

sind wichtige Einstellungen und Parameter der Messung und des Fits von CH_4 in der Position 3 aufgelistet:

- Messung:
 - Messung bei „lin.tab.“ 55,62
 - Ladung: 253,05 C
 - Meßzeit: 43,52 Stunden
 - Winkel Kristall: $\Theta_C = 39^\circ 07'$
 - Winkel Arm: $\Theta_A = 45^\circ 20'$
 - Targetdruck: $p_{TZ} = 1\,400 \pm 10$ mbar
 - Temperatur: 294 ± 1 K ($\approx 22^\circ\text{C}$)
- Parameter in „csd“:
 - common lower energy threshold: Kanal 500
 - Abspeichern der Position defekter Pixel ausgeschaltet
 - Kurvenkorrektur:
 - * $A = 662,65 \pm 0,21$
 - * $B = 1,631 \cdot 10^{-2} \pm 5,4 \cdot 10^{-4}$
 - * $C = -8,65 \cdot 10^{-6} \pm 2,8 \cdot 10^{-7}$
 - * $\text{NDF} = 33; \chi^2/\text{NDF} = 0,53$ (NDF... Zahl der Freiheitsgrade)
 - Energiebereich:

* CCD1: 980–1065	CCD4: 950–1100
* CCD2: 950–1020	CCD5: 950–1100
* CCD3: 1010–1100	CCD6: 950–1100
 - x/y-cut: $\Delta x : 650\text{--}695$; $\Delta y : 1\text{--}1830$

- Parameter in „fitos“:
 - max. Anzahl der Iterationen: 29 bzw. 30
 - konstanter Untergrund
 - Fitregion Kanal 500–800
 - Bitschalter für Peak 1–4:
 - * Position und Höhe: Bitschalter 0 (wird individuell gefittet)
 - * Niedrigenergieregion und Hochenergieregion: Bitschalter -2 (deaktiviert)
 - * Gauß-FWHM: Bitschalter -1 (fix gesetzt)
 - * Lorentz-FWHM: Bitschalter 6 (Lorentz-Parameter aller 4 Peaks mit demselben Wert gefittet)
 - Anzahl der Parameter: 10
 - NDF = 291

Bei der Analyse der Aufnahmen in Fokusposition wurden alle Aufnahmen von CH_4 in der Position 3 in das CCD-Analyseprogramm eingelesen, eine Kurvenkorrektur und ein Spektrum (s. Abb. 6.5) erzeugt, welches dann mit „fitos“ gefittet wurde. Die Einstellungen und Parameter der Programme für diese Prozeduren sind aus obiger Auflistung zu entnehmen.

Die Analyse der Aufnahmen mit C_2H_2 im Target erfolgte auf die selbe Weise, gemäß den Beschreibungen in 5.3 und 5.4. Die Parameter (inkl. Kurvenkorrektur) in „csd“ und „fitos“ waren dieselben, wie bei der Analyse von CH_4 in Position 3 (s. obige Liste). Einige davon abweichende Werte bei der Messung selbst waren:

- Ladung: 78,03 C
- Meßzeit: 12,74 Stunden
- Targetdruck: $p_{TZ} = 754 \pm 5$ mbar

Bei der Untersuchung dieses Spektrums mit „fitos“ wurde Γ_G auf den Wert von Γ_G in CH_4 in Position 3 gesetzt (s. Tab. 6.8) und Γ_L frei veränderbar belassen. Die Gesamtbreite Γ wurde wieder durch Bestimmung der Anzahl der Kanäle zwischen den Punkten mit halber Peakhöhe ermittelt. Ihr statistischer Fehler σ_Γ wurde mittels eines Gaußfits des Spektrums berechnet (s. 5.6.3).

Die Tab. 6.8 listet die Ergebnisse der Fits der Röntgenübergänge $\pi^- \text{C}_{(5 \rightarrow 4)}$ aus den Gasen CH_4 und C_2H_2 mit „fitos“ auf. Wie zuvor, sind die Prozentwerte in der dritten und fünften Spalte die Intensitäten der parallelen Übergänge bzw. von $\pi^{-13}\text{C}_{(5g \rightarrow 4f)}$ im Vergleich zum zirkularen Übergang $\pi^{-12}\text{C}_{(5g \rightarrow 4f)}$. Auch hier wurden die Energien der Peaks 2, 3, und 4 (Spalte 2 und 4) aus den Peakpositionen im Fit (Parameter $x_{c,2}$ bis $x_{c,4}$ in der Dimension [Ch]) über die Differenzen zur Position $x_{c,1}$ der Linie $\pi^{-12}\text{C}_{(5g \rightarrow 4f)}$ berechnet und mit der konstanten Dispersion $80,16135 \frac{\text{meV}}{\text{Ch}}$ gemäß Gl. 6.1 in eV umgerechnet.

	CH ₄			C ₂ H ₂		
	Wert	Fehler	Intensität	Wert	Fehler	Intensität
y_0 [Ch]	0,78±	0,07		0,32±	0,04	
Γ [meV]	629	± 8		669	± 18	
Γ_G [meV]	416	± 20		416	± 20	
Γ_L [meV]	185	± 9		201	± 21	
$x_{c,1}$ [eV]	2973,83±	0,01		2973,83±	0,01	
I_1	3165	± 59	100%	711	± 28	100%
$x_{c,2}$ [eV]	2975,26±	0,02		2975,26±	0,04	
I_2	384	± 23	(12,1±0,7)%	73	± 10	(10,3±1,4)%
$x_{c,3}$ [eV]	2976,65±	0,06		2976,61±	0,24	
I_3	51	± 10	(1,6±0,3)%	5	± 4	(0,7±0,5)%
$x_{c,4}$ [eV]	2978,29±	0,05		2978,35±	0,32	
I_4	47	± 8	(1,5±0,3)%	3	± 3	(0,4±0,4)%
Rate [Er/C]	14,4	± 0,3		10,2	± 0,4	

Tabelle 6.8: Fit-Ergebnisse der Spektren von CH₄ und C₂H₂ (Messung Mai 2001).

Abb. 6.5 und 6.6 zeigen die Spektren dieser Röntgenübergänge. Aufgrund der bekannten Energien der Übergänge (s. Tab. 4.2) wurde die Achse der Dispersion in der Einheit der ADC-Kanäle [Ch] belassen.

Durch Vergleich dieser Fits ergab sich hier eine Verbreiterung des Spektrums in C₂H₂ gegenüber CH₄ von

$$\Delta\Gamma = 40 \pm 20 \text{ meV bzw. um } 6,4\%.$$

Die unterschiedlichen Breiten Γ des Überganges $\pi^{-12}\text{C}_{(5g \rightarrow 4f)}$ in beiden Messungen (CH₄: 569 ± 13 meV bzw. 629 ± 8 meV; C₂H₂: 609 ± 18 meV bzw. 669 ± 18 meV) sind bedingt durch die unterschiedliche Auflösung der verwendeten Kristalle (Energieauflösung Si111= 418 meV; Energieauflösung Quarz10 $\bar{1}$ = 444 meV).

Im Vergleich zu den Messungen im Dezember 2000 mit dem Si-Kristall Z13 wurde im Mai 2001 mit dem Quarz-Kristall Z20 eine um 37% (CH₄) und eine um 47% (C₂H₂) geringere Rate an $\pi^{-}\text{C}_{(5 \rightarrow 4)}$ -Ereignissen pro Coulomb Protonenstrahlstrom gemessen. Dieser Unterschied lässt sich durch eine geringere π^{-} -Rate erklären, da im Jahr 2000 das lange Produktionstarget E (60 mm Graphit) vor der Strahllinie des Areals $\pi\text{E}5$ installiert war, während 2001 nur das kurze Target (40 mm Graphit) verwendet wurde (s. S. 33).

6.2.4 Simulationen und Dopplerbreite

Nach den Fits wurden mit den aus Tab. 6.9 ersichtlichen Werten der Parameter die Simulationen des CH₄- und des C₂H₂-Spektrums mit dem Programm „SpeComp“ (s. Anhang B.1) ausgeführt.

Die Durchführung der Monte-Carlo Simulationen ist in 5.5.1 erklärt. Das Ergebnis dieser

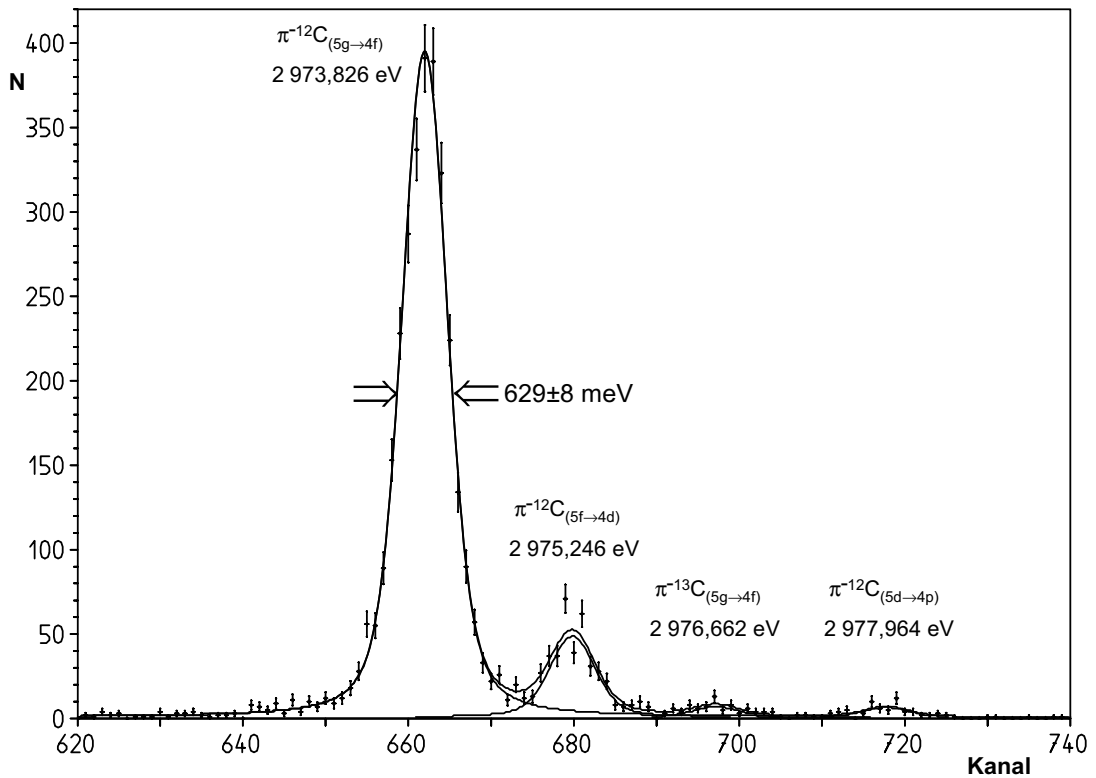


Abbildung 6.5: Spektrum der Übergänge von $\pi^{-}\text{C}_{(5 \rightarrow 4)}$ von CH_4 aufgenommen im Mai 2001. Eingezeichnet ist die ermittelte Breite der Linien und die Energien (s. Tab. 4.2). Messzeit 43,52 h.

Parameter		Wert CH_4	Wert C_2H_2	Einheit
xl(1)	$x_{c,1}$	661,978	661,522	Ch
xl(2)	$x_{c,2}$	679,832	679,437	Ch
xl(3)	$x_{c,3}$	697,172	696,298	Ch
xl(4)	$x_{c,4}$	717,746	717,988	Ch
trial(1)	I_1	316 457	71 178	
trial(2)	I_2	38 429	7 324	
trial(3)	I_3	5 083	525	
trial(4)	I_4	4 687	307	
xb1	y_0	74,05	$31,80^{+4,55}_{-4,00}$	
gamg	Γ_G	5,194	$5,194 \pm 0,254$	Ch
gaml	Γ_L	2,309	$2,309 \pm 0,108$	Ch

Tabelle 6.9: Parameter der Monte-Carlo Simulationen der Spektren von Mai 2001.

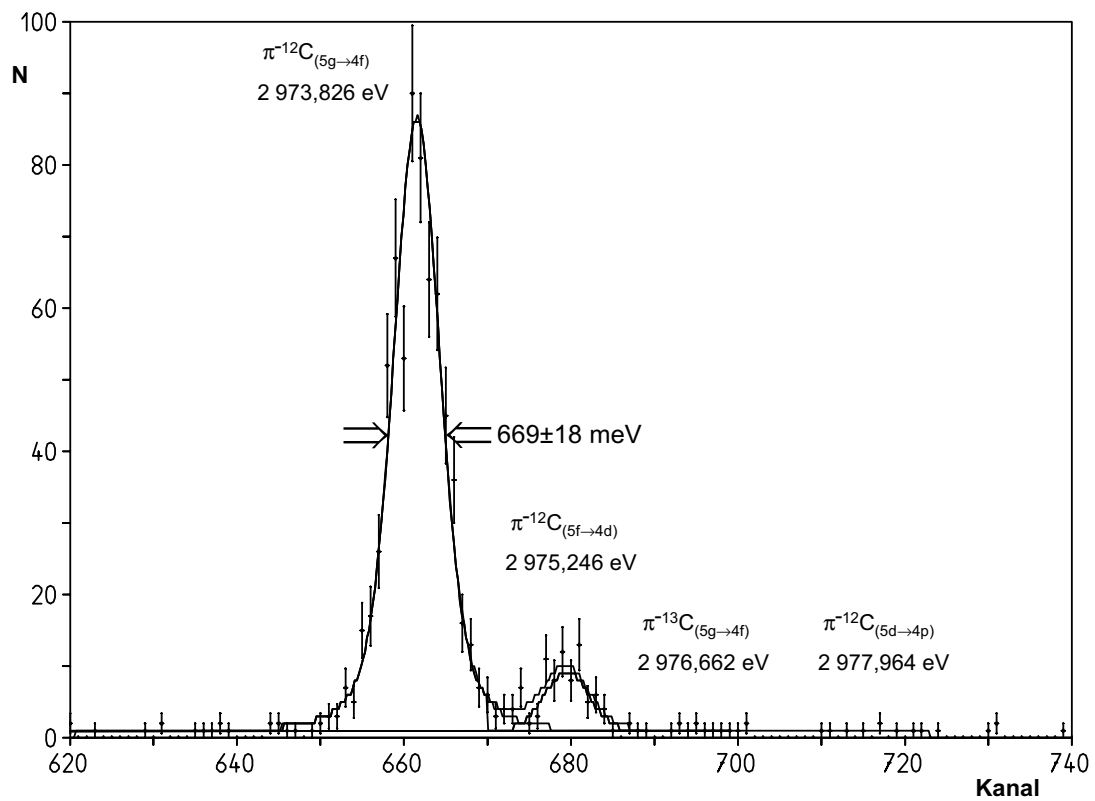


Abbildung 6.6: Spektrum der Übergänge von $\pi^- C_{(5 \rightarrow 4)}$ von C_2H_2 aufgenommen im Mai 2001. Eingezeichnet ist die ermittelte Breite der Linien und die Energien (s. Tab. 4.2). Messzeit 12,74 h.

Berechnungen und der Vergleich mit den Daten ergab bei CH₄:

$$\Gamma_D^{\text{CH}_4} = 0,30_{-0,30}^{+0,80} \text{ Kanäle} \quad \text{mit} \quad \chi_{min}^2 = 100,88 \quad \text{und} \quad (\chi^2/NDF)_{min} = 0,9608$$

Auch hier bestätigte sich wieder, daß CH₄ einen Doppleranteil in der Linienform besitzen könnte, obwohl in diesem Fall die Signifikanz dieser Aussage durch die geringe Statistik leidet (s. 5.5.3).

Wieder wurde die Form des Doppleranteils untersucht, wie es in 5.5.2 beschrieben steht. Die Simulation des Spektrums als reines Gaußprofil ergab $\chi^2 = 100,83$ und $\chi^2/NDF = 0,9603$ bei $\Gamma_D = 0$ und $\Gamma_G = 5,13$ Kanälen bzw. $\Gamma_G = 411$ meV. Wie schon bei den Messungen im Dezember 2000 liegen auch hier für beide Modellannahmen die Werte von χ^2 so nahe beieinander, daß keine eindeutige Unterscheidung zwischen beiden Modellen möglich ist. Die Einfachheit der Annahme einer einzigen Dopplerbox gab den Ausschlag für die Weiterführung der Analyse mit diesem Modell.

Die Simulationen des C₂H₂-Spektrums wurden so durchgeführt, wie es in 5.5.1 beschrieben ist. Die Werte der Eigabeparameter für das Programm „SpeComp“ sind aus Tab. 6.9 ersichtlich. Für diese Simulation wurde

$$\Gamma_D^{\text{C}_2\text{H}_2} = 3,31 \pm 0,78 \pm 0,73 \text{ Kanäle} \quad \text{mit} \quad \chi_{min}^2 = 46,76 \quad \text{und} \quad (\chi^2/NDF)_{min} = 0,632$$

erhalten. Die zweite Unsicherheit hierin ist der systematische Fehler $\sigma_{\Gamma_D, syst}$. Seine Berechnungsweise ist auf S. 72 beschrieben.

Auch hier wurde die Form des Doppleranteils überprüft und es ergab sich $\chi^2 = 46,57$ und $\chi^2/NDF = 0,629$ bei $\Gamma_D = 0$ und $\Gamma_G = 5,75$ Kanälen bzw. $\Gamma_G = 461$ meV. Man ersieht, daß wiederum das Modell der Rechteckbox nicht eindeutig von der Annahme einer Struktur in der Dopplerverbreiterung unterschieden werden kann.

Tab. 6.10 faßt die Breiten der jeweiligen Anteile in den Spektren zusammen und Abb. 6.7 zeigt das mit diesen Parametern simulierte Spektrum und den Vergleich mit den Daten.

Mit Zusammenfassung des statistischen und des systematischen Fehlers gemäß Gl. 5.10 konnte der Doppleranteil in C₂H₂ angegeben werden als

$$\Gamma_D^{\text{C}_2\text{H}_2} = \mathbf{3,3 \pm 1,1 \text{ Kanäle bzw. } \Gamma_D^{\text{C}_2\text{H}_2} = \mathbf{265 \pm 85 \text{ meV.}}$$

6.3 Endergebnis

6.3.1 Die Verbreiterung

Die Ergebnisse der Verbreiterung des Doppleranteils in C₂H₂ in den Daten von Dezember 2000 ($\Gamma_D^{\text{C}_2\text{H}_2} = 282 \pm 109$ meV) und von Mai 2001 ($\Gamma_D^{\text{C}_2\text{H}_2} = 265 \pm 85$) können nun über die Berechnung des gewichteten Mittels nach Gl. 6.2 zu einem Wert zusammengefasst werden:

$$\mu' = \frac{\sum_{i=1}^n \frac{x_i}{\sigma_i^2}}{\sum_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_i^2}} \quad \text{mit} \quad \sigma_{\mu'}^2 = \frac{1}{\sum_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_i^2}} \quad (6.2)$$

	CH ₄		C ₂ H ₂			
	Wert	stat.Fehler	Wert	stat.Fehler	syst.Fehler	
Γ_G	5,194±	0,254	5,194±	0,254		Ch
Γ_L	2,309±	0,108	2,309±	0,108		Ch
Γ_D	0,30	$^{+0,80}_{-0,30}$	3,31 ±	0,78	± 0,73	Ch
Γ_G	416	± 20	416	± 20		meV
Γ_L	185	± 9	185	± 9		meV
Γ_D	24	$^{+64}_{-24}$	265	± 62	± 59	meV

Tabelle 6.10: Ergebnisse der Simulationen der Spektren von CH₄ und C₂H₂ im Mai 2001.

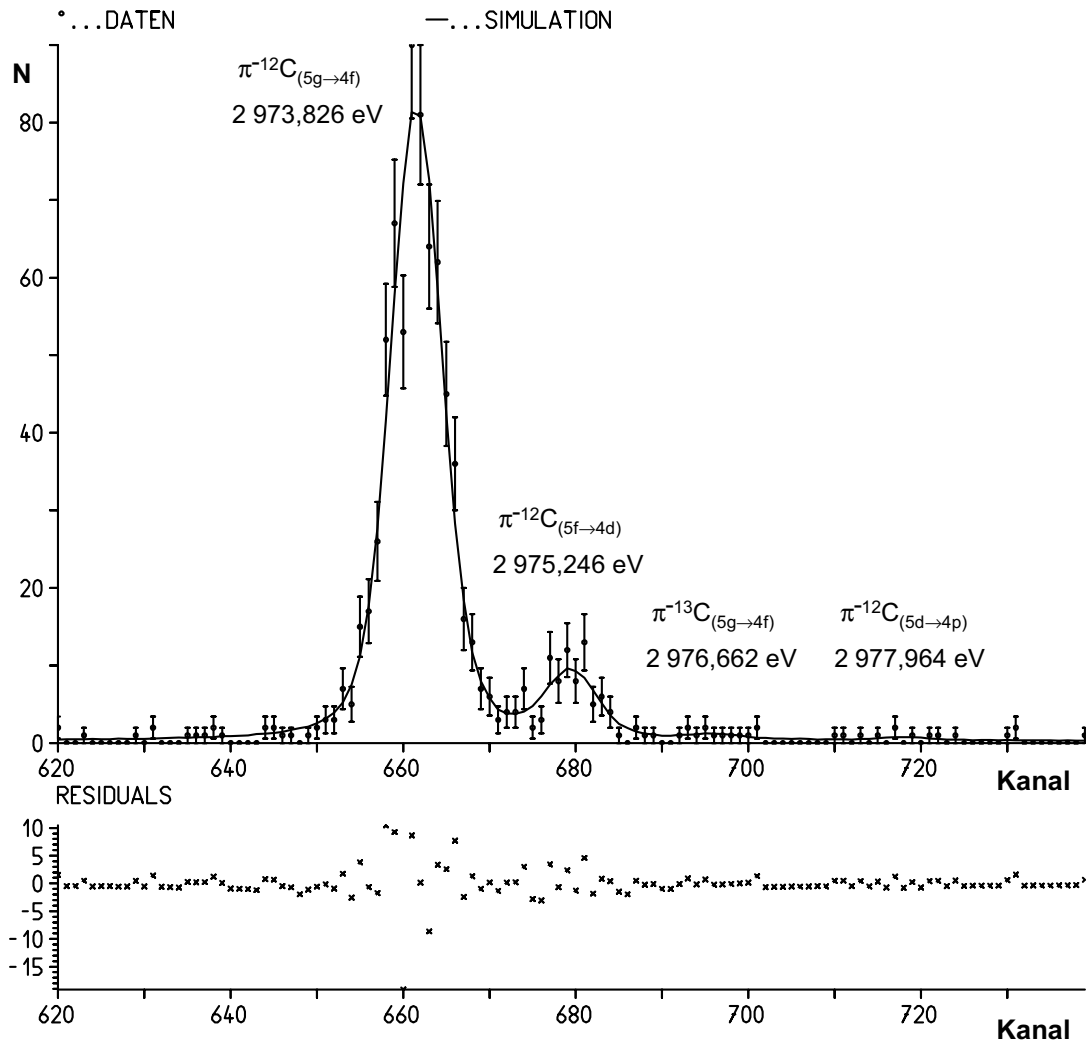


Abbildung 6.7: Monte-Carlo Simulation des Spektrums der Übergänge $\pi^{-}\text{C}_{(5 \rightarrow 4)}$ von C₂H₂ aufgenommen im Mai 2001. Die Übereinstimmung der Simulation mit den Daten ist aus dem Feld „Residuals“ (Meßdaten minus Simulation) ersichtlich.

Somit erhält man dann aus den in 6.1.3 und 6.2.3 beschriebenen Fits der Daten und durch die in 6.1.4 und 6.2.4 behandelten Simulationen gemäß dem in Abschnitt 5.4.1 erwähnten Modell, einen gemittelten Wert $\Gamma_D^{C_2H_2}$ für den Doppleranteil. In diesem Fall macht die Verbreiterung aus:

$$\Gamma_D^{C_2H_2} = 271 \pm 67 \text{ meV.}$$

In weiterer Folge werden — wenn nicht anders erwähnt — $\pi^{-12}C$ -Atome behandelt, die der Einfachheit halber nur als „ π^-C -Atome“ bezeichnet werden. Die folgende Berechnung der jeweiligen Größen erfolgt, wie in 2.4 erwähnt. Die in diese Berechnungen eingehenden Konstanten sind in Tab. A.2 auf S. 109 angegeben.

Die Hälfte von $\Gamma_D^{C_2H_2}$ ist die maximale Linienverbreiterung $\Delta E_{Dop}^{C_2H_2}$, die ein π^-C -Atom durch die Dopplerverschiebung verursachen kann. Diese Größe ist für die Berechnung der maximalen Geschwindigkeit $\beta_{\pi C}^{C_2H_2}$ dieses exotischen Atoms und des Ladungszustandes des $C \equiv C$ -Moleküles ausschlaggebend.

$$\Delta E_{Dop}^{C_2H_2} = 136 \pm 34 \text{ meV}$$

Aus $\Delta E_{Dop}^{C_2H_2}$ gelangt man über den Dopplereffekt und die Beziehung $E = h\nu$ zur Geschwindigkeit $\beta_{\pi C}^{C_2H_2}$, die ein π^-C -Atom maximal erreicht (s. Gl. 2.32 und 2.33). Durch Einfügen der Werte für $\Delta E_{Dop}^{C_2H_2}$ und E_0 in Gl. 2.33 erhält man

$$\begin{aligned} \beta_{\pi C}^{C_2H_2} &= (4,6 \pm 1,1) \cdot 10^{-5}, \\ \text{umgerechnet } v_{\pi C}^{C_2H_2} &= (13,8 \pm 3,3) \cdot 10^3 \frac{\text{m}}{\text{s}}. \end{aligned}$$

Dieses $\beta_{\pi C}^{C_2H_2}$ liegt, wie erwartet (s. Tab. 2.3, S. 25) im Bereich von 10^{-4} bis 10^{-5} . Das ist 10 bis 100 mal schneller als bei Systemen im thermischen Gleichgewicht. Der Vergleich mit der mittleren thermischen Geschwindigkeit eines Gases aus Kohlenstoffatomen ($v_{th} = 635 \frac{\text{m}}{\text{s}}$) macht die Stärke der Coulombabstoßung im ionisierten C_2H_2 -Molekül deutlich.

Setzt man diese Geschwindigkeit $\beta_{\pi C}^{C_2H_2}$ in Gl. 2.29 zusammen mit der Masse des π^-C -Atoms $m_{\pi C}$ ($m_{\pi^{12}C}$ in Tab. A.2) ein, erhält man die kinetische Energie $T_{\pi C}^{C_2H_2}$ des Fragments. Dabei berechnet sich die Masse des pionischen Kohlenstoffs aus der Summe der Konstituenten minus der Bindungsenergie des Systems (Gl. 2.4 bzw. Tab. A.1) zu

$$\begin{aligned} m_{\pi C} &= m_C + m_{\pi^-} - B_{(n_{\pi}=5)}^{\pi C} = 12 \cdot u + m_{\pi^-} - B_{(n_{\pi}=5)}^{\pi C} \\ &= 12 \cdot 931,494\,013(37) \frac{\text{MeV}}{c^2} + 139,570\,18(35) \frac{\text{MeV}}{c^2} - 0,005\,285 \frac{\text{MeV}}{c^2} \\ &= 11\,317,493\,05(57) \frac{\text{MeV}}{c^2}. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Daraus ergibt sich die kinetische Energie jenes Fragments des $C \equiv C$ -Moleküles aus C_2H_2 , welches mit dem eingefangenen π^- emittiert wird zu:

$$\mathbf{T}_{\pi C}^{C_2H_2} = 12,0 \pm 5,7 \text{ eV}$$

Mithilfe der Masse des Kohlenstoffkerns m_C (m_{12C} in Tab. A.2), $m_{\pi C}$ und $\beta_{\pi C}^{C_2H_2}$ erhält man aus Gl. 2.30 die Geschwindigkeit $\beta_C^{C_2H_2}$ des anderen Fragments, sowie dessen kinetische Energie $T_C^{C_2H_2}$:

$$\beta_C^{C_2H_2} = (-4,7 \pm 1,1) \cdot 10^{-5}$$

$$T_C^{\text{C}_2\text{H}_2} = 12,3 \pm 5,8 \text{ eV}$$

Hat man den Wert für beide kinetischen Energien $T_{\pi\text{C}}^{\text{C}_2\text{H}_2}$ und $T_C^{\text{C}_2\text{H}_2}$, so läßt sich über Gl. 2.31 die potentielle Energie $V_{C_2^+(r)}$ des explodierenden Moleküles berechnen. Dabei nimmt man für das Potential $V_{C_2^+(r)}$ ein simples Coulomb Potential für Punktladungen an (hier mit den entsprechenden Einheiten)

$$V_{C_2^+(r)} [\text{eV}] = 14,399\,643\,91 \left[\frac{\text{ÅV}}{\text{e}} \right] \cdot \frac{q_1^+ [\text{e}] q_2^+ [\text{e}]}{r [\text{Å}]}, \quad (6.4)$$

obwohl in [Sgm2000] gezeigt wurde, daß zumindest bei der ioneninduzierten Coulomb-Explosion nicht-coulombische Potentiale ($\propto \frac{1}{r}$) Einfluß haben (s. 2.5.2). Aus dieser Rechnung erhält man:

$$V_{C_2^+(r)} = 24,3 \pm 8,1 \text{ eV}$$

Nimmt man den Abstand der C-Kerne r bei der Explosion als gegeben an, kann man die Ladungszustände der Fragmente q_1^+ und q_2^+ bei der Explosion abschätzen (s. Gl. 2.28 bzw. Gl. 6.4). Beim Einfang des π^- wird ein e^- aus dem Molekül geschlagen, d.h. es bildet sich das Ion C_2H_2^+ , welches eine andere Bindungslänge der $\text{C} \equiv \text{C}$ -Bindung hat (s. Tab. 4.1 auf S. 59). Allerdings geht das Aufbrechen des Moleküls so rasch vor sich ($\ll 10^{-12}$ s), daß die C-Kerne keine Zeit haben, auf die Emission dieses ersten Elektrons zu reagieren. Deshalb kann man für die Rechnung den Wert des Gleichgewichtsabstandes der C-Kerne in der $\text{HC} \equiv \text{CH}$ -Bindung des C_2H_2 -Moleküls (s. Tab. 4.1) $r = R_{\text{C}_2} = (1,203 \pm 0,001) \text{Å}$ verwenden (s. Abschätzung im Anhang A.2). Einsetzen von R_{C_2} und $V_{C_2^+(r)}$ in Gl. 6.4 ergibt für den Ladungszustand des C_2H_2 -Moleküls

$$\mathbf{q_1^+ q_2^+ = 2,03 \pm 0,68 \text{ e}^2 \approx 2 \pm 1 \text{ e}^2.}$$

Da im Zuge der Analyse festgestellt wurde, daß — entgegen der ursprünglichen Annahme — auch in CH_4 eine von Null verschiedene Dopplerverbreiterung $\Gamma_D^{\text{CH}_4}$ aufscheinen dürfte, seien nachfolgend die analog berechneten Werte für CH_4 aufgelistet:

Mittelung des Doppleranteils in CH_4 in den Daten von Dezember 2000 ($\Gamma_D^{\text{CH}_4} = 60 \pm 64 \text{ meV}$) und von Mai 2001 ($\Gamma_D^{\text{CH}_4} = 24 \pm 64$) nach Gl. 6.2 ergibt

$$\begin{aligned} \Gamma_D^{\text{CH}_4} &= 42 \pm 45 \text{ meV} . \\ \text{Daraus folgt } \Delta E_{\text{Dop}}^{\text{CH}_4} &= 21 \pm 23 \text{ meV} \\ \beta_{\pi\text{C}}^{\text{CH}_4} &= (7,1 \pm 7,6) \cdot 10^{-6} \\ v_{\pi\text{C}}^{\text{CH}_4} &= (2,1 \pm 2,3) \cdot 10^3 \frac{\text{m}}{\text{s}} \\ T_{\pi\text{C}}^{\text{CH}_4} &= 0,29 \pm 0,61 \text{ eV} . \end{aligned}$$

6.3.2 Die Stoßzahl

Ausgehend von der Geschwindigkeit β des exotischen Fragments kann man die Zeit zwischen dem Aufbrechen der Bindung und der ersten Kollision mit einem Nachbarmolekül berechnen. In [Ehr1983] wurde dies für μ^- -N in N_2 durchgeführt. Dabei zeigte sich, daß diese Zeit um einen Faktor 20 kleiner ist, als die mittlere Zeit zwischen zwei Stößen in N_2 bei 50 bar und

sie etwa gleich dem Inversen der Auger-Raten bei diesem Druck ist. Daraus schloß man, daß das μ^- -N-Atom selbst bei relativ geringen Drücken e^- zwischen aufeinander folgenden Auger-Übergängen durch electron-refilling erhält.

Angeregt durch diese Untersuchung, wird im Folgenden die mittlere Flugzeit $\bar{\tau}$ zwischen zwei Stößen bzw. die mittlere Stoßzahl \bar{Z} der π^- -C-Atome im Azetylen-Gas berechnet. Aufschlußreich ist dabei der Vergleich mit den Werten dieser Größen in C_2H_2 bei Raumtemperatur (290 K). In 5.6.2 ist die Vorgangsweise der Abschätzung erläutert, weshalb hier nur noch die Resultate folgen.

Die Dichte von Azetylen aus [ALE1976]

- bei 290 K und 0,5066 bar ist $\rho_5 = 0,5492 \pm 0,0001 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$ und
- bei 290 K und 0,7093 bar ist $\rho_7 = 0,7699 \pm 0,0001 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$.

Diese Druckwerte liegen nahe den tatsächlichen Verhältnissen (508 mbar bzw. 754 mbar), sodaß nicht zwischen ihnen interpoliert werden muß. Damit erhält man über das Molekulgewicht $M_r = 26,038 \pm 0,001 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}}$ nach Gl. 5.11 für die Teilchendichte beim jeweiligen Druck:

$$\begin{aligned} n_5 &= (1,27021 \pm 0,00024) \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3} \\ n_7 &= (1,78065 \pm 0,00024) \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3} \end{aligned}$$

Somit beträgt nach Gl. 5.12 die mittlere freie Weglänge im C_2H_2 -Gas

$$\begin{aligned} \bar{l}_5 &= (4,28589 \pm 0,00027) \cdot 10^{-9} \text{ m} \\ \bar{l}_7 &= (3,82949 \pm 0,00017) \cdot 10^{-9} \text{ m} \end{aligned}$$

Division von M_r durch $(N_A \cdot 10^3)$ ergibt die Masse eines C_2H_2 -Moleküles $m_{C_2H_2} = (4,32371 \pm 0,00017) \cdot 10^{-26} \text{ kg}$, womit man mittels Gl. 2.34 die mittlere thermische Geschwindigkeit der Maxwell'schen Geschwindigkeitsverteilung \bar{c} bei $T = 290 \text{ K}$ erhält:

$$\bar{c} = 485,6044 \pm 0,0096 \frac{\text{m}}{\text{s}}.$$

Damit läßt sich nun mittels Gl. 2.35 die mittlere Stoßzahl

$$\begin{aligned} \bar{Z}_5 &= (113303,1 \pm 7,5) \cdot 10^6 \text{ s}^{-1} \\ \bar{Z}_7 &= (126806,5 \pm 6,2) \cdot 10^6 \text{ s}^{-1} \end{aligned}$$

bzw. die mittlere Flugzeit

$$\begin{aligned} \bar{\tau}_5 &= (8,82589 \pm 0,00058) \cdot 10^{-12} \text{ s} \approx 8,8 \text{ ps} \\ \bar{\tau}_7 &= (7,88603 \pm 0,00038) \cdot 10^{-12} \text{ s} \approx 7,9 \text{ ps} \end{aligned}$$

der C_2H_2 -Moleküle zwischen aufeinanderfolgenden Stößen berechnen.

Bei diesen Zeiten zwischen aufeinanderfolgenden Stößen kann man davon ausgehen, daß die pionische Kaskade in C normalerweise längst abgeschlossen ist (s. Abschätzung der Dauer der Kaskade in π^- -C, Anhang A.1), bevor ein Stoß mit einem Nachbarmolekül erfolgt und

somit electron-refilling verursachen könnte.

Wie in 5.6.2 erwähnt, bleibt für die im C_2H_2 -Gas befindlichen π^- -C-Atome die mittlere freie Weglänge \bar{l} gleich, die folgend für die weitere Rechnung gemittelt wurde:

$$\bar{l}_{\pi\text{C}} = (4,05769 \pm 0,00032) \cdot 10^{-9} \text{ m}$$

Mit $v_{\pi\text{C}} = (13,8 \pm 3,3) \cdot 10^3 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ erhält man für die mittlere Stoßzahl

$$\bar{Z}_{\pi\text{C}} = (3,40 \pm 0,81) \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$$

und für die mittlere freie Flugzeit zwischen zwei Stößen

$$\bar{\tau}_{\pi\text{C}} = (2,94 \pm 0,70) \cdot 10^{-13} \text{ s} \approx \mathbf{0,294 \text{ ps}}.$$

Das heißt, daß die π^- -C Fragmente aufgrund ihrer höheren Geschwindigkeit 28 mal mehr Stöße in der Sekunde (Mittelwert von \bar{Z}_5 und \bar{Z}_7) ausführen als die C_2H_2 -Moleküle im Gas. Diese Stoßzeiten liegen unterhalb der Dauer der pionischen Kaskade (s. Anhang A.1), sodaß sich das π^- bei den ersten Stößen mit einem Nachbarmolekül noch in einem angeregten Zustand $n_\pi > 1$ befindet. Dadurch werden e^- vom Stoßpartner übernommen (electron-refilling), wodurch die nicht-zirkularen Übergänge verstärkt werden (s. S. 21 und 2.4.2).

Um diese Werte $\bar{Z}_{\pi\text{C}}$ und $\bar{l}_{\pi\text{C}}$ ohne Coulomb-Explosion zu erreichen, müßte nach Gl. 5.14 eine Teilchendichte von

$$n_{oCE} = 4,852 \cdot 10^{27} \text{ m}^{-3}$$

herrschen. Laut Gl. 5.11 entspricht dies einer Dichte von

$$\rho = 209,8 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}.$$

Dieser Wert liegt zwischen der Dichte des gasförmigen ($\rho_{gas} = 73,24 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$) und des flüssigen Azetylens ($\rho_{fl} = 411 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$) bei seiner Verflüssigung bei 290 K und einem Dampfdruck von [ALE1976]

$$p' = 40,84 \text{ bar}.$$

Diese Dichte wäre somit nur während der Verflüssigung von C_2H_2 bei dieser Temperatur in der Targetzelle erreichbar.

Auf diese Weise wird gezeigt, daß die im C_2H_2 -Gas indirekt gemessenen Stoßzahlen keinesfalls unter den im Experiment herrschenden Bedingungen erreichbar sind, und sich nur durch den Effekt der Coulomb-Explosion erklären lassen.

6.3.3 Isotopenmischung

Im Targetgas befanden sich auch Gasmoleküle bestehend aus den Isotopen der Atome (^{13}C statt ^{12}C). Diese Isotope liegen im natürlichen Mischungsverhältnis in den Gasflaschen vor; hier $^{12}\text{C}:^{13}\text{C} = (98,89 \pm 0,01)\% : (1,11 \pm 0,01)\%$ [NWC2000]. Aus der Intensität der jeweiligen Spektrallinien ließe sich dieses Mischungsverhältnis reproduzieren.

Wie aus den Spektren des $\pi^-C_{5\rightarrow 4}$ Komplexes zu ersehen ist (Abb. 6.2, 6.3, 6.5 und 6.6), trat in den vorliegenden Messungen der zirkulare Übergang $5g \rightarrow 4f$ in pionischem ^{13}C auf. Der Vergleich der Verhältnisse $\frac{I_3}{I_1}$ in den Tab. 6.3 und 6.8 zeigt tatsächlich, daß das Isotop ^{13}C zu 1–2% in den beiden Targetfüllungen vorkam. Dies deckt sich gut mit dem natürlichen Mischungsverhältnis.

6.4 Diskussion

6.4.1 Die Coulomb-Explosion

Die in 6.3.1 berechneten Werte der kinetischen Energie der Fragmente und der potentiellen Energie in C_2H_2 vor der Explosion leisten über einen Vergleich mit der Coulomb-Explosion bei anderen Prozessen (s. 2.5) einen Beitrag zur Theorie dieses Phänomens. Weiters lassen sich daraus, zusammen mit den Daten aus 6.3.2, Aufschlüsse über die Geschwindigkeit der pionischen Kaskade und über das electron-refilling während dieser Kaskade ziehen. Schlußendlich liefert der Vergleich der hier untersuchten Coulomb-Explosion bei π^-C mit jener bei π^-N und μ^-O [Sie2000] Einblicke in die Unterschiede der Kaskade bei unterschiedlichem Z .

In Abb. 6.8 ist die potentielle Energie zweier Punktladungen $V_{C_2^+(r)}$ (in eV) gegen ihren Abstand r (in Å) für verschiedene Ladungszustände aufgetragen (s. Gl. 6.4). Jede Kurve steht für ein Produkt aus den beiden möglichen Ladungszuständen q_1^+ und q_2^+ . Durch einen Vergleich der aus den Messungen resultierenden potentiellen Energie des explodierenden Moleküles $V_{C_2^+}^{exp}$ (durchgezogene Linie) mit den Potentialkurven lassen sich diese Ladungszustände und der Kernabstand bei der Coulomb-Explosion von C_2H_2 abschätzen. Der anhand der gemessenen Doppler-Verbreiterung ermittelte Bereich der potentiellen Energie schneidet einige Kurven bei $r = R_{C_2}$.

Weiters zeigt Abb. 6.9 die Verbreiterung $\Gamma_D^{C_2H_2} = \Gamma_D$ (in meV) der Röntgenlinien im Komplex $\pi^{-12}C_{(5\rightarrow 4)}$ aus C_2H_2 , verursacht durch die Coulomb-Explosion zweier π^-C -Atome, in Abhängigkeit ihres Kernabstandes r bei der Explosion für verschiedene Ladungskanäle. Den Ausdruck für die Kurvenschar erhält man durch Gleichsetzen von Gl. 6.4 mit Gl. 2.31, Ersetzen von $v_{C_2H_2}^{C_2H_2}$ durch Gl. 2.30 und von $v_{\pi C}^{C_2H_2}$ durch $\frac{\Delta E_{Dop}^{C_2H_2}}{E_0} c$, Einsetzen von $m_{\pi^{12}C}$, $m_{^{12}C}$ und E_0 (s. Tab. A.2) und Umformen nach $\Delta E_{Dop}^{C_2H_2}$. Da $\Gamma_D^{C_2H_2}$ das Doppelte davon ist, erhält man (mit den entsprechenden Einheiten)

$$\Gamma_{D(r)} [\text{meV}] = 211,49249 [\sqrt{\text{Å}} \text{ mV}] \cdot \sqrt{\frac{q_1^+ [e] q_2^+ [e]}{r [\text{Å}]}}. \quad (6.5)$$

Konkrete Rechnungen in [Har1978] zeigen eine bevorzugt symmetrische Ionisation, sodaß Ladungszustände mit $|q_2^+ - q_1^+| > 1$ in der vorliegenden Analyse von vorneherein ausgeschlossen wurden. Aus den eingezeichneten Intervallen von $V_{C_2^+}^{exp} - \sigma_{V_{C_2^+}^{exp}}$ bis $V_{C_2^+}^{exp} + \sigma_{V_{C_2^+}^{exp}}$ bzw. von $\Gamma_D^{exp} - \sigma_{\Gamma_D^{exp}}$ bis $\Gamma_D^{exp} + \sigma_{\Gamma_D^{exp}}$ (jeweils gestrichelte Linien) können einige Bereiche der Kurvenschar eingegrenzt werden:

A: Abstände $r < R_{C_2}$ seien zunächst ausgeschlossen, da nicht geklärt ist, ob das Pion Kernladungen gegeneinander abschirmen kann, bevor das Molekül explodiert.

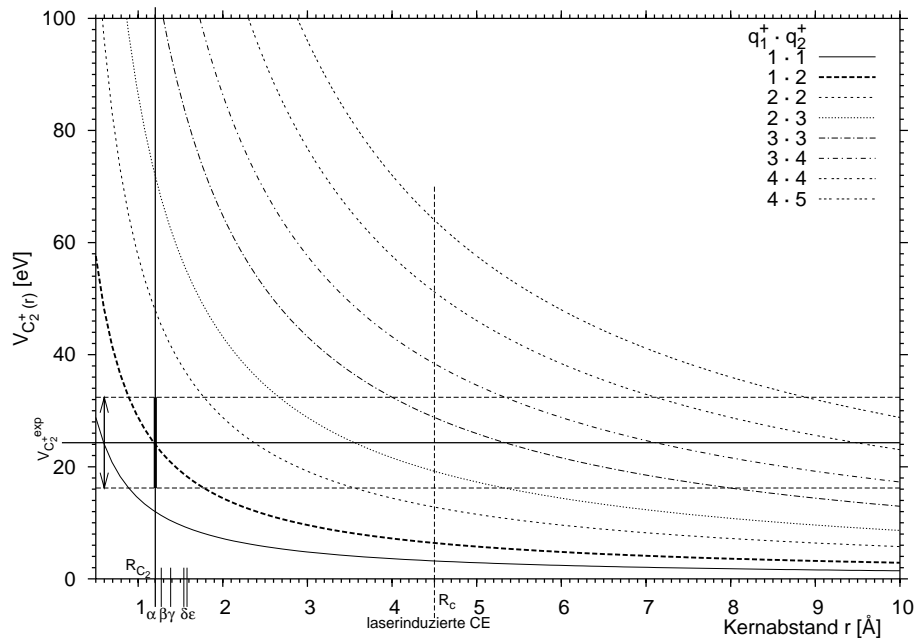


Abbildung 6.8: Potentielle Energie zweier Kohlenstoffatome $V_{C_2^+}(r)$ in Abhängigkeit ihres Kernabstandes r nach dem einfachen Punktladungs-Modell für verschiedene Ladungszustände. Eingezeichnet sind die Bindungslängen $\text{HC} \equiv \text{CH}$ ($R_{C_2} = \alpha = 1,203 \text{ \AA}$), $\text{HC} \equiv \text{CH}^+$ ($\beta = 1,273 \text{ \AA}$), $\text{HB} = \text{CH}_2$ ($\gamma = 1,385 \text{ \AA}$), $\text{OB} - \text{CH}_3$ ($\delta = 1,54 \text{ \AA}$), $\text{B} - (\text{CH}_3)_3$ ($\varepsilon = 1,578 \text{ \AA}$), sowie der Wert des Kernabstandes $R_c \approx 4,5 \text{ \AA}$ der laserinduzierten Coulomb-Explosion aus dem Modell von Chelkowski und Bandrauk (s. S. 27).

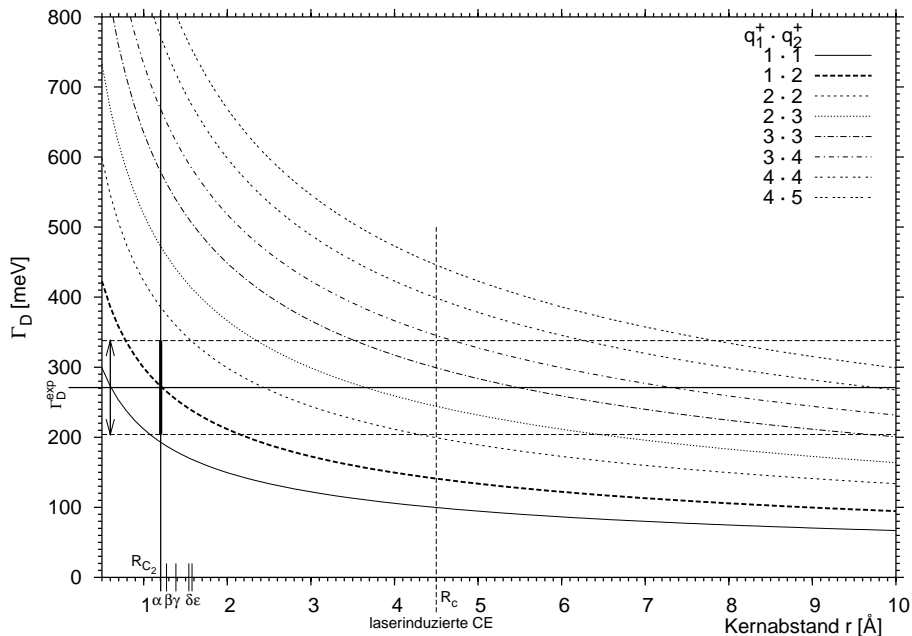


Abbildung 6.9: Verbreiterung der Linien im Röntgenkomplex $\pi^{-12}\text{C}_{(5 \rightarrow 4)}$ in Abhängigkeit des Kernabstandes r der $\pi^{-}\text{C}$ -Atome nach dem einfachen Punktladungs-Modell für verschiedene Ladungszustände. Eingezeichnete Markierungen wie bei Abb. 6.8.

B: Das Produkt $q_1^+ q_2^+$ hat minimal den Wert $1 \cdot 1 = 1$ und maximal den Wert $5 \cdot 6 = 30$, da eine elektrische Ladung des Kohlenstoffkerns im π^- -C-Fragment durch das schwere, in Kernnähe befindliche Pion nach außen hin abgeschirmt wird.

C: Das Band der Dopplerverbreiterung um $V_{C_2^+}^{exp}$ bzw. Γ_D^{exp} wird nur von einer Kurve bei R_{C_2} geschnitten, nämlich jene von $1 \cdot 2$. Die Kurve für den Ladungszustand $1 \cdot 1$ liegt nur knapp außerhalb des Fehlerbereiches. Die Bindungslängen einfacher und doppelter B – C Bindungen in organischen Bor-Verbindungen, die einem C_2 Molekül mit einer abgeschirmten Kernladung entsprechen, befinden sich nahe R_{C_2} ($1,3\text{--}1,6 \text{ \AA}$). Daher ist stark anzunehmen, daß die Coulomb-Explosion nahe R_{C_2} stattfindet.

Azetylen explodiert offensichtlich bei den Ladungszuständen $q_1^+ q_2^+ = 1 \cdot 1$ und $q_1^+ q_2^+ = 1 \cdot 2$ nahe R_{C_2} . Das bedeutet, daß dem Molekül 3 bzw. 4 Elektronen fehlen (eine Kernladung wird immer durch das Pion abgeschirmt).

Mithilfe der Abschätzung im Anhang A.2 läßt sich eine auf der Ladungsabstoßung basierende Separation der beiden C-Kerne, wie es das 2-Stufen-Modell der laserinduzierten Coulomb-Explosion von *Chelkowski* und *Bandrauk* (s. S.27) benötigt, als Erklärung für die Coulomb-Explosion bei exotischen Atomen ausschließen. Dieses Ergebnis bestätigt dieselbe Aussage für den Fall von π^- -N, die in [Sie1997] getroffen wurde. Eventuell handelt es sich bei diesem 2-Stufen-Prozeß um eine durch die Laserstrahlung hervorgerufene Resonanzerscheinung.

Die Abregung durch Auger-Elektronen nach dem Einfang des π^- vollzieht sich sehr schnell ($< 10^{-15}$ s). Die gesamte Kaskade ist ebenfalls schnell ($< 10^{-12}$ s) im Vergleich zur Separationszeit der Kerne (etwa 10^{-12} s) und läßt somit keine Zeit für stabile intermediäre Zustände bei $r > R_{C_2}$ (s. Anhang A.1 und A.2).

Da die Auger-Rate für e^- aus der L-Schale bei $n_\pi \approx 25$ größer als 10^{16} s^{-1} ist, benötigt das eingefangene π^- weniger als 1 fs, um die Bindungselektronen in C_2H_2 zu ionisieren [Sie2000]. Die Ladungen der Fragmente bei der Coulomb-Explosion in pionischem Kohlenstoff in C_2H_2 liegen bei 1 e bis 2 e, wobei die Aufbruchsdistanz bei der Bindungslänge der beiden C-Kerne liegt. Es weist darauf hin, daß die symmetrische Konfiguration $q_1^+ q_2^+ = 1 \cdot 2$ (4 Elektronen herausgeschlagen) von der Auflösung der 2 C – H-Bindungen und der schwächsten der 3 kovalenten C \equiv C-Bindungen kommt. Danach folgt in dem Fragment, in dem das π^- eingefangen wurde, die schnelle Auger-Emission der restlichen bzw. der durch electron-refilling eingefangenen Elektronen.

Die durchschnittliche Zeit zwischen Stößen im thermalisierten π^- -C ist rund 5710 fs (berechnet mit $m_{\pi C} = 2,018 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$, $\bar{c}_{\pi C} = 710,8 \frac{\text{m}}{\text{s}}$, $\bar{l}_{\pi C}$), aber nur 294 fs für die Fragmente, die aus der Coulomb-Explosion stammen. Daher kommt es während der Lebensdauer des $n_\pi = 5$ -g-Niveaus in π^- -C (664 fs, s. Tab. A.1) zu Stößen mit Nachbarmolekülen. Die Wirkungsquerschnitte für Kollision und refilling sind von der Größenordnung 10^{-18} m^2 . Darum können bei rund 1 bar nur wenige Stöße vor der Emission der $\pi^{-12}C_{(5g \rightarrow 4f)}$ Röntgenstrahlung auftreten. Daher ist die Geschwindigkeit $v_{\pi C}^{C_2H_2}$, die aus der Dopplerverbreiterung dieses Röntgenüberganges berechnet wurde, nahe der Geschwindigkeit bei der Coulomb-Explosion des Moleküles.

Bei Auftreten des $\pi^{-12}\text{C}_{(5g\rightarrow 4f)}$ Überganges ist die Elektronenschale des Systems $\pi^{-}\text{C}$ bei der Dichte äquivalent zu 1 bar vollkommen verarmt. Sonst wäre die Röntgenstrahlung stark unterdrückt aufgrund der kürzeren Auger-Lebenszeit des $\pi^{-}\text{C}_{5g}$ Niveaus (27 fs, s. Tab. A.1).

In Tab.6.11 wird ein Vergleich der in dieser Arbeit ermittelten Daten zur Coulomb-Explosion in exotischen Atomen mit den Werten aus [Sie2000] gemacht.

Übergang	Targetgas	E_0 [eV]	p_{TZ} [bar]	Γ_D [meV]	β [$\cdot 10^{-6}$]	$q_1^+ q_2^+$ [e ²]
$\pi^{-12}\text{C}_{(5g\rightarrow 4f)}$	C_2H_2	2973,8	0,63	271 ± 67	46 ± 11	2 ± 1
$\mu^{-16}\text{O}_{(5g\rightarrow 4f)}$	O_2	4024,0	1,05	$992\pm 98_{-277}^{+233}$	$123\pm 12_{-34}^{+29}$	$19\pm 4_{-11}^{+9}$
$\pi^{-14}\text{N}_{(5g\rightarrow 4f)}$	N_2	4055,4	0,62	$773\pm 24_{-74}^{+30}$	$95\pm 3_{-8}^{+3}$	$9,2\pm 0,6_{-1,7}^{+0,7}$
			1,0	$805\pm 30_{-117}^{+15}$	$99\pm 3_{-14}^{+2}$	$10,0\pm 0,8_{-2,8}^{+0,4}$
			2,5	$951\pm 23_{-62}^{+18}$	$117\pm 3_{-7}^{+2}$	$13,9\pm 0,7_{-1,8}^{+0,5}$

Tabelle 6.11: Vergleich der in dieser Arbeit gemessenen Werte mit früheren Daten zur Coulomb-Explosion in exotischen Atomen [Sie2000]. p_{TZ} von Kohlenstoff wurde aus den Messungen gemittelt, E_0 von Sauerstoff ist der Mittelwert der Übergänge $^{16}\text{O}_{(5g_{7/2}\rightarrow 4f_{5/2})}$ und $^{16}\text{O}_{(5g_{9/2}\rightarrow 4f_{7/2})}$

Auffallend dabei ist die rund drei Mal so große Dopplerverbreiterung Γ_D in $^{14}\text{N}_{(5g\rightarrow 4f)}$ verglichen mit jener in $\pi^{-12}\text{C}_{(5g\rightarrow 4f)}$, obwohl N nur ein Nukleon und ein e^{-} mehr als C besitzt. Dieser Unterschied dürfte aus Messungen zur Transferwahrscheinlichkeit des exotischen Teilchens zu verstehen sein:

Untersuchungen in myonischen Atomen und Molekülen [Kir1999] zeigten, daß die Dichteabhängigkeit der Kaskade in $\mu^{-}\text{N}$ und in $\mu^{-}\text{O}$, erzeugt durch den Einfang in N_2 bzw. O_2 , am stärksten ausgebildet ist. Im Gegensatz dazu reagiert die Kaskade von $\mu^{-}\text{C}$ in Kohlenwasserstoffen nicht so ausgeprägt auf Druckänderungen. Zurückgeführt wird dies auf den Einfang des μ^{-} in die Orbitale des H und den anschließenden Transfer $\mu^{-}\text{p} + \text{C} \rightarrow \text{p} + \mu^{-}\text{C}$ zum Kohlenstoff (s. auch 2.2.3), der hinab bis zu Drücken der Größenordnung 10 mbar nachgewiesen wurde.

In CH_4 können nur die H-Ionen das $\mu^{-}\text{C}$ System beschleunigen. Deswegen ist die Kaskade des μ^{-} in CH_4 nicht so ausgeprägt von der Dichte abhängig, wie in $\mu^{-}\text{N}$. Daß die Kaskade in den Messungen von [Kir1999] auch in C_2H_6 nur geringe Druckabhängigkeit zeigt, weist darauf hin, daß die Coulomb-Explosion der Kohlenwasserstoffe durch die Wasserstoffatome gedämpft wird.

Für $\mu^{-}\text{N}$ in N_2 schätzte [Kir1999] unter Annahme symmetrischer Ionisation $q_1^+ q_2^+$ zu $3 \cdot 3$ bis $4 \cdot 4$ und die daraus resultierende kinetische Energie der Fragmente auf einige 10 eV ab.

6.4.2 Antwortfunktion

Bei den Vorbereitungen zum Experiment R-98-01 ging man davon aus, daß CH_4 aufgrund seiner symmetrischen Struktur keinen Dopplereffekt aufweisen würde, woraufhin dieses Gas zum Messen der Antwortfunktion des Spektrometers gewählt wurde. Die vorliegenden Unter-

suchungen widerlegen jedoch diese Annahme, sodaß man davon aushgehen kann, daß auch in pionischem CH_4 eine Dopplerverbreiterung existiert. Dies wird unterstützt durch neueste Erkenntnisse [Hen2003] über die Antwortfunktion aus den Messungen mit He-ähnlichen Ar^{16+} in der ECRIT (s. S. 47).

Um die Breite des $\pi^{-12}\text{C}_{(5g\rightarrow 4f)}$ -Überganges in CH_4 mit der aus den ECRIT-Messungen stammenden Antwortfunktion zu erklären, ist ein zusätzlicher Doppleranteil nötig, der sich nur durch Coulomb-Explosion erklären läßt. Diese Dopplerverbreiterung in CH_4 entspricht einer kinetischen Energie des π^- -C-Atoms von 15 eV. Frühere Messungen der Coulomb-Explosion durch Ionenbeschuß zeigten eine geringere kinetische Energie der Fragmente von rund 0,9 eV [Man1976]. Die höhere Energie in pionischem CH_4 könnte durch eine asymmetrische Explosion verursacht sein. Wenn eines oder mehrere H-Atome vor den anderen aus dem Molekül ausbricht, könnte das Aufbrechen des verbleibenden CH_n Moleküles die nötige Beschleunigung verursachen.

Der in der vorliegenden Arbeit untersuchte Vergleich zwischen CH_4 und C_2H_2 ergibt eine um rund 12 eV höhere kinetische Energie der π^- -C-Fragmente in C_2H_2 . Addiert man beide Werte der kinetischen Energien (12 eV und obige 15 eV), d.h. würde man die Spektren von C_2H_2 mit der Antwortfunktion aus der ECRIT Messung vergleichen, dann müßten sich im Prinzip etwa folgende Werte für die hier abgeleiteten Parameter ergeben:

$$T_{\pi\text{C}} = 27 \text{ eV}; V_{\text{C}_2^+} = 54 \text{ eV}; q_1^+ q_2^+ = 4,5 \text{ e}^2; \beta = 69 \cdot 10^{-6}; v_{\pi\text{C}} = 20\,700 \frac{\text{m}}{\text{s}}; \Delta E_{\text{Dop}} = 205,4 \text{ meV}; \Gamma_D = 410,8 \text{ meV}; \bar{Z}_{\pi\text{C}} = 5,10 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}; \bar{\tau}_{\pi\text{C}} = 1,96 \cdot 10^{-13} \text{ s} = 196 \text{ fs}$$

6.5 Zusammenfassung der Ergebnisse

Folgend seien die Ergebnisse der hier vorliegenden Messungen zusammengefaßt:

	Wert	Min	Max	Einheit
$\Delta\Gamma$ - Si111	40 ± 22	18	62	meV
$\Delta\Gamma$ - Quarz10 $\bar{1}$	40 ± 20	20	60	meV
Verbreiterung - Si111	7,0			%
Verbreiterung - Quarz10 $\bar{1}$	6,4			%
Γ_D	271 ± 67	204	338	meV
ΔE_{Dop}	136 ± 34	102	169	meV
β	46 ± 11	34	57	$\cdot 10^{-6}$
$v_{\pi\text{C}}$	$13\,800 \pm 3\,300$	10\,500	17\,100	$\frac{\text{m}}{\text{s}}$
$T_{\pi\text{C}}$	$12,0 \pm 5,7$	6,2	17,7	eV
$V_{\text{C}_2^+}$	$24,3 \pm 8,1$	16,1	32,4	eV
$q_1^+ q_2^+$	2 ± 1	1	3	e^2
$\bar{Z}_{\pi\text{C}}$	$3,40 \pm 0,81$	2,59	4,21	$\cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$
$\bar{\tau}_{\pi\text{C}}$	294 ± 70	224	364	$\cdot 10^{-15} \text{ s}$

Tabelle 6.12: Zusammenfassung der Ergebnisse der pion-induzierten Coulomb-Explosion des C \equiv C Komplexes in C_2H_2 , gemessen durch Vergleich mit CH_4 .

Aus diesen Werten, die einen Vergleich der pionischen Kaskade in CH_4 und in C_2H_2 darstellen, geht hervor, daß in C_2H_2 die $\text{C} \equiv \text{C}$ -Bindung durch Coulomb-Explosion aufbricht. Davor haben beide Fragmente jeweils 1 bis 2 Elektronen durch das eingefangene Pion verloren. Die durch die Explosion verursachte erhöhte kinetische Energie (12 eV) verursacht einerseits eine Dopplerverbreiterung der ($5 \rightarrow 4$)-Röntgenübergänge in der Kaskade des Pions um 8% bzw. einen Doppleranteil im Linienprofil mit 271 meV Breite. Andererseits verursacht diese erhöhte Geschwindigkeit ($13\,800 \frac{\text{m}}{\text{s}}$) electron-refilling durch Stöße mit Nachbarmolekülen (mittlere Zeit zwischen zwei Stößen 294 fs) während der Lebensdauer des $n_\pi = 5$ -Niveaus in $\pi^- \text{C}$.

Kapitel 7

Ausblicke

7.1 Zukünftige Messungen

Mit Ende 2002 wurde der erste Schritt des Experiments R-98-01 — Datennahme mit π^- H — mit drei Strahlzeiten (Dezember 2000, Mai/Juni 2001, Mai/Juni 2002) abgeschlossen. Das vorläufige Resultat ist [Hen2003]:

$$\varepsilon_{1s} = 7,120 \pm 0,008^{+0,009}_{-0,008} \text{ eV} \quad \Gamma_{1s} < 0,850 \text{ eV}$$

Es wurde keine Dichteabhängigkeit der Energie des π^- H_(3p→1s)-Röntgenüberganges und somit auch kein Effekt auf ε_{1s} durch Bildung von Molekülen festgestellt. Diese molekularen Zustände würden Satellitenlinien mit dichteabhängigen Intensitäten bewirken. Allerdings wurde eine starke Abhängigkeit der Linienbreite vom Ausgangszustand des Überganges (Übergänge 4p → 1s, 3p → 1s, 2p → 1s) gemessen. Man nimmt an, daß durch die verschiedenen kinetischen Energien, die π^- H durch Coulombabregung in den verschiedenen Ausgangsniveaus erhalten kann, dafür verantwortlich sind.

Im Jahr 2004 wird mit der genauen Messung der Eigenschaften der Kristalle mit der ECRIT-Röntgenquelle der zweite Schritt des Experiments durchgeführt. Ziel hierbei ist die genaue Bestimmung der Antwortfunktionen für Bragg-Kristalle.

Im Jahr 2005 soll der dritte Teil des Experiments durchgeführt werden — die genaue Messung der Röntgenlinien der K-Übergänge (K α , K β , . . .) in μ^- H (keine Einflüsse der starken Wechselwirkung). Ziel ist die genaue Bestimmung der Dopplerverbreiterung durch Coulombabregung, um Γ_{1s} mit der angestrebten Genauigkeit (1%) zu ermitteln. Weitere Messungen der Lyman-Übergänge in π^- H mit hoher Statistik sind geplant [Mar2003, Got2003].

7.2 Zukünftige Untersuchungen der Coulomb-Explosion in exotischen Atomen

Auf der Basis der in dieser Arbeit beschriebenen Prozeduren bieten sich im Rahmen des Experiments R-98-01 weitere Untersuchungen bezüglich der Coulomb-Explosion an:

- In Fortführung der Untersuchungen der Coulomb-Explosion in N₂ und CH₄ bzw. C₂H₂

ist die Untersuchung der Coulomb-Explosion mit den gemessenen Spektren in π^- O (Übergänge $\pi^-^{16}\text{O}_{(6h\rightarrow 5g)}$, $\pi^-^{16}\text{O}_{(8i\rightarrow 6h)}$, $\pi^-^{18}\text{O}_{(6h\rightarrow 5g)}$ und $\pi^-^{18}\text{O}_{(8i\rightarrow 6h)}$) geplant.

- In Zukunft könnte eine unabhängige Bestimmung der Coulomb-Explosion in C_2H_2 durch Vergleich mit der aus den ECRIT-Messungen hervorgehenden Antwortfunktion erfolgen. Dabei könnte man auch das in 2.4.2 auf Seite 26 erwähnte Ansteigen des Verhältnisses der Intensitäten der nicht-zirkularen Übergänge (parallele bzw. Serien-Übergänge — siehe Fußnoten auf S. 21) zur Intensität des zirkularen Übergangs untersuchen. Dazu müßte man die Aufnahmen mit und ohne Coulomb-Explosion bei gleichem Targetdruck und mit gleicher Statistik (gleiche Meßdauer oder gleich viel Ladung vom Protonenstrahl) durchführen bzw. die Daten zur Coulomb-Explosion bei verschiedenen Targetdrücken sammeln.
- Aufgrund der mit dem Kristallspektrometer erreichbaren Auflösung würden sich die parallelen Übergänge genauer untersuchen lassen. Man könnte messen, ob die Dopplerverbreiterung in den zirkularen und parallelen Übergängen gleich groß ist (wovon man bisher immer ausgegangen ist), oder — aufgrund der unterschiedlichen Abfolge der vorhergehenden Übergänge — doch leicht unterschiedlich voneinander ist. Eine solche Bestimmung der Dopplerbreiten wäre ein wichtiger Input für die Theorie der Kaskade exotischer Atome.
- Die hier beschriebenen Analysemethoden könnten auch auf die bereits gemessenen Daten zur Coulomb-Explosion in π^- N und μ^- O ([Sie2000]) angewendet werden.

Mithilfe der hier beschriebenen Methode bieten sich weitere Messungen zur Coulomb-Explosion in exotischen Atomen/Molekülen an:

- Die kinetische Energie pro Fragment hat bei zwei Explosionspartnern einen maximalen Wert. Daher kann angenommen werden, daß die Auswirkungen der Coulomb-Explosion abnehmen, wenn mehr als 2 äquivalente Fragmente beteiligt sind. Messungen mit Molekülen der Art C_nH_m (z.B. Isobuthan C_4H_{10}) könnten einen Einblick vermitteln.
- Die Messung der Coulomb-Explosion in anderen (schwereren) symmetrischen und asymmetrischen binären exotischen Molekülen und der Vergleich mit der laserinduzierten bzw. ioneninduzierten Coulomb-Explosion in diesen Molekülen (z.B. in CO, Cl_2 oder I_2) würde das Wissen über diesen Effekt vertiefen. Besonders interessant wäre die Messung an NH_3 , um festzustellen, ob sich auch in diesem Molekül — ähnlich wie in CH_4 — eine Dopplerverbreiterung ergäbe. Außerdem wäre dann ein direkter Vergleich mit N_2 möglich.

Anhang A

Abschätzungen und Zahlenwerte

A.1 Dauer der Kaskade

Um die Dauer der Kaskade des π^- im Kohlenstoff ($Z = 6$) abzuschätzen, werden in Tab. A.1 die Raten der radiativen Übergänge $W_{rad,n_\pi}^{\pi C}$ und der Auger Übergänge $W_{Aug,n_\pi}^{\pi C}$ mittels Gl. 2.23 und Gl. 2.25 für jeden Übergang ($n_\pi \rightarrow n_\pi - 1$) berechnet. Das Reziproke dieser Raten ist die Dauer des jeweiligen Überganges ($t_{rad,n_\pi}^{\pi C}$ bzw. $t_{Aug,n_\pi}^{\pi C}$), woüber dann summiert wird. Da in Gl. 2.25 der photoelektrische Wirkungsquerschnitt des Atoms mit $Z - 1$, $\sigma_{\gamma e(E)}^{(Z-1)}$, von der Energie des Überganges E_{n_π} abhängt, berechnet man zuvor noch über Gl. 2.3 die reduzierte Masse $\mu_{\pi^{12}C}$ des $\pi^{-12}C$ -Atoms und über Gl. 2.4 die Bindungsenergie $B_{n_\pi}^{\pi C}$ des π^- im ^{12}C -Atom im jeweiligen Niveau n_π .

Die Vernachlässigungen in dieser Abschätzung sind, daß Gl. 2.23 nur für zirkulare radiative Übergänge gilt, und die Augerraten aus Gl. 2.25 nur für Emission von K-Elektronen gelten. Speziell in den oberen Niveaus ist dies nicht der Fall (Emission aus der L-Schale). Außerdem geht in letzterer Formel nur der K-Wirkungsquerschnitt ein. Zum Zwecke der groben Abschätzung wurden die Werte für den photoelektrischen Querschnitt von ^{11}B aus [ADT1973] entnommen.

Ausgangspunkt ist das atomare Niveau in π^-C beim Pion-Einfang ($n_\pi \approx 31$). Bis zu $n_\pi = 6$ wurde in der Rechnung die Anzahl der vorhandenen K-Elektronen auf $N_K = 2$ gesetzt, ab $n_\pi = 5$ auf $N_K = 1$. Die letzte Spalte $t_{K,n_\pi}^{\pi C}$ wählt aus den beiden Abregungsprozessen den wahrscheinlicheren aus und gibt $1/W$ in Pikosekunden an. Da zumindest ab $n_\pi = 5$ radiative Übergänge beobachtet werden, werden ab diesem Wert der Hauptquantenzahl nur die Strahlungsübergänge in Betracht gezogen. Die Summierung über die Zeiten t ergibt:

$$\sum_{n_\pi=1}^{31} t_{rad,n_\pi}^{\pi C} = 41\,268 \text{ ps} \quad \sum_{n_\pi=1}^{31} t_{Aug,n_\pi}^{\pi C} = 20,9 \text{ ps} \quad \sum_{n_\pi=1}^{31} t_{K,n_\pi}^{\pi C} = 3,502 \text{ ps}$$

Das bedeutet, daß die Kaskade in $\pi^{-12}C$ maximal **3,5 ps** dauert. Allerdings ist eher eine kürzere Zeit (Größenordnung einige hundert fs) wahrscheinlich, da in den oberen Niveaus Emission von e^- aus der L-Schale vorherrscht (hier nicht berücksichtigt).

n_π	$B_{n_\pi}^{\pi C}$ [keV]	$E_{n_\pi}^{\pi C}$ [keV]	$W_{rad,n_\pi}^{\pi C}$ [$\frac{1}{s}$]	$t_{rad,n_\pi}^{\pi C}$ [s]	$W_{Aug,n_\pi}^{\pi C}$ [$\frac{1}{s}$]	$t_{Aug,n_\pi}^{\pi C}$ [s]	$t_{K,n_\pi}^{\pi C}$ [ps]
31	0,137	0,009	$1,368 \cdot 10^8$	$7,309 \cdot 10^{-9}$	$2,205 \cdot 10^{12}$	$4,536 \cdot 10^{-13}$	0,453 6
30	0,147	0,010	$1,614 \cdot 10^8$	$6,197 \cdot 10^{-9}$	$2,600 \cdot 10^{12}$	$3,846 \cdot 10^{-13}$	0,384 6
29	0,157	0,011	$1,914 \cdot 10^8$	$5,225 \cdot 10^{-9}$	$3,084 \cdot 10^{12}$	$3,242 \cdot 10^{-13}$	0,324 2
28	0,169	0,013	$2,284 \cdot 10^8$	$4,378 \cdot 10^{-9}$	$3,681 \cdot 10^{12}$	$2,717 \cdot 10^{-13}$	0,271 7
27	0,181	0,014	$2,743 \cdot 10^8$	$3,645 \cdot 10^{-9}$	$4,421 \cdot 10^{12}$	$2,262 \cdot 10^{-13}$	0,226 2
26	0,195	0,016	$3,318 \cdot 10^8$	$3,014 \cdot 10^{-9}$	$5,346 \cdot 10^{12}$	$1,870 \cdot 10^{-13}$	0,187 0
25	0,211	0,018	$4,043 \cdot 10^8$	$2,473 \cdot 10^{-9}$	$6,515 \cdot 10^{12}$	$1,535 \cdot 10^{-13}$	0,153 5
24	0,229	0,020	$4,967 \cdot 10^8$	$2,013 \cdot 10^{-9}$	$8,004 \cdot 10^{12}$	$1,249 \cdot 10^{-13}$	0,124 9
23	0,250	0,023	$6,156 \cdot 10^8$	$1,624 \cdot 10^{-9}$	$9,921 \cdot 10^{12}$	$1,008 \cdot 10^{-13}$	0,100 8
22	0,273	0,027	$7,704 \cdot 10^8$	$1,298 \cdot 10^{-9}$	$1,242 \cdot 10^{13}$	$8,055 \cdot 10^{-14}$	0,080 5
21	0,300	0,031	$9,744 \cdot 10^8$	$1,026 \cdot 10^{-9}$	$1,570 \cdot 10^{13}$	$6,369 \cdot 10^{-14}$	0,063 7
20	0,330	0,036	$1,247 \cdot 10^9$	$8,021 \cdot 10^{-10}$	$2,009 \cdot 10^{13}$	$4,987 \cdot 10^{-14}$	0,049 8
19	0,366	0,042	$1,616 \cdot 10^9$	$6,190 \cdot 10^{-10}$	$2,603 \cdot 10^{13}$	$3,841 \cdot 10^{-14}$	0,038 4
18	0,408	0,049	$2,123 \cdot 10^9$	$4,709 \cdot 10^{-10}$	$3,422 \cdot 10^{13}$	$2,922 \cdot 10^{-14}$	0,029 2
17	0,457	0,059	$2,836 \cdot 10^9$	$3,527 \cdot 10^{-10}$	$4,569 \cdot 10^{13}$	$2,188 \cdot 10^{-14}$	0,021 9
16	0,516	0,071	$3,854 \cdot 10^9$	$2,594 \cdot 10^{-10}$	$6,211 \cdot 10^{13}$	$1,610 \cdot 10^{-14}$	0,016 1
15	0,587	0,087	$5,346 \cdot 10^9$	$1,871 \cdot 10^{-10}$	$8,614 \cdot 10^{13}$	$1,161 \cdot 10^{-14}$	0,011 6
14	0,674	0,108	$7,586 \cdot 10^9$	$1,318 \cdot 10^{-10}$	$1,222 \cdot 10^{14}$	$8,180 \cdot 10^{-15}$	0,008 2
13	0,782	0,136	$1,105 \cdot 10^{10}$	$9,048 \cdot 10^{-11}$	$7,377 \cdot 10^{13}$	$1,356 \cdot 10^{-14}$	0,013 6
12	0,918	0,174	$1,660 \cdot 10^{10}$	$6,022 \cdot 10^{-11}$	$6,570 \cdot 10^{13}$	$1,522 \cdot 10^{-14}$	0,015 2
11	1,092	0,229	$2,586 \cdot 10^{10}$	$3,866 \cdot 10^{-11}$	$1,866 \cdot 10^{15}$	$5,359 \cdot 10^{-16}$	0,000 5
10	1,321	0,310	$4,206 \cdot 10^{10}$	$2,377 \cdot 10^{-11}$	$1,308 \cdot 10^{15}$	$7,648 \cdot 10^{-16}$	0,000 8
9	1,631	0,433	$7,210 \cdot 10^{10}$	$1,387 \cdot 10^{-11}$	$1,105 \cdot 10^{15}$	$9,046 \cdot 10^{-16}$	0,000 9
8	2,065	0,632	$1,319 \cdot 10^{11}$	$7,580 \cdot 10^{-12}$	$6,996 \cdot 10^{14}$	$1,429 \cdot 10^{-15}$	0,001 4
7	2,697	0,974	$2,624 \cdot 10^{11}$	$3,812 \cdot 10^{-12}$	$3,376 \cdot 10^{14}$	$2,962 \cdot 10^{-15}$	0,003 0
6	3,670	1,615	$5,826 \cdot 10^{11}$	$1,717 \cdot 10^{-12}$	$2,371 \cdot 10^{14}$	$4,217 \cdot 10^{-15}$	0,004 2
5	5,285	2,973	$1,507 \cdot 10^{12}$	$6,637 \cdot 10^{-13}$	$3,660 \cdot 10^{13}$	$2,732 \cdot 10^{-14}$	0,663 7
4	8,258	6,423	$4,883 \cdot 10^{12}$	$2,048 \cdot 10^{-13}$	$1,333 \cdot 10^{13}$	$7,502 \cdot 10^{-14}$	0,204 8
3	14,681	18,352	$2,290 \cdot 10^{13}$	$4,367 \cdot 10^{-14}$	$1,253 \cdot 10^{12}$	$7,982 \cdot 10^{-13}$	0,043 7
2	33,033	99,099	$2,219 \cdot 10^{14}$	$4,507 \cdot 10^{-15}$	$5,730 \cdot 10^{10}$	$1,745 \cdot 10^{-11}$	0,004 5
1	132,132						

Tabelle A.1: Bindungsenergien des π^- , Energien der Übergänge, radiative Raten, Raten der Auger Übergänge und daraus abgeschätzte Dauer jedes Überganges $n_\pi \rightarrow n_\pi - 1$.

A.2 Welcher Bindungsabstand?

Wie erwähnt, wird beim Einfang des π^- ein e^- aus dem Molekül C_2H_2 geschlagen. Dadurch wird das Ion $C_2H_2^+$ gebildet, welches im Gleichgewicht eine andere Bindungslänge in der $C \equiv C$ -Bindung hat (1,273 Å statt 1,203 Å). Im folgenden wird abgeschätzt, ob sich die beiden Kohlenstoffkerne während der Dauer dieses Teils der Kaskade bis zum Aufbrechen der Bindung um 0,07 Å voneinander entfernen können. Dazu berechnet man den Impuls bzw. die kinetische Energie, die ein ^{12}C -Atom durch den Einfang eines π^- und die Emission eines e^- erhält, und die daraus resultierende Dauer zur Überbrückung von 0,07 Å.

Wie auf Seite 7 ausgeführt, wird das π^- in einem Radius eingefangen der vergleichbar ist mit dem Bohrradius der elektronischen L-Schale. Mittels Gl. 2.3 erhält man die reduzierten Massen der Systeme ($\pi^- + ^{12}C$) und ($e^- + ^{12}C$) $\mu_{\pi^{12}C}$ und $\mu_{e^{12}C}$ (s. Tab. A.2). Nimmt man den einfachsten Fall an, dann befinden sich π^- und ^{12}C vor dem Einfang in Ruhe

$$\vec{p} = \vec{p}_\pi + \vec{p}_C \approx 0 \quad E = -B_{(n_e=2)},$$

und danach sind $\pi^-^{12}C$ und das e^- in Bewegung

$$\vec{p}' = \vec{p}_{\pi C} + \vec{p}_e \quad E' = T_{\pi C} + T_e - B_{(n_\pi=31)} = \frac{p_{\pi C}^2}{2 m_{\pi C}} + \frac{p_e^2}{2 m_e} - B_{(n_\pi=31)}.$$

Aus der Impuls- und Energieerhaltung folgt

$$\begin{aligned} \vec{p}_{\pi C} &= -\vec{p}_e \quad \text{und} \\ B_{(n_\pi=31)} - B_{(n_e=2)} &= \frac{p_{\pi C}^2}{2 m_{\pi C}} + \frac{p_e^2}{2 m_e} = p_{\pi C}^2 \cdot 0,979 \frac{\text{MeV}}{c^2} \end{aligned}$$

Nach Gl. 2.4 ist für Kohlenstoff ($Z = 6$)

$$B_{(n_\pi=31)} - B_{(n_e=2)} = \frac{6^2 \alpha^2}{2} \left(\frac{\mu_{\pi C} c^2}{31^2} - \frac{\mu_{e C} c^2}{2^2} \right) = 15,05 \text{ eV}.$$

Damit ist

$$p_{\pi C} = \sqrt{15,05 \text{ eV} \cdot 979\,000 \frac{\text{eV}}{c^2}} = 3\,838,5 \frac{\text{eV}}{c}$$

$$\text{bzw. } T_{\pi C} = \frac{p_{\pi C}^2}{2 m_{\pi C}} = 6,5 \cdot 10^{-4} \frac{\text{eV}}{c^2}$$

Da bei dieser geringen kinetischen Energie die nicht-relativistische Formel $p_{\pi C} = (m_{\pi C}) \cdot v_{\pi C}$ genügt, kann man daraus die Geschwindigkeit des ($\pi^-^{12}C$)-Systems abschätzen. Umrechnen von $p_{\pi C}$ auf SI-Einheiten ($p_{\pi C} = 2,05 \cdot 10^{-24} \frac{\text{Js}}{\text{m}}$) ergibt diese Geschwindigkeit $v_{\pi C} = 101,5 \frac{\text{m}}{\text{s}}$. Mit dieser Geschwindigkeit überbrückt ein π^- -C-Kern die Distanz von 0,035 Å (d.h. beide C-Kerne entfernen sich voneinander um 0,07 Å) in $3,45 \cdot 10^{-14} \text{ s}$ (35 fs).

Unterstützt durch Abb. 2.5 ist bekannt, daß unmittelbar nach Einfang des π^- die Emission von Elektronen aus der L-Schale überwiegt und daß diese ähnlich rasch vor sich geht, wie die Emission von K-Elektronen im Maximum des K-Auger-Prozesses. Typische Raten dafür sind $\approx 10^{16} \text{ s}^{-1}$ wenn $n_\pi \approx 25$ [Sie2000]. Das würde heißen, daß die Abregungsprozesse in den oberen Niveaus rund 10^{-16} s oder kürzer dauern und daß das π^- Bindungselektronen in

weniger als 1 fs abschütteln kann. Deshalb kann man davon ausgehen, daß die beiden C-Kerne bis zum Eintreten der Coulomb-Explosion nicht den $C \equiv C$ -Gleichgewichts-Bindungsabstand in $C_2H_2^+$ erreichen können.

Die Überbrückung der Distanz von 0,6015 Å auf 2,25 Å für einen π^- -C-Kern (d.h. Ausweitung der gegenseitigen Abstandes von 1,203 Å auf 4,5 Å) würde $1,62 \cdot 10^{-12}$ s benötigen. Dies entspräche nach A.1 ungefähr der maximal möglichen Dauer der gesamten Kaskade. Selbst wenn sich die Kerne mit der Geschwindigkeit $v_{\pi C}$ voneinander entfernen würden, bräuchten sie für diese Strecke 12 fs. Das wäre länger, als die Zeit, die nötig ist, um die L-Schale beider C-Atome zu entvölkern. Somit kann man ausschließen, daß sich die C-Kerne bis zur Explosion auf 9 Bohr (4,5 Å) voneinander entfernen, wie es vom Modell der laserinduzierten Coulomb-Explosion nach *Chelkowski* und *Bandrauk* (s. S. 27) verlangt wird.

A.3 Wahrscheinlichkeit $W_{H(C_2H_2)}^{\pi}$ des nuklearen Einfangs im p des H von C_2H_2

In 2.2.3 auf S. 15 wurde ein Wert für die Wahrscheinlichkeit $W_{H(C_2H_2)}^{\pi}$ des nuklearen Einfangs des im C_2H_2 gestoppten Pions im p des Wasserstoffs des Moleküles (Reaktion $p\pi^- \rightarrow n\pi^0 \rightarrow 2\gamma$) angegeben, der sich aus folgender Abschätzung ergibt:

Gemäß dem LMM-Modell (*model of Large Mesic Molecules*) ist W_H^{π} für allgemeine Hydride Z_mH_n [Hor1981]:

$$W_H^{\pi} = a_Z \frac{nZ^{-2}}{mZ + n} \quad (A.1)$$

Dabei ist a_Z ein empirischer Faktor, der die Besonderheiten der chemischen Bindung des H im Molekül widerspiegelt. Darum sollte er für alle Verbindungen mit identischer Struktur in den Valenzschalen, z.B. die gesättigten Kohlenwasserstoffe C_mH_n mit $n = 2m + 2$ (Alkane), den gleichen Wert haben. Eine Analyse der experimentellen Daten an Alkanen zeigt, daß a_Z mit der Anzahl der C-Atome im Molekül sinkt. [Pet1976] erklärt dies mit einer steigenden Wahrscheinlichkeit für den Pion-Transfer (intern und extern) vom p zum C bei steigender C-Konzentration, speziell bei Werten $x = \frac{m}{n} \gtrsim 1$. [Pon1973] zeigt, daß für gesättigte Kohlenwasserstoffe die Gleichung

$$W_H^{\pi} = \alpha \frac{nZ^{-2}}{m\nu} \quad (A.2)$$

(ν ... Anzahl der Valenzelektronen) mit $\nu = 4$ und $\alpha \approx 1$ die experimentellen Ergebnisse für Alkane besser wiedergibt.

Setzt man für C_2H_2 die entsprechenden Parameter in Gl. A.2 ein, erhält man $W_{H(C_2H_2)}^{\pi} = 0,69\%$. Allerdings ist diese Gleichung streng genommen nur für gesättigte Kohlenwasserstoffe gültig. C_2H_2 ist aber durch seine $C \equiv C$ -Bindung ein zweifach ungesättigter Kohlenwasserstoff (Alkin). [Pet1976] weist darauf hin, daß W_H^{π} und auch a_C beim Übergang von $(CH_2)_n$ (Polyethylen) bzw. C_6H_{12} (Zyklohexan) zu C_2H_4 (Ethylen), welches eine andere Art der Bindung zwischen den C-Kernen (Doppelbindung) bei sonst gleichem $x = 1/2$ hat, sprunghaft sinken.

Der Übergang von gesättigten (Einfach-)Bindungen zu ungesättigten (Doppel-)Bindungen besteht im Ersetzen des sp^3 -Hybrid Orbitals, welches die C – H Bindung beeinflusst, durch ein sp^2 Orbital, in welchem der C elektronegativer ist und dadurch W_{H}^{π} reduziert wird.

Unter der Annahme, daß beim Übergang zu Alkinen (Dreifach-Bindung der C-Atome zueinander) ein analoger Sprung in a_{C} bei jeweils gleichem x stattfindet ($\frac{a_{\text{C}(\text{C}_6\text{H}_{12})}}{a_{\text{C}(\text{C}_2\text{H}_4)}} = \frac{a_{\text{C}(\text{C}_6\text{H}_6)}}{a_{\text{C}(\text{C}_2\text{H}_2)}}$, mit $a_{\text{C}(\text{C}_6\text{H}_{12})} = 2,06$, $a_{\text{C}(\text{C}_2\text{H}_4)} = 1,42$ und $a_{\text{C}(\text{C}_6\text{H}_6)} = 0,98$ [Hor1981]), erhält man $a_{\text{C}(\text{C}_2\text{H}_2)} = 0,68$. Setzt man diesen Wert zusammen mit den entsprechenden Parametern für C_2H_2 in Gl. A.1 ein, ergibt sich $W_{\text{H}(\text{C}_2\text{H}_2)}^{\pi} = 0,27\%$.

A.4 In der Analyse verwendete Zahlenwerte

Im folgenden seien in Tab. A.2 die für die Analyse und die vorhergehenden Abschätzungen wichtigsten Zahlenwerte gesammelt aufgelistet:

Größe	Wert	Unsicherheit	Einheit	Quelle
m_e	0,510 998 902	$\pm 0,000\,000\,021$	$\frac{\text{MeV}}{c^2}$	[PDG2002]
m_{π^-}	139,570 18	$\pm 0,000\,35$	$\frac{\text{MeV}}{c^2}$	[PDG2002]
u	931,494 013	$\pm 0,000\,037$	$\frac{\text{MeV}}{c^2}$	[PDG2002]
$m_{^{12}\text{C}}$	11 177,928 16	$\pm 0,000\,44$	$\frac{\text{MeV}}{c^2}$	$12 \cdot u$
$m_{\pi^{12}\text{C}}$	11 317,493 05	$\pm 0,000\,57$	$\frac{\text{MeV}}{c^2}$	Gl. 6.3
$\mu_{\pi^{12}\text{C}}$	137,848 97	$\pm 0,000\,35$	$\frac{\text{MeV}}{c^2}$	Gl. 2.3
$\mu_{e^{-12}\text{C}}$	0,510 975 563	$\pm 0,000\,000\,035$	$\frac{\text{MeV}}{c^2}$	Gl. 2.3
R_{C_2}	1,203	$\pm 0,001$	Å	[CRC1994]
c	299 792 458		$\frac{\text{m}}{\text{s}}$	[PDG2002]
E_0	2 973, 826 41		eV	[Got2001]
$\frac{1}{4\pi\epsilon_0}$	14, 399 643 91		$\frac{\text{ÅV}}{\text{e}}$	[PDG2002]
M_r	26,038	$\pm 0,001$	$\frac{\text{g}}{\text{mol}}$	[ALE1976]
N_A	$6,022\,141\,99 \cdot 10^{23}$	$\pm 0,000\,000\,47 \cdot 10^{23}$	mol^{-1}	[PDG2002]
k_B	$1,380\,650\,3 \cdot 10^{-23}$	$\pm 0,000\,002\,4 \cdot 10^{-23}$	$\frac{\text{J}}{\text{K}}$	[PDG2002]
$d_{\text{C}_2\text{H}_2}$	5, 7		Å	[ALE1976]
α	$7,297\,352\,533 \cdot 10^{-3}$	$\pm 0,000\,000\,027 \cdot 10^{-3}$		[PDG2002]
σ_T	0,665 245 854	$\pm 0,000\,000\,015$	barn	[PDG2002]

Tabelle A.2: Auflistung der für die Analyse und die Abschätzungen wichtigen Zahlenwerte.

Anhang B

Programmcodes

Das erste Programm ist das Hauptprogramm, welches zur Auswertung der Spektren verwendet wurde. Es besteht aus einer Verflechtung von zwei separaten Programmen (*Spektrum* und *Compar*), deren grundlegendste Funktionen (Generator für Zufallszahlen [Pre1992] und Spektrallinien-Erzeugung) dankenswerterweise von *D. Gotta* als Quellcode zur Verfügung gestellt wurden.

Das zweite Programm vollzieht die Suche nach dem Minimum einer Parabel durch 3 Punkte.

Mit dem dritten Programm läßt sich die Breite eines Peaks modellunabhängig bestimmen.

Die Programmcodes findet man auf der homepage des Autors unter <http://www.unet.univie.ac.at/~a9302331/DiplProgs.html>.

B.1 Das Programm „SpeComp“

Im ersten Teil wird 10 mal ein Spektrum aus 4 Linien erzeugt, daß aus einem Lorentz-Profil besteht, welches noch Gauß- und Doppler-verbreitet wird. Zuvor wird noch für jeden der 4 Peaks die Position, die Intensität, die Gaußbreite, die Lorentzbreite, die Breite der Dopplerbox und der Prozentsatz der Linie, der mit der Dopplerbox gefaltet werden soll, abgefragt, sowie der lineare Untergrund. Zur Vereinfachung der Arbeit wurden die meisten Werte als Konstanten im Code gesetzt, sodaß nur noch die Breiten variiert werden mußten. Nach Bildung der Mittelwerte aus diesen 10 Spektren kann man sich das Resultat anzeigen lassen, oder abspeichern.

Im zweiten Teil wird dieses simulierte Spektrum mit den gemessenen Daten verglichen, die zuvor als ASCII Datei eingelesen wurden. Um eine aussagekräftige Größe für die Güte der Simulation zu erhalten (χ^2), wird noch am Anfang der interessierende Bereich um die Spektrallinien festgelegt (*Region of interest - ROI*). Da die Simulation mit 100-facher Intensität in den Linien erzeugt wurde, muß sie noch auf das gemessene Spektrum normiert werden. Die Berechnung von χ^2 innerhalb der ROI erfolgt über diese Normierung. Anschließend kann man sich den Vergleich der Simulation mit den Meßdaten anzeigen lassen, sowohl als überlagerte Spektren, als auch als Residuen (Daten minus Simulation).

Da trotz der Mittelwertbildung über 10 Monte-Carlo Rechnungen die Werte für $\frac{\chi^2}{NDF}$ (NDF... Anzahl der Freiheitsgrade) bei gleichen Parametern noch immer stark schwankt, wird diese gesamte Prozedur 10 mal in einer Schleife durchlaufen. Erst der daraus ermittelte Mittelwert von χ^2 wurde als Indiz der Güte des Fits der Simulation an die Daten verwendet.

B.2 Das Programm „ParabMin“

Man gibt 3 x- und y-Werte ein, von denen man annimmt, daß sie entlang einer Parabel liegen (Methode der kleinsten Quadrate). Man erhält die Koeffizienten der Gleichung zweiter Ordnung, die Koordinaten des Minimums und die Koordinaten jener Werte, die 1σ auf der x-Achse zu beiden Seiten des Minimums liegen.

B.3 Das Programm „Breite“

Man liest ein Spektrum als ASCII-Datei ein und gibt einen Kanal, der sich noch links des zu untersuchenden Peaks befindet, ein. Ab dieser Position wird das Spektrum nach dem maximalen y-Wert YMAX durchsucht. Beiderseits des Peaks wird für je zwei Datenpunkte unterhalb und oberhalb von YMAX/2 eine Gerade gefittet, und daraus der zu YMAX/2 passende Wert x berechnet. Durch Differenz der Anzahl der Kanäle zwischen diesen beiden x-Werten erhält man die Breite FWHM.

Anhang C

Kollaboration

Auflistung der Kollaborationsmitglieder, die während der Strahlzeiten mitarbeiteten:

- Institut für Mittelenergiephysik (IMEP) der Österreichischen Akademie der Wissenschaften; Boltzmannngasse 3; A-1090 Wien; Österreich
 - A. Gruber, H. Fuhrmann, M. Giersch, A. Hirtl, T. Ishiwatari, J. Zmeskal
- Institut für Kernphysik; Forschungszentrum Jülich; D-52425 Jülich; Deutschland
 - D. Gotta, M. Hennebach
- Paul Scherrer Institut (PSI); CH-5232 Villigen PSI; Schweiz
 - L.M. Simons, V.E. Markushin, Y.-W. Liu, A. Dax
- Laboratoire Kastler-Brossel; CNRS Université Pierre et Marie Curie; 4 place Jussieu; F-75252 Paris Cedex 05; Frankreich
 - P. Indelicato, M. Trassinelli, Sé. Guilbaud, St. Guilbaud
- Laboratory of Material Science, Department of Physics; University of Ioannina; GR-45110 Ioannina; Griechenland
 - D.F. Anagnostopoulos
- Space Research Center, Department of Physics and Astronomy; University of Leicester; University Road; GB-Leicester LE1 7RH; Großbritannien
 - N. Nelms
- Laboratoire de Physique Appliquée, Faculté des Sciences & Techniques; Université Abdelmalek es-Saadi; B.P 414 Tanger; Marokko
 - A.J. Rusi el Hassani

Weitere Informationen auf der homepage der Kollaboration unter „Pionic Hydrogen @ PST“ auf <http://pihydrogen.web.psi.ch/>

Anhang D

Lebenslauf

Ich, Alexander Gruber, wurde am 18. Oktober 1972 als Sohn von Hedwig Gruber und Hellmuth Gruber in Wien geboren.

Nach Absolvierung der Volksschule in der GTVS Am Schöpfwerk (Wien XII) 1983 besuchte ich in das Bundesrealgymnasium Diefenbachgasse in Wien XV und maturierte ebendort im Jahr 1991 mit Auszeichnung.

Nach der Ableistung des Zivildienstes 1991/92 (MA12 - Soziale Dienste Wien, ASBÖ) verbrachte ich ein Jahr bei Tibetischen Flüchtlingen in Nordindien und arbeitete für die Tibetische Exilregierung in Dharamsala/Indien.

Im Oktober 1993 immatrikulierte ich an der Universität Wien und inskribierte die Studienfächer Astronomie und Physik. In beiden Fächern beendete ich im Jänner 1996 den ersten Studienabschnitt mit Auszeichnung. Im zweiten Abschnitt spezialisierte ich mich auf Kern- und Teilchenphysik.

1999 hatte ich die großartige Gelegenheit 3 Monate als Sommerstudent am *CERN* (Europäisches Forschungszentrum für Teilchenphysik) zu verbringen und so einen Einblick in die Arbeitsmethoden der Teilchenphysik zu erhalten.

Im August 1997 und im Juli 1998 arbeitete ich für das Institut für Mittelenergiephysik (*IMEP*) der Österreichischen Akademie der Wissenschaften und hatte so die Möglichkeit am DEAR Experiment am *LNF* (Laboratori Nazionali di Frascati dell'INFN) in Italien mitzuarbeiten.

Seit April 1999 arbeite ich durchgehend über freie Dienstverträge am IMEP. Dabei hatte ich Anteil an den Experimenten DEAR (*LNF*), ATRAP (*CERN*) und dem Experiment zu pionischem Wasserstoff (*PSI*), in dessen Rahmen auch diese Diplomarbeit entstand.

Anhang E

Danksagung

Mein herzlichster Dank gilt meinem Betreuer *Univ.Prof. Dr. Ing. Paul Kienle* für die interessante Themenstellung. Mein spezieller Dank geht an *Dr. D. Gotta* und *Dr. L.M. Simons* für die Idee zu diesen Messungen und die bereitwillige Beantwortung aller meiner Fragen während der Analyse.

Bedanken möchte ich mich auch bei *Dr. J. Zmeskal* für die hervorragende Zusammenarbeit und seine wertvollen Hinweise bezüglich experimenteller Methoden.

Weiters danke ich allen (ehem.) Mitgliedern des Instituts: *Dipl.Ing. Dr. M. Cargnelli, Mag. H. Fuhrmann, M. Giersch, Dipl.Ing. A. Hirtl, Dr. T. Ishiwatari, Dr. R. King, Mag. M. Stifter, Mag. R. Ursin* und speziell *Dipl.Ing. Dr. J. Marton* für das Korrigieren des umfangreichen Manuskripts.

Nicht vergessen möchte ich die Techniker des Instituts: *M. Geyer, Ing. R. Gsell, C. Müllner, Ing. H. Schneider, D. Stückler, A. Valenta* und *L. Stohwasser*, der die von mir begonnene Entwicklung der Targetzellen perfektioniert hat.

Last, but not least, I would like to thank all members of the π H collaboration for the valuable discussions during those weeks of beamtime.

Vor allem aber möchte ich meiner Frau *B.A. Tsering Yangchen* und meinen Eltern danken für ihr Verständnis und ihr beständiges Interesse am Fortgang meines Studiums, welches mich schlußendlich doch noch zum Abschluß führte.

Literaturverzeichnis

- [ADT1973] WM. J. Veigele: *Photon Cross Sections from 0.1 keV to 1 MeV for elements Z=1 to Z=94*; Atomic Data Tables, Vol. 5 (1973), 51–111
- [ALE1976] L’Air Liquide/Elsevier: *Encyclopédie des gaz*; Amsterdam, New York (1976)
- [Ana2003] D. F. Anagnostopoulos, D. Gotta, P. Indelicato, L. M. Simons: *Low-Energy X-Ray Standards from Hydrogenlike Pionic Atoms*; Phys. Rev. Let., Vol. 91 (2003), 240801
- [Bac1989] R. Bacher et al.: *Relevance of ionization and electron refilling to the observation of the M1 transition ($\gamma M1 : 2s - 1s$) in light muonic atoms*; Phys. Rev. A, Vol. 39 (1989), 1610–1620
- [Ber1992] Bergmann, Schaefer: *Lehrbuch der Experimentalphysik, Band 4 - Teilchen*; Walter de Gruyter Verl., Berlin (1992)
- [Bir2000] S. Biri, L. M. Simons, D. Hitz: *Electron cyclotron resonance ion trap: A hybrid magnetic system with very high mirror ratio for highly charged ion production and trapping*; Rev. o. Sci. Instr., Vol. 71 (2000), 1116–1118
- [Bre1989] W. H. Breunlich, P. Kammel, J. S. Cohen, M. Leon: *Muon Catalyzed Fusion*; Ann. Rev. Nucl. Part. Sci., Vol. 39 (1989), 311–356
- [Bur1953] G. R. Burbidge, A. H. de Borde: *The Mesonic Auger Effect*; Phys. Rev., Vol. 89 (1953), 189–193
- [Cat1979] R. C. Catura, R. C. Smithson: *Single photon x-ray detection with a CCD image sensor*; Rev. Sci. Instr., Vol. 50 (1979), 219–220
- [Che1975] S. C. Cheng et al.: *K^- mass from kaonic atoms*; Nucl. Phys. A, Vol. 254 (1975), 381–395
- [Che1995] S. Chelkowski, A. D. Bandrauk: *Two-step Coulomb explosions of diatoms in intense laser fields*; J. Phys. B, Vol. 28 (1995), L723–L731
- [Cor1995] C. Cornaggia, M. Schmidt, D. Normand: *Laser-induced nuclear motions in the Coulomb explosion of $C_2H_2^+$ ions*; Phys. Rev. A, Vol. 51 (1995), 1431–1437
- [CRC1994] ed. David R. Linde: *CRC Handbook of Chemistry and Physics*; Vol. 75 (1994/95)
- [Des1954] S. Deser, M. L. Goldberger, K. Baumann, W. Thirring: *Energy Level Displacements in Pi-Mesonic Atoms*; Phys. Rev., Vol. 96 (1954), 774–776

- [Dia1963] J. A. Diaz, et al.: *Nuclear fission induced by radiationless transitions in the MU-mesonic atoms Th²³², U²³⁵ and U²³⁸*; Nucl. Phys., Vol. 40 (1963), 54–56
- [Doe1963] J. H. Doede, R. H. Hildebrand, M. H. Israel, M. R. Pyka: *Moderation and Absorption Times of Negative Pions in Liquid Hydrogen*; Phys. Rev., Vol. 129 (1963), 2808–2811
- [Egg1965] J. Eggs, K. Ulmer: *Röntgenspektroskopie mit sphärisch gekrümmten Kristallen*; Z. f. angew. Phys., 20. Band, 2. Heft (1965), 118–128
- [Egi1984] T. v. Egidy, D. H. Jakubassa-Amundsen, F. J. Hartmann: *Calculation of muonic Coulomb-capture probabilities from electron binding energies*; Phys. Rev. A, Vol. 29 (1984), 455–461
- [Ehr1983] P. Ehrhart et al.: *An Experimental Investigation of the Pressure and Concentration Dependence of Muonic Coulomb Capture and Cascade in Gases*; Z. f. Phys. A, Vol. 311 (1983), 259–266
- [Eri1966] M. Ericson, T. E. O. Ericson: *Optical Properties of Low-Energy Pions in Nuclei*; Ann. of Phys., Vol. 36 (1966), 323–362
- [Eri1988] T. Ericson, W. Weise: *Pions and Nuclei*; International Series of Monographs on Physics, Vol. 74; Oxford Science Pub., New York (1988)
- [Fai1999] M. P. Faifman et al.: *Physics of the atomic cascade in kaonic hydrogen and deuterium*; Frascati Phys. Ser., Vol. XVI (1999), 637–641
- [Fer1947] E. Fermi, E. Teller: *The Capture of Negative Mesotrons in Matter*; Phys. Rev., Vol. 72 (1947), 399–408
- [Fie1960] T. H. Fields, G. B. Yodh, M. Derrick, J. G. Fetkovich: *Cascade Time of π^- in Liquid Hydrogen*; Phys. Rev. Lett., Vol. 5 (1960), 69–70
- [For1996] F. Foroughi: *$\pi E5$ secondary beam line*; PSI, Jun. 1996
- [Gab1997] G. Gabrielse et al.: *The Production and Study of Cold Antihydrogen*; Proposal presented to the CERN SPSLC (1997)
- [Gab2002a] G. Gabrielse et al.: *Background-Free Observation of Cold Antihydrogen with Field-Ionization Analysis of Its States*; Phys. Rev. Lett., Vol. 89 (2002), 213401
- [Gab2002b] G. Gabrielse et al.: *Driven Production of Cold Antihydrogen and the First Measured Distribution of Antihydrogen States*; Phys. Rev. Lett., Vol. 89 (2002), 233401
- [Gas1988] J. Gasser, M. E. Saino, A. Švarc: *Nucleons with Chiral Loops*; Nucl. Phys. B, Vol. 307 (1988), 779–853
- [Gem1981] D. S. Gemmell: *Using an electrostatic accelerator to determine the stereochemical structures of molecular ions*; IEEE Trans. Nuc. Sci., Vol. NS-28 (1981), 1168–1173
- [Gol1955] M. L. Goldberger, H. Miyazawa, R. Oehme: *Application of Dispersion Relations to Pion-Nucleon Scattering*; Phys. Rev., Vol. 99 (1955), 986–988

- [Got1998] D. Gotta et al.: *Measurement of the strong interaction width and shift of the ground state of pionic hydrogen*; Proposal for an experiment at PSI (1998)
- [Got2001] D. Gotta: private Mitteilung
- [Got2003] D. Gotta: *Precision Spectroscopy of Pionic Hydrogen*; Vortrag bei „EXA 02 - International Workshop on Exotic Atoms - Future Perspectives“, 28. –30. November 2002, Vienna, Austria; ed. P. Kienle, J. Marton, J. Zmeskal; Austrian Academy of Sciences Press (2003), 71–79
- [Gru2000] A. Gruber: *Klebstoffe und Klebetechnik*; Seminarvortrag SS 2000, IMEP (2000)
- [Gua1998] C. Guaraldo et al.: *The DEAR case*; Presented by the DEAR collaboration (1998)
- [Har1978] H. Hartung et al.: *An ab-initio calculation of the Coulomb explosion of N₂ after Heavy-Ion bombardement*; Phys. Lett. A, Vol. 69 (1978), 87–89
- [Har1989a] F. J. Hartmann: *Slowing-down and atomic capture of exotic particles in elements with $Z > 2$* ; Beitrag „Fifth course of the International School of Physics of Exotic Atoms, Electromagnetic Cascade and Chemistry of Exotic Atoms“, 14.–20. Mai 1989, Erice, Italien; ed. L.M. Simons, D. Horváth, G. Torelli; Plenum Press (1990), 23–40
- [Har1989b] F. J. Hartmann: *Exotic atom cascade processes in atoms with $Z > 2$* ; Beitrag „Fifth course of the International School of Physics of Exotic Atoms, Electromagnetic Cascade and Chemistry of Exotic Atoms“, 14.–20. Mai 1989, Erice, Italien; ed. L.M. Simons, D. Horváth, G. Torelli; Plenum Press (1990), 127–139
- [Hen2003] M. Hennebach: *Precision Measurement of Ground State Transitions in Pionic Hydrogen*; Dissertation, Universität Köln (2003)
- [Hor1981] D. Horváth: *Chemistry of Pionic Hydrogen Atoms*; Radiochimica Acta, Vol. 28 (1981), 241–254
- [Hostaph] Kalle Folien: *Datenblätter physikalischer Eigenschaften*; Hoechst High Chem und Mitsubishi Polyester Film GmbH
- [Hu1975] E. Hu et al.: *Mass and magnetic moment of the antiproton by the exotic atom method*; Nucl. Phys. A, Vol. 254 (1975), 403–412
- [Ind2000] P. Indelicato: private Mitteilung
- [Ind2001] P. Indelicato: private Mitteilung
- [Jei1992] M. Jeitler: *Epithermal effects in muon-catalyzed deuterium-tritium fusion*; Dissertation, Universität Wien (1992)
- [Jen2002a] T. S. Jensen: *Atomic Cascade in light Exotic Atoms*; Dissertation, Universität Zürich (2002)
- [Jen2002b] T. S. Jensen: private Mitteilung

- [Joh1931] H. H. Johann: *Die Erzeugung lichtstarker Röntgenspektren mit Hilfe von Konkavlinen.*; ZS. f. Phys., Band 69 (1931), 185–206
- [Kapton] DuPont Films: *Kapton[®] Polyimidfolie - Zusammenfassung der Eigenschaften*
- [Kir1999] K. Kirch et al.: *Muonic cascades in isolated low-Z atoms and molecules*; Phys. Rev. A, Vol. 59 (1999), 3375–3385
- [Kis1955] L. S. Kisslinger: *Scattering of Mesons by Light Nuclei*; Phys. Rev., Vol. 98 (1955), 761–765
- [Kni1983] J. D. Knight et al.: *Target-density effects in muonic-atom cascades*; Phys. Rev. A, Vol. 27 (1983), 2936–2945
- [Kot2000] F. Kottmann et al.: *Towards a measurement of the Lamb shift in muonic hydrogen*; PSI Scientific Report 1999 - Vol. I (2000), 17
- [Kot2001] F. Kottmann et al.: *The muonic hydrogen Lamb shift experiment at PSI*; Hyperf. Int., Vol. 138 (2001), 55–60
- [Laa1988] C. T. A. M. de Laat: *Strong and Electromagnetic Interactions in Heavy Exotic Atoms*; Dissertation, Technische Universität Delft (1988)
- [Lan2002] R. Landua et al.: *Production and detection of cold antihydrogen atoms*; Nature, Vol. 419 (2002), 456–459; advance online publication, 18 Sept. 2002 (doi:10.1038/nature01096)
- [Lau1997] B. Lauss: *Kaskade und Transfer von Myonen in Wasserstoff*; Dissertation, Universität Wien (1997)
- [Lau2002] B. Lauss: *CCD saturation in high-background environments*; Applied Radiation and Isotopes, Vol. 57 (2002), 867–873
- [Len1998] S. Lenz et al.: *A new determination of the mass of the charged pion*; Phys. Lett. B, Vol. 416 (1998), 50–55
- [Lud1997] J. Ludwig, H. Rottke, W. Sandner: *Dissociation of H_2^+ and D_2^+ in an intense laser field*; Phys. Rev. A, Vol. 56 (1997), 2168–2181
- [Man1976] R. Mann, F. Folkmann, K. O. Groeneveld: *Strong Molecular Effects in Heavy-Ion-Induced Carbon and Nitrogen K Auger Transitions*; Phys. Rev. Lett., Vol. 37 (1976), 1674–1677
- [Man2001] B. Manil et al.: *Precision Measurement of the Charged Pion Mass by High Resolution X-Ray Spectroscopy*; Hyp. Int., 132 (2001), 195–207
- [Mar1989] V. Markushin: *Cascade Processes in exotic atoms with $Z=1$* ; Beitrag „Fifth course of the International School of Physics of Exotic Atoms, Electromagnetic Cascade and Chemistry of Exotic Atoms“, 14.–20. Mai 1989, Erice, Italien; ed. L.M. Simons, D. Horváth, G. Torelli; Plenum Press (1990), 73–95

- [Mar2003] J. Marton: *Precision measurements in pionic hydrogen*; Vortrag bei „PANIC 02 - XVI International Conference on Particles and Nuclei“, 30. September–4. Oktober 2002, Osaka, Japan; Nucl. Phys. A, Vol. 721 (2003), 849c–852c
- [Men2001] L. I. Men'shikov, M. K. Eseev: *Some problems of the physics of exotic atoms*; Physics-Uspekhi, Vol. 44 (2001), 135–171
- [Mes1990] A. Messiah: *Quantenmechanik 2*, 3. Aufl.; Walter de Gruyter Verl., Berlin (1990)
- [Mor1999] T. Mori et al.: *Search for $\mu^+ \rightarrow e^+\gamma$ down to 10^{-14} branching ratio*; Research Proposal to PSI (1999)
- [Nel2002a] N. Nelms et al.: *Precision determination of pion mass using X-ray CCD spectroscopy*; Nucl. Inst. Meth. A, Vol. 477 (2002), 461–468
- [Nel2002b] N. Nelms: *A new determination of the charged pion mass and muon neutrino mass upper limit from exotic atom X-ray spectroscopy*; Ph.D.-Thesis, Universität Leicester (2002)
- [Nel2002c] N. Nelms et al.: *A large area CCD X-ray detector for exotic atom spectroscopy*; Nucl. Inst. Meth. A, Vol. 484 (2002), 419–431
- [NWC2000] J. K. Tuli: *Nuclear Wallet Cards*; National Nuclear Data Center (NNDC) (2000), BNL, Upton, New York
- [Oel1996] W. Oelert et al.: *Production of antihydrogen*; Phys. Lett. B, Vol. 368 (1996), 251–258
- [PDG2002] K. Hagiwara et al. (Particle Data Group): *Review of Particle Physics*; Phys. Rev. D, Vol. 66 (2002), 010001
- [Pet1976] V. I. Petrukhin et al.: *Interception of π^- mesons by carbon atoms in organic molecules*; Sov. Phys.-JETP, Vol. 42 (1976), 955–957
- [Pon1973] L. I. Ponomarev: *Molecular structure effects on atomic and nuclear capture of mesons*; Ann. Rev. Nucl. Sci., Vol. 23 (1973), 395–430
- [Pos1996a] J. H. Posthumus et al.: *The dissociation dynamics of diatomic molecules in intense laser fields*; J. Phys. B, Vol. 29 (1996), L525–L531
- [Pos1996b] J. H. Posthumus et al.: *Field-ionization, Coulomb explosion of diatomic molecules in intense laser fields*; J. Phys. B, Vol. 29 (1996), 5811–5829
- [Pre1992] W. H. Press et al.: *Numerical Recipes in Fortran - The Art of Scientific Computing*, 2. Aufl.; Cambridge University Pr., New York (1992)
- [Rin1985] G. A. Rinker: *Exotic Atoms a la Carte*; Vorlesungsskript von „Troisième Cycle de la Physique en Suisse Romande, Semestre d'été 1985“
- [Rin1996] B. Rinnhofer: *Bestimmung der Helium-Permeabilität von Polyamidfolien - Ein Vergleich zwischen Kapton[®] und Hostaphan[®]*; Diplomarbeit, Universität Wien (1996)

- [Röm1979] O. A. Neumüller: *Römpps Chemie-Lexikon, Band 3: H-L*; 8. Aufl. (1979), Franckh'sche Verlagshandlung, Stuttgart
- [Rud1993] G. Rudolf: *GRAPHX - Benutzerhandbuch*; Paul Scherrer Institut, CH-5232 Villigen (1993)
- [Rus1995] A.J. Rusi el Hassani et al.: *Measurement of absolute yields of Lyman transitions in pionic hydrogen and deuterium as a function of pressure*; Z. Phys. A, Vol. 351 (1995), 113–121
- [Sch1978] H. Schneuwly, V.I. Pokrovsky, L.I. Ponomarev: *On Coulomb Capture Ratios of Negative Mesons in Chemical Compounds*; Nucl. Phys. A, Vol. 312 (1978), 419–426
- [Sch1983] F. Scheck: *Leptons, Hadrons and Nuclei*; North-Holland Pub., Amsterdam (1983)
- [Sch1999] M. Schmidt et al.: *Fragment-emission patterns from the Coulomb explosion of diatomic molecules in intense laser fields*; Phys. Rev. A, Vol. 60 (1999); 4706–4714
- [Sch2002] P. A. Schmelzbach: *PSI Hochstrombeschleuniger*; PSI Hauszeitung „spectrum“ 1/2002, 15–19
- [Sgm2000] B. Siegmann et al.: *Kinetic energy release distributions in the Coulomb explosion of N₂ molecules induced by fast, highly-charged-ion impact*; Phys. Rev. A, Vol. 62 (2000), 022718
- [Shi1996] A. Shinohara et al.: *Negative-pion capture process and its chemical effects in some hydrocarbons*; Phys. Rev. A, Vol. 53 (1996), 130–138
- [Shi2000] A. Shinohara: *Formation Process of Pionic Atoms and Their Behavior in Material*; J. o. Nucl. a. Radiochem. Sci., Vol. 1 (2000), 33–37
- [Sie1997] T. Siems: *Kaskade und Coulomb-Explosion in leichten pionischen und myonischen Atomen*; Dissertation, Universität Köln (1997)
- [Sie2000] T. Siems et al.: *First Direct Observation of Coulomb Explosion during the Formation of Exotic Atoms*; Phys. Rev. Lett., Vol. 84 (2000), 4573–4576
- [Sig1994] D. Sigg: *CCDs as X-ray detectors in a high radiation environment*; Nucl. Inst. Meth. A, Vol. 345 (1994), 107–114
- [Sim1988] L. M. Simons: *Recent Results on Antiprotonic Atoms using a Cyclotron Trap at LEAR*; Physica Scripta; Vol. T22 (1988), 90–95
- [Sim1992] L. M. Simons: *Die Zyklotronfalle*; Phys. Bl., Vol. 48 (1992), 261–266
- [Sim1994] L. M. Simons et al.: *Exotic atoms and their electron shell*; Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, Vol. 87 (1994), 293–300
- [Sim2002] L. M. Simons et al.: *First measurements with the PSI ECRIT*; Vortrag bei „15th International Workshop on ECR Ion Sources - ECRIS'02“, 12. – 14. Juni 2002, Jyväskylä, Finnland; ed. J. Arje, H. Koivisto, P. Suominen; JYFL Research Report 4/2002, 122–125

- [Sim2003] L. M. Simons: private Mitteilung
- [Ste1995] J. V. Steele, H. Yamagishi, I. Zahed: *The Pion-Nucleon Sigma Term and the Goldberger-Treiman Discrepancy*; arXiv.org: hep-ph/9512233 (12/1995)
- [Tar2000] M. Tarisien et al.: *Ion-induced molecular fragmentation: beyond the Coulomb explosion picture*; J. Phys. B, Vol.33 (2000), L11–L20
- [Tom1966] Y. Tomozawa: *Axial-Vector Coupling Constant Renormalization and the Meson-Baryon Scattering Lengths*; Nuovo Cim. A, Vol. 46 (1966), 707–716
- [Vag1986] Z. Vager et al.: *Direct Determination of the Stereochemical Structure of CH₄⁺*; Phys. Rev. Lett. Vol. 57 (1986), 2793–2795
- [Vag1989] Z. Vager, R. Naaman, E. P. Kanter: *Coulomb Explosion Imaging of Small Molecules*; Science Vol. 244 (1989), 426–431
- [Var1990] D. Varidel et al.: *CCDs as low-energy X-ray detectors, II*; Nucl. Inst. Meth. A, Vol. 292 (1990), 147–155
- [Wei1966] S. Weinberg: *Pion Scattering Lengths*; Phys. Rev. Lett., Vol. 17 (1966), 616–621
- [Whe1947] J. A. Wheeler: *Mechanism of Capture of Slow Mesons*; Phys. Rev., Vol. 71 (1947), 320–321
- [XDB2001] A. C. Thompson et al.: *X-ray Data Booklet*; Center for X-Ray Optics and Advanced Light Source (2001), LBNL, Berkeley
- [Zaj1991] D. Zajfman et al.: *The structures of C₂H⁺ and C₂H₂⁺ as measured by Coulomb explosion imaging*; J. Chem. Phys., Vol. 94 (1991), 6377–6386