

Interner Bericht  
DESY F41-79/01  
Januar 1979

DESY-Bibliothek

26. MRZ. 1979

PLANUNG, AUFBAU UND VORBEREITENDE  
MESSUNG FÜR EIN EXPERIMENT  
'MÖSSBAUEREFFEKT MIT SYNCHROTRONSTRAHLUNG'

von

Rudolf Ruffer



Planung, Aufbau und vorbereitende  
Messungen für ein Experiment  
'Mößbauereffekt mit Synchrotronstrahlung'

Experimentelle physikalische Diplomarbeit  
des Fachbereiches Physik  
der Universität Hamburg

vorgelegt von  
Rudolf Ruffer

Hamburg  
1978

Inhaltsverzeichnis			
A. Einleitung	4	5.2. Neigung der Kristalloberfläche gegen die Netzebenen	58
B. Synchrotronstrahlung	6	5.3. Verbreiterung bzw. Verengung des Ausgangsstrahles auf Grund asymmetrisch geschnittener Kristalle und der Dicke der Kristalle	59
1.    Eigenschaften	6	5.4. Verschiebung der Mitte der Rockingkurve in Bezug auf den Braggwinkel	61
2.    Vergleich mit anderen Strahlungsquellen	14	5.5. Halbwertsbreite der Rockingkurve	63
C. Mößbauereffekt mit Synchrotronstrahlung	17	5.6. Verhältnis von Eingangsdivergenz zu Ausgangsdivergenz	66
1.    Möglichkeiten der Monochromatisierung	18	5.7. Reflektivität	68
2.    Geeignete Kristalle für die Mößbauerstreuung	21	5.8. Integrale Reflektivität	70
D. Die Dynamische Theorie der elektronischen Braggstreuung	24	6.    Übersichtstabellen und Nomenklatur	72
1.    Die Dielektrische Funktion	25	E. Das Mößbauerspektrometer	77
2.    Einkristalle	28	1.    Der mechanische Aufbau	80
2.1.  Die allgemeinen Gleichungen der dynamischen Theorie für einen Einkristall	28	1.1.  Das Goniometer	80
2.2.  Intensitätsverhältnisse	34	1.2.  Aufbau zur Messung von Rockingkurven	84
2.3.  Reflektivität	37	1.2.1. Der Aufbau	84
2.4.  Näherungen für den Bragg-Fall	39	1.2.2. Die Justierung	85
2.4.1. Reflexion ohne Absorption	39	1.2.3. Divergenz des einfallenden Strahles	86
2.4.2. Reflexion mit Absorption	44	2.    Der elektronische Aufbau	89
3.    Mosaikkristalle	46	2.1.  Der Schrittmotor und das Leistungsteil	90
3.1.  Die allgemeinen Gleichungen für einen Mosaikkristall	46	2.2.  Die Anpaßsteuerung	91
3.2.  Näherungen für einen dicken Mosaikkristall	47	2.3.  Der Vielkanalanalysator	93
4.    Integrale Reflektivität	50	2.4.  Das Interface	93
5.    Der Einfluß der Asymmetrie auf die Rockingkurve	52	F. Der Vormonochromator	95
5.1.  Geometrische Interpretation der Ergebnisse der Dynamischen Theorie	55	1.    Geeignete Kristalle	95
		2.    Messung von Rockingkurven	98
		2.1.  Graphit	98
		2.2.  Germanium	101
		3.    Der Doppelmonochromator	105

4.	Vorschlag eines Monochromators	108
G.	Zusammenfassung und Ausblick	112
H.	Anhang	115
	A. Lösungen der Differentialgleichung	115
	B. Amplitudenverhältnisse	117
	C. Mosaikkristall	119
I.	Literatur	121

#### A. Einleitung

Die Synchrotronstrahlung ist in Hinblick auf Intensität, Polarisation und Kollimation eine so hervorragende Strahlungsquelle, wie sie mit konventionellen Röntgen- oder Mößbauerquellen nur schwer erreicht werden kann. Jedoch erst der Speicherring mit seiner stabilen Strahl- lage und noch höheren Intensität als der eines Synchro- trons, läßt Versuche aussichtsreich erscheinen, den Möß- bauereffekt mit der Synchrotronstrahlung nachzuweisen. Als einer der ersten schlug Ruby 1974 /RUB74/ eine Ver- suchsanordnung vor, die die Zeitstruktur der Synchrotron- strahlung ausnutzt. Aber auch von anderen Gruppen werden entsprechende Experimente geplant.

Zum Nachweis des Mößbauereffektes ist ein monochromati- scher, polarisierter und paralleler Gamma-Strahl notwen- dig. Der Nachweis ist jedoch nur der erste Schritt in Richtung auf interessante Anwendungen auf verschiedenen Gebieten, von denen einige hier angeführt sind.

Er ermöglicht Strukturuntersuchungen, die mit anderen Me- thoden nur schwer oder gar nicht durchgeführt werden kön- nen. Diese Anwendung wird von Zhdanov und Kuz'min /ZHD68/ mit 'Mößbauerographie' bezeichnet. Im einzelnen handelt es sich dabei um die Bestimmung z.B. der Phase des Struk- turfaktors und der magnetischen und elektrischen Struktur der Kristalle.

Ein weiteres Gebiet sind Effekte, die durch die kollektive Wechselwirkung des elektromagnetischen Wellenfeldes mit den Kernen im Kristall zustande kommen. Ein Beispiel hier- für ist die Unterdrückung des inelastischen Kanals der Kernstreuung, d.h., ein unter dem Braggwinkel auf einen Einkristall treffender Gamma-Strahl dringt wesentlich tie- fer ein, als in einen nicht perfekten Einkristall oder in einen Einkristall, wenn die Braggbedingung nicht erfüllt ist. Dieser Effekt ist das Analogon zum Borrmanneffekt bei der elektronischen Braggstreuung.

Die Röntgen- bzw. Gamma-Optik, wie sie z.B. von Bonse et al /BON77/ betrieben wird, erhält ganz neue Dimensionen. Statt einer Kohärenzlänge von etwa  $10^{-6}$  m, wie man sie mit der bisher benutzten Strahlung erreicht, erhält man Kohärenzlängen von einigen Zentimetern bis zu einigen zehn Metern.

In dieser Arbeit werden die Überlegungen dargelegt, wie man aus der Synchrotronstrahlung des Speicherringes Doris bei Desy (Hamburg) einen monochromatischen, polarisierten und parallelen Gamma-Strahl erzeugen kann. Die theoretische Grundlage ist die Dynamische Theorie der Braggstreuung, bestehend aus der Theorie der elektronischen Braggstreuung und der MÖßbauerstreuung. Hier werden die Ergebnisse der Theorie soweit mitgeteilt, wie sie für die grundsätzliche Planung notwendig sind. Die Theorie der elektronischen Braggstreuung wird ausführlich dargestellt und die Ergebnisse in Hinblick auf dieses Experiment diskutiert. Die Dynamische Theorie und die Eigenschaften der Synchrotronstrahlung sind der Ausgangspunkt für die Planung eines MÖßbauerspektrometers, mit dem der gewünschte Gamma-Strahl erzeugt werden kann. Der Aufbau des MÖßbauerspektrometers und vorbereitende Messungen mit Teilen des Spektrometers werden im Anschluß an den theoretischen Teil behandelt.

## B. Die Synchrotronstrahlung

### 1. Eigenschaften

Werden geladene Teilchen (z.B. Elektronen, Positronen) beschleunigt, strahlen sie elektromagnetische Strahlung ab. In einem Beschleuniger oder Speicherring wird diese Strahlung Synchrotronstrahlung genannt. Die theoretische Behandlung wird u.a. bei Jackson /JAC75/ durchgeführt.

Die Rechnungen, Tabellen und Abbildungen, die im folgenden dargestellt sind, beziehen sich auf den Speicherring DORIS bei Desy (Hamburg).

Einige Daten des Speicherringes, die bei den Rechnungen benutzt werden:

Magnetradius	: 12.12 m
beschleunigte Teilchen	: Elektronen
Entfernung des Teilchenstrahles zum Synchrotronexperiment	: 40 m
Strom	: 10 mA
maximale horizontale Ausdehnung des Synchrotronstrahles im Labor	: 40 mm $\approx$ 1 mrad

Aus der Theorie erhält man folgende Ergebnisse, die im Rahmen dieser Arbeit von Wichtigkeit sind.

- Die Synchrotronstrahlung ist auf Grund der relativistischen Geschwindigkeit der Teilchen in deren Flugrichtung stark kollimiert.
- Die gesamte abgestrahlte Intensität der Strahlung ist proportional zur vierten Potenz der Teilchenenergie.
- Die Intensität der Strahlung unterhalb der charakteristischen Wellenlänge  $\lambda_c$  nimmt stark ab.  
 $R$  sei der Radius des Beschleunigers,  $E$  die Teilchenenergie und  $mc^2$  die Ruheenergie der Teilchen. Die charakteristische Wellenlänge  $\lambda_c$  ist definiert als

$$\lambda_c = \frac{4\pi R}{3} \left( \frac{E}{mc^2} \right)^{-3}$$

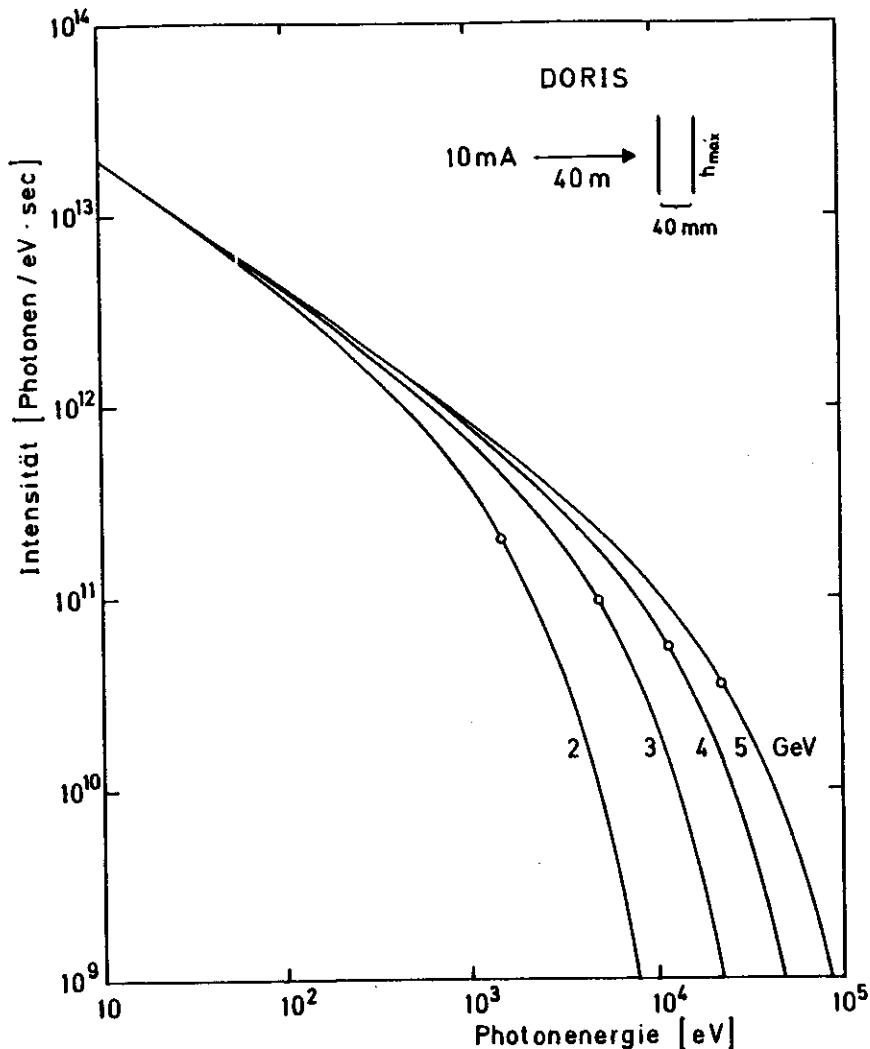


Abbildung 1: Intensität der Synchrotronstrahlung, die in 40 m Abstand von der Quelle mit einem 40 mm breiten Fenster unendlicher Höhe bei verschiedenen Elektronenenergien und bei 10 mA Elektronenstrom im Ring erfaßt werden kann. Die eingezeichneten Werte sind die charakteristischen Energien  $E_c$ .

In der Tabelle 1 sind für einige Teilchenenergien die charakteristische Wellenlänge  $\lambda_c$  und die zugehörige charakteristische Energie  $E_c$  der Strahlung zusammengestellt.

E (GeV)	$\lambda_c$ (Å)	$E_c$ (keV)
2.0	8.5	1.5
3.0	2.5	4.9
4.0	1.1	11.7
5.0	0.54	23.0

Tabelle 1: Charakteristische Wellenlänge  $\lambda_c$  und Energie  $E_c$  für einige Teilchenenergien E.

Die Abbildung 1 zeigt die Intensität der Strahlung in Abhängigkeit der Photonenergie für verschiedene Teilchenenergien (die horizontale Spaltöffnung  $h_{max}$  wurde dabei so groß gewählt, daß alle Photonen erfaßt werden.)

- Das Spektrum der Strahlung ist kontinuierlich.
- Es gibt eine definierte Zeitstruktur der Strahlung. In einen Speicherring werden die Teilchen nicht kontinuierlich, sondern in Teilchenpaketen - sogenannten Bunchen - eingefüllt. Bei Doris ist es möglich, maximal 480 Bunche mit einem Bunchabstand von 2 nsec und einer Bunchlänge von etwa 200 psec in den Ring zu füllen. Das Minimum ist der sogenannte 'Single-Bunch-Betrieb' mit nur einem Bunch von etwa 200 psec Länge im Ring, der 960 nsec für einen Umlauf benötigt.
- Die Ausdehnung des Elektronenstrahles kann in der vertikalen Richtung bis zu  $1 \text{ mm} \pm 5''$  und die Neigung zur Speicherringebene bis zu 0.15 mrad betragen.

Die geometrischen Verhältnisse der Abstrahlung der Synchrotronstrahlung werden in Abbildung 2 gezeigt.

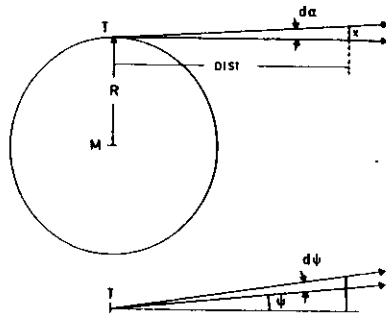


Abbildung 2:  
oben: Abstrahlung in der Synchrotronebene in jede Tangential-Richtung  
unten: Abstrahlung senkrecht zur Synchrotronebene

In Tangentialrichtung ist die Speicherringebene überall von der Synchrotronstrahlung ausgefüllt. Für die Anwendung wird ihre Ausdehnung  $x$  nur durch die geometrischen Abmessungen der Strahlrohre usw. beschränkt. Senkrecht zur Speicherringebene nimmt die Intensität jedoch rasch mit zunehmenden Winkel  $\psi$  ab. In der Abbildung 3 ist für eine Photonenenergie von 14.4 keV für verschiedene Teilchenenergien die Intensität und der Polarisationsgrad  $G$  der Strahlung in Abhängigkeit des Winkels  $\psi$  für Spaltöffnungen  $d\psi$  von  $40 \mu\text{m} \pm 10^{-6}$  rad aufgetragen.

$I_p$  sei der Anteil an der Intensität, dessen E-Vektor parallel und  $I_s$  sei der Anteil, dessen E-Vektor senkrecht zur Synchrotronebene schwingt. Der Polarisationsgrad  $G$  ist dann definiert als:

$$G = \frac{I_p - I_s}{I_p + I_s}$$

Man sieht, daß nur ein kleiner Winkelbereich von  $\Delta\psi = 0.4$  mrad ausgeleuchtet wird, und daß in der Strahlebene die Photonen zu 100% linear polarisiert sind.

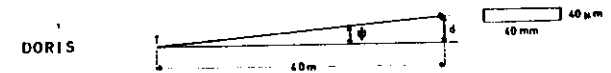
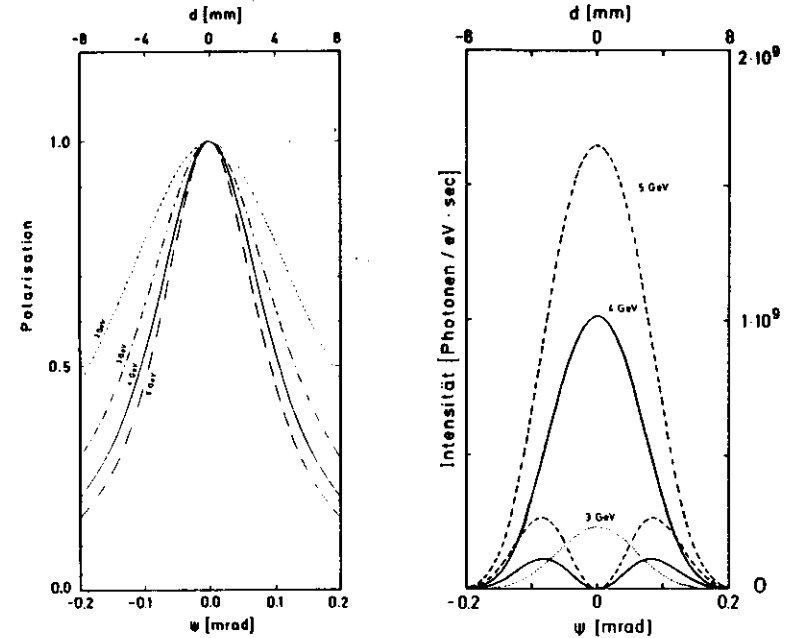


Abbildung 3:

Die linke Abbildung zeigt die Polarisation und die rechte die Intensität der Synchrotronstrahlung in Abhängigkeit des Winkels  $\psi$  für verschiedene Elektronenenergien. Es wurde eine Photonenenergie von 14.4 keV, ein Elektronenstrom von 50 mA und eine Blendenöffnung in 40 m Abstand vom Tangentialpunkt T von  $40 \mu\text{m} \times 40 \text{mm}$  angenommen.

In der rechten Abbildung zeigen diejenigen Kurven, die bei  $\psi = 0$  ihr Maximum haben, die Intensitätsverteilung des Strahlungsanteiles, dessen E-Vektor parallel zur Speicherringebene schwingt, während die Kurven, die bei  $\psi = 0$  ihr Minimum haben, den Anteil wiedergeben, dessen E-Vektor senkrecht zur Speicherringebene schwingt.



Für M88bauerexperimente ist der M88bauerübergang des Fe-57 mit einer Übergangsenergie von 14.4 keV interessant. Für diese Energie zeigt die Abbildung 4 in Abhängigkeit der Spaltöffnung den Verlauf der Intensität und den Polarisationsgrad G der Strahlung für verschiedene Teilchenenergien, und die Abbildung 5 den prozentualen Anteil der vertikal polarisierten Komponente  $I_p$  an der Gesamtintensität der Synchrotronstrahlung.

Ein wichtiges Ergebnis kann man aus den Abbildungen ablesen. Für Spaltöffnungen gleicher Größe nimmt der Polarisationsgrad bei steigender Teilchenenergie ab.

Will man möglichst alle verfügbaren Photonen übertragen, muß man die Spaltöffnung genügend groß machen und verschlechtert damit den Polarisationsgrad. In der Tabelle 2 sind die Verhältnisse unter der Annahme, daß 90% der Photonen erfaßt werden, zusammengestellt.

Teilchenenergie (GeV)	Spaltöffnung (mm)	Intensität ( $10^{10} \frac{\text{PHOTONEN}}{\text{EV} \cdot \text{SEC}}$ )	Polarisationsgrad (%)	$\frac{I_p}{I_p + I_s}$ (%)
2.5	3.4	0.08	95.8	96.6
3.0	3.9	0.64	89.6	94.6
4.0	4.4	3.4	82.2	90.9
5.0	4.8	6.4	75.4	87.6

Tabelle 2: Intensität, Polarisationsgrad und Spaltöffnung für den Fall, daß 90% der maximal möglichen Intensität der Synchrotronstrahlung bei einer Photonenenergie von 14.4 keV erfaßt wird für verschiedene Elektronenenergien und einem Strom von 10mA.

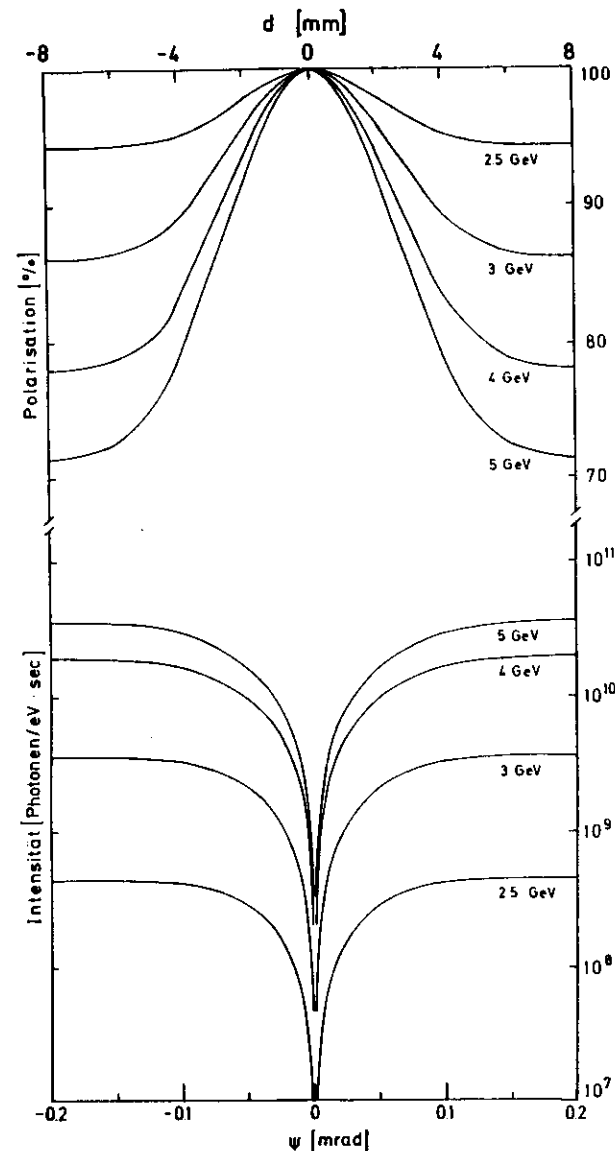


Abbildung 4: Die Abbildung zeigt oben den Polarisationsgrad G und unten die Intensität in Abhängigkeit der Spaltöffnung d bzw.  $\psi$  bei einer Photonenenergie von 14.4 keV. (Doris 10 mA; siehe auch Abbildung 5)

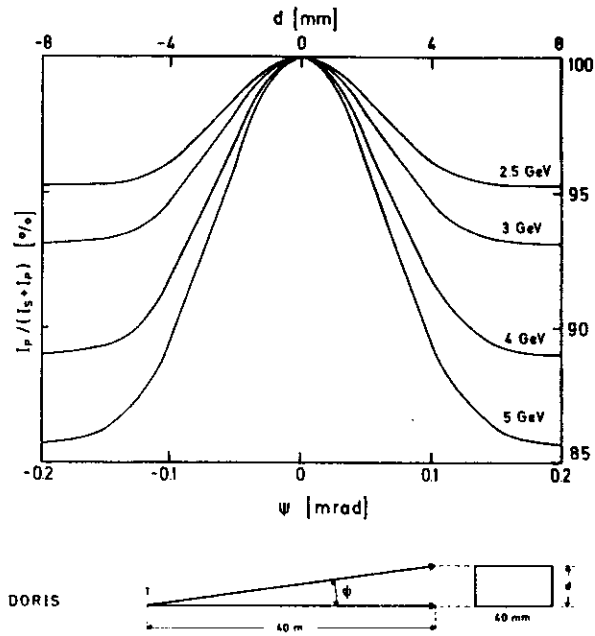


Abbildung 5:  
Die Abbildung zeigt den Anteil an der Gesamtintensität, dessen E-Vektor parallel zur Speicherringebene schwingt, in Abhängigkeit der Spaltöffnung  $d$  bzw.  $\psi$  bei einer Photonenenergie von 14.4 keV.

Die Rechnungen wurden mit Hilfe eines Rechenprogrammes von R.Klucker durchgeführt. Es geht von monoenergetischen Elektronen aus, die sich nur in der Speicherringebene bewegen. Synchrotron- und Betatronschwingungen werden nicht berücksichtigt. Weitere Einzelheiten über die Synchrotronstrahlung bei Desy sind in /SYN77/ beschrieben.

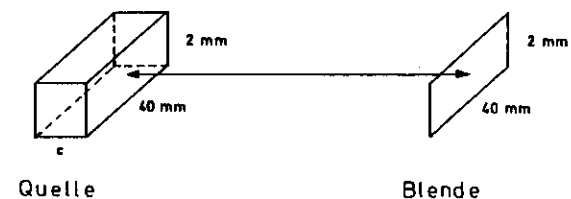
## 2. Vergleich mit anderen Strahlungsquellen

### Röntgenröhre:

Im Gegensatz zu der Synchrotronstrahlung wird die Röntgenstrahlung einer Röntgenröhre nahezu isotrop abgestrahlt. Das bedeutet, daß bei Experimenten, bei denen die Divergenz des Photonenstrahles klein sein soll, ein großer Teil der Strahlungsleistung von Röntgenröhren verloren geht. In /SYN77/ wird gezeigt, daß das Bremskontinuum einer Röntgenröhre (45 kV, 50 mA) mehrere Größenordnungen unter der Strahlungsleistung des Speicherringes Doris liegt (für Elektronenenergien größer 2 GeV). Aber auch die intensiven charakteristischen Linien einer Röntgenröhre erreichen nicht immer die Intensität der Synchrotronstrahlung.

### Mößbauerquelle:

Die wirksame Aktivität einer Mößbauerquelle wird durch Photoabsorption und Mößbauerabsorption beschränkt. Eine Mößbauerquelle, die wie die Synchrotronstrahlung Gamma-Quanten mit einer Divergenz von  $10^{-7}$  sterad aussendet, hat maximal folgende Abmessungen.



Die maximale Dicke  $c$  der Quelle ergibt sich aus dem Wirkungsquerschnitt für Photoeffekt  $\sigma_{el}$  und dem für Mößbauer-effekt  $\sigma_{MB}$  zu

$$c = \frac{1}{n \sigma_{el} + n(t) \sigma_{MB}}$$

dabei ist  $n$  die Anzahl der Atome in der Quelle und  $n(t)$  die Anzahl der gebildeten Mößbauerkerne zum Zeitpunkt  $t$ .  
Unter der Annahme, daß zum Zeitpunkt  $t = 0$  alle Kerne Co-57 Kerne sind, ergibt sich für die Dicke  $c$  der Quelle:

$$c(t=0) = 1.6 \cdot 10^{-5} \text{ m}$$
$$c(t=8d) = 1.8 \cdot 10^{-6} \text{ m}$$

Die Anzahl der emittierten 14.4 keV Quanten des Fe-57 ergibt sich aus

$$A(t) = -\lambda N_0 \exp(-\lambda t)$$

Die Zerfallswahrscheinlichkeit  $\lambda$  ist durch den Zerfall des Co-57 bestimmt, da dieses langlebige Niveau (Halbwertszeit 270 d) die nachfolgende Aktivität bestimmt.  $N_0$  ist die Anzahl der Co-57 Kerne zur Zeit  $t=0$ .

Für eine Quelle mit den obigen Abmessungen ergibt sich zum Zeitpunkt  $t=0$  eine Aktivität von etwa 100Curie und damit eine Zählrate von (Divergenz des Gamma-Strahles  $10^{-7}$  sterad):

$$I(t=0) = 1370 \text{ Photonen/sec}$$
$$I(t=8d) = 192 \text{ Photonen/sec}$$

In dem gleichen Raumwinkel und dasselbe  $\Gamma$  ( $\Gamma(\text{Fe-57}) = 4.67 \cdot 10^{-9} \text{ eV}$ ) fallen bei der Synchrotronstrahlung von Doris bei 5 GeV und 10 mA etwa 150 Photonen/sec. Es ergibt sich also eine vergleichbare Intensität. Die Annahmen, die bei der Berechnung der Aktivität der Mößbauerquelle zugrunde gelegt werden, sind sehr optimistisch. Hinzu kommt, daß die Aktivität der Quelle in erster Näherung weiter linear abnimmt, d.h., sie müßte ständig neu aktiviert

werden. Bei der Synchrotronstrahlung kann man dagegen durch einen höheren Elektronenstrom (dieser wird bei Doris auch erreicht) einen Faktor 10-30 gewinnen. (Dem niedrigen Strom von 10 mA liegt die Annahme eines 'Single-Bunch-Betriebes' zugrunde.)

### C. Mößbauereffekt mit Synchrotronstrahlung

Einen monochromatischen, polarisierten und parallelen Gamma-Strahl kann man unter Ausnutzung der Braggstreuung aus der Synchrotronstrahlung herstellen. Die theoretischen Grundlagen liefert die Dynamische Theorie der kohärenten Streuung von Gamma-Strahlen an Einkristallen. Zwei unterschiedliche Mechanismen sind für diese Streuung verantwortlich, die Wechselwirkung der Gamma-Strahlen mit der Elektronenhülle, elektronische Braggstreuung oder Rayleighstreuung genannt (siehe z.B. /ZAC45/), und die Wechselwirkung der Gamma-Strahlen mit den Kernen durch resonante Kernanregung, Mößbauerstreuung oder Kernbraggstreuung genannt (siehe z.B. /HAN68/, /HAN69/ und /HAN74/). Die Ergebnisse der Theorie werden hier soweit mitgeteilt, wie sie für die Planung eines Experimentes zur Erzeugung eines solchen Gamma-Strahles notwendig sind.

Für die Braggstreuung an Einkristallen ergeben sich Reflexbreiten in der Größenordnung von einigen bis zu etwa 30 Bogensekunden. Das entspricht einer Monochromatisierung eines einfallenden Gamma-Strahles auf etwa 1-10 eV. Die Reflektivität eines Einkristalles beträgt in der Regel 70%-100%. Bei der Braggstreuung mit einem Braggwinkel von  $\theta_B = 45$  Grad wirkt der Kristall als Polarisator. Der Gamma-Strahl ist nach der Streuung zu 100% linear polarisiert.

Für Mosaikkristalle können sich sehr viel größere Reflexbreiten ergeben (z.B. Graphit 30'). Die Reflektivität ist in der Regel jedoch kleiner als bei Einkristallen.

Bei der Mößbauerstreuung ergibt sich je nach Wahl des Experimentes die Polarisation erhaltende oder die Polarisation mischende Streuung. Polarisationserhaltende Streuung ergibt sich, wenn man Kristalle benutzt, in denen die Kernniveaus unaufgespalten sind (z.B. FeTi), oder das Magnetfeld, daß eine Aufspaltung bewirkt, eine ausgezeichnete Richtung, nämlich die Richtung senkrecht zur Streuebene, hat. Führt man analog zu der elektronischen Streulänge

eine Kernstreulänge ein, läßt sich der Fall der polarisationserhaltenden Streuung mit dem Formalismus der elektronischen Braggstreuung behandeln. Die Kernstreulänge ist jedoch etwa 100-mal größer als die elektronische Streulänge. Dieser einfache Fall wird auch von O'Connor /CON69/ beschrieben.

Für die polarisationsmischende Streuung ergibt sich eine aufwendigere Theorie, da man die Wechselwirkung aller Polarisationsrichtungen des einfallenden und ausfallenden Strahles berücksichtigen muß.

Die Streucharakteristik wird durch den Multipolcharakter bestimmt und kann daher auch andere Formen annehmen als bei der elektronischen Braggstreuung, die eine reine E1-Streuung ist. Auf Grund der Lebensdauer der Kernniveaus tritt die Mößbauerstreuung im Gegensatz zur elektronischen Braggstreuung verzögert auf. Außerdem bestimmt die Lebensdauer wegen der Unschärferelation die Energieunschärfe der gestreuten Gamma-Quanten. Sie liegt in der Größenordnung von  $10^{-8}$  eV, und bestimmt damit den Grad der Monochromatisierung, der mit Hilfe der Mößbauerstreuung erreicht werden kann.

#### 1. Möglichkeiten der Monochromatisierung

Die hohe Intensität der Synchrotronstrahlung und die damit verbundene Wärme- und Strahlenbelastung, läßt es sinnvoll erscheinen, das Monochromatisieren in zwei Schritten, der Vormonochromatisierung und der Feinmonochromatisierung, durchzuführen. Nach der Vormonochromatisierung unter Ausnutzung der elektronischen Braggstreuung, erhält man ein Energieband von 1-10 eV mit einer Intensität von  $10^{10}$ - $10^{11}$  Photonen/sec (für 14.4 keV, Doris 4 GeV und 10 mA). Benutzt man zudem noch eine oder mehrere  $90^\circ$ -Streuungen, verbessert man den Polarisationsgrad der Synchrotronstrahlung. Der zweite Schritt, Monochromatisieren des 1-10 eV breiten Energiebandes zu einem Energieband von etwa  $10^{-8}$  eV, kann mit der Mößbauerstreuung erreicht werden. Das Problem ist, die elektronische Streuung zu unterdrücken. Wie gut man die unerwünschten Gamma-Quanten unterdrücken muß, hängt

von der Wahl des nachfolgenden Experimentes ab. Um den Mößbauerereffekt nachzuweisen, genügt sicher eine geringere Unterdrückung als für einen Gamma-Strahl, mit dem man z.B. Gamma-Optik betreiben will.

Im folgenden werden vier mögliche Methoden beschrieben.

#### a) 90°-Streuung

Die unterschiedliche Streu charakteristik einer E1-Strahlung (z.B. elektronische Braggstreuung) und einer M1-Streuung (z.B. Mößbauerübergang im Fe-57) kann man ausnutzen, um den elektronischen Braggreflex zu unterdrücken. Ein 100% linear in der Streuebene polarisierter Gamma-Strahl läßt bei einer 90°-Streuung, d.h., einer Braggstreuung mit einem Braggwinkel von  $\theta_B = 45^\circ$ , nur eine M1-Streuung zu.

Die Problematik dieser Methode liegt in der Forderung nach einem 100% linear polarisiertem Gamma-Strahl. Ist dieser nicht zu erreichen, werden auch Anteile der elektronischen Braggstreuung nach Maßgabe des Polarisationsfaktor G übertragen.

#### b) Dünne Schichten

Die Mößbauerstreuung ist wesentlich stärker als die elektronische Braggstreuung. Wählt man die Schichtdicke des streuenden Kristalles so dünn, daß der elektronische Reflex stark unterdrückt wird, erhält man überwiegend Streuteile, die von der Mößbauerstreuung herrühren. Die Anzahl der benötigten Netzebenen liegt in der Größenordnung von einigen hundert. Durch die geringe Dicke der Schicht wird jedoch auch die Intensität der Mößbauerstreuung stark herabgesetzt.

#### c) Überstruktur

Ein Kristall, der abwechselnd aus einer Schicht A von Atomen mit streufähigen Kernen und einer Schicht B mit nicht streufähigen Kernen aber in beiden Fällen mit gleichartig streufähigen Elektronen (d.h. gleiche Kernladungszahl Z für beide Atomsorten) gebildet wird, bildet bezüglich der

Mößbauerstreuung ein Gitter mit dem Gitterabstand  $2d$  und bezüglich der Elektronenstreuung ein Gitter mit dem Gitterabstand  $d$ . Bei einer Braggstreuung mit dem Braggwinkel  $\theta_B(2d)$ , der zu dem Gitterabstand  $2d$  gehört, überlagern sich die Wellen der Kernstreuung konstruktiv und die der Elektronenstreuung destruktiv, d.h., mit Hilfe solcher 'AB'-Kristalle läßt sich reine Mößbauerstreuung beobachten. Die Herstellung dieser Kristalle stößt auf Schwierigkeiten.

Man kann jedoch Verbindungen suchen, die auf Grund ihrer Struktur die Mößbauerstreuung gegenüber der Elektronenstreuung bevorzugen. Als Beispiele seien die drei folgenden Kristalle angeführt.

- Black & Duerdoth /BLA64/ haben an der Eisenverbindung  $K_4Fe(CN)_6 \cdot 3H_2O$  die Mößbauerstreuung am 080-Reflex nachgewiesen. Bedingt durch die Kristallgeometrie ist der elektronische Braggreflex wesentlich schwächer als der der Mößbauerstreuung.

- Smirnov et al /SMI69/ zeigen die Möglichkeit, reine Mößbauerstreuung an dem antiferromagnetischen Kristall Hematit  $\alpha-Fe_2O_3$  zu beobachten. Wegen der Kristallgeometrie existieren die (111), (333), ...-Reflexe nicht. Jedoch ist auf Grund der magnetischen Struktur Mößbauerstreuung möglich. Bei den (222), (444), ...-Reflexen beobachtet man eine Interferenz von Elektronen- und Mößbauerstreuung.

- Mirzababaev et al /MIR71/ weisen reine Mößbauerstreuung für den 003-Reflex der Verbindung  $Na_2Fe(CN)_5NO \cdot 2H_2O$  nach. Auf Grund der Kristallgeometrie existiert der elektronische Reflex nicht, während auf Grund der Quadrupolaufspaltung der Fe-57 Kernniveaus und der unterschiedlichen Orientierung des elektrischen Feldgradienten eine Mößbauerstreuung möglich ist.

d) Zeitdiskriminierung

Auf Grund der Lebensdauer eines Kernniveaus ergibt sich eine zeitliche Verzögerung von  $\tau = \hbar/\Gamma = 10^{-7}$  sec (z.B. 141 nsec für Fe-57) der Mößbauerstreuung im Gegensatz zur 'prompten' Elektronenstreuung.

Wird Doris im Single-Bunch-Betrieb gefahren, werden Gamma-Strahl-Pulse von etwa 200 psec Länge und mit einer Periode von etwa 1  $\mu$ sec erzeugt. Das bedeutet, daß man etwa zehn Halbwertszeiten ( $T_{1/2} = \tau \cdot \ln 2$ ) Zeit hat, verzögerte Gamma-Quanten zu beobachten. Cohen et al /COH77/ haben mit dieser Methode -durch Nachweis der reemittierten Elektronen- gezeigt, daß das 14.4 keV Kernniveau von Fe-57 durch die Synchrotronstrahlung angeregt wird.

2. Geeignete Kristalle für die Mößbauerstreuung

Für die Auswahl geeigneter Kristalle muß man folgende Punkte beachten, die sich auf Grund der Eigenschaften der Synchrotronstrahlung und der Mößbauerstreuung ergeben.

- Übergangsenergie

Auf Grund der verfügbaren Speicherringe sind nur Gamma-Energien bis zu einigen zehn keV mit ausreichender Intensität zu erreichen.

- Halbwertsbreite

Die Halbwertsbreite der verwendeten Kerne bestimmt das gestreute Energieband und damit einerseits die gestreute Intensität und andererseits den Grad der Monochromatisierung.

- Einkristalle

Zur Braggstreuung sind gute Einkristalle notwendig.

- Art des Überganges

Der Übergang muß ein Gamma-Übergang mit nicht zu großem Konversionskoeffizienten sein. Für den Punkt a) ist es zudem notwendig, einen Kern mit einem M1-Übergang auszuwählen.

- Debye-Waller-Faktor und Isotopenhäufigkeit

Da die Streulänge proportional zum Debye-Waller-Faktor und zur Isotopenhäufigkeit ist, sollte man sich bemühen, diese so groß wie möglich zu machen.

- Verfügbarkeit

Ein weiterer Punkt ist die Möglichkeit, die gewünschten Isotope zu erhalten. Das heißt zum einen, daß das Isotop technisch hergestellt wird und zum anderen, daß der Preis nicht zu hoch ist.

Auf Grund der Forderung nach einer niedrigen Übergangsenergie verbleiben nur wenige von den möglichen Kernen mit einem Mößbauerübergang. In der Tabelle 1 sind diese mit ihren für dieses Experiment wichtigen Parametern zusammengestellt. (Angaben nach /MDI74/)

Kern	$E_\gamma$ (keV)	$\Gamma$ ( $10^{-9}$ eV)	Art des Überganges	$\alpha_\gamma$	Isotopenhäufigkeit (%)	$N_\gamma$ ( $\text{sec}^{-1}$ )	$f_{\text{max}}$ ( $10^{-12}$ m)
$^{57}\text{Fe}$	14.4127	4.67	M1	8.21	2.14	177	1.49
$^{73}\text{Ge}$	13.263	0.1545	E2	1095	7.76	6.5	0.004
$^{119}\text{Sn}$	23.263	25.70	M1	5.12	8.58	283	1.35
$^{169}\text{Tm}$	8.401	114.0	M1 + 0.14%E2	268	100	11400	0.087
$^{181}\text{Ta}$	6.238	0.067	E1	46	99.99	8.7	0.42

Tabelle 1: Mögliche Kerne für eine Mößbauerstreuung

$N_\gamma$  - verfügbare Gamma-Quanten in  $\Gamma$  pro Sekunde

(Doris 4 GeV und 10 mA)

$f_{\text{max}}$  - maximale Streulänge für Mößbauerstreuung

(Debye-Waller-Faktor = 1, Isotopenhäufigkeit = 100%)

Betrachtet man die maßgeblichen Größen Streulänge und verfügbare Gamma-Intensität, ergeben sich für die Kerne Fe-57, Sn-119 und Tm-169 deutlich bessere Werte als für Ge-73 und Ta-181. Die Entscheidung, welchen Kern man bevorzugt, ergibt sich aus der Möglichkeit, Einkristalle zu erhalten. Käuflich zu erwerben, sind sie in keinem Fall. Für Eisen besteht jedoch die Möglichkeit, Einkristalle herzustellen /HAR77/, /FEN77/.

#### D. Die Dynamische Theorie der elektronischen Braggstreuung

Die Dynamische Theorie der elektronischen Braggstreuung beschreibt die kohärente Streuung von Röntgen- bzw. Gamma-Strahlen in einem Kristall unter Berücksichtigung aller Wechselwirkungen der Wellen innerhalb des Kristalles.

Um diese Theorie darzulegen, ist es notwendig, die Maxwell'schen Gleichungen für ein Medium mit einer periodischen komplexen dielektrischen Funktion zu lösen. Unter der Annahme, daß die einfallenden Strahlen durch unendlich ausgedehnte ebene Wellen beschrieben werden können, und diese die Braggbedingung erfüllen, ergibt sich als Lösung der Maxwell'schen Gleichungen ein homogenes lineares Gleichungssystem für die Feldamplituden. Dieses Gleichungssystem hat nur dann nichttriviale Lösungen, wenn ihre Determinante null ist. Die daraus folgenden Bedingungen bestimmen die Wellenvektoren.

Für die 'Zwei-Wellen-Näherung' lassen sich hieraus relativ einfache Ausdrücke für die Reflektivität usw. ableiten. Diese werden für den Bragg-Fall weiter diskutiert.

### 1. Die Dielektrische Funktion

In einem Einkristall von unendlicher Ausdehnung kann die Elektronendichte als Fourier-Summe über das reziproke Gitter geschrieben werden,

$$\rho(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{H}} F_{\mathbf{H}} \exp[-2\pi i(\mathbf{H}, \vec{r})] \quad (1.1)$$

V ist das Volumen der Einheitszelle. Seien A, B, C die reziproken Gittervektoren, die die Einheitszelle im reziproken Raum definieren; dann ist  $\mathbf{H} = h\mathbf{A} + k\mathbf{B} + l\mathbf{C}$  ein reziproker Gittervektor mit den Millerschen Indizes hkl. Für den Strukturfaktor  $F_{\mathbf{H}}$  erhält man somit

$$F_{\mathbf{H}} = \int_V \rho(\vec{r}) \exp[+2\pi i(\mathbf{H}, \vec{r})] dV \quad (1.2)$$

Nimmt man an, daß sich die Atome bezüglich ihrer Elektronenverteilung wie 'starre Kugeln' verhalten, kann man den Strukturfaktor als Summe über die Atome der Einheitszelle schreiben.

$$F_{\mathbf{H}} = \sum_n f_n \exp[-M_n] \exp[+2\pi i(\mathbf{H}, \vec{r}_n)] \quad (1.3)$$

Dabei ist  $f_n$  der atomare Streufaktor, n ein Summationsindex über die Atome in der Einheitszelle und  $\exp(-M_n)$  der Debye-Waller-Faktor.

Der Zusammenhang der dielektrischen Funktion und der Elektronendichte wird im folgenden hergeleitet.

Die dielektrische Funktion ist definiert als

$$\epsilon_{\omega}(\vec{r}) := \frac{\vec{D}_{\omega}(\vec{r})}{\epsilon_0 \vec{E}_{\omega}} = 1 + \frac{\vec{P}_{\omega}(\vec{r})}{\epsilon_0 \vec{E}_{\omega}} \quad (1.4)$$

Die Polarisation  $\vec{P}_{\omega}(\vec{r})$  ist definiert als Dipolmoment pro Volumeneinheit, also

$$\vec{P}_{\omega}(\vec{r}) = -\rho(\vec{r})e\vec{r} \quad (1.5)$$

Um  $\vec{P}_{\omega}(\vec{r})$  in einem Kristall zu bestimmen, stellt man die Bewegungsgleichung für gebundene Elektronen in einem elektrischen Feld auf,

$$m \ddot{\vec{r}}(t) + 2m\alpha \dot{\vec{r}}(t) + m\omega_0^2 \vec{r}(t) = -e \vec{E}(t) \quad (1.6)$$

Unter der Voraussetzung, daß sowohl  $\vec{r}(t)$  als auch  $\vec{E}(t)$  über  $\exp(-i\omega t)$  von der Zeit abhängen, erhält man

$$\vec{r}(t) = -\frac{e \vec{E}(t)}{m(\omega_0^2 - \omega^2 - 2i\alpha\omega)} \quad (1.7)$$

Man geht in erster Näherung davon aus, daß im Bereich der Röntgen- bzw. Gamma-Strahlen  $\omega \gg \omega_0$  und daß keine Absorption vorhanden ist, also  $\alpha = 0$ . Später fügt man Korrekturterme hinzu. Es folgt

$$\epsilon_{\omega}(\vec{r}) = 1 - \Gamma \sum_{\mathbf{H}} F_{\mathbf{H}} \exp[-2\pi i(\mathbf{H}, \vec{r})] \quad (1.8)$$

mit

$$\Gamma := \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m c^2} \frac{\lambda^2}{nV}$$

Die Korrekturterme -Hönl Korrekturen - werden am atomaren Streufaktor f angebracht

$$F_{\mathbf{H}} = \sum_n (f + f' + if'') \exp[2\pi i(\mathbf{H}, \vec{r}_n)] \quad (1.9)$$

f' beschreibt Resonanzeffekte und f'' Absorptionseffekte; f' und f'' sind reell. Zerlegt man den Strukturfaktor  $F_{\mathbf{H}}$  in Resonanz- und Absorptionsanteile, erhält man

$$F_{\mathbf{H}} = F_{\mathbf{H}}' + iF_{\mathbf{H}}'' \quad (1.10)$$

Ist der Kristall nicht zentrosymmetrisch, können  $F_{\mathbf{H}}'$  und  $F_{\mathbf{H}}''$  komplex sein.

Für hkl = 000 erhält man aus der Gleichung (1.8)

$$\epsilon(H=0) = 1 - \Gamma (F_0' + iF_0'') \quad (1.11)$$

Aus Gleichung (1.9) erhält man, daß  $F_0'$  und  $F_0''$  reell sind.

$$\epsilon(H=0) = 1 - \Gamma \sum_n [f_0 + f_0']_n - i\Gamma \sum_n f_0'' \quad (1.12)$$

$\epsilon(H=0)$  wird als mittlerer Wert der dielektrischen Funktion verstanden.

Batterman /BAT64/ zeigt, daß zwischen dem linearen Absorptionskoeffizienten  $\mu_0$  und  $F_0''$  der folgende Zusammenhang besteht,

$$\mu_0 = \frac{2\pi}{\lambda} \Gamma F_0'' \quad (1.13)$$



Eine Abschätzung von  $\epsilon(H=0)$  für Germanium bei der Wellenlänge von  $\lambda = 0.86$  Ångström, einem Absorptionskoeffizienten  $\mu_0 = 5.4 \cdot 10^{-4} \text{ m}^{-1}$  ergibt:

$$|\epsilon(H=0)| = 1.94 \cdot 10^{-6}$$

$\epsilon(H=0)$  weicht also etwa um  $10^{-5}$  von eins ab. Da  $n = \sqrt{\epsilon}$  ist, folgt, daß auch der Brechungsindex  $n$  sich nur um etwa  $10^{-5}$  von eins unterscheidet.

## 2. Einkristalle

### 2.1. Die allgemeinen Gleichungen der Dynamischen Theorie für einen Einkristall

Die Maxwell'schen Gleichungen lauten

$$\begin{aligned} \text{rot } \vec{H} &= \mathbf{j} + \frac{d\vec{D}}{dt} & \text{div } \vec{D} &= \rho \\ \text{rot } \vec{E} &= - \frac{d\vec{B}}{dt} & \text{div } \vec{B} &= 0 \end{aligned} \quad (2.1)$$

Für hohe Frequenzen wird die Leitfähigkeit gleich null, damit und mit  $\vec{B} = \mu_0 \cdot \vec{H}$  vereinfachen sich die Gleichungen (2.1) zu

$$\begin{aligned} \text{rot } \vec{B} &= \mu_0 \frac{d\vec{D}}{dt} & \text{div } \vec{D} &= \rho \\ \text{rot } \vec{E} &= - \frac{d\vec{B}}{dt} & \text{div } \vec{B} &= 0 \end{aligned} \quad (2.2)$$

Auflösen der Gleichungen nach der dielektrischen Verschiebung  $\vec{D}$ , führt zu der Differentialgleichung ( $\epsilon_0 \mu_0 c^2 = 1$ )

$$\text{rot rot } \frac{\vec{D}}{\epsilon} = - \frac{1}{c^2} \frac{d^2 \vec{D}}{dt^2} \quad (2.3)$$

Die dielektrische Funktion  $\epsilon(\vec{r})$  hat die Form (1.8). Da  $\epsilon(\vec{r})$  nur etwas von eins verschieden ist, folgt

$$\frac{1}{\epsilon(\vec{r})} = 1 + \Gamma \sum_n F_n \exp[-2\pi i(\vec{H}, \vec{r})] \quad (2.4)$$

Einsetzen in Gleichung (2.3) ergibt

$$\text{rot rot } (1 + \Gamma \sum_n F_n \exp[-2\pi i(\vec{H}, \vec{r})]) \vec{D} = - \frac{1}{c^2} \frac{d^2 \vec{D}}{dt^2} \quad (2.5)$$

Um diese Differentialgleichung zu lösen, nimmt man an, daß  $\vec{D}$  als Summe ebener Wellen geschrieben werden kann,

$$\vec{D}(t) = \sum_n \vec{D}_n \exp[i\omega_n t - 2\pi i(\vec{K}_n, \vec{r})] \quad .$$

Von den so erhaltenen Lösungen der Maxwell'schen Gleichungen sind nur diejenigen interessant, die zusätzlich die Bragg-Bedingung erfüllen,

$$\vec{K}_H = \vec{K}_0 + \vec{H} \quad (2.6)$$

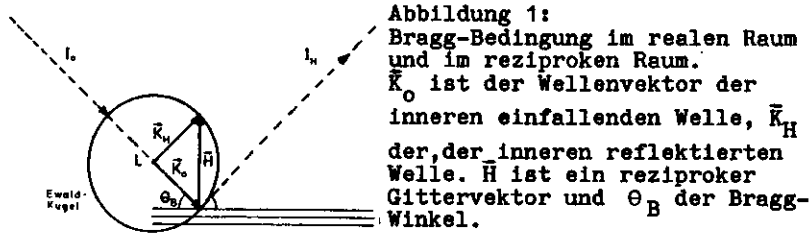


Abbildung 1:  
Bragg-Bedingung im realen Raum und im reziproken Raum.  $\vec{K}_0$  ist der Wellenvektor der inneren einfallenden Welle,  $\vec{K}_H$  der inneren reflektierten Welle.  $\vec{H}$  ist ein reziproker Gittervektor und  $\theta_B$  der Bragg-Winkel.

Im Anhang A wird gezeigt, wie die Maxwell'schen Gleichungen unter den gegebenen Voraussetzungen gelöst werden. Das Ergebnis ist das Gleichungssystem (A.10), das hier wiederholt wird

$$\sum_{H \neq L} \{ \Gamma_{HL}(\vec{K}_H, \vec{K}_H) \vec{D}_L - \Gamma_{HL}(\vec{K}_H, \vec{D}_L) \vec{R}_H \} = \{ k^2 - (1 + \Gamma_E)(\vec{K}_H, \vec{R}_H) \} \vec{D}_H$$

für alle H. k ist die Wellenzahl im Vakuum. Es gilt  $k=1/\lambda$ . Diese Gleichungen sind das Fundamentalsystem der Dynamischen Theorie von welchem alle Betrachtungen ausgehen.

Lösungen des Fundamentalsystems für den Fall, daß nur zwei Wellen im Kristall existieren.

Die Einfallsrichtung auf den Kristall wird so gewählt, daß nur ein reziproker Gitterpunkt H nahe genug an der Oberfläche der Ewaldkugel liegt. Das bedeutet, daß fast alle Feldvektoren  $\vec{D}_1 = 0$  sind, mit Ausnahme von zweien, die mit  $\vec{D}_0$  und  $\vec{D}_H$  bezeichnet werden.

Es folgt

$$\Gamma_E(\vec{R}_0, \vec{R}_0) \vec{D}_H - \Gamma_E(\vec{R}_0, \vec{D}_H) \vec{R}_0 = \{ k^2 - (1 + \Gamma_E)(\vec{R}_0, \vec{R}_0) \} \vec{D}_0$$

$$\Gamma_E(\vec{R}_H, \vec{R}_H) \vec{D}_0 - \Gamma_E(\vec{R}_H, \vec{D}_0) \vec{R}_H = \{ k^2 - (1 + \Gamma_E)(\vec{R}_H, \vec{R}_H) \} \vec{D}_H$$

Da der Brechungsindex nur wenig von eins abweicht, kann man schreiben  $n = 1 + \delta$ . Damit ergeben sich für die Skalarprodukte die Näherungen

$$(\vec{R}_0, \vec{R}_0) = k^2 [1 + 2\delta_0] \quad \text{und} \quad (\vec{R}_H, \vec{R}_H) = k^2 [1 + 2\delta_H] \quad (2.9)$$

$\delta_0$  und  $\delta_H$  beschreiben die Abweichung des Brechungsindex von eins.  $\delta_0 \neq \delta_H$  bedeutet, daß der Brechungsindex richtungsabhängig ist.

Wenn man Gleichung (2.7) mit  $\vec{D}_0$  und Gleichung (2.8) mit  $\vec{D}_H$  skalar multipliziert, erhält man

$$\begin{aligned} [2\delta_0 + \Gamma_E] D_0^i + \Gamma_E \Gamma_H D_H^i &= 0 \\ \Gamma_E \Gamma_H D_0^i + [2\delta_H + \Gamma_E] D_H^i &= 0 \end{aligned}$$

mit  $P = \cos 2\theta$  für Pi-Polarisation und  $P = 1$  für Sigma-Polarisation und  $i = \pi, 0$ .

Es ist üblich, diese beiden Polarisationsrichtungen der einfallenden Welle einzuführen. Bei der Pi-Polarisation liegt  $\vec{D}_0$  in der Ebene von  $\vec{K}_0$  und  $\vec{K}_H$ , und bei der Sigma-Polarisation steht  $\vec{D}_0$  senkrecht auf der Ebene  $\vec{K}_0$  und  $\vec{K}_H$ .

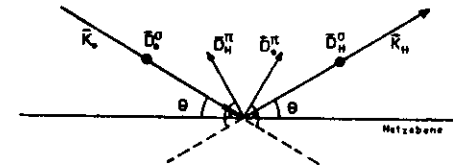


Abbildung 2:

Darstellung der einfallenden und ausfallenden Wellenvektoren und der Verschiebungsvektoren für die verschiedenen Polarisationsrichtungen.

Die Skalarprodukte ergeben somit

$$(\vec{D}_0, \vec{D}_H)^{\pi} = D_0^{\pi} D_H^{\pi} \cos 2\theta \quad \text{und} \quad (\vec{D}_0, \vec{D}_H)^0 = D_0^0 D_H^0$$

Mit Hilfe des Polarisationsfaktors P lassen sich die Gleichungen für die beiden Polarisationsrichtungen  $\kappa$  und  $\sigma$  in einer kombinierten Form schreiben. Im folgenden ergeben sich also aus einer Gleichung immer zwei, eine für jede Polarisationsrichtung.

Die Gleichungen haben nur dann eine nichttriviale Lösung, wenn ihre Determinante gleich null ist.

$$\begin{vmatrix} 2\delta_0 + \Gamma F_0 & P \Gamma F_H \\ P \Gamma F_H & 2\delta_H + \Gamma F_0 \end{vmatrix} = 0 \quad (2.10)$$

Diese nichttriviale Lösung muß die folgende Gleichung erfüllen,

$$x := \frac{D_H}{D_0} = - \frac{2\delta_0 + \Gamma F_0}{P \Gamma F_H} \quad (2.11)$$

Im Anhang B wird ausgeführt, daß man auf Grund der 'Zwei-Wellen-Näherung' zwei Lösungen für das Amplitudenverhältnis  $x$  und zwei Lösungen für  $\delta_0$  und damit auch für  $\delta_H$  erhält,

$$x_1 = \frac{D_H^I}{D_0^I} \quad \text{und} \quad x_2 = \frac{D_H^{II}}{D_0^{II}} \quad (2.12)$$

Das heißt, es gibt zwei innere einfallende Wellen und zwei innere reflektierte Wellen. Die allgemeine Form ohne die triviale Zeitabhängigkeit des inneren einfallenden Strahles ist somit eine Linearkombination der beiden,

$$\bar{D}_0 = \exp[-2\pi i(\bar{K}_0 \cdot \bar{r})] \{ x_1 \bar{D}_0^I \exp[-i\varphi_1 t] + x_2 \bar{D}_0^{II} \exp[-i\varphi_2 t] \}; \quad (2.13)$$

und die des inneren reflektierten Strahles

$$\bar{D}_H = \exp[-2\pi i(\bar{K}_H \cdot \bar{r})] \{ \bar{D}_H^I \exp[-i\varphi_1 t] + \bar{D}_H^{II} \exp[-i\varphi_2 t] \} \quad (2.14)$$

mit der Bezeichnung:

$$\varphi_1 := \frac{2\pi k \delta_0^I}{\gamma_0} \quad \varphi_2 := \frac{2\pi k \delta_0^{II}}{\gamma_0} \quad t := (\bar{n}, \bar{r}) \quad \gamma_0 := (\bar{n}, \bar{u}_0)$$

$\gamma_H := (\bar{n}, \bar{u}_H)$ ,  $\bar{u}_0$  - Einheitsvektor in Richtung  $\bar{K}_0$   
 $\bar{u}_H$  - Einheitsvektor in Richtung  $\bar{K}_H$ ,  $\bar{n}$  - Einheitsvektor in Richtung der Oberflächennormalen

Randbedingungen

Betrachtet man die Randbedingungen für  $\bar{E}$  und  $\bar{D}$  bei einem Übergang von einem Medium in ein anderes (Leitfähigkeit gleich null), so gilt, daß die Tangentialkomponenten von  $\bar{E}$  und die Normalkomponenten von  $\bar{D}$  stetig ineinander übergehen. In dem hier betrachteten Fall ist das eine Medium Luft bzw. Vakuum und somit gilt für die Feldvektoren der einfallenden Welle  $\epsilon_0 \bar{E} \approx \bar{D}$ . Da, wie gezeigt wurde, die dielektrische Funktion nur wenig von eins abweicht, kann man  $\bar{D}_0 \approx \epsilon_0 \bar{E}_0$  setzen.

Da zwei innere einfallende Wellen  $D_0^I$  und  $D_0^{II}$  existieren, gilt

$$D_0^I + D_0^{II} = \epsilon_0 E_0 \quad (2.15)$$

Bezüglich der Feldvektoren kann man also sagen, daß die Kristalloberfläche nicht existiert. Für die Wellenvektoren ist dieses nicht richtig.

Die einfallende Welle werde durch die Gleichung

$$\bar{E}_0(t) = \bar{E}_0 \exp[i\omega_0 t - 2\pi i(\bar{K}_0 \cdot \bar{r})] \quad (2.16)$$

beschrieben.

Die innere einfallende Welle im Kristall hat die folgende Form (siehe (2.13))

$$\bar{D}_0(t) = \bar{D}_0 \exp[i\omega_0 t - 2\pi i(\bar{K}_0 \cdot \bar{r})] \quad (2.17)$$

( $\bar{K}_0$  ist der einfallende Wellenvektor im Vakuum)

Der Kristall habe eine ebene Oberfläche und der Ursprung sei in dieser gewählt, dann ist die Grenzfläche durch  $(\bar{n}, \bar{r}) = 0$  festgelegt.

An der Grenzfläche  $(\bar{n}, \bar{r}) = 0$  müssen die Exponentialfunktionen (2.16) und (2.17) übereinstimmen,

$$\exp[i\omega_0 t - 2\pi i(\bar{K}_0 \cdot \bar{r})] = \exp[i\omega_0 t - 2\pi i(\bar{K}_0 \cdot \bar{r})]$$

d.h., es muß gelten

$$\bar{K}_0 = \bar{K}_H + \Delta \bar{n} \quad (2.18)$$

Nach Quadrieren von (2.18) und Einsetzen von (2.9) folgt unter Berücksichtigung nur linearer Terme in  $\Delta \vec{n}$

$$\vec{k}_0 = \vec{k}_e + \frac{k_0 \delta_n}{\gamma} \vec{n} \quad (2.19)$$

Damit ist der Wellenvektor  $\vec{k}_0$  der einfallenden Welle innerhalb des Kristalles bekannt, wenn  $\delta_0$  bestimmt ist.

## 2.2. Intensitätsverhältnisse

Im folgenden werden Lösungen für eine planparallele Kristallplatte der Dicke  $t_0$  behandelt. Ihre seitliche Ausdehnung wird als unendlich angenommen.

Es werden zwei Fälle unterschieden: Der Laue-Fall und der Bragg-Fall.

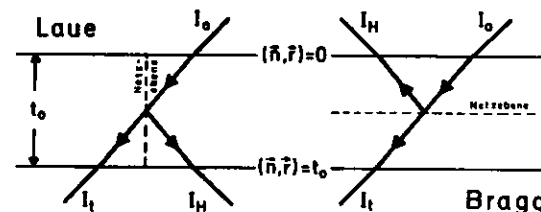


Abbildung 3: Schematische Darstellung der Streuverhältnisse im Laue- und Bragg-Fall

In den folgenden Formeln spielt der Parameter  $b$  eine zentrale Rolle. Für den Bragg-Fall kann er Werte zwischen  $-\infty$  und null und für den Laue-Fall Werte zwischen null und  $+\infty$  annehmen. Wenn  $b=1$  ist, liegt der symmetrische Laue-Fall vor und wenn  $b=-1$  ist der symmetrische Bragg-Fall. (siehe auch Abschnitt 5)

### A) Der Laue-Fall

Im Laue-Fall fällt der Strahl durch die eine Seite des Kristalles ein und tritt auf der gegenüberliegenden Seite wieder aus. Es tritt also kein reflektierter Strahl durch die Fläche  $(\vec{n}, \vec{r}) = 0$  aus, d.h.,

$$D_0^{\text{ref}} + D_H^{\text{ref}} = 0$$

Aus dieser Gleichung und den Gleichungen (2.12) und (2.15) folgt

$$D_0^{\text{ref}} = \frac{x_2}{x_2 - x_1} \epsilon_0 E, \quad \text{und} \quad D_0^{\text{tr}} = -\frac{x_1}{x_2 - x_1} \epsilon_0 E. \quad (2.21)$$

Das Intensitätsverhältnis reflektierter zu einfallender Intensität  $I_H/I_0$  bzw. transmittierter zu einfallender Intensität  $I_t/I_0$  ergibt sich mit (2.13) bzw. (2.14) aus

$$\frac{I_H}{I_0} = \frac{|\bar{D}_H|^2}{|\epsilon_0 \bar{E}_0|^2} \quad \text{bzw.} \quad \frac{I_t}{I_0} = \frac{|\bar{D}_t|^2}{|\epsilon_0 \bar{E}_0|^2}$$

zu

$$\frac{I_H}{I_0} = \left| \frac{x_1 x_2 (c_1 - c_2)}{x_2 - x_1} \right|^2 \quad (2.22)$$

bzw.

$$\frac{I_t}{I_0} = \left| \frac{x_2 c_1 - x_1 c_2}{x_2 - x_1} \right|^2 \quad (2.23)$$

mit  $c_1 = \exp[-i\varphi_1 t_0]$  und  $c_2 = \exp[-i\varphi_2 t_0]$ .

Schreibt man die Gleichungen in eine für die Anwendung zweckmäßigere Form und benutzt die im Anhang B eingeführten Größen  $q$ ,  $z$  und  $b$

$$q = b^2 \Gamma^2 F_H F_R, \quad z = \frac{b-1}{2} \Gamma F_0 + b \Delta \theta \sin 2\theta_0, \quad b = \frac{V_0}{V_H}$$

ergibt sich,

$$\frac{I_H}{I_0} = \left| \frac{b \Gamma F_H}{\sqrt{q+z^2}} \sinh\left[i\pi \frac{k t_0}{V_0} \sqrt{q+z^2}\right] \exp\left[i\pi \frac{k t_0}{V_0} (\Gamma F_0 + z)\right] \right|^2, \quad (2.24)$$

bzw.

$$\frac{I_t}{I_0} = \left| \frac{1}{\sqrt{q+z^2}} \left[ z \sinh\left[i\pi \frac{k t_0}{V_0} \sqrt{q+z^2}\right] + \sqrt{q+z^2} \cosh\left[i\pi \frac{k t_0}{V_0} \sqrt{q+z^2}\right] \right] \exp\left[i\pi \frac{k t_0}{V_0} (\Gamma F_0 + z)\right] \right|^2 \quad (2.25)$$

## B) Der Bragg-Fall

Im Bragg-Fall tritt der reflektierte Strahl aus derselben Kristallfläche aus, in die der einfallende Strahl fällt,

d.h., daß auf der rückseitigen Fläche  $(\vec{n}, \vec{r}) = t_0$  die reflektierte Welle die Intensität null haben muß,

$$D_H^+(t_0) + D_H^-(t_0) = 0$$

Aus dieser Gleichung und den Gleichungen (2.14) und (2.15) folgt

$$D_0^+ = \frac{c_2 x_2}{c_2 x_2 - c_1 x_1} \epsilon_0 E_0 \quad \text{und} \quad D_0^- = -\frac{c_1 x_1}{c_2 x_2 - c_1 x_1} \epsilon_0 E_0 \quad (2.26)$$

Das Intensitätsverhältnis der reflektierten Welle  $I_H$  und der einfallenden Welle  $I_0$  ergibt sich aus der obigen Gleichung zu

$$\frac{I_H}{I_0} = \left| \frac{x_1 x_2 (c_1 - c_2)}{c_2 x_2 - c_1 x_1} \right|^2, \quad (2.27)$$

und das Intensitätsverhältnis der transmittierten Welle  $I_t$  und der einfallenden Welle  $I_0$  ergibt sich zu

$$\frac{I_t}{I_0} = \left| \frac{c_1 c_2 (x_2 - x_1)}{c_2 x_2 - c_1 x_1} \right|^2 \quad (2.28)$$

Für die Anwendung lassen sich die Gleichungen umformen in

$$\frac{I_H}{I_0} = \left| \frac{b \Gamma F_H}{z - \sqrt{q+z^2} \coth\left[i\pi \frac{k t_0}{V_0} \sqrt{q+z^2}\right]} \right|^2 \quad (2.29)$$

und

$$\frac{I_t}{I_0} = \left| \frac{\sqrt{q+z^2} \exp\left[i\pi \frac{k t_0}{V_0} (\Gamma F_0 + z)\right]}{z \sinh\left[i\pi \frac{k t_0}{V_0} \sqrt{q+z^2}\right] - \sqrt{q+z^2} \cosh\left[i\pi \frac{k t_0}{V_0} \sqrt{q+z^2}\right]} \right|^2 \quad (2.30)$$

### 2.3. Reflektivität

Die Reflektivität  $R$  wird definiert als das Verhältnis  $P_H/P_0$ , dabei ist  $P_H := S_H \cdot I_H$  und  $P_0 := S_0 \cdot I_0$ .  $S_0$  und  $S_H$  sind die Strahlquerschnitte des einfallenden bzw. des reflektierten Strahles.

Im Abschnitt 5.3. wird gezeigt werden, daß unter der Voraussetzung, daß der Brechungsindex  $n=1$  und der Querschnitt des einfallenden Strahles groß im Vergleich zu der Eindringtiefe des Strahles in den Kristall ist, die folgende Beziehung gilt

$$\frac{S_H}{S_0} = \left| \frac{1}{b} \right| \quad (2.31)$$

Damit erhält man für die Reflektivität  $R(\theta)$  an der Stelle  $\theta$

$$R(\theta) := \frac{P_H(\theta)}{P_0(\theta)} = \frac{1}{|b|} \frac{I_H(\theta)}{I_0(\theta)} \quad (2.32)$$

Der Graph von  $R(\theta)$  über  $\theta$  heißt Rockingkurve.

Das Integral über die Rockingkurve wird Integrale Reflektivität  $R_H^0$  genannt, also

$$R_H^0 = \int \frac{P_H(\theta)}{P_0(\theta)} d\theta \quad (2.33)$$

Sie wird in 'rad' angegeben und kann somit auch größer als eins sein.

Der Index  $\theta$  soll verdeutlichen, daß über den Winkel  $\theta$  integriert wird. Es ist nämlich auch üblich, den Parameter  $y$

$$y(\theta) := \frac{z(\theta)}{\sqrt{|a|}}$$

einzuführen und eine Integrale Reflektivität  $R_H^y$  zu definieren.

Der Zusammenhang zwischen  $R_H^0$  und  $R_H^y$  ergibt sich aus

$$R_H^0 = \int \frac{P_H(\theta)}{P_0(\theta)} d\theta = \int \frac{P_H(y)}{P_0(y)} \frac{d\theta}{dy} dy = \frac{d\theta}{dy} \int \frac{P_H(y)}{P_0(y)} dy$$

zu

$$R_H^0 = \frac{P \sqrt{F_H F_R}}{\sqrt{|b|} \sin 2\theta_0} R_H^y \quad (2.34)$$

wegen

$$\frac{d\theta}{dy} = \frac{P \sqrt{F_H F_R}}{\sqrt{|b|} \sin 2\theta_0}$$

### 2.4. Näherungen für den Bragg-Fall

Im Prinzip sind mit den Gleichungen (2.27) und (2.28) die Rockingkurven bekannt. Es wurde ein Programm für eine Rechenmaschine geschrieben, das Rockingkurven für verschiedene Kristalle in der allgemeinen Form (d.h. variable Dicke, Absorption, asymmetrisch geschnittene Kristalle) berechnet und zeichnet. Die mit diesem Programm berechneten Rockingkurven, stimmen mit Rechnungen von Renninger /REN75/ und Mueller /MUE77/ überein. Für das Verständnis ist es jedoch interessant, einige Sonderfälle nicht nur numerisch sondern auch algebraisch zu bestimmen.

#### 2.4.1. Reflexion ohne Absorption

Betrachtet man Reflexion ohne Absorption (Photoabsorption, Comptonstreuung), so ist  $F_H F_{\bar{H}}$  reell. Für die weitere Behandlung wird der Parameter A eingeführt.

$$A = \frac{nkP \sqrt{F_H F_{\bar{H}}}}{\sqrt{V_x V_d}} t \quad (2.35)$$

Aus der Gleichung (2.29) folgt dann

$$\frac{P_H}{P_o} = \frac{1}{y^2 + (1-y^2) \coth^2 A \sqrt{1-y^2}} \quad (2.36)$$

und aus Gleichung (2.30) folgt

$$\frac{P_t}{P_o} = \frac{1-y^2}{y^2 \sinh^2 A \sqrt{1-y^2} + (1-y^2) \cosh^2 A \sqrt{1-y^2}} \quad (2.37)$$

Diese Gleichungen zeigen wie erwartet, daß sich bei Reflexion ohne Absorption die gesamte einfallende Energie  $P_o$  auf  $P_H$  und  $P_t$  verteilt,

$$P_H + P_t = P_o \quad .$$

Entsprechendes folgt aus den Gleichungen (2.24) und (2.25) für den Laue-Fall.

Die Form der Rockingkurven wird entscheidend durch A bestimmt. Es ist üblich zu sagen, daß ein Kristall dick ist, wenn  $A \gg 1$ , und dünn, wenn  $A \ll 1$  ist. Da A proportional zu  $F_H$  und  $t_o$  ist, stellt es eine 'effektive Dicke' dar.

Im folgenden werden für Rockingkurven mit  $A \gg 1$  und  $A \ll 1$  Näherungen eingeführt und für verschiedene Werte von A Rockingkurven abgebildet.

#### A. Grenzfälle

Dicker Kristall ( $A \gg 1$ )

Aus der Gleichung (2.36) erhält man

$$\frac{P_H}{P_o} = 1 \quad \text{für } |y| < 1 \quad (2.38)$$

Das heißt mit anderen Worten, daß für  $|y| \leq 1$  die gesamte Energie, die in den Kristall durch die Fläche  $(\vec{n}, \vec{r}) = 0$  eindringt, ihn durch dieselbe Fläche wieder verläßt. Diesen Bereich nennt man den Bereich der Totalreflexion. Für  $|y| > 1$  wird das Argument der coth-Funktion rein imaginär, und damit geht die coth-Funktion in eine cot-Funktion über. Zachariasen /ZAC45/ nimmt für diesen Bereich einen Mittelwert für die cot-Funktion an, da für große A die Nulldurchgänge der cot-Funktion immer näher zusammenrücken. Er erhält aus Gleichung (2.36)

$$\frac{P_H}{P_o} = 1 - \sqrt{1-y^2} \quad \text{für } |y| > 1 \quad (2.40)$$

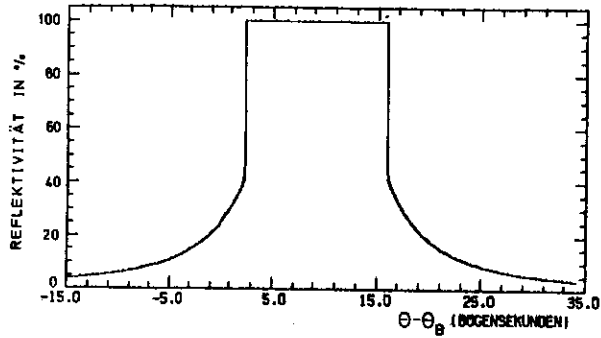


Abbildung 4: Rockingkurve für einen dicken Kristall ohne Absorption (Silber 200-Reflex)

Dünnere Kristall ( $A \ll 1$ )

Für dünne Kristalle nimmt die Reflektivität stark ab, da nicht mehr genügend Netzebenen zum Reflektieren beitragen. Aus Gleichung (2.36) folgt für  $A \ll 1$

$$\frac{P_H}{P_0} \approx \frac{\sin^2 Ay}{y^2} \quad (2.41)$$

In Abbildung 5 ist für einen dünnen Silbereinkristall (200-Reflex) eine Rockingkurve dargestellt (geänderter Maßstab!)

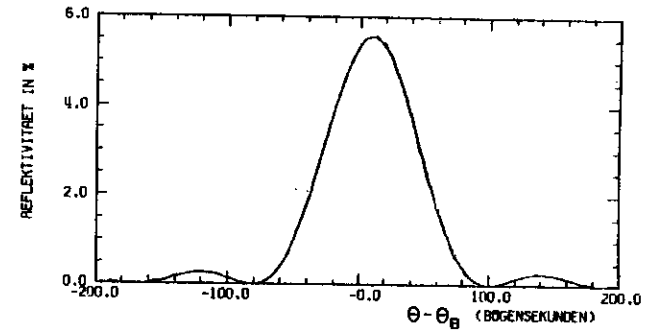
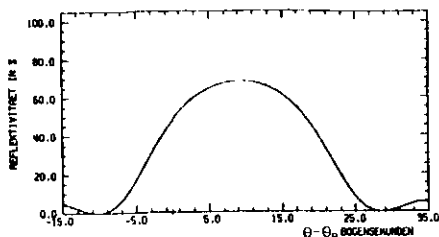


Abbildung 5: Rockingkurve für einen dünnen Kristall ohne Absorption (Silber 200-Reflex,  $A = 0.236$ ,  $t_0 = 0.16 \mu\text{m}$ )

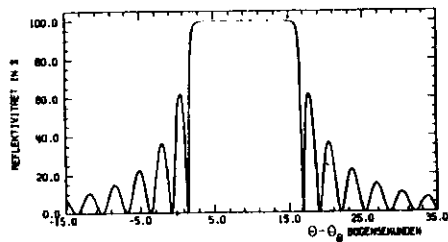
B) Abbildungen von Rockingkurven

In der Abbildung 6 sind Rockingkurven für einen 200-Reflex eines Silber-Einkristalles für verschiedene Werte von  $A$  gezeigt. Sie sind mit Hilfe der Formel (2.36) berechnet worden.

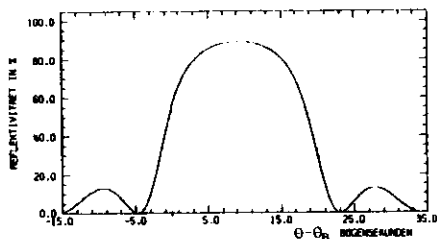




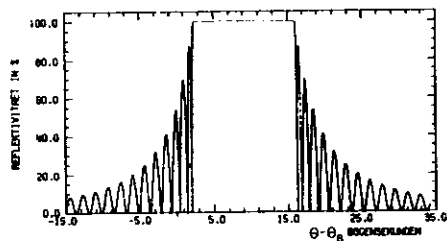
$t_0 = 0.5 \mu\text{m}$      $A = 1.1$



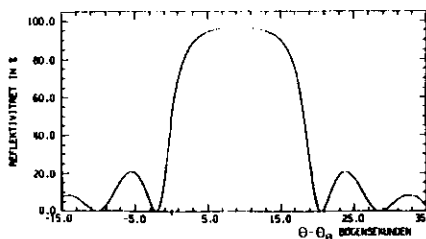
$t_0 = 2.5 \mu\text{m}$      $A = 5.7$



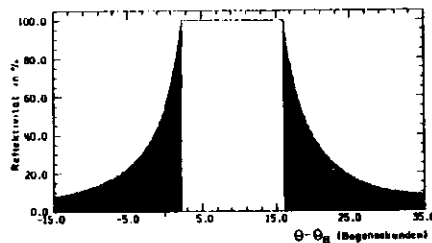
$t_0 = 0.75 \mu\text{m}$      $A = 1.7$



$t_0 = 5.0 \mu\text{m}$      $A = 11.3$



$t_0 = 1.0 \mu\text{m}$      $A = 2.3$



$t_0 = 100.0 \mu\text{m}$      $A = 226$

Abbildung 6:  
Rockingkurven des 200-Reflexes von Silber  
Rechnungen nach Gleichung [2.36] für verschiedene Dicken  $t_0$   
und ohne Absorption  
 $\theta_B = 12.15^\circ$  ,  $\lambda = 0.86 \text{ \AA}$

### 2.4.2. Reflexion mit Absorption

Im Fall mit Absorption läßt sich nur für einen dicken Kristall (also  $A \gg 1$ ) eine Näherung angeben. Aus Gleichung (2.29) folgt für einen betragsmäßig großen Realteil des Argumentes der coth-Funktion, daß der coth gegen +1 bzw. -1 konvergiert. Für die Reflektivität erhält man somit

$$\frac{P_R}{P_0} = \frac{F_R}{F_0} \left| y \pm \sqrt{y^2 - 1} \right|^2 \quad (2.42)$$

Dieses ist die Gleichung, die bei Batterman /BAT64/ als Gleichung (104) angegeben ist.

Für die übrigen Fälle muß man die exakte Gleichung (2.29) benutzen. Die Abbildung 7 zeigt Rockingkurven des 200-Reflexes von Silber für verschiedene Dicken.

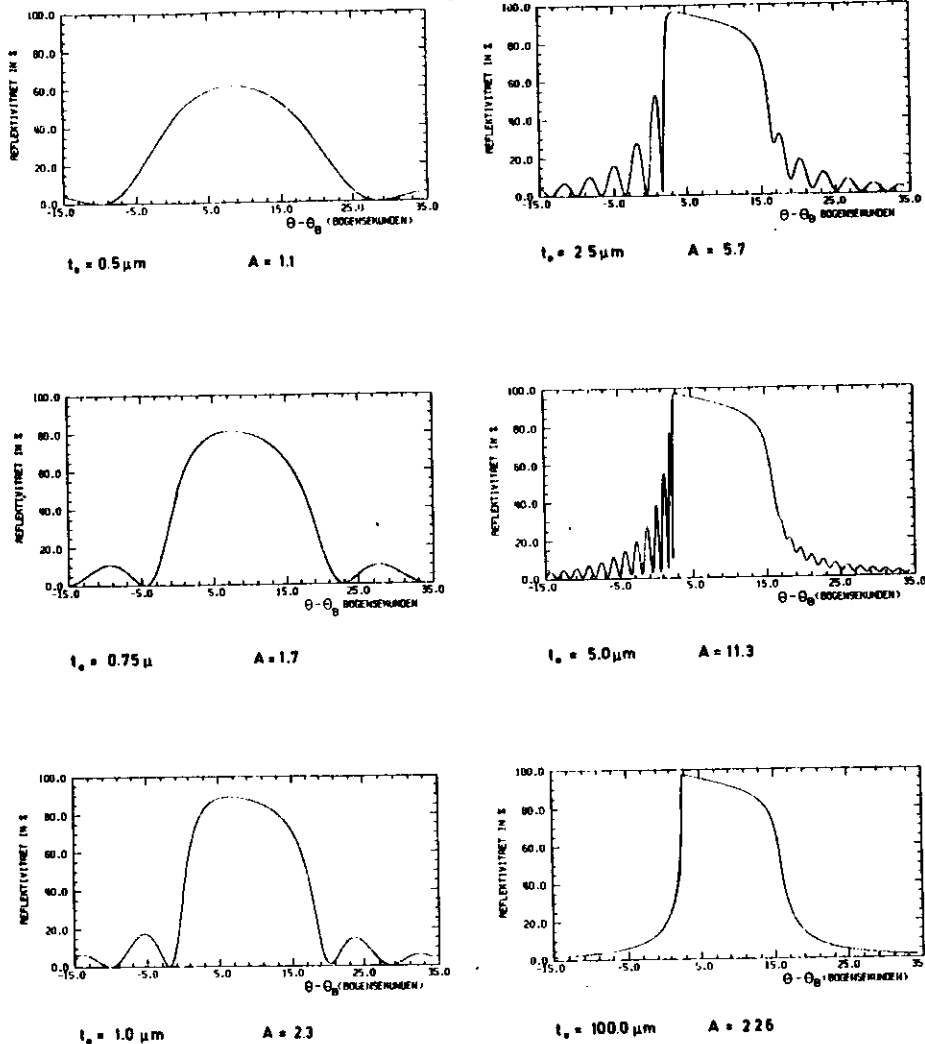


Abbildung 7:  
 Rockingkurven des 200-Reflexes von Silber  
 Rechnungen nach Gleichung [2.29] für verschiedene Dicken  $t_0$   
 $\theta_B = 12.15^\circ$ ,  $\lambda = 0.86 \text{ \AA}$

### 3. Mosaikkristall

#### 3.1. Die allgemeinen Gleichungen für einen Mosaikkristall

Mosaikkristalle bestehen aus einer Vielzahl von Einkristallen - Kristallite genannt -, deren Hauptachsenrichtung um einen effektiven Winkel streuen. Die Streuung wird durch die Verteilungsfunktion  $W(\Delta)$  beschrieben. In den meisten Rechnungen wird für  $W(\Delta)$  eine Gaußverteilung angenommen,

$$W(\Delta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\eta} \exp\left[-\frac{\Delta^2}{2\eta^2}\right] \quad (3.1)$$

Für eine einzige Schicht von Kristalliten mit der Winkelverteilung  $W(\Delta)$  und der Dicke  $t_0$  wird die Reflektivität  $\Omega$  definiert als

$$\Omega(\theta - \theta_B) = \int W(\Delta) \frac{P_H}{P_0}(\theta - \theta_B + \Delta) d\Delta \quad (3.2)$$

Dabei ist  $P_H/P_0$  die Reflektivität eines Einkristalles der Dicke  $t_0$ , wie in Gleichung (2.29) gezeigt wurde.

Als Grenzfall beschreibt Gleichung (3.2) auch die Reflektivität eines Einkristalles dann, wenn die Winkelverteilung eine Delta-Funktion ist, also nur ein einziger Winkel existiert.

Im folgenden wird die Reflektivität  $R := P_H/P_0$  für einen Mosaikkristall der Dicke  $T_0$  berechnet. Ist  $t_0$  die Schichtdicke, besteht der Mosaikkristall aus  $n = T_0/t_0$  Schichten.

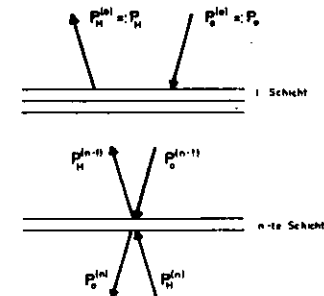


Abbildung 8: Mosaikkristall - Darstellung der Intensitätsverhältnisse für die n-te Schicht

$P_0^{(n)}$  ist die einfallende Intensität,  $P_H^{(n)}$  die die erste Schicht verlassende und  $P_0^{(n-1)}$  die auf die n-te Schicht fallende Intensität. Die Beziehungen zwischen der einfallenden und reflektierten Intensität nach Durchgang durch die n-te Schicht ergeben sich zu

$$\begin{aligned} P_0^{(n)} &= (\alpha - \Omega) P_0^{(n-1)} + \Omega P_H^{(n)} \\ P_H^{(n-1)} &= (\alpha - \Omega) P_H^{(n)} + \Omega P_0^{(n-1)} \end{aligned} \quad (3.3)$$

$P_0^{(n)}$  setzt sich also aus den Anteilen  $P_0^{(n-1)}$  zusammen, die nicht absorbiert oder reflektiert werden und dem reflektierten Anteil von  $P_H^{(n)}$ . Entsprechendes gilt für  $P_H^{(n-1)}$ . Dabei beschreibt  $\alpha := \exp(-\mu_0 t_0 / \gamma_0)$  die Absorption. Aus den Gleichungen (3.3) erhält man eine Rekursionsformel für die Reflektivität eines Mosaikkristalles von n Schichten.

$$R_n = \frac{(\alpha - \Omega)^2}{1 - \Omega R_{n-1}} R_{n-1} + \Omega \quad (3.4)$$

Für einen unendlich dicken Mosaikkristall folgt aus der Gleichung (3.4)

$$R_\infty = \frac{2\Omega}{1 - \alpha^2 + 2\alpha\Omega + \sqrt{(1 + \alpha^2 - 2\alpha\Omega)^2 - 4(\alpha - \Omega)^2}} \quad (3.5)$$

Die Ableitung der Formeln (3.4) und (3.5) werden im Anhang C gezeigt.

### 3.2. Näherungen für einen dicken Mosaikkristall

A) Wenn die Absorption  $\alpha$  sich nähern läßt zu  $\alpha = 1 - \mu_0 t_0 / \gamma_0$ , folgt aus Gleichung (3.5)

$$R = \frac{\Omega + \mu_0 \frac{t_0}{\gamma_0}}{\Omega} + \sqrt{\left| \frac{\Omega + \mu_0 \frac{t_0}{\gamma_0}}{\Omega} \right|^2 - 1} \quad (3.6)$$

Zachariasen /ZAC45/ definiert eine Reflektivität  $\sigma$  pro Einheitsdicke,  $\sigma = \Omega / t_0$ . Aus Gleichung (3.6) folgt dann

$$R = \frac{1}{\sigma} \left\{ \sigma + \frac{\mu_0}{\gamma_0} - \sqrt{\left| \sigma + \frac{\mu_0}{\gamma_0} \right|^2 - \sigma^2} \right\} \quad (3.7)$$

Für die weiteren Näherungen wird angenommen, daß die Halbwertsbreite der Verteilungsfunktion  $W(\Delta)$  sehr viel größer ist, als die der Funktion  $P_H/P_0$  eines Einkristalles. Man kann dann die Verteilungsfunktion in der Formel (3.2) für  $\Omega$  als Konstante betrachten und vor das Integral schreiben.

$$\sigma = \frac{1}{t_0} \Omega (\theta - \theta_0) = \frac{1}{t_0} \int W(\Delta) \frac{P_H}{P_0}(\theta - \theta_0 + \Delta) d\Delta = \frac{1}{t_0} W(\theta - \theta_0) \epsilon R_H^0 \quad (3.8)$$

$\epsilon R_H^0$  ist die integrale Reflektivität eines Kristalliten. Entwickelt man die Gleichung (3.7) nach

$$\left| \frac{\gamma_0 \sigma + \mu_0}{\gamma_0 \sigma} \right|^{-1}$$

in eine Reihe, so folgt

$$R = \frac{\gamma_0 \sigma}{2(\mu_0 + \gamma_0 \sigma)} + \left| \frac{\gamma_0 \sigma}{2(\mu_0 + \gamma_0 \sigma)} \right|^2 + \dots \quad (3.9)$$

### B) Vernachlässigbare primäre und sekundäre Extinktion

Bei der Behandlung von Mosaikkristallen ist es üblich von primärer und sekundärer Extinktion zu sprechen.

Unter primärer Extinktion versteht man den Energieverlust des primären Strahles durch 'Wegreflektieren'; d.h., die tieferen Schichten eines Kristalliten erhalten weniger Primärintensität als die oberen Schichten desselben Kristalliten.

Im Fall der sekundären Extinktion entziehen die oberen Kristallite, die sich in Reflexionsstellung befinden, dem

primären Strahl durch Reflexion Strahlungsenergie und wirken so abschirmend auf die Kristallite der unteren Schichten des Mosaikkristalles.

Primäre Extinktion ist zu vernachlässigen, wenn die Kristallite so dünn sind, daß kein merklicher Anteil der einfallenden Strahlung in einem Kristalliten reflektiert wird. Es gilt dann die Bedingung,

$$A \ll 1 \quad (3.10)$$

Sekundäre Extinktion ist zu vernachlässigen, wenn die Intensitätsabnahme des einfallenden Strahles, bedingt durch Reflexion wesentlich kleiner ist als die durch Absorption; d.h.,

$$\gamma_0 \ll \mu_0 \quad (3.11)$$

Entwickelt man nur den ersten Summanden der Reihenentwicklung (3.9) nach  $\gamma_0/\mu_0$ , erhält man unter Berücksichtigung der Terme erster Ordnung

$$R = \frac{1}{2\mu_0} W(\theta_0) F_H^0 \gamma_0 \quad (3.12)$$

mit  $F_H^0 = Q \cdot t_0 / \gamma_0$  folgt

$$R = \frac{Q}{2\mu_0} W(\theta_0) \quad (3.13)$$

Q ist eine gebräuchliche Schreibweise für

$$Q = (P \Gamma F_H)^2 \frac{\pi^2}{\lambda \sin 2\theta_0} \quad (3.14)$$

In der Literatur wird ein Mosaikkristall, der die Bedingungen (3.10) und (3.11) erfüllt, ein 'idealer Mosaikkristall' genannt.

#### C) Vernachlässigbare primäre und kleine sekundäre Extinktion

Kleine sekundäre Extinktion bedeutet, daß man den quadratischen Term in der obigen Entwicklung noch berücksichtigt, also

$$R = \frac{WQ}{2\mu_0} \left[ 1 - \frac{WQ}{\mu_0} \right] \quad (3.15)$$

#### 4. Integrale Reflektivität

Die Integrale Reflektivität  $R_H^0$  erhält man, wie oben gezeigt, indem man die Rockingkurve über  $\Delta\theta$  integriert. Betrachtet man die allgemeine Form der Rockingkurve (Gleichung (2.24) oder (2.29)), so sieht man, daß es im allgemeinen nicht möglich ist, diese analytisch über den Winkel zu integrieren. Bis heute wurden nur einige Spezialfälle geschlossen gelöst: Der Fall ohne und der mit sehr großer Absorption. Im letzteren Fall ergibt sich dasselbe Ergebnis wie für einen Mosaikkristall. Im allgemeinen Fall bestimmt man die Integrale Reflektivität graphisch.

Hirsch und Ramachandran /HIR50/ haben eine empirische Formel gefunden, die es erlaubt, Integrale Reflektivitäten von Einkristallen im Bragg-Fall mit einem Fehler von etwa 2% zu berechnen. Um diese Formel zu erhalten, haben sie angenommen, daß der Kristall zentrosymmetrisch ist und gezeigt, daß sie mit Hilfe zweier Parameter g und  $\kappa$  in Bezug auf Asymmetrie, Strukturfaktor und Absorption beschrieben werden kann, als

$$R_H^0 = \frac{P \Gamma F_H}{\sqrt{|b|} \sin 2\theta_0} \frac{\pi \sqrt{1+\kappa^2}}{4 \left\{ \exp[-(1+\kappa^2)^2 (|g|+C)] + |g| \right\}} \quad (4.1)$$

mit

$$g = -\frac{1-b}{\sqrt{|b|}} \frac{\lambda}{4\pi} \frac{\mu_0 \sqrt{1+\kappa^2}}{P \Gamma F_H} \quad (4.2)$$

$$\kappa = \frac{F_H''}{F_H'} \quad , \quad C = \ln \frac{32}{3\pi}$$

Für  $g=0$  und  $\kappa=0$  folgt aus (4.1)

$$R_H^0 = \frac{8}{3} \frac{P \Gamma F_H}{\sqrt{|b|} \sin 2\theta_0} \quad (4.3)$$

Dieses ist die Darwinsche Lösung für vernachlässigbare Absorption.

Für große  $g$  geht die Formel (4.1) in die für einen idealen Mosaikkristall (symmetrischer Braggfall,  $b=-1$ ) über

$$R_n^0 = \frac{P \Gamma F_H}{\sqrt{|\mu|} \sin 2\theta_0} \frac{\pi \sqrt{1+\kappa^2}}{4|g|} = \frac{Q}{2\mu_0} \quad (4.4)$$

Um die Aussagen über die Integrale Reflektivität zu verstehen, kann man folgendes überlegen. Die Eindringtiefe der Gamma-Strahlen in einen absorbierenden Kristall hängt von der Absorption und der Extinktion ab. Ohne Absorption hängt die Eindringtiefe nur von der Extinktion ab und aus Gleichung (2.35) erhält man ein  $t_0$  für  $A \sim 1$  von der Größenordnung

$$t_0 \sim \frac{\lambda}{\pi P \Gamma F_H} \sqrt{|\gamma_c \gamma_H|} \quad (4.5)$$

Wenn man annimmt, daß keine Extinktion sondern nur Absorption vorhanden ist, ergibt sich bei einer Schwächung des einfallenden Strahles auf  $1/e$  für die Eindringtiefe

$$t \sim \frac{1}{\mu_0} \left[ \frac{1}{\gamma_c} + \frac{1}{\gamma_H} \right] \quad (4.6)$$

Daraus folgt

$$\frac{t}{t_0} \sim -4g \quad (4.7)$$

$g$  ist also ein Maß dafür, wie stark die Abhängigkeit von Extinktion und Absorption ist. Ein kleiner Wert von  $g$  ergibt eine große Extinktion und kleine Absorption und umgekehrt.  $\kappa$  ist direkt proportional zu dem linearen Absorptionskoeffizienten  $\mu_0$ .

In den Tabellen 3 und 4 sind die Integralen Reflektivitäten für verschiedene Näherungen im Bragg-Fall zusammengestellt.

## 5. Der Einfluß der Asymmetrie auf die Rockingkurven

Ist ein Kristall asymmetrisch geschnitten, bilden die Netzebenen und die Kristalloberfläche einen Winkel  $\delta$  miteinander. In Abbildung 9 sind die Verhältnisse schematisch dargestellt.

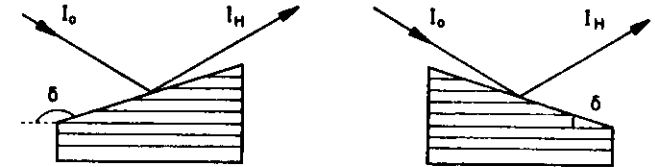


Abbildung 9: Streuverhältnisse bei asymmetrisch geschnittenen Kristallen für den Bragg-Fall

Die Formeln für die Rockingkurven, die in Abschnitt 2 entwickelt werden, beinhalten auch den Fall eines asymmetrisch geschnittenen Kristalles. Um jedoch eine Vorstellung zu erhalten, welche Auswirkungen das asymmetrische Schneiden der Kristalle auf die Rockingkurven von Einkristallen haben, werden hier einige Zusammenhänge näher untersucht.

Dabei spielt der Parameter  $b$  eine zentrale Rolle.

Im Anhang B wird  $b$  definiert und gezeigt, daß es geschrieben werden kann als

$$b = \frac{\gamma_c}{\gamma_H} = \frac{(\vec{n}, \vec{u}_c)}{(\vec{n}, \vec{u}_H)}$$

Die Abbildung 10 zeigt für den Bragg-Fall die geometrischen Verhältnisse.

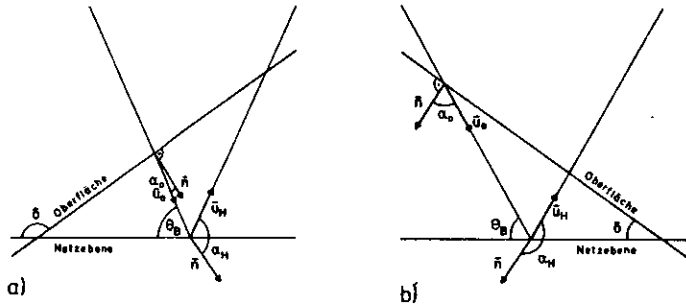


Abbildung 10: Geometrische Darstellung der Winkelbeziehungen für den Parameter  $b$  im Bragg-Fall  
 a)  $180^\circ - \delta \leq \theta_B \leq 90^\circ$  und b)  $\delta \leq \theta_B \leq 90^\circ$

Geometrisch erhält man für  $180^\circ - \delta \leq \theta_B \leq 90^\circ$ ,

$$\begin{aligned} (\bar{n}, \vec{u}_0) &= \cos \alpha_0 = -\sin(\theta_B - \delta) , \\ (\bar{n}, \vec{u}_H) &= \cos \alpha_H = \sin(\theta_B + \delta) , \end{aligned}$$

und für  $\delta \leq \theta_B \leq 90^\circ$ ,

$$\begin{aligned} (\bar{n}, \vec{u}_0) &= \cos \alpha_0 = \sin(\theta_B - \delta) , \\ (\bar{n}, \vec{u}_H) &= \cos \alpha_H = -\sin(\theta_B + \delta) . \end{aligned}$$

Daraus folgt für  $b$

$$b = -\frac{\sin(\theta_B - \delta)}{\sin(\theta_B + \delta)} . \quad (5.1)$$

Aus (5.1) folgt für  $\delta = 0^\circ$  - den symmetrischen Bragg-Fall -

$$b = -1 .$$

Die Grenzen des Bereiches, den  $b$  durchlaufen kann, erge-

ben sich aus (5.1).

Für  $\theta_B = \delta$  folgt  $b = 0$ , und für  $\theta_B = 180^\circ - \delta$  folgt  $b = -\infty$ .

Zur einfacheren Darstellung wird gelegentlich der Parameter  $\beta$  eingeführt.

$$\beta = \frac{b+1}{b-1} \iff b = \frac{\beta+1}{\beta-1}$$

$b$  bzw.  $\beta$  bewegen sich also zwischen

$$-\infty \leq b \leq 0 \quad \text{bzw.} \quad 1 \geq \beta \geq -1$$

Die Abbildung 11 zeigt für den Laue-Fall die geometrischen Verhältnisse.

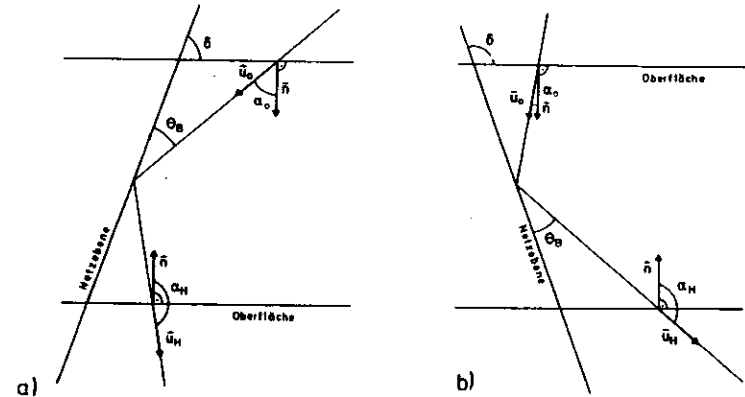


Abbildung 11: Geometrische Darstellung der Winkelbeziehungen für den Parameter  $b$  im Laue-Fall  
 a)  $\theta_B \leq \delta \leq 90^\circ$  und b)  $\theta_B < 180^\circ - \delta \leq 90^\circ$

Geometrisch erhält man für  $\theta_B < \delta \leq 90^\circ$

$$\begin{aligned} (\bar{n}, \vec{u}_0) &= \cos \alpha_0 = -\sin(\theta_B - \delta) , \\ (\bar{n}, \vec{u}_H) &= \cos \alpha_H = -\sin(\theta_B + \delta) , \end{aligned}$$

und für  $\theta_0 = 180^\circ - \delta = 90^\circ$

$$\begin{aligned} (\vec{n}, \vec{u}_0) &= \cos \alpha_0 = -\sin(\theta_0 - \delta) , \\ (\vec{n}, \vec{u}_n) &= \cos \alpha_n = -\sin(\theta_0 + \delta) . \end{aligned}$$

Daraus folgt für b

$$b = \frac{\sin(\theta - \delta)}{\sin(\theta + \delta)} \quad (5.2)$$

für  $\delta = 0^\circ$  - den symmetrischen Laue-Fall - erhält man

$$b = +1 .$$

Analog zum Bragg-Fall erhält man aus (5.2) die Grenzen des Bereiches, den b durchlaufen kann.

Für  $\theta_0 = \delta$  folgt  $b = 0$ , und für  $\theta_0 = 180^\circ - \delta$  folgt  $b = \infty$ .

b bzw.  $\beta$  durchlaufen also folgenden Bereich

$$0 \leq b \leq \infty \quad \text{bzw.} \quad -1 \leq \beta \leq 1 .$$

### 5.1. Geometrische Interpretation der Ergebnisse der Dynamischen Theorie

Für die folgende Diskussion ist es hilfreich, die Ergebnisse der Dynamischen Theorie geometrisch zu veranschaulichen. (siehe Abbildung 12)

Die Gleichung (2.10) heißt 'Dispersionsgleichung',

$$(2\delta_n + \Gamma F_n)(2\delta_n - \Gamma F_n) = \rho^2 \Gamma^2 F_n \bar{n} .$$

Mit zwei neuen Parametern  $\xi_0$  und  $\xi_n$ ,

$$\xi_0 = \frac{1}{2} k(2\delta_n + \Gamma F_n) \quad \xi_n = \frac{1}{2} k(2\delta_n - \Gamma F_n) , \quad (5.3)$$

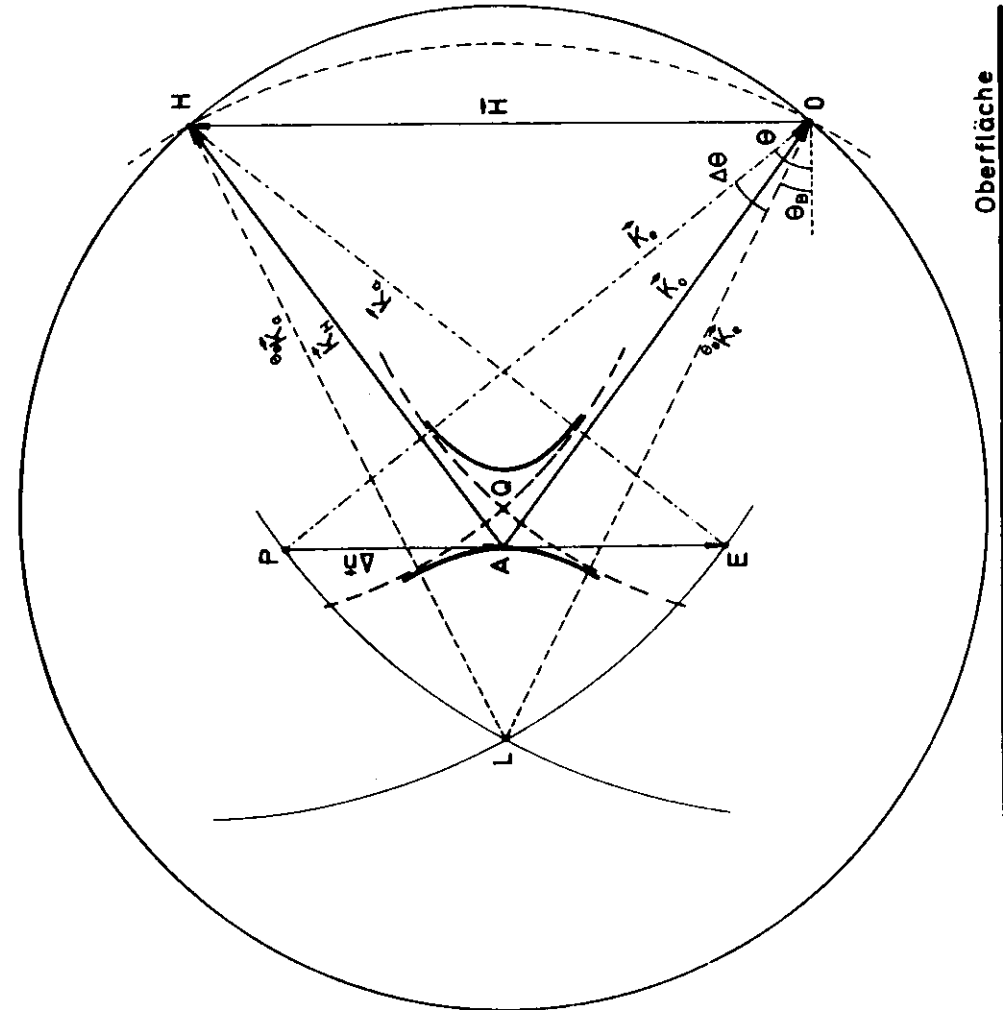


Abbildung 12: Darstellung der Reflexion im reziproken Raum

Die Abbildung zeigt die Ewald-Kugel im reziproken Raum korrigiert um den mittleren Brechungsindex. Der Laue-Punkt L wäre der Mittelpunkt im Vakuum, Q ist der Mittelpunkt im wirklichen Kristall. Die Hyperbeln (dick gezeichnet) sind die Dispersionsflächen, die durch die Gleichung (5.4) bestimmt sind.  $\vec{H}$  ist der reziproke Gittervektor der hkl-Reflexion. Um zu einem einfallenden Strahl mit Wellenvektor  $\vec{K}_e$  den inneren einfallenden Wellenvektor  $\vec{K}_0$  zu bestimmen, zeichnet man den Wellenvektor  $\vec{K}_e$  unter dem Einfallswinkel  $\theta$  ein und erhält den Punkt P. Einerseits unterscheidet sich  $\vec{K}_0$  vom Wellenvektor  $\vec{K}_e$  innerhalb des Kristalles nur um einen Vektor  $\Delta \vec{n}$  in Richtung der Oberflächennormalen  $\vec{n}$  (2.18), andererseits geht  $\vec{K}_0$  von einem Punkt auf der Dispersionsfläche aus. Damit ist der Punkt A bestimmt und damit auch  $\vec{K}_0$ . Den ausfallenden Strahl mit Wellenvektor  $\vec{K}_a$  erhält man analog.

läßt sich die Dispersionsgleichung schreiben als

$$\xi_o \xi_H = \frac{1}{4} k^2 \Gamma^2 F_H F_o \quad (5.4)$$

Dieses ist die Gleichung einer gleichseitigen Hyperbel. Um  $\xi_o$  und  $\xi_H$  anschaulich zu machen, schreibt man (5.3) um:

$$\begin{aligned} \xi_o &= k(1 + \delta_o) - k(1 - \frac{1}{2} \Gamma F_o) \\ \xi_H &= k(1 + \delta_H) - k(1 - \frac{1}{2} \Gamma F_o) \end{aligned} \quad (5.5)$$

In (2.9) wurde gezeigt, daß

$$|\vec{K}_o| = k(1 + \delta_o) \quad \text{und} \quad |\vec{K}_H| = k(1 + \delta_H)$$

ist. Aus (5.5) sieht man, daß betragsmäßig  $\xi_o$  die Differenz zwischen dem einfallenden Wellenvektor  $\vec{K}_o$  und dem Wellenvektor im Vakuum  $\vec{K}_o$  ( $|\vec{K}_o| = k$ ) - korrigiert durch den mittleren Brechungsindex  $1 - \frac{1}{2} \Gamma F_o$  - ist. Analoges gilt für  $\xi_H$ .

Die Dispersionsgleichung fordert, daß die Anfangspunkte der Wellenvektoren  $\vec{K}_o$  und  $\vec{K}_H$  auf einer Hyperbel liegen. Betrachtet man einen unter dem Winkel  $\theta$  einfallenden Strahl mit dem Wellenvektor  $\vec{K}_o$ , kann man sich den zugehörigen Wellenvektor im Kristall  $\vec{K}_o$  konstruieren. Auf Grund der Randbedingungen unterscheiden sich  $\vec{K}_o$  und  $\vec{K}_o$  nur um einen Vektor in Richtung der Oberflächennormalen  $\vec{n}$ . Entsprechend erhält man den reflektierten Wellenvektor  $\vec{K}_H$  bzw.  $\vec{K}_a$ .

### 5.2. Neigung der Kristalloberfläche gegen die Netzebenen

In den obigen Gleichungen wurde die Größe  $b$  eingeführt. Sie sagt etwas aus über den Winkel zwischen den Netzebenen und der Kristalloberfläche. Für die Anwendung ist es wichtig zu wissen, wie der Zusammenhang zwischen  $b$  und dem Neigungswinkel  $\delta$  ist.

$$\delta = - \arctan \left\{ \frac{b+1}{b-1} \tan \theta_a \right\} \quad (5.6)$$

In Abbildung 13 wird dieser Zusammenhang graphisch dargestellt. Für kleine  $\delta$  ist  $\delta \approx b$ .

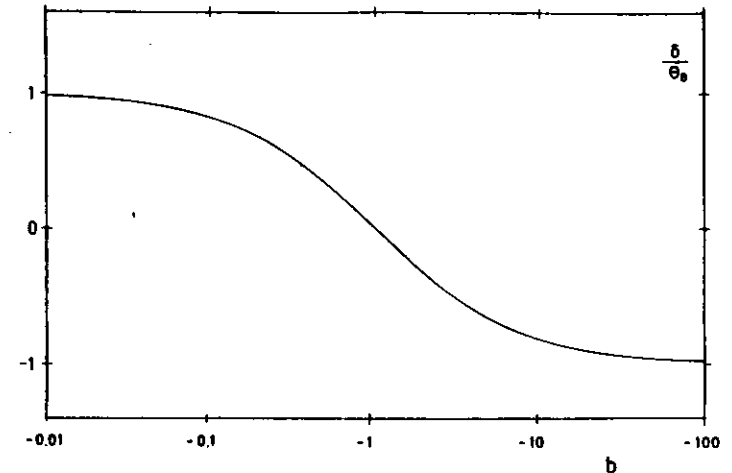


Abbildung 13: Zusammenhang zwischen dem Neigungswinkel  $\delta$  und dem Parameter  $b$  - Rechnungen nach (5.6)



5.3. Verbreiterung bzw. Verengung des Ausgangsstrahles auf Grund asymmetrisch geschnittener Kristalle und der Dicke der Kristalle

$S_0$  sei der Querschnitt des einfallenden und  $S_H$  der des ausfallenden Strahles.  $S_H'$  sei der Querschnitt des ausfallenden Strahles, der auf Grund der Asymmetrie des Kristalles von  $S_0$  abweicht und  $S_H''$  der, der auf Grund der Dicke des Kristalles zustande kommt. Es gilt dann

$$S_H = S_H' + S_H'' \quad (5.7)$$

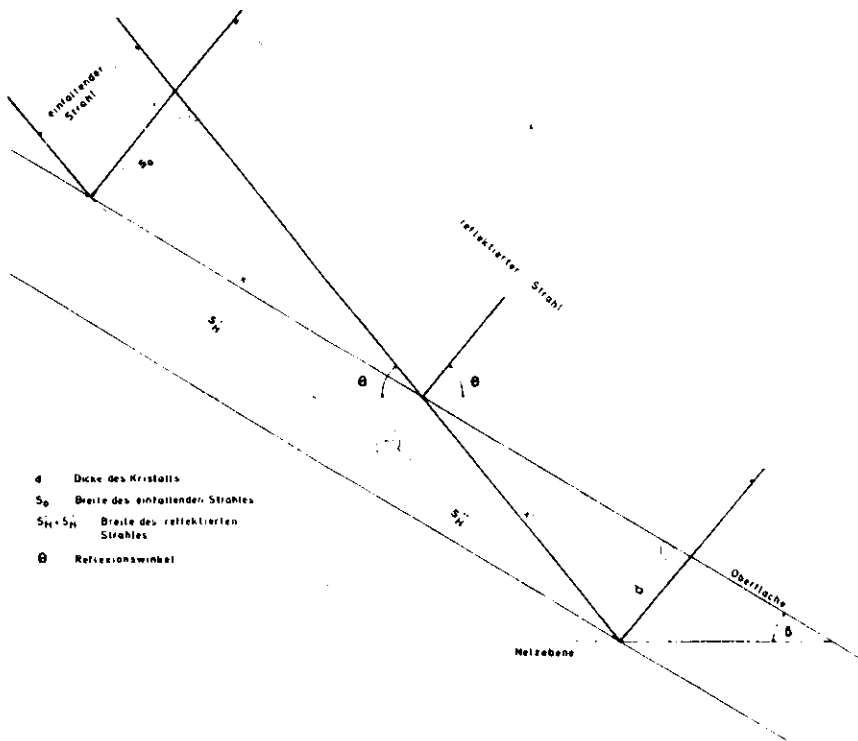


Abbildung 14: Geometrie für einen reflektierten Gammastrahl an einem asymmetrisch geschnittenen Kristall der Dicke d.

Geometrisch erhält man mit Hilfe der Abbildung 14

$$S_H' = S_0 \frac{\sin(\theta + \delta)}{\sin(\theta - \delta)}$$

$$S_H'' = d \frac{\sin 2\theta}{\sin(\theta - \delta)}$$

Für  $S_H$  erhält man somit

$$S_H = S_0 \frac{1}{|b|} \left| 1 + \frac{2d \cos \theta}{S_0} \frac{\sin \theta}{\sin(\theta + \delta)} \right| \quad (5.8)$$

Für symmetrisch geschnittene Kristalle, d.h.,  $b = :1$  und  $\delta = 0^\circ$ , folgt aus (5.8)

$$S_H = S_0 \left| 1 + \frac{2d \cos \theta}{S_0} \right| \quad (5.9)$$

Für dünne Kristalle im Vergleich zum Querschnitt des einfallenden Strahles, also  $d \ll S_0$ , folgt ( $0^\circ < \theta < \theta + \delta < 90^\circ$ ) aus (5.8)

$$S_H = S_0 \frac{1}{|b|} \quad (5.10)$$

Für Einkristalle ist die Bedingung  $d \ll S_0$  in der Regel erfüllt und damit die Formel (5.10) anwendbar. Aus (2.35) ergeben sich mit  $A = 1$  die Eindringtiefen für Gamma-Strahlen in Einkristalle (Extinktionslänge). Für Mosaikkristalle ist dies jedoch nicht der Fall. Einige sind in Tabelle 1 für eine Gamma-Energie von 14.4 keV ( $\lambda = 0.86 \text{ \AA}$ ) zusammengestellt.

Kristall (Reflex)	Braggwinkel	Extinktionslänge ( $10^{-6} \text{ m}$ )
Ag (111)	10.5°	0.36
(444)	46.8°	4.9
Ge (111)	7.6°	0.64
(444)	31.8°	4.0
Graphit-Mosaik*		
(002)	7.4°	~1600
(008)	30.9°	~2300

Tabelle 1: Extinktionslängen für einige Kristalle mit  $\lambda = 0.86 \text{ \AA}$   
\*) Empirisch bestimmt für den in Abschnitt F.2.1. behandelten Graphit-Mosaikkristall

### 5.4. Verschiebung der Mitte der Rockingkurve in Bezug auf den Bragg-Winkel

Die Rockingkurven für Kristalle ohne Absorption sind symmetrisch um ihr Maximum bei  $y=0$ . Unter Verschiebung versteht man die Differenz von  $\theta_B - \theta(y=0)$ . Die Rockingkurven von Kristallen mit Absorption sind nicht symmetrisch um  $Re(y)=0$ , trotzdem wollen wir die Verschiebung genauso definieren wie oben. Aus

$$y = \frac{b \Delta\theta \sin 2\theta_B + \frac{1}{2} \Gamma F_0 (b-1)}{\sqrt{|b|} \Gamma \sqrt{F_H} F_H} \quad (5.11)$$

folgt für  $Re(y)=0$  und zentrosymmetrische Kristalle

$$\Delta\theta = \frac{\frac{1}{2} \Gamma F_0 (1-b)}{b \sin 2\theta_B} \left( 1 + \frac{F_H'}{F_H} \frac{F_H''}{F_H} \right) \quad (5.12)$$

Mit  $\beta$  folgt aus (5.12)

$$\Delta\theta = -\frac{1}{1-\beta} \frac{\Gamma F_0'}{\sin 2\theta_B} \left( 1 + \frac{F_H'}{F_H} \frac{F_H''}{F_H} \right) \quad (5.13)$$

Gewöhnlich setzt man den Term in der geschweiften Klammer gleich eins, da er nur etwa um  $10^{-2} - 10^{-3}$  von eins abweicht, bzw. für den Fall ohne Absorption gleich eins ist.

Der Braggreflex ist also um  $\Delta\theta$  vom exakten Braggwinkel verschoben. Aus der Gleichung ist ersichtlich, daß nur für den symmetrischen Laue-Fall,  $b=+1$ , keine Verschiebung vorhanden ist. Für  $b > +1$  ergibt sich eine Verschiebung zu kleineren Winkeln, im Fall  $b < +1$  zu größeren Winkeln als dem Braggwinkel, d.h., daß bei einer Bragganordnung eine Verschiebung immer zu größeren Winkeln als dem Bragg-Winkel gegeben ist.

In Abbildung 15 ist der Zusammenhang (5.13) graphisch dargestellt. Für große  $-b$  bzw.  $\beta \rightarrow 1$  konvergiert die Funktion gegen  $\frac{1}{2} \Gamma F_0' / \sin 2\theta_B$  und für  $b \rightarrow 0$  bzw.  $\beta \rightarrow -1$  divergiert sie.

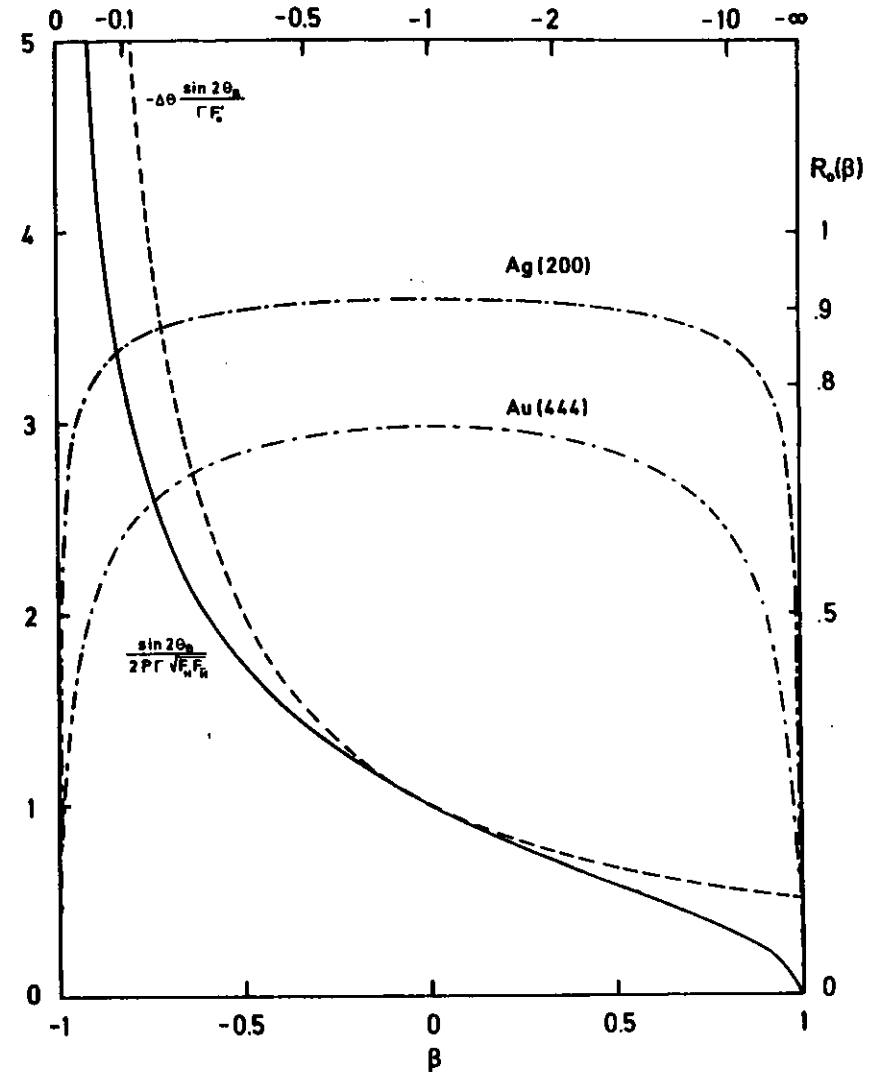


Abbildung 15:

- Halbwidthsbreite  $B$  in Abhängigkeit von  $\beta$  bzw.  $b$  normiert auf  $-\Delta\theta \sin 2\theta_B / \Gamma F_0'$
- - - - - Verschiebung der Mitte der Rockingkurve in Abhängigkeit von  $\beta$  bzw.  $b$  normiert auf  $\frac{\sin 2\theta_B}{2\Gamma \sqrt{F_H} F_H}$
- · - · - Reflektivität  $R_0$  in der Mitte der Rockingkurve

In der Abbildung 12 repräsentiert die Strecke  $\overline{LP}$  die Winkelabweichung  $\Delta\theta$  des einfallenden Strahles vom Braggwinkel, denn

$$\Delta\theta = \frac{\overline{LP}}{k}$$

Für den symmetrischen Bragg-Fall ( $b=-1$ ) ergeben sich z.B. folgende Werte

Kristall	$\Delta\theta$
Si (422)	3.1''
Ag (200)	9.2''
Graphit (002)	3.7''

Für den 200-Reflex von Silber ergeben sich für verschiedene Werte von  $b$ :

$b$	$\Delta\theta$
- 0.5	13.8''
- 1.0	9.2''
- 2.0	6.9''
-10.0	5.0''

5.5. Halbwertsbreite der Rockingkurve

Für die Behandlung ohne Absorption ist die Breite  $B$  gegeben durch

$$B = |\theta_s(y=1) - \theta_s(y=0)|$$

Im realen Fall tritt jedoch immer Absorption auf, trotzdem soll auch in diesem Fall unter der Breite einer Rocking-

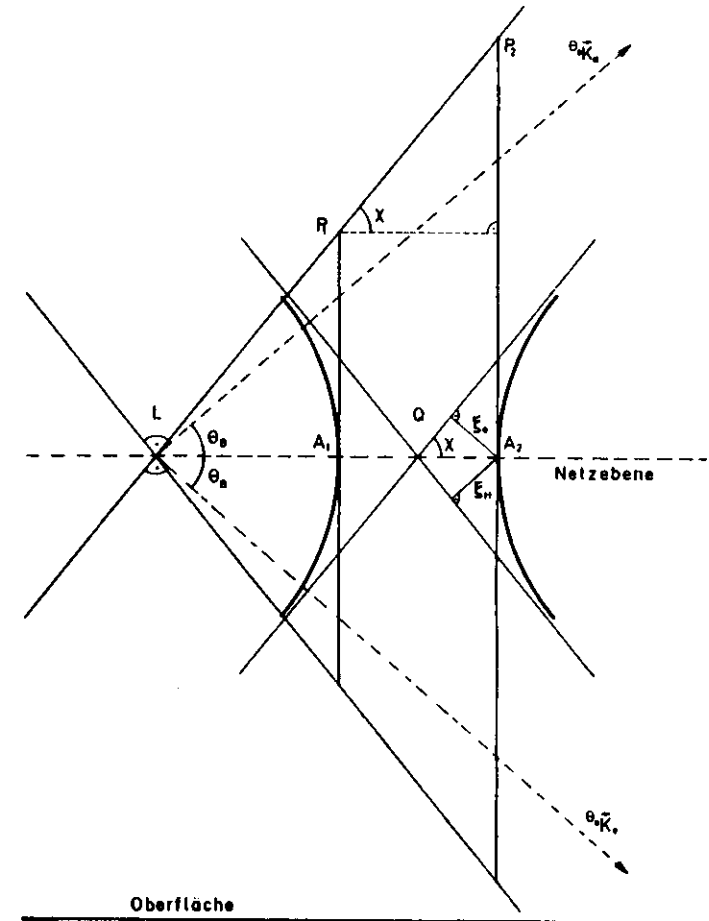


Abbildung 16: Geometrische Darstellung der Streuung zur Erklärung der Breite einer Rockingkurve. Symmetrischer Bragg-Fall,  $\chi = 90^\circ - \theta_B$

kurve die Differenz  $|\theta - \theta_0|$  verstanden werden.  
Aus (5.11) folgt für  $y=1$  und  $\theta$ .

$$\sqrt{|b|} P \Gamma \sqrt{F_H F_R} = b(\theta_0 - \theta) \sin 2\theta_0 + \frac{1}{2} \Gamma F_H (b-1) ,$$

und für  $y=-1$  und  $\theta$ .

$$-\sqrt{|b|} P \Gamma \sqrt{F_H F_R} = b(\theta_0 - \theta) \sin 2\theta_0 + \frac{1}{2} \Gamma F_H (b-1) .$$

Die Breite B ergibt sich damit zu

$$B = \frac{1}{\sqrt{|b|}} \frac{2P \Gamma \sqrt{F_H F_R}}{\sin 2\theta_0} , \quad (5.14)$$

bzw. mit der Substitution  $\beta$  für b

$$B = \sqrt{\frac{1-\beta}{1+\beta}} \frac{2P \Gamma \sqrt{F_H F_R}}{\sin 2\theta_0} . \quad (5.15)$$

Mit Hilfe der Formel (5.4) und der Abbildung 16 läßt sich die Formel (5.14) für den symmetrischen Bragg-Fall auch anschaulich verifizieren.

Die Konstruktion der Wellenvektoren in Abbildung 16 erfolgt analog zu der in Abbildung 12.

Die Wellenvektoren, die zwischen  $P_1$  und  $P_2$  ihren Ursprung haben, werden totalreflektiert. Es gibt dort keinen Hyperbelpunkt, und somit kann keine reflektierte Welle im Kristall existieren. Die Größe  $B = \overline{P_1 P_2} / k$  ist die Breite der Rockingkurve. Es gilt

$$B = \frac{\overline{P_1 P_2}}{k} = \frac{1}{\sin \theta_0} \frac{\overline{A_1 A_2}}{k} .$$

$\overline{A_1 A_2}$  ergibt sich aus (5.4) mit  $\xi_0 = \xi_H$  zu

$$\overline{A_1 A_2} = \frac{\xi}{\sin \chi} = 2 \frac{k P \Gamma \sqrt{F_H F_R}}{2 \cos \theta_0} .$$

Für B folgt dann

$$B = \frac{2P \Gamma \sqrt{F_H F_R}}{\sin 2\theta_0} .$$

In Abbildung 15 ist die Breite B einer Rockingkurve in Abhängigkeit von  $\beta$  bzw. b graphisch dargestellt.

## 5.6. Verhältnis von Eingangs- zu Ausgangsdivergenz

Es wurde gezeigt, wie sich die Breite der Rockingkurve in Abhängigkeit des asymmetrischen Kristallschnittes verändert. Für die Anwendung ist es interessant, wie die Divergenz des Ausgangsstrahles von der Divergenz des Eingangsstrahles abhängt. In Abbildung 17 sind die Verhältnisse für einen asymmetrisch geschnittenen Kristall im reziproken Raum für  $\delta = 10^\circ$  und  $\theta_0 = 40^\circ$  dargestellt. Die Konstruktion erfolgt wie oben beschrieben.

Geometrisch erhält man eine Beziehung für die Reflexbreite von einfallendem zu reflektiertem Strahl.

$$\overline{E_1 E_2} = \overline{P_1 P_2} \frac{\sin(\theta_0 + \delta)}{\sin(\theta_0 - \delta)} = \frac{1}{|b|} \overline{P_1 P_2} \quad (5.16)$$

In Gleichung (5.10) werden die geometrischen Abmessungen von einfallendem und reflektiertem Strahl verknüpft. Faßt man beide Aussagen zusammen, so folgt, daß ein geometrisch breiter Strahl mit einer kleinen Divergenz einen geometrisch schmalen Strahl mit großer Divergenz erzeugt; d.h., es gilt das erwartete Ergebnis

$$S_n \overline{E_1 E_2} = S_n \overline{P_1 P_2} . \quad (5.17)$$

In Abbildung 18 sind für den Silberreflex 200 mit  $\delta = 4^\circ$  ( $b = -2$  und  $b = -0.5$ ) Rockingkurven dargestellt, die die Verbreiterung des Reflexes zeigen. Bubakova /BUB62/ hat auch experimentell diese Verhältnisse verifiziert.

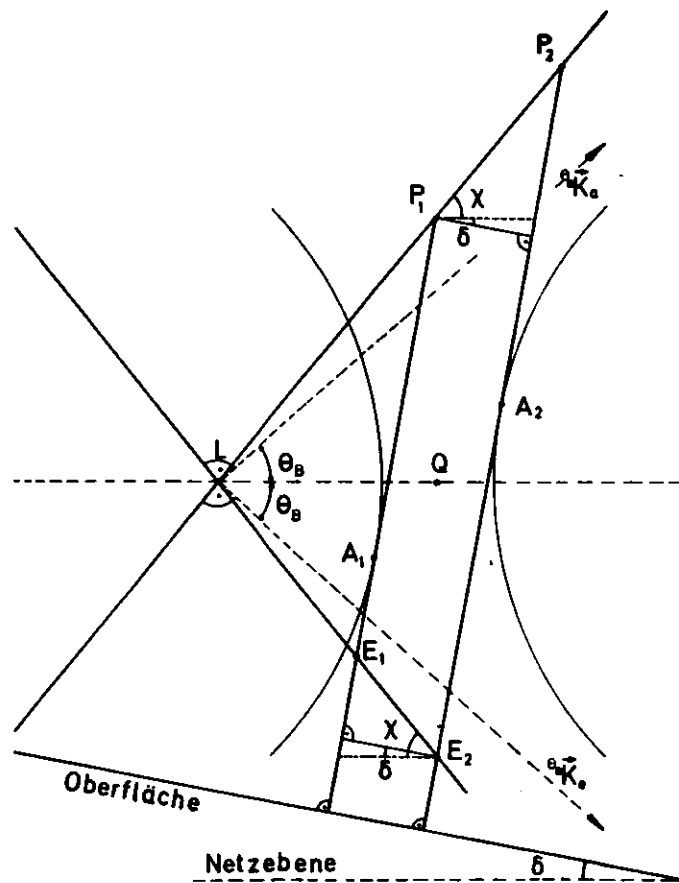


Abbildung 17: Divergenz des einfallenden und ausfallenden Strahles

Die Abbildung zeigt einen vergrößerten Ausschnitt der Abbildung 12. Die Kreise um O und H durch L sind zu Geraden entartet. Die Konstruktion eines inneren einfallenden Strahles erfolgt, wie in Abbildung 12 gezeigt wird, für zwei einfallende Wellenvektoren, die den Bereich der Totalreflexion definieren. Sie bestimmen die Punkte  $P_1$  und  $P_2$ , und damit die Punkte  $A_1$  und  $A_2$  auf der Hyperbel. Für die ausfallenden Wellenvektoren ergeben sich entsprechend aus den Punkten  $A_1$  und  $A_2$  die Punkte  $E_1$  und  $E_2$ . Die Strecken  $\overline{P_1 P_2}$  und  $\overline{E_1 E_2}$  sind ein Maß für die mögliche Winkeldivergenz im Eingangs- bzw. Ausgangskanal.  $\delta$  ist der Winkel zwischen der Oberfläche und der Netzebene ( $\delta = 10^\circ$ ) und  $\chi = 90^\circ - \theta_B$  ( $\theta_B = 40^\circ$ ).

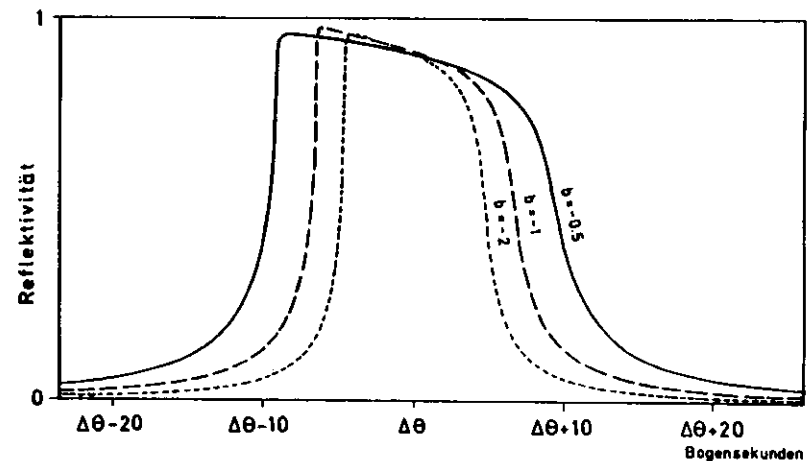


Abbildung 18: Rockingkurven des 200-Reflexes von Silber für verschiedene Parameter  $b$  nach (2.29) berechnet. Die Kurven sind so verschoben, daß die Mitten der Rockingkurven aufeinander liegen. ( $\lambda = 0.86 \text{ \AA}$ ,  $\theta_B = 12.15^\circ$ )

### 5.7. Reflektivität

Zur Darstellung der Reflektivität in Abhängigkeit von  $b$  wird hier die Reflektivität an der Stelle  $\Delta\theta$ ,  $R(\Delta\theta) =: R_0$ , betrachtet. In der y-Skala ist das gleichbedeutend mit  $\text{Re}(y) = 0$ . Ferner beschränkt man sich auf dicke Einkristalle.

Aus (2.42) erhält man für  $\text{Re}(y)=0$  und zentrosymmetrische Kristalle ( $F_H = F_{\bar{H}}$ ),

$$R_s = \left| \text{Im}(y) : \sqrt{|\text{Im}(y)|^2 + 1} \right|^2 \quad (5.18)$$

Für Kristalle ohne Absorption erhält man  $R_0=1$ , da  $y$  reell ist. Für reale Kristalle wird  $y$  komplex und der Imaginärteil ist ein Maß für die Absorption. Zwar wird hier die maximale Reflektivität nicht ganz erreicht (siehe Abbildung 18), jedoch läßt sich die 'b-Abhängigkeit' der Reflektivität einfach darstellen.

Aus (5.11) erhält man für den Imaginärteil von  $y$  mit

$$y_i = \frac{F_H F_H''}{P(E_H^2 + E_H''^2)} \quad (5.19)$$

$$\text{Im}(y) = \frac{b-1}{2\sqrt{|b|}} y_i = g \quad \text{Im}(y) = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} y_i = g \quad (5.20)$$

$g$  ist die in (4.2) definierte Größe. Sie ist ein Maß für das Verhältnis von Absorption und Extinktion.

Für die Reflektivität  $R_0$  erhält man somit

$$R_0 = \left| \frac{y_i}{\sqrt{1-\beta^2}} : \sqrt{\frac{y_i^2}{1-\beta^2} + 1} \right|^2 \quad (5.22)$$

In Tabelle 2 sind für einige Rockingkurven die maximalen Reflektivitäten, die sich aus (4.42) ergeben, und  $R_0$  aus (5.22), zusammengestellt.

Reflex	$\theta_b$	$\text{Im}(y)$	$R_0$	$R_{\max}$
Ag (111)	10.51°	0.043	91.7%	97.9%
Ag (200)	12.15°	0.046	91.1%	97.4%
Ag (444)	46.28°	0.148	74.5%	79.0%

Tabelle 2: Reflektivitäten ( $\lambda = 0.86 \text{ \AA}$ )

In Abschnitt 4 wurde gezeigt, daß ein kleiner Wert von  $g$  und damit von  $\text{Im}(y)$  eine hohe Reflektivität und ein großer Wert eine kleine Reflektivität bedeutet. Dieses Beispiel bestätigt die Aussage.

In der Abbildung 15 sind für Ag (200) und Au (444) die Reflektivität  $R_0$  in Abhängigkeit von  $\beta$  bzw.  $b$  dargestellt.

### 5.8. Integrale Reflektivität

Hirsch und Ramachandran /HIR50/ zeigen, daß man sowohl die Integrale Reflektivität eines Einkristalles als auch die eines idealen Mosaikkristalles mit Hilfe der Parameter  $g$  und  $\kappa$  schreiben kann, und erhalten

$${}^E R_H^0 = \frac{1}{\sqrt{|b|}} \frac{P F_H F_H''}{\sin 2\theta_b} {}^E R_H^*(g, \kappa) \quad \text{bzw.} \quad {}^M R_H^0 = \frac{1}{\sqrt{|b|}} \frac{P F_H F_H''}{\sin 2\theta_b} {}^M R_H^*(g, \kappa)$$

Die Integrale Reflektivität ist also proportional zu

$$\frac{1}{\sqrt{|b|}} R_H^*(g, \kappa)$$

Für Germanium wurde für verschiedene Parameter  $b$  die Integrale Reflektivität für einen Einkristall nach Gleichung (4.1) und einen idealen Mosaikkristall nach Tabelle 4 berechnet.

In Abbildung 19 sind die Verhältnisse der Integralen Reflektivitäten  $R(\beta)/{}^M R(0)$  gegen die Variable  $\beta$  aufgetragen. Aus Tabelle 4 und (4.1) folgt für dieses Verhältnis an der Stelle  $\beta = 0$ .

$$\frac{{}^E R(0)}{{}^M R(0)} = \left[ 1 + \frac{1}{|g(0)| \exp((1+\kappa^2)^2 (|g| + C))} \right]^{-1}$$

Es hängt also im wesentlichen von  $|g|$  ab. Daraus ergibt sich die Tatsache, daß für dieselben Kristalle die Verhältnisse höherer Reflexe größer sind als für niedrigere, da der Strukturfaktor mit der Ordnung der Reflexe kleiner wird und damit  $|g|$  größer.

Weiterhin sieht man aus der Abbildung, daß die Integrale Reflektivität eines Einkristalles immer kleiner als die eines idealen Mosaikkristalles ist, und für  $\delta = \theta_b$ , d.h.,  $\beta = -1$  gleich der eines idealen Mosaikkristalles ist. Die maximale Integrale Reflektivität eines Einkristalles ist gerade doppelt so groß, wie die eines idealen Mosaikkristalles für den symmetrischen Bragg-Fall ( $b = -1 \Leftrightarrow \beta = 0$ ).

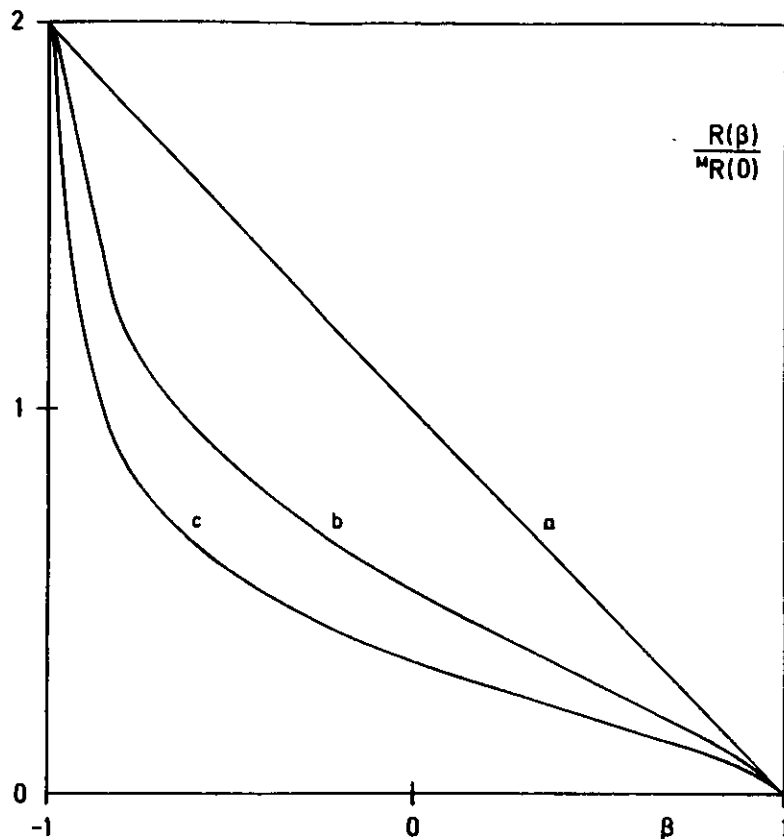


Abbildung 19: Integrale Reflektivitäten von Germanium in Abhängigkeit von  $\beta$ . Die Integrale Reflektivität  $R(\beta)$  ist normiert auf die Integrale Reflektivität des zugehörigen Mosaikkristalles für  $\beta=0$  (symmetrischer Bragg-Fall)  $R(0)$ .

- a) 111-Reflex Mosaikkristall
- b) 333-Reflex Einkristall
- c) 111-Reflex Einkristall

## 6. Übersichtstabellen und Nomenklatur

In den folgenden Tabellen 3 und 4 sind für einen Einkristall und einen Mosaikkristall die Formeln für die Rockingkurven und die Integrale Reflektivität zusammengestellt. Die Integrale Reflektivität erhält man durch Integration der entsprechenden Rockingkurve über den Winkel. Die einzige Ausnahme ist die empirische Formel von Hirsch und Ramachandran.

Im Anschluß daran folgt eine Übersicht der verwendeten Nomenklatur. Leider bleibt es nicht aus, für verschiedene Begriffe unter Umständen dasselbe Symbol zu verwenden. In diesen Fällen ist das jedoch einzeln erwähnt.

Das Skalarprodukt der Vektoren  $\vec{A}$  und  $\vec{B}$  wird mit  $(\vec{A}, \vec{B})$ , und das Vektorprodukt mit  $[\vec{A}, \vec{B}]$  bezeichnet.

EINKRISTALL

	Rockingkurve	Integrale Reflektivität
allgemeine Formel	$R^d = \left  \frac{\sqrt{ b } P \Gamma F_H}{z - \sqrt{q + z^2} \coth \left[ i n \frac{k_L}{\gamma_0} \sqrt{q + z^2} \right]} \right ^2$ $R^i = \left  \frac{\sqrt{q + z^2} \exp \left[ i n \frac{k_L}{\gamma_0} (\Gamma F_0 + z) \right]}{\sqrt{ b } \left[ z \sinh \left[ i n \frac{k_L}{\gamma_0} \sqrt{q + z^2} \right] - \sqrt{q + z^2} \cosh \left[ i n \frac{k_L}{\gamma_0} \sqrt{q + z^2} \right] \right]} \right ^2$	$R_H^0 = \frac{P \Gamma  F_H }{\sqrt{ b } \sin 2\theta_0} \frac{\pi \sqrt{1 + \kappa^2}}{4 \left[ \exp \left\{ -(1 + \kappa^2) (\eta_0 + C) \right\} +  \eta_0  \right]}$ $C = i n \frac{32}{3\pi}$
dicker Kristall $A \gg 1$	$R^d = \left  \frac{F_H}{F_R} \right  y \pm \sqrt{y^2 - 1}$	$R_H^0 = \frac{8}{3} \frac{P \Gamma  F_H }{\sqrt{ b } \sin 2\theta_0}$
Ohne Absorption		
allgemeine Formel	$R^d = \frac{1}{y^2 + (1 - y^2) \coth^2 A \sqrt{1 - y^2}}$ $R^i = \frac{1 - y^2}{y^2 \sinh^2 A \sqrt{1 - y^2} + (1 - y^2) \cosh^2 A \sqrt{1 - y^2}}$	$R_H^0 = \pi \tanh A \frac{P \Gamma  F_H }{\sqrt{ b } \sin 2\theta_0}$
dicker Kristall $A \gg 1$	$R^d = 1 \quad \text{für } y \leq 1$ $R^d = 1 - \sqrt{1 - y^2} \quad \text{für } y > 1$	$R_H^0 = \pi \frac{P \Gamma  F_H }{\sqrt{ b } \sin 2\theta_0}$
dünnere Kristall $A \ll 1$	$R^d = \frac{\sin^2 A y}{y^2}$	$R_H^0 = \pi A \frac{P \Gamma  F_H }{\sqrt{ b } \sin 2\theta_0}$

Tabelle 3: Zusammenstellung der Formeln für einen Einkristall, Bragg - Fall

MOSAIKKRISTALL

	Rockingkurve	Integrale Reflektivität
allgemeine Formel	$R_n = \frac{(\alpha - \Omega)^2}{1 - \Omega R_{n-1}} R_{n-1} + \Omega$	
dicker Kristall	$R^d = \frac{2\Omega}{1 - \alpha^2 + 2\alpha\Omega + \sqrt{(1 - \alpha^2 - 2\alpha\Omega)^2 - 4(\alpha - \Omega)^2}}$	
Kristallite ohne Absorption		
Kristallite ohne Absorption und $\alpha = 1 - \mu_0 \frac{t_0}{\gamma_0}$	$R^d = \frac{\sigma + \frac{H_0}{\gamma_0} - U}{\sigma} \left[ 1 - \frac{U \exp[-U t_0]}{\left(\sigma + \frac{H_0}{\gamma_0}\right) \sinh U t_0 + U \cosh U t_0} \right]$	
dicker Kristall	$R^d = \frac{\sigma + \frac{H_0}{\gamma_0} - \sqrt{\left(\sigma + \frac{H_0}{\gamma_0}\right)^2 - \sigma^2}}{\sigma}$	
idealer Mosaikkristall $\gamma_0 \sigma \ll \mu_0$ $A \ll 1$	$R^d = \frac{Q}{2\mu_0} W$	$R_H^0 = \frac{Q}{2\mu_0}$
$\gamma_0 \sigma < \mu_0$ $A \ll 1$	$R^d = \frac{WQ}{2\mu_0} \left[ 1 - \frac{WQ}{\mu_0} \right]$	$R_H^0 = \frac{Q}{2(\mu_0 + qQ)} \quad ; \quad q = \frac{1}{2\sqrt{\pi\gamma}}$

Tabelle 4: Zusammenstellung der Formeln für einen Mosaikkristall, Bragg - Fall



Nomenklatur

$\vec{D}$	Verschiebungsvektor
$\vec{D}_o, \vec{D}_H$	Verschiebungsvektor der inneren einfallenden bzw. reflektierten Welle
$D_o^i, D_o^{(1)}, D_o^{(2)}$	Amplitude des Verschiebungsvektors der inneren einfallenden Welle
$D_H^i, D_H^{(1)}, D_H^{(2)}$	Amplitude des Verschiebungsvektors der inneren reflektierten Welle
	$i = o, \pi$ ; (1), (2) - die beiden möglichen Lösungen
$\vec{E}$	Elektrischer Feldstärkevektor
$\vec{E}_e$	Elektrischer Feldstärkevektor der äußeren einfallenden Welle
$\vec{K}_a, \vec{K}_e$	Wellenvektor der äußeren reflektierten bzw. einfallenden Welle
$\vec{K}_o, \vec{K}_H$	Wellenvektor der inneren einfallenden bzw. reflektierten Welle
$k$	Wellenzahl im Vakuum - $k = 1/\lambda$
$\lambda$	Wellenlänge im Vakuum
$I_o, I_H, I_t$	Intensität der einfallenden, reflektierten bzw. transmittierten Welle
$P_o, P_H, P_t$	Intensität der einfallenden, reflektierten bzw. transmittierten Welle pro Einheitsfläche
$R$	Reflektivität
$R^d, R^t$	reflektierter bzw. transmittierter Anteil an der Reflektivität
$R_o$	Reflektivität bei $y=0$ (Mitte der Rockingkurve)
$R_n$	Reflektivität eines Mosaikkristalles mit $n$ Schichten
$R_\infty$	Reflektivität eines unendlich dicken Mosaikkristalles
$\Omega$	Reflektivität einer Schicht eines Mosaikkristalles
$o$	Reflektivität pro Einheitsdicke eines Mosaikkristalles
$R_H^e, R_H^y$	Integrale Reflektivität im $\theta$ - bzw. $y$ -Maßstab
$E_{R_H}^e, E_{R_H}^y$	Integrale Reflektivität im $\theta$ - bzw. $y$ -Maßstab eines Einkristalles
$M_{R_H}^e, M_{R_H}^y$	Integrale Reflektivität im $\theta$ - bzw. $y$ -Maßstab eines Mosaikkristalles
$\vec{r}$	Ortsvektor
$\vec{n}$	Vektor in Richtung der Oberflächennormalen

$T_o, t_o$	Dicke eines Mosaikkristalles bzw. Einkristalles
$f+f'+f''$	Atomarer Streufaktor
$F_H$	Strukturfaktor ( $F_H = F_H' + iF_H''$ )
$\theta_B$	Braggwinkel
$\theta$	Winkel zwischen dem einfallenden Strahl und den Netzebenen
$\Delta\theta$	$\theta_B - \theta$
$\delta$	Winkel zwischen der Kristalloberfläche und den Netzebenen
$\vec{H}$	reziproker Gittervektor
$\mu_o$	linearer Absorptionskoeffizient
$\beta$	$(b+1)/(b-1)$
$b$	$\gamma_o/\gamma_H$
$\gamma_o, \gamma_H$	$(\vec{n}, \vec{u}_o)$ bzw. $(\vec{n}, \vec{u}_H)$
$\vec{u}_o, \vec{u}_H$	Einheitsvektoren in Richtung der inneren einfallenden bzw. reflektierten Welle
$W$	Verteilungsfunktion für die Kristallite im Mosaikkristall
$P$	Polarisationsfaktor
$G$	Polarisationsgrad

$$\Gamma := \frac{e^2}{4\pi\epsilon_o m c^2} \frac{\lambda^2}{nV}$$

$$g := -\frac{1-b}{\sqrt{|b|}} \frac{\lambda}{4\pi} \frac{\mu_o \sqrt{1+\kappa^2}}{P\Gamma F_H}$$

$$\kappa := \frac{F_H''}{F_H'}$$

### E. Das Mößbauerspektrometer

Im Kapitel C wurde ausgeführt, welche Möglichkeiten es gibt, einen monochromatischen, parallelen und polarisierten Gamma-Strahl zu erzeugen. Da man sich nicht festlegen möchte, welche Methode man verfolgen will, sollte der mechanische und elektronische Aufbau der Versuchsanordnung so flexibel wie möglich gehalten werden. Als Randbedingung für die Planung sind der verfügbare Platz im Speicherringlabor und die geometrische Lage des Strahlrohres zu beachten.

Der Synchrotronstrahl tritt in einer Höhe von 1595 mm über dem Fußboden durch ein Beryllium-Fenster (Durchmesser maximal 34 mm) aus. An diesem Punkt beginnt der Aufbau dieses Experimentes. Die Abbildung 1 zeigt eine schematische Skizze des geplanten Aufbaues.

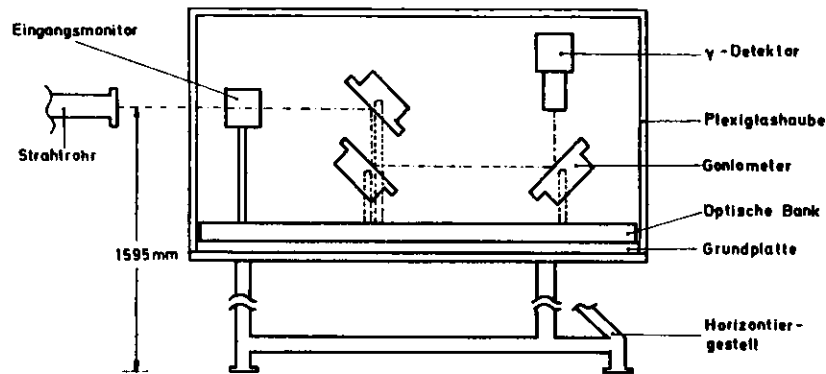


Abbildung 1: Schematische Skizze eines geplanten Aufbaues

Im folgenden werden die einzelnen Komponenten erläutert.

#### 1. Horizontiergestell

Das Gestell dient dazu, die gesamte Apparatur in die richtige Lage zu dem Synchrotronstrahl zu bringen. Er kann beliebig innerhalb des Strahlrohres liegen, das bedeutet, daß man mit Hilfe des Gestelles in der Lage sein muß, sowohl die Höhe (im Rahmen des Rohrquerschnittes) als auch die Neigung gegen die Waagerechte zu variieren. Zusätzlich wurde eine seitliche Verschiebung vorgesehen. Da es möglich ist, daß der Synchrotronstrahl seine Lage ändert, muß ein schnelles Nachfahren der Apparatur gewährleistet sein.

#### 2. Optische Bank mit Grundplatte

Die eigentliche Apparatur muß genau justiert werden können. Als Grundlage hierzu dient eine gegossene Grundplatte aus Aluminium, auf der eine optische Bank, bestehend aus drei geschliffenen Hohlwellen, montiert ist. Je zwei dieser Wellen dienen als Auflage für die optischen Reiter.

#### 3. Eingangsmonitor

Um die gesamte Apparatur gegen den Synchrotronstrahl zu justieren, wurde ein Eingangsmonitor vorgesehen. Dieser erlaubt es, die Intensitätsverteilung der Synchrotronstrahlung zu bestimmen. Wenn man die gesamte Apparatur bezüglich des Eingangsmonitors justiert hat, kann man das Spektrometer zum Strahl justieren, indem man den Eingangsmonitor (der mit dem Spektrometer fest verbunden ist) auf maximale Intensität einstellt.

#### 4. Goniometer und Bedienungselektronik

Um die Kristalle zu justieren, wurde ein Goniometer konstruiert. Mit Hilfe zweier Schrittmotoren und einer Ansteuerungselektronik kann ein Kristall um zwei Achsen in Winkelschritten von 2' bzw. 4' bewegt werden.

#### 5. Plexiglashaube und Temperaturstabilisierung

Die Plexiglashaube erlaubt es, die gesamte Apparatur gasdicht gegen die Umgebung abzuschirmen. Mit Hilfe von Peltier-Elementen ist es weiter möglich, die Apparatur bei

konstanter Temperatur zu betreiben.

### 6. Wandloses Zählrohr

Als Detektor für die Gamma-Strahlen wurde ein 'Wandloses-Zählrohr' konstruiert. Wandlos bedeutet hier, daß das eigentliche Zählrohr von vielen kleinen Zählrohren, die die Wand bilden, umgeben ist. Mit einer geeigneten Elektronik soll das Wandlose Zählrohr die Untergrundzählrate stark reduzieren.

### 7. Multiplier

Im Kapitel C wurde als eine Möglichkeit angeführt, eine Zeitdiskriminierung der Gamma-Quanten durchzuführen, d.h., man braucht einen Detektor mit hoher Zeitauflösung. Normale NaJ-Szintillatoren haben Abklingzeiten in der Größenordnung von 250 nsec, mit Plastik-Szintillatoren kommt man in den Bereich von 3 bis 10 nsec. Zusätzlich sollte man versuchen, den prompten Anteil der Strahlung möglichst früh zu unterdrücken. Zu diesem Zweck wird ein sogenannter getasteter Multiplier mit einem Plastik-Szintillator konstruiert. Mit Hilfe eines definierten Zeitsignales von Doris wird der Multiplier kurz vor Ankunft eines Bunches gesperrt und nach der Abklingzeit der Anregung des Szintillators durch die prompte Strahlung wieder geöffnet.

### 8. Bunch-Trigger-Generator

Um ein definiertes Zeitsignal zu erhalten, das mit den Bunchen der Synchrotronstrahlung korreliert ist, bietet Desy einen Bunch-Trigger-Generator an /PAE77/. Der Generator erhält aus dem Steuersender der Beschleuniger ein Referenzsignal und erzeugt daraus umlaufsynchrone Taktsignale. Sie besitzen eine zeitliche Stabilität in der Größenordnung von 10 psec und sind reproduzierbar um beliebig einstellbare Bunchzahlen verschiebbar.

### 9. Interface

Das Interface ist eine automatische Steuerungs- und Überwachungseinheit für den Versuchsablauf.

## 1. Der mechanische Aufbau

### 1.1. Das Goniometer

An das Goniometer werden folgende Anforderungen gestellt:

- drehbar um zwei Achsen
- hohe Winkelauflösung (etwa 1'')
- kompakte Bauweise
- automatische Bedienung
- reproduzierbare Einstellung

a) Der auf dem Goniometer montierte Kristall soll um die beiden Achsen  $\varphi$  und  $\vartheta$  gedreht werden können.

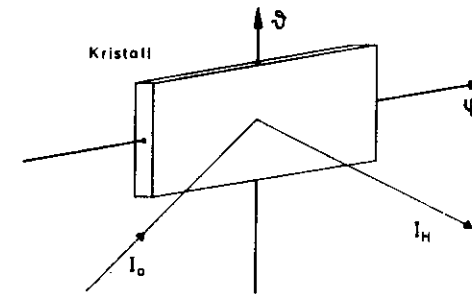


Abbildung 2: Drehachsen des Goniometers

b) Die Breiten der Rockingkurven von Einkristallen liegen in der Größenordnung von 1'' bis 20''. Will man also Rockingkurven aufnehmen, muß die Winkelauflösung in dieser Größenordnung oder darunter liegen. Diese hohe Winkelauflösung erfordert eine sehr präzise Arbeit.

c) In diesem Versuch wird der Gamma-Strahl an mehreren Kristallen reflektiert. Das bedeutet, daß auch mehrere Goniometer zu einer Versuchsanordnung gehören. Der verfügbare Platz für den Versuchsaufbau und die Absorption der Gamma-Quanten verlangen einen möglichst kompakten Aufbau. Ein kompakter Aufbau der Goniometer erschwert jedoch eine hohe Winkelauflösung. Es muß also ein Kompromiß gefunden werden zwischen kompakter Bauweise und hoher Winkelauflösung.

d) Der Versuchsaufbau an der Synchrotronstrahlung läßt es nicht zu, während der Messung die Apparatur per Hand zu verstellen (Strahlenschutz). Zum anderen ist es auch sinnvoll, die Aufnahme z.B. einer Rockingkurve automatisch vorzunehmen. Aus diesen Gründen muß das Goniometer fernbedient werden können. Auf Grund seiner kompakten Bauweise, definierten Winkelstellung und kleinen Winkeländerung bietet es sich an, für die Achsverdrehung Schrittmotoren vorzusehen.

e) Eine reproduzierbare Einstellung ist wichtig, um Reflexe (von einigen Bogensekunden Breite) schnell wiederfinden zu können. Zu diesem Zweck sollte sowohl eine definierte mechanische als auch elektronische Nullstellung existieren.

Ein Goniometer mit den geforderten Eigenschaften im Handel zu erhalten, erwies sich als unmöglich. Das hieß, daß im Institut ein solches Goniometer konstruiert und gebaut werden mußte. Es entstand das Goniometer, daß in Abbildung 3 zu sehen ist.

Es ist um zwei Achsen jeweils um  $\pm 6$  Grad drehbar und hat eine Winkelauflösung von  $2''$  bzw.  $4''$  je nach verwendetem Schrittmotor. (Das Goniometer untersetzt die Schritte des Motors um etwa 650). Eine noch kleinere Winkelauflösung hätte zu einem größeren Goniometer geführt. Die jetzigen Abmessungen betragen 210 mm im Durchmesser und 130 mm in der Höhe. Auf Grund der hohen Winkelauflösung ist es notwendig, das Goniometer mit sehr kleinen Toleranzen zu fertigen und auch die Materialauswahl darauf auszurichten. Es wurde im wesentlichen aus Konstruktal ausgeführt, da dieses Material sehr fest und dabei leicht ist.

Nach Fertigstellung des Goniometers wurde mit Hilfe eines Autokollimationsfernrohres die Winkelverstellung in Abhängigkeit der Schrittzahl gemessen. Die Ablesegenauigkeit des Autokollimationsfernrohres beträgt etwa  $\pm 1''$ .

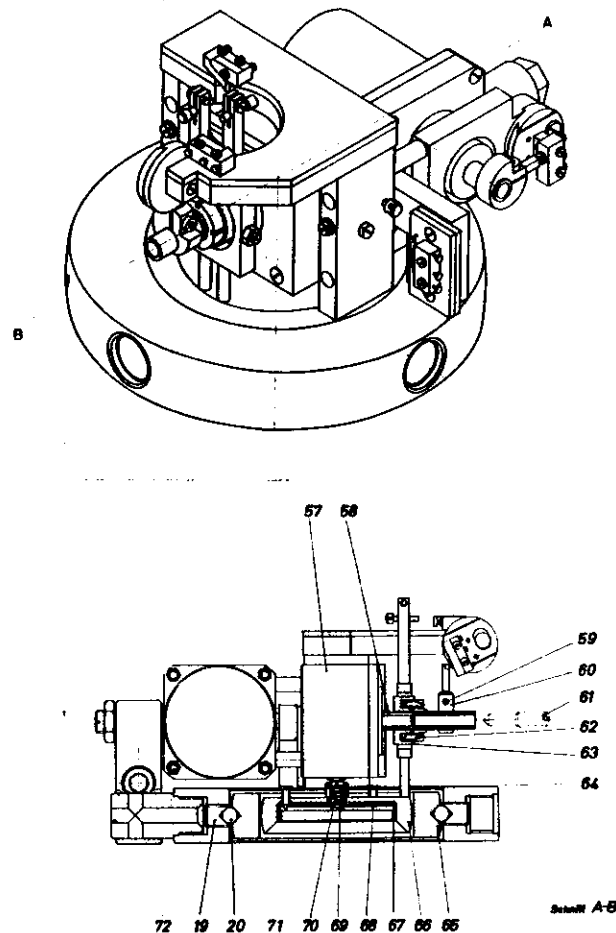


Abbildung 3: oben - Ansicht des Goniometers  
unten - Schnitt A - B

- 57 Schrittmotor für die Drehung des inneren Ringes, Kristalldrehung um  $\delta$
- 58 Spindel
- 65 Mittlerer Ring
- 66 Innerer Ring
- 67 Kristallhalter
- 72 Schrittmotor für die Drehung des mittleren Ringes, Kristalldrehung um  $\psi$

**Anlaufphase:**

Es zeigte sich, daß der Motor in der Anlaufphase (etwa 500 Schritte) nicht die erwarteten 4'' pro Schritt sondern weniger machte. Erklärt konnte diese Tatsache damit werden, daß die Motorachse in Achsrichtung ein mechanisches Spiel in der Größenordnung von 1 mm hat. Durch Umbau der Motore, es wurden stärkere Federn eingebaut, konnte dieses Spiel soweit vermindert werden, daß nach etwa 50-100 Schritten die Winkelverstellung stimmt. Damit liegt das Spiel gerade noch in der Toleranz, da die Elektronik für ein Spielausgleich von 64 Schritten ausgelegt ist (siehe Abschnitt E.2).

**Einzelschritte:**

Die Aufnahme von Einzelschritten in Abhängigkeit vom Drehwinkel zeigte eine Streuung in den Messwerten von ±1''. Dieser Wert liegt in der Ablesegenauigkeit des Fernrohres.

**Zehner-Schritte:**

In Abbildung 4 ist die Schrittposition in Abhängigkeit der Winkeldifferenz für eine Schrittdifferenz von jeweils 10 Schritten aufgetragen.

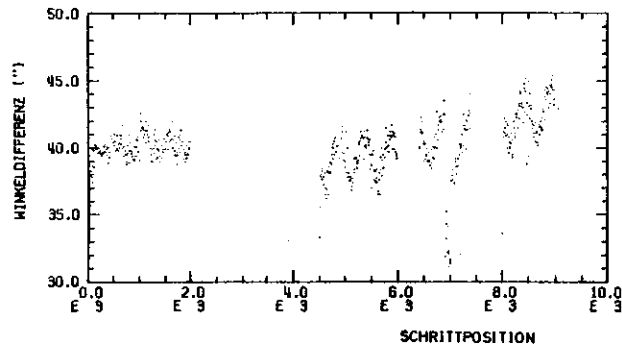


Abbildung 4: Gemessene Winkeldifferenz für jeweils zehn Schritte des Schrittmotores

Der Motor wurde immer zehn Schritte weitergestellt, um Fehler des Motors auszuschalten. Man sieht, daß 10 Schritte 40'' mit einem Fehler von ±2'' entsprechen. Außerdem ist dem Kurvenverlauf eine sinusförmige Kurve mit einer Periode von 500 Schritten überlagert. 500 Schritte entsprechen einer Umdrehung der Motorachse. Eine mögliche Ursache ist eine Ungenauigkeit in der Herstellung der Spindel. Wie aus der Abbildung 3 für den inneren Ring zu sehen ist, ergibt eine Toleranz in der Achsrichtung der Spindel von 0.001 mm eine Verdrehung des inneren Ringes um etwa 4''. Diese Toleranz ist auch nicht zu beheben. Die absolute Toleranz bei der Herstellung von 50 mm langen Spindeln ergibt sich auf Grund der Toleranz der Drehbänke zu ±10 µm.

**1.2. Aufbau zur Messung von Rockingkurven**

**1.2.1. Der Aufbau**

Von zwei verschiedenen Kristallen, Graphit und Germanium, wurden Rockingkurven aufgenommen. Der Aufbau ist in Abbildung 5 zu sehen. Der elektronische Teil der Apparatur ist in Abschnitt E.2 beschrieben.

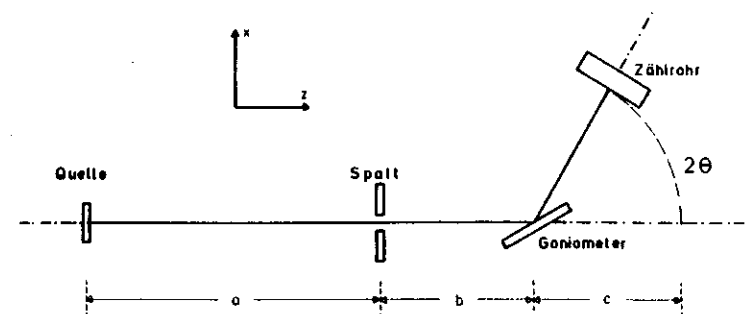


Abbildung 5: Aufbau zur Aufnahme einer Rockingkurve

Auf einer optischen Bank sind eine 'Mößbauerquelle', ein Spalt und ein Goniometer mit dem zu untersuchenden Kristall aufgebaut. Das Zählrohr kann so auf einem Kreisbogen um das Goniometer gedreht werden, daß es jeweils den Streuwinkel  $2\theta$  mit dem direkten Strahl bildet.

Die Mößbauerquelle ist eine eigens für diesen Versuch gefertigte 10 mCi starke Co-57 - Quelle in Pd, die unter anderem Gamma-Quanten mit einer Energie von 14.4 keV emittiert. Geometrisch ist sie so hergestellt, daß sie die Abmessungen des Synchrotronstrahles simuliert.

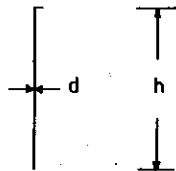


Abbildung 6:  
Mößbauerquelle Co-57 in Pd  
Die Höhe h beträgt etwa 30 mm  
und die Dicke d etwa 0.125 mm.

Der Spalt ist eine einfache Konstruktion aus Messing, deren Öffnung stufenlos einstellbar ist. Aus den Erfahrungen der Messungen hat sich ergeben, daß dieses nicht ausreichend ist. Es wurde ein neuer Spalt mit austauschbaren Spaltöffnungen konstruiert, der drehbar ist. Dieser neue Spalt ist auch als Halter für die Mößbauerquelle verwendbar, so daß es möglich ist, Quelle und Spalt genau parallel zueinander zu justieren.

Das Zählrohr ist ein Proportionalzählrohr der Firma Reuter & Stokes mit einer 97% Xe + 3% CO<sub>2</sub> - Füllung unter Normaldruck.

### 1.2.2. Die Justierung

Mit einem Laser wird die Apparatur grob vorjustiert. Zur Kalibrierung des direkten Strahles wird das Zählrohr in die z-Achse geschwenkt und die Apparatur auf maximale Intensität justiert. Dabei werden Messzeit und geometrische Abstände so gewählt, wie in der späteren Messung zur Aufnahme der Rockingkurve.

Zur Messung des reflektierten Strahles wird das Zählrohr um den Streuwinkel  $2\theta$  gegen die Richtung des einfallenden Strahles geschwenkt und das Goniometer in den Strahlengang gestellt. Nach Aufsuchen des Reflexionsmaximums wird das Goniometer in der x-Richtung solange verschoben, bis die Zählrate optimal ist. Dieses Verfahren stellt sicher, daß die Reflexion symmetrisch zur Drehachse stattfindet.

### 1.2.3. Divergenz des einfallenden Gamma-Strahles

Die Divergenz des einfallenden Gamma-Strahles hat zwei Ursachen:

- endliche Ausdehnung der Quelle
- Spaltöffnung und Spaltanordnung

In der benutzten Meßanordnung (Abbildung 5) wurde die oben beschriebene Quelle mit den Maßen 30 mm x 0.125 mm und ein Spalt mit einer Spaltöffnung von 30 mm x 0.5 mm benutzt. In der Abbildung 7 sind die Verhältnisse dargestellt.

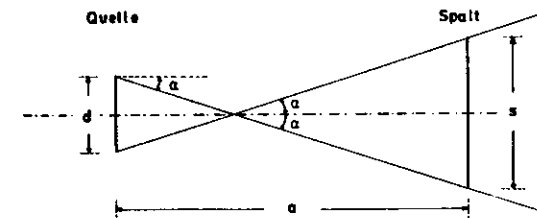


Abbildung 7: Strahlverhältnisse bei einem Spalt

Für die Divergenz  $2\alpha$  ergibt sich geometrisch

$$2\alpha = 2 \arctan\left\{\frac{s+d}{2a}\right\} ,$$

für  $s+d \ll a$  folgt

$$2\alpha = \frac{s+d}{a} .$$

Wegen der Konstruktion der Quelle (Linienquelle) ist es möglich, daß Spalt und Quelle gegeneinander um einen effektiven Winkel  $\beta$  verdreht sind. Daraus resultiert eine scheinbare Verbreiterung der Quelle. Mit  $d'=h\beta$  ergibt sich für die Divergenz

$$2\alpha = 2 \arctan \left\{ \frac{d+d'+s}{2a} \right\} ,$$

für  $s+d+d' \ll a$  folgt

$$2\alpha = \frac{d+d'+s}{a} .$$

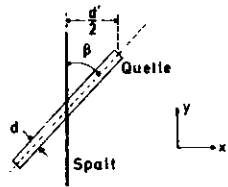


Abbildung 8:  
Quelle und Spalt bilden miteinander den Winkel  $\beta$

Aus der Gleichung sieht man, daß es für eine Quelle mit endlicher Ausdehnung eine minimal mögliche Divergenz gibt. Für  $s \rightarrow 0$ , wenn der Spalt also ganz zuge dreht wird, ergibt sich

$$2\alpha = \frac{d+d'}{a} .$$

Will man bei ausgedehnten Quellen eine noch kleinere Divergenz erzielen, muß man eine Anordnung mit zwei Spalten wählen.

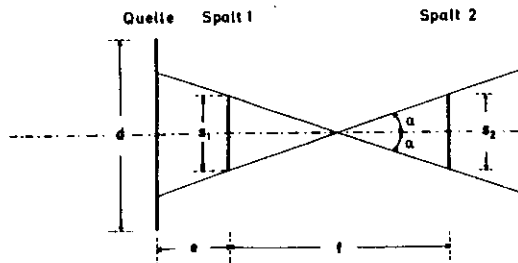


Abbildung 9: Strahlverhältnisse mit zwei Spalten

Durch diese Anordnung wird die Divergenz des Strahles für  $d=s$  nur durch die Öffnungen  $s_1$  und  $s_2$  der Spalte 1 und 2 bestimmt. Dabei ergibt sich jedoch eine reduzierte Intensität. Es ergibt sich

$$2\alpha = 2 \arctan \left[ \frac{s_1+s_2}{2f} \right] ,$$

für  $s_1+s_2 \ll 2f$  folgt

$$2\alpha = \frac{s_1+s_2}{f} .$$

## 2. Der elektronische Aufbau

Die Elektronik soll es ermöglichen, Rockingkurven in Abhängigkeit der Winkel  $\varphi$  und  $\vartheta$  automatisch aufzunehmen. Die hierfür notwendige Elektronik ist in Abbildung 10 zu sehen.

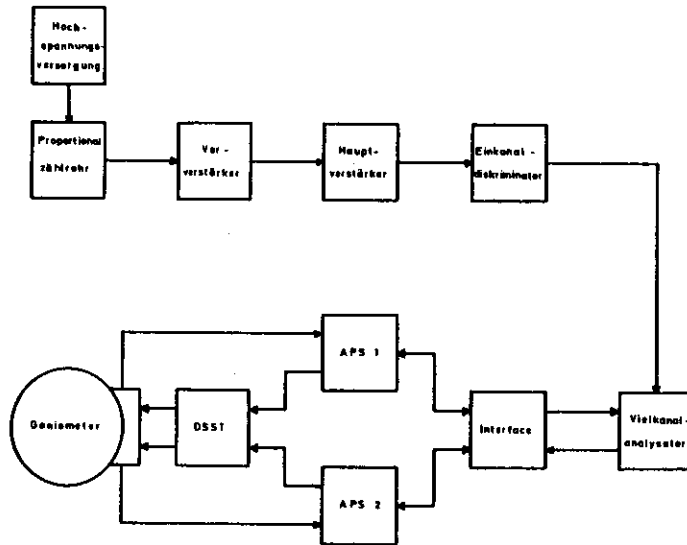


Abbildung 10: Der elektronische Aufbau

Der auf dem Goniometer montierte Kristall wird mit Hilfe zweier Schrittmotoren um die beiden Achsen  $\varphi$  und  $\vartheta$  gedreht. Angesteuert werden die Schrittmotoren durch die Leistungsteile DSST und die Anpaßsteuerungen APS. (Zu einem Schrittmotor gehört jeweils ein halbes Leistungsteil und eine An-

paßsteuerung.)

Die reflektierten Gamma-Quanten werden mit Hilfe eines Zählrohres nachgewiesen. Die so erzeugten Pulse werden verstärkt, in einem Einkanal-Diskriminator energetisch diskriminiert und in Abhängigkeit der Kristallwinkelstellung in einem Vielkanalanalysator gespeichert.

Das Interface steuert den gesamten Meßvorgang.

Im folgenden werden die einzelnen Komponenten des Aufbaues gesondert behandelt.

### 2.1. Der Schrittmotor und das Leistungsteil (DSST)

Auf Grund der Forderung nach einer möglichst hohen Winkelauflösung, fiel die Wahl auf die Schrittmotoren der Firma Berger. Sie bieten eine sogenannte '5-Phasen-Schrittmotoren-Reihe' an, die sowohl im Vollschritt- als auch im Halbschrittbetrieb gefahren werden kann. Ein Vollschritt entspricht 0.72 Grad, d.h., 500 Schritte pro Umdrehung, und ein Halbschritt entspricht 0.36 Grad, d.h., 1000 Schritte pro Umdrehung.

Der Rotor ist ein Permanentmagnet, der in einem sich ändernden Magnetfeld des Stators umläuft. Die Abbildung 11 zeigt ein Prinzipschaltbild der Schaltung - F1-Schaltung - zur Erzeugung dieses Magnetfeldes.

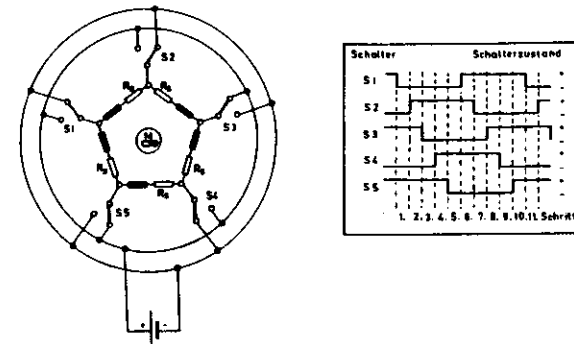


Abbildung 11: Prinzipschaltung eines 5-Phasen-Schrittmotors und die zugehörigen Schalterzustände



Will man also ein Drehen des Rotors erreichen, muß man dafür sorgen, daß die Wicklungen der Spulen nach einem bestimmten Programm (Abbildung 11) geschaltet werden. Die Firma Berger liefert zu diesen Motoren eine 5-Phasen-Konstantspannungsansteuerung - D100 - , die dieses Programm verwirklicht. Zusätzlich ermöglicht diese Schaltung die Wahl von Links- und Rechtslauf, interne oder externe Ansteuerung und variable Geschwindigkeit der Motoren.

### 2.2. Die Anpaßsteuerung (APS)

Die Firma L.Jahnke (Hamburg) baute nach unseren Spezifikationen eine Anpaßsteuerung (Abbildung 12), die in Verbindung mit dem Leistungsteil - DSST - einen erweiterten Betrieb eines Schrittmotors zuläßt.

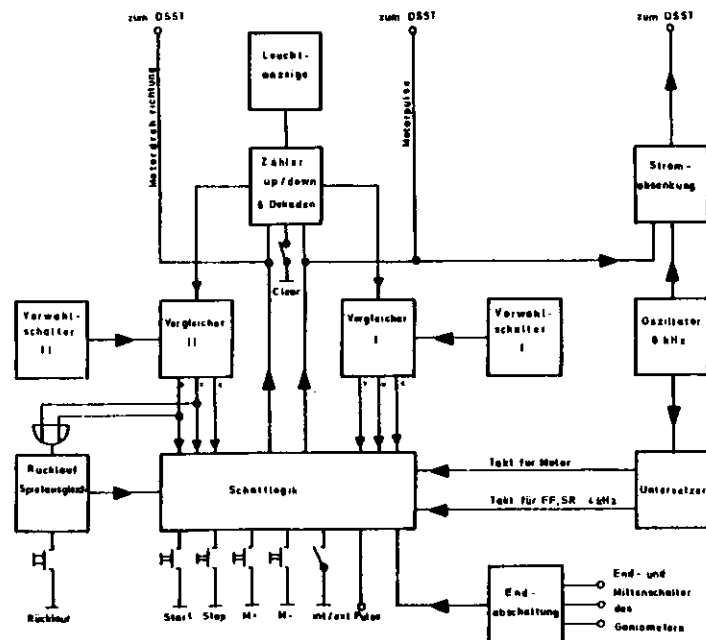


Abbildung 12: Blockschaltbild der Anpaßsteuerung

Ein up/down Zähler - Anzeige seines Inhaltes mittels Leuchtziffern -, der an jedem Punkt auf Null gesetzt werden kann ('Clear'), zählt die Motorpulse, und ermöglicht damit eine relative Positionierung bezüglich des definierten Nullpunktes. Mittels zweier digitaler Vorwahlschalter I und II kann der gewünschte Winkelbereich eingestellt werden. Bei Betätigung des Tasters 'Start' werden 125 Hz - Pulse von einem Oszillator an die DSST bzw. den Motor gegeben, und der Motor läuft bis zu der Position, die durch den Vorwahlschalter I gegeben ist. Dieses ist die Ausgangsposition für einen automatischen Meßvorgang, der vom Interface kontrolliert und gesteuert wird. Der Taster 'Stop' unterbricht jede Lauf-tätigkeit des Motors. Mit  $M_+$  und  $M_-$  kann der Motor per Hand vor- und rückwärts gefahren werden. Der Modul 'Rücklauf/Spielausgleich' sorgt dafür, wenn er aktiviert wird, daß der Schrittmotor aus seiner Endposition (Vorwahl II) wieder in seine Anfangsposition (Vorwahl I) unter Berücksichtigung eines Spielausgleiches zurückläuft. Das bedeutet, daß der Schrittmotor erst 64 Schritte über seine Anfangsposition hinausläuft, und sie erst dann wieder erreicht. Damit soll ein mechanisches Spiel im Goniometer ausgeglichen werden. Da die Schrittmotoren auch wenn sie nicht laufen unter Spannung stehen, und damit Wärme erzeugen, wurde eine Stromabsenkung konzipiert, d.h., in der Zeit, in der der Motor nicht läuft, wird die Motorspannung herabgesetzt, indem die Spannung mit 8 kHz gepulst wird. Wir haben noch einen Modul 'Endabschaltung' hinzugebaut. Dieser sorgt dafür, daß die Schrittmotoren in ihren mechanischen Endstellungen, die durch Schalter fixiert sind, angehalten werden, und nur noch in der entgegengesetzten Richtung wieder anlaufen können. Ein Mittenschalter am Goniometer definiert eine mechanische Mitteneinstellung des Goniometers.

### 2.3. Der Vielkanalanalysator

Der Vielkanalanalysator ist das Modell FHT 400 der Firma Frieseke & Höpfer. Er hat 400 Kanäle und erlaubt sowohl eine Einspeicherung im ADC-, als auch im Multiscaler-Mode. In dem hier benutzten Mode werden die Kanäle extern weitergeschaltet, d.h., der Vielkanalanalysator wird im Multiscaler-Mode betrieben.

Alle Funktionen des Vielkanalanalysators werden vom Interface aktiviert.

### 2.4. Das Interface

Das Interface wurde im Rahmen dieser Arbeit gebaut. Es steuert alle Abläufe innerhalb des Aufbaues.

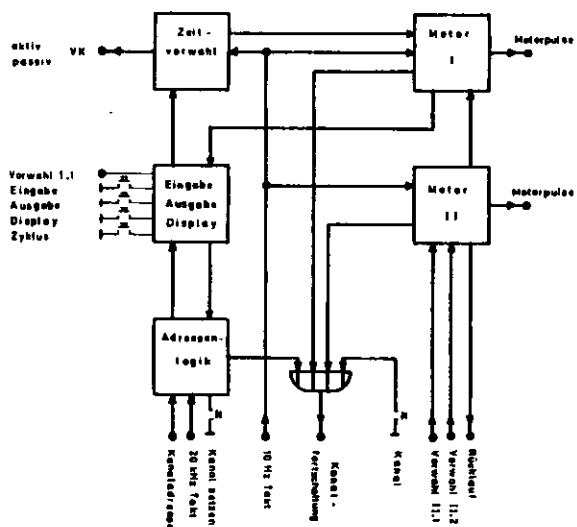


Abbildung 13: Blockschaltbild des Interfaces

Die Eigenschaften des Interfaces sind:

- Einstellung der Winkelintervallbreite beim Fortschalten für beide Winkel  $\varphi$  und  $\vartheta$  getrennt ('Schrittweite')
- Einstellung der Meßdauer pro Winkelstellung  $\vartheta$  (10 sec - 10 000 sec)
- Display der Rockingkurve zu jedem Zeitpunkt ('Display')
- Beginn der Einspeicherung der Rockingkurve in den Vielkanalanalysator bei jedem Kanal ('Kanal setzen')
- Fortschalten des Vielkanalanalysators nach Beendigung einer Datennahme

Ein vollständiger Meßzyklus läuft wie folgt ab:

Die Motoren werden in ihre vorgewählte Anfangsposition gefahren (eingestellt bei der APS Vorwahl I.1 und I.2). An der APS wird der Winkelbereich für beide Motoren gewählt (Vorwahl I.1, II.1 und I.2, II.2). Am Interface wird die Meßzeit zwischen 10 sec und 10 000 sec, die Schrittweiten für die beiden Motoren eingestellt und der Vielkanalanalysator auf den gewünschten Anfangskanal gestellt.

Betätigt man nun den Schalter 'Zyklus', zählt der Vielkanalanalysator die Impulse der Gamma-Strahlen, die vom Kristall unter dem ersten Winkel reflektiert werden. Ist die eingestellte Meßzeit abgelaufen, wird der Vielkanalanalysator gestoppt und der erste Motor um die eingestellte Schrittweite, d.h., um den Winkel  $\Delta\vartheta$ , weitergestellt. Darauf wird der Vielkanalanalysator um einen Kanal fortgeschaltet und in diesem werden die Impulse für die neue Winkelstellung eingespeichert. Erreicht der erste Motor seine Endposition (Vorwahl II.1) wird eine Meldung an das Interface gegeben. Dieses führt den zweiten Motor um die eingestellte Schrittweite, d.h., um den Winkel  $\Delta\varphi$ , weiter. Ist dieses geschehen, aktiviert das Interface den Modul 'Rücklauf/Spielausgleich' der APS. Damit ist der erste Motor wieder in der Ausgangsposition und der Ablauf beginnt von vorn. Ist auch der zweite Motor an seiner Endposition (Vorwahl II.2) angekommen, wird der gesamte Meßvorgang beendet.

### F. Der Vormonochromator

Im Kapitel C wird ein Versuchsaufbau in zwei Stufen vorgeschlagen. Hier wird nun die erste Stufe - das Vormonochromatisieren - an Hand der behandelten Theorie diskutiert.

Ein idealer Vormonochromator sollte folgende Eigenschaften besitzen:

- Eine Reflektivität von 100 %
- Einen Polarisierungseffekt von 1
- Ausnutzung der gesamten Synchrotronstrahlintensität, d.h., die Breite der Rockingkurve muß von der Größe der Divergenz der Synchrotronstrahlung sein
- Verminderung der einfallenden Divergenz der Synchrotronstrahlung

Diese Eigenschaften hängen zum einen von der gewählten Kristallart und zum anderen von der Anordnung der Kristalle ab.

#### 1. Geeignete Kristalle

Um die oben angeführten Eigenschaften für die verschiedenen Kristalle zu prüfen, wurden für Elemente, bei denen die Möglichkeit besteht, Einkristalle für Monochromatoren herzustellen, die möglichen Reflexe berechnet. Daraus ergeben sich dann die Reflektivität, die Reflexbreite und der Braggwinkel und damit der Grad der Polarisation. In der Tabelle 1 sind diese Größen jeweils für den niedrigsten Reflex und für einen Reflex mit einem Braggwinkel von etwa 45° zusammengestellt.

Man sieht, daß für höhere Reflexe sowohl die Reflektivität als auch die Halbwertsbreite der Rockingkurven zurück geht. Das heißt, daß man einen guten Polarisationsgrad nur bei gleichzeitigem Intensitätsverlust erreichen kann.

Element	Reflex	$\theta_B$	$R_o$	B	P
Ag	111	10.51°	91.7%	16.0''	0.93
Ag	444	46.28°	74.5%	1.7''	0.04
Au	111	10.53°	69.2%	28.8''	0.93
Au	444	46.95°	37.4%	3.6''	0.07
Ge	111	7.57°	64.6%	8.9''	0.97
Ge	444	41.18°	30.0%	0.7''	0.13
Si	111	7.88°	95.3%	1.4''	0.96
Si	555	43.30°	92.0%	0.2''	0.06

Tabelle 1: Braggwinkel, Reflektivität, Halbwertsbreite und Polarisationsfaktor für einige Einkristalle ( $\lambda = 0.86 \text{ \AA}$  und  $b = -1$ )

Legt man keinen großen Wert auf eine Verbesserung des Polarisationsgrades der Synchrotronstrahlung, sind für eine Vormonochromatisierung Silber- bzw. Goldeinkristalle mit einem niedrigen Reflex wegen ihrer hohen Reflektivität und großen Reflexbreite gut geeignet. Die Reflexbreite erreicht jedoch auch im symmetrischen Bragg-Fall noch nicht die Divergenz der Synchrotronstrahlung von 60''. Das bedeutet, daß ein Teil der angebotenen Intensität verschenkt wird. In der Tabelle 2 ist für einige Halbwertsbreiten die Intensität zusammengestellt, die bei 100 % - iger Reflektivität übertragen werden könnte (siehe auch Abbildung B.4).

Halbwertsbreite B	Intensität [ $10^9 \frac{\text{PHOTONEN}}{\text{EV} \cdot \text{SEC}}$ ]
5''	5.2
10''	10.0
20''	18.0
30''	26.0
60''	38.0

Tabelle 2: Maximale Intensität, die bei verschiedenen Halbwertsbreiten übertragen werden kann. (Doris 4 GeV, 10 mA,  $\lambda = 0.86 \text{ \AA}$ )

In Abschnitt D.5. wird ausgeführt, daß durch asymmetrisch geschnittene Kristalle die akzeptierte Eingangsdivergenz

variiert werden kann. Eine Vergrößerung der Eingangsdivergenz ergibt eine Verkleinerung der Ausgangsdivergenz verbunden mit einer Vergrößerung der geometrischen Breite des reflektierten Strahles.

In dem folgenden Beispiel werden für den 111-Reflex von Gold die Verhältnisse für den Fall berechnet, daß eine Eingangsdivergenz von 60'' übertragen werden soll. (Der Synchrotronstrahl habe eine Höhe von 8 mm) Es ergeben sich folgende Werte:

Braggwinkel	$\theta_b$	:	10.53°
	b	(5.15)	: -0.48
Neigungswinkel	$\delta$	(5.6)	: 3.7°
Reflektivität	$R_o$	(5.22)	: 67.5 %
Ausgangsdivergenz		(5.16)	: 28.8''
geometrische Breite		(5.17)	: 16.7 mm

(Die Zahlen in den Klammern sind die Gleichungen, nach denen die Werte berechnet wurden.)

Mit einem solchen asymmetrisch geschnittenen Kristall kann man die gesamte angebotene Strahlung zu etwa 67.5 % übertragen und erhält einen doppelt so breiten Ausgangsstrahl mit halber Divergenz des Eingangsstrahles.

Eine andere Möglichkeit besteht darin, einen gebogenen Kristall zu verwenden. Als Analogon betrachte man einen gebogenen Spiegel.

Es zeigt sich, daß auf Grund der geringeren Reflexbreiten Germanium- und besonders Silizium-Einkristalle weniger als Monochromatoren geeignet sind. Sie haben jedoch im Gegensatz zu Silber- und Gold-Einkristallen den großen Vorteil, daß sie in guter Qualität im Handel angeboten werden. Weiterhin ist Graphit als Mosaikkristall verfügbar. Es ist trotz seiner Mosaikstruktur interessant, weil es einen kleinen Absorptionskoeffizienten hat. Das bedeutet, daß Graphit im Vergleich zu anderen Mosaikkristallen eine hohe maximale Reflektivität hat. Sie erreicht die Größenordnung von Einkristallen (siehe auch Abschnitt 2).

## 2. Messungen von Rockingkurven

Um die Qualität der Kristalle zu überprüfen, wurden von zwei verfügbaren Kristallen - Graphit und Germanium - Rockingkurven aufgenommen. Dafür wurde eine Versuchsanordnung, wie sie in den Abschnitten E.1.2. und E.2. beschrieben wird, aufgebaut.

### 2.1. Graphit

Der vorliegende Graphit-Kristall ist ein pyrolytischer Mosaikkristall von der Firma Union Carbide Corporation. Seine Abmessungen betragen 1.73 inch x 2.36 inch x 1/16 inch (44 mm x 60 mm x 1.6 mm). Vom Hersteller wird angegeben, daß der Kristall einen Mosaikspread von 0.4°:0.1° hat (FWHM für den 002-Reflex).

Um eine Rockingkurve differentiell aufzunehmen, muß die Divergenz des einfallenden Gamma-Strahles deutlich kleiner sein als die Reflexbreite des Kristalles. Daraus ergeben sich für den Aufbau die Grenzen der geometrischen Abstände und Spaltöffnungen. Für die Messungen am Graphit wird  $a \approx 500$  mm und  $s = 0.5$  mm gewählt (siehe Abbildung E.1.2.). Damit ergibt sich eine Divergenz von  $2\alpha = 1.25 \cdot 10^{-3} : 0.44 \cdot 10^{-3}$  das entspricht 4.3' : 1.5'. (Die Fehlerangabe ergibt sich aus einer möglichen Verdrehung der Quelle gegen den Spalt von 0.5 mm.) Die Divergenz ist also etwa 6-mal kleiner als die Reflexbreite.

Die Zählrate des direkten Gamma-Strahles beträgt 11 480 Impulse pro 200 sec. Für die Reflexe 002, 004, 006 und 008 wurden Rockingkurven aufgenommen (siehe Abbildung 1). Die Integrale Reflektivität wurde bestimmt, indem durch die Meßwerte eine Gaußverteilung gelegt und über diese integriert wird. Die Divergenz des einfallenden Strahles wurde bei den Rechnungen berücksichtigt, indem als Fitfunktion eine Faltung einer Gaußverteilung und einer Spaltfunktion benutzt wurde. In der Tabelle 3 sind die Ergebnisse zusammengestellt.

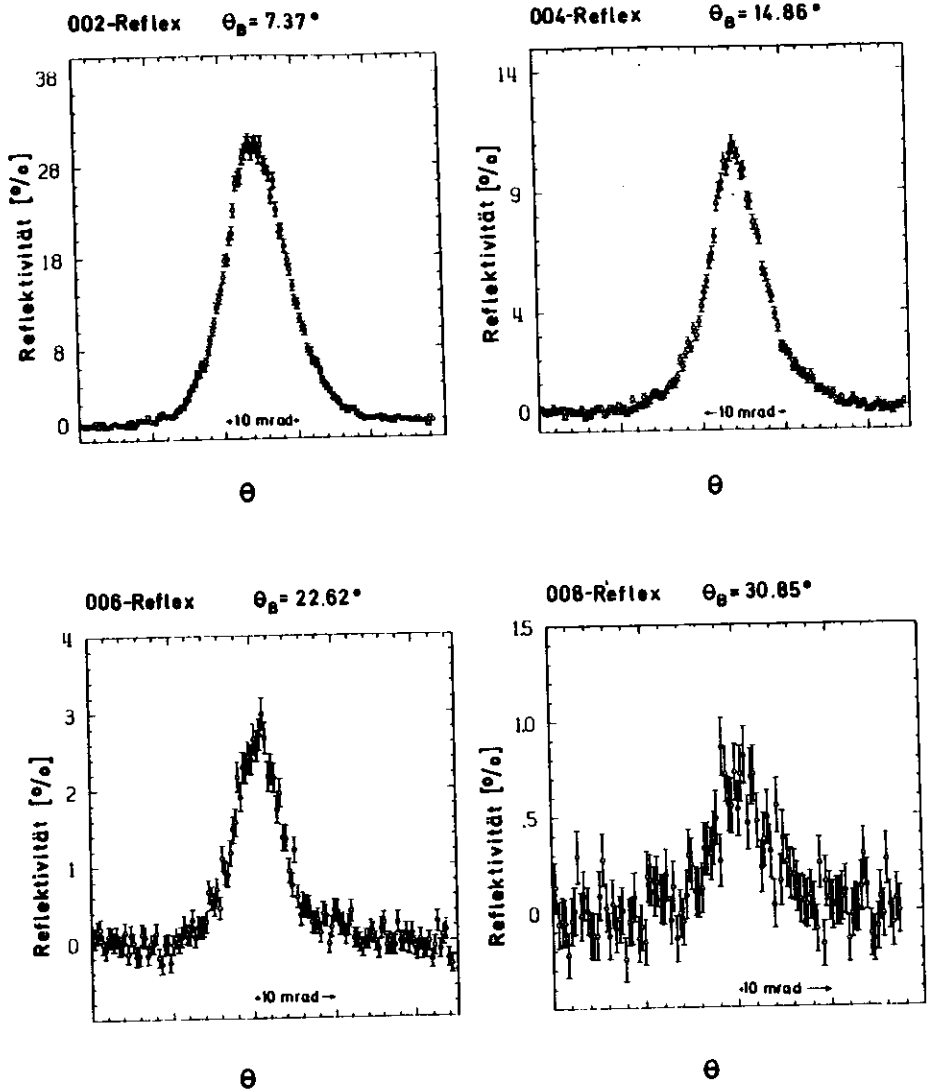


Abbildung 1:

Gemessene Rockingkurven der 002-, 004-, 006- und 008- Reflexe von pyrolytischem Graphit  
Wellenlänge  $\lambda = 0.86 \text{ \AA}$

Die theoretischen Werte für die Integrale Reflektivität wurden mit Hilfe der Formeln aus Tabelle D.3. und D.4. bestimmt. Der Vergleich mit den experimentellen Werten zeigt, daß der Graphitkristall weder ein idealer Mosalkristall noch ein Einkristall ist. Die für einen Mosalkristall verhältnismäßig hohe maximale Reflektivität von ~30 % für den 002-Reflex ist für die Anwendung als Monochromator ausreichend. Hinzu kommt, daß diese Reflektivität über einen Bereich von  $\sim 15^\circ$  erreicht wird, und somit die gesamte Eingangsdivergenz der Synchrotronstrahlung ausgenutzt werden kann. Die große Reflexbreite führt jedoch auch dazu, daß ein breites Energieband übertragen wird, und damit die Monochromatisierung schlechter ist als bei Einkristallen.

Tabelle 3: Gemessene und berechnete Werte für Graphit ( $\lambda = 0.86 \text{ \AA}$ )

Reflex	Winkel	Integrale Maximale Reflektivität ( $10^{-5}$ )	(%)	FWHM ( $^\circ$ )	Integrale Reflektivität Mosalk-Kristall ( $10^{-5}$ )	Ein-Kristall
002	$7.37^\circ$	319	30.1	2178 : 17	1290	3.4
004	$14.86^\circ$	87.8	10.5	1627 : 26	190	0.9
006	$22.62^\circ$	19.2	2.8	1316 : 43	55	0.4
008	$30.85^\circ$	4.8	0.7	1332 : 133	23	0.2

## 2.2. Germanium

Der Germanium-Einkristall von der Firma 'Gesellschaft für Elektrometallurgie' wurde nach der Czochralski-Methode in der (111)-Richtung mit einem Fehler von  $\pm 1^\circ$  gezogen. Seine Länge beträgt etwa 15 cm und sein Durchmesser etwa 5.5 cm. Von diesem Kristall haben wir zwei etwa 6 mm dicke Scheiben mit einer Diamantsäge abgeschnitten. Eine der Scheiben wurde zusätzlich mit einer Diamantpaste (Körnung  $0.25 \mu\text{m}$ ) poliert.

Die theoretische Reflexbreite eines Germanium-Einkristalles beträgt etwa  $9''$ . Will man die Rockingkurve differentiell messen, muß man mit der Divergenz des einfallenden Strahles deutlich unter der Reflexbreite bleiben. Da aber einerseits die Entfernung  $a$  (Quelle - Spalt) nicht beliebig groß gewählt werden kann (optische Bank, Absorption der Gamma-Quanten in Luft, verfügbare Zählrate) und es auf Grund einer scheinbaren Verbreiterung der Quelle nicht sinnvoll ist, die Spaltöffnung beliebig klein zu machen, ergibt sich als Kompromiß:  $a = 2000 \text{ mm}$  und  $s = 0.5 \text{ mm}$ . (siehe auch Abbildung E.5)

Daraus folgt eine Divergenz des einfallenden Strahles von  $(3.1 \cdot 10^{-4} : 2.5 \cdot 10^{-4}) \text{ rad} \hat{=} (64 : 51)''$ . (Die Fehlerangabe ergibt sich aus einer möglichen Verdrehung der Quelle gegen den Spalt von  $0.5 \text{ mm}$ ). Das bedeutet, daß eine differentielle Messung der Rockingkurve nicht möglich ist.

Es wurde sowohl der polierte als auch der unbehandelte Kristall auf ihre Eigenschaften untersucht.

### Polierter Kristall

Die Abbildung 2 zeigt die gemessene Reflexionskurve des polierten Kristalles.

Das Goniometer wurde in Schritten von  $4''$  um die  $\delta$ -Achse gedreht und die reflektierte Intensität für jede Winkelstellung 1000 sec lang gemessen. Die Intensität des ein-

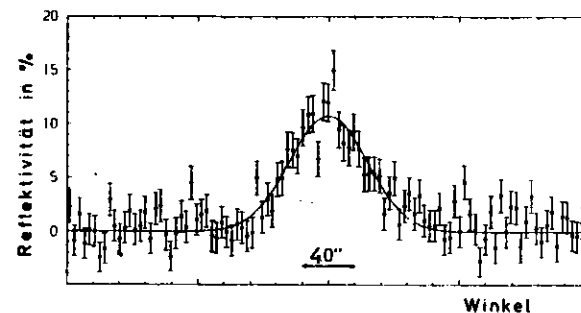


Abbildung 2: Gemessene Reflexionskurve des 111-Reflexes von Germanium. Die ausgezogene Linie ist eine Gaußverteilung.  
( $\lambda = 0.86 \text{ \AA}$ ,  $\theta_0 = 7.57^\circ$ )

fallenden Strahles beträgt 19 236 Impulse pro 10000sec. Durch die Meßpunkte wird eine Gauß-Verteilung gelegt. Die daraus berechneten Werte ergeben sich zu:

Halbwertsbreite (FWHM)	: (71.7 : 4.6)''
Reflektivität, im Maximum	: (10.7 : 0.6) %
Integrale Reflektivität	: $4 \cdot 10^{-5} : 0.2 \cdot 10^{-5}$

In der Größe der Halbwertsbreite spiegelt sich die Divergenz des einfallenden Strahles wieder.

Die theoretische Rockingkurve nach Gleichung (2.29) ist in Abbildung 3 gezeigt.

Die Halbwertsbreite beträgt  $9''$ , die Reflektivität im Maximum 69 % und die Integrale Reflektivität  $R_H^0 = 3.5 \cdot 10^{-5}$ . Aus der empirischen Formel (4.1) erhält man eine Integrale Reflektivität von  $4.3 \cdot 10^{-5}$ .

Für einen idealen Mosaikkristall ergibt sich aus den Rechnungen eine Integrale Reflektivität von  $12.6 \cdot 10^{-5}$ .

Da die gemessene Integrale Reflektivität gut mit dem theoretischen Wert für einen Einkristall übereinstimmt, kann man erwarten, daß der Germanium-Kristall ein Einkristall

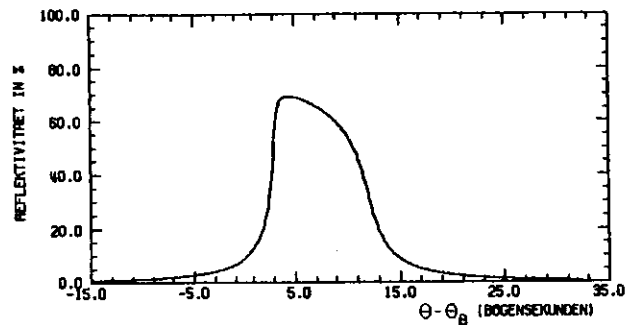


Abbildung 3: Theoretische Rockingkurve des 111-Reflexes von Germanium (berechnet nach Formel (2.29)) ( $\lambda = 0.86 \text{ \AA}$ ,  $\theta_B = 7.57^\circ$ )

ist und damit die theoretisch berechneten Größen wie Reflektivität im Maximum und Halbwertsbreite mit dem realen Kristall übereinstimmen.

Besonders die hohe Reflektivität von fast 70 % ist für die Anwendung als Monochromator interessant.

#### Unbehandelter Kristall

An der unpolierten Kristallscheibe wurde ebenfalls versucht, eine Rockingkurve aufzunehmen. Dieses ist jedoch nicht gelungen. Eine mögliche Ursache ist die unebene Oberfläche des Kristalles, die von Sägeriefen von bis zu 1 mm Tiefe herrühren. Da die Eindringtiefe der Gamma-Quanten eines Einkristalles in der Größenordnung von  $10^{-6} \text{ m}$  liegt (Tabelle D.5.1), kommt der Oberfläche eine große Bedeutung bei der Reflexion zu. In Abschnitt D.5. wird gezeigt, daß sich durch die unterschiedliche Neigung der Netzebenen zu der Kristalloberfläche Verschiebungen des Reflexionswinkels und eine Verbreiterung der Rockingkurven ergeben. Dies führt zu einer Verminderung der Reflektivität.

#### Folgerungen aus dem Meßaufbau

Im Rahmen dieses Meßaufbaues ist es nicht möglich die Rockingkurven genauer auszumessen, da die einfallende Divergenz zu groß ist. Auf Grund der Erfahrungen wurde angeregt, neue Spalte und Quellenhalter zu bauen. Mit einem ähnlichen Aufbau wie oben, jedoch mit zwei Spalten, die 2000 mm auseinander stehen und eine Öffnung von 0.125 mm haben, kann eine Eingangsdivergenz von  $26''$  erreicht werden. Mit einer Öffnung von 0.05 mm kann eine Eingangsdivergenz von  $10''$  erreicht werden. Da die Spalte jedoch dann enger als die Quellenausdehnung sind, wird ein Teil der Intensität verschenkt.

Eine andere Möglichkeit, Rockingkurven differentiell aufzunehmen, besteht darin, daß man sich mittels eines Braggreflexes mit sehr kleiner Breite (einige Sekunden) einen parallelen Strahl herstellt und diesen zur Messung benutzt.

### 3. Der Doppelmonochromator

Monochromatoren aus mehr als einem Kristall haben gegenüber solchen mit nur einem Kristall den Vorteil, daß man den Grad der Monochromatisierung und Kollimierung besser bestimmen und den Gamma-Strahl besser handhaben kann (z.B. bei paralleler Anordnung).

Es gibt zwei prinzipiell verschiedene Anordnungen: Die antiparallele bzw. (+,+)- und die parallele bzw. (+,-)-Anordnung. Sie sind in den Abbildungen 4 und 5 geometrisch und mit Hilfe der 'DuMond-Diagramme' /DUM37/ in ihrer Wirkungsweise dargestellt.

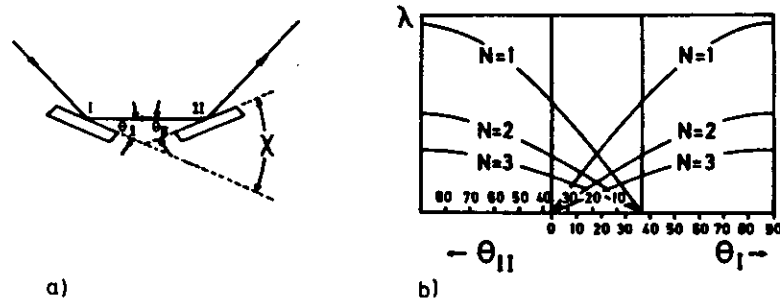


Abbildung 4:

- a) Geometrische Darstellung eines Doppelmonochromators, antiparallele Anordnung
- b) Wirkungsweise eines Doppelmonochromators, dargestellt mit Hilfe eines 'DuMond-Diagrammes'; antiparallele Anordnung

Die antiparallele Anordnung ist dadurch gekennzeichnet, daß der einfallende Strahl zweimal gleichsinnig um den Streuwinkel  $2\theta$  gestreut wird (deshalb auch (+,+)-Anordnung). Für eine fest gewählte Stellung der Kristalle unter dem Winkel  $X$ , folgt aus einem Vergrößern des Einfallswinkels  $\theta_1$ , ein Verkleinern des Winkels  $\theta_{11}$  (Abbildung 4a). Diese Verhältnisse werden in dem DuMond-Diagramm (Abbildung 4b) in

Abhängigkeit der Wellenlänge  $\lambda$  dargestellt. Daraus folgt, daß die Kristalle nur in dem kleinen Bereich, in dem sich die beiden Kurven schneiden, reflektieren.

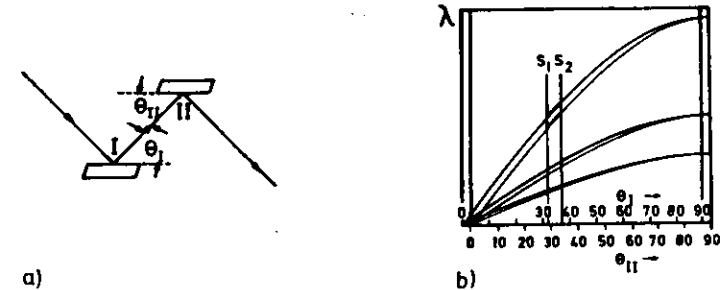


Abbildung 5:

- a) Geometrische Darstellung eines Doppelmonochromators; parallele Anordnung
- b) Wirkungsweise eines Doppelmonochromators, dargestellt mit Hilfe eines 'DuMond-Diagrammes'; parallele Anordnung. Die beiden Kurven sind etwas gegeneinander auf der Winkelachse verschoben, um sie darstellen zu können. In Wirklichkeit fallen sie exakt aufeinander.

Bei der parallelen Anordnung wird der einfallende Gamma-Strahl zweimal gegensinnig um den Streuwinkel  $2\theta$  gestreut, so daß der ausfallende zwar gegen den einfallenden Strahl parallel versetzt ist, aber dieselbe Richtung hat (deshalb auch (+,-)-Anordnung). Hier bedeutet ein Vergrößern des Winkels  $\theta_1$  ebenfalls ein Vergrößern des Winkels  $\theta_{11}$ . Im DuMond-Diagramm sind die beiden Kurven etwas verschoben, um sie kenntlich zu machen; eigentlich fallen sie zusammen. Das bedeutet also, daß in dieser Anordnung prinzipiell alle Wellenlängen gleichzeitig übertragen werden können, wenn sie unter verschiedenen Winkeln auftreffen. In der Praxis wird der Übertragende Bereich durch Blenden begrenzt, sie sind in der Abbildung 5b mit  $S_1$  und  $S_2$  bezeichnet. Da die



Synchrotronstrahlung selbst eine sehr kleine Winkeldivergenz hat (maximal einige zehn Bogensekunden), wirkt sich dieser Umstand als Blendenersatz aus, und läßt somit nur einen kleinen Übertragungsbereich zu. Dieser ist jedoch in der Regel größer als bei der antiparallelen Anordnung.

#### 4. Vorschlag eines Monochromators

Aufbauend auf die bisherige Diskussion und in Hinblick auf die geforderten Eigenschaften eines Monochromators, wird hier als Beispiel ein asymmetrisch geschnittener Germanium-Doppelmonochromator in paralleler Anordnung aus 'einem Stück' beschrieben.

Er hat den Vorteil, daß Germanium-Einkristalle in guter Qualität erhältlich und gut zu bearbeiten sind. Durch den asymmetrischen Schnitt wird zum einen die Übertragungsbreite herauf- und die Wärmebelastung pro Flächeneinheit herabgesetzt. Die parallele Anordnung aus 'einem Stück' erlaubt eine einfache Handhabung des 'Energiedurchfahrens' und bewirkt keine Richtungsänderung des Gamma-Strahles. Nachteilig wirkt sich bei einem Germanium-Einkristall die geringere Reflektivität (Tabelle 1) und bei der parallelen Anordnung die geringere Monochromatisierung und Kollimierung aus (Abbildung 4 und 5).

Zur Bestimmung der geometrischen Abmessungen ergeben sich allgemein mit Hilfe der Abbildung 6 die folgenden Formeln:

$$l = l' \cos \delta = \left[ \frac{a}{\sin(\theta - \delta)} + \frac{d}{\tan(\theta + \delta)} + d \tan \delta \right] \cos \delta$$

$$z = z' \cos \delta = \left[ \frac{a}{\sin(\theta - \delta)} - \frac{d}{\tan(\theta + \delta)} + d \tan \delta \right] \cos \delta$$

Dabei bedeuten: l - Länge des Kristalles; z - Ausschnitt des Kristalles; a - einfallender Strahlquerschnitt; d - Nut-Breite;  $\theta$  - halber Streuwinkel;  $\delta$  - Winkel zwischen den Netzebenen und der Kristalloberfläche

Für den 111-Reflex eines Germanium-Einkristalles ist bei der gewünschten Gamma-Energie von 14.4 keV der Braggwinkel  $\theta_B = 7.57^\circ$ . Um alle möglichen Gamma-Quanten zu übertragen, müßte eine Eingangsdivergenz von 60'' zugelassen werden (Tabelle 2). Um dieses zu erreichen, muß bei einer Breite der Rockingkurve von 9'', der Kristall so asymmetrisch geschnitten werden, daß die Reflektivität zu klein wird (Abbildung D.15 für  $b = -0.02$ ).

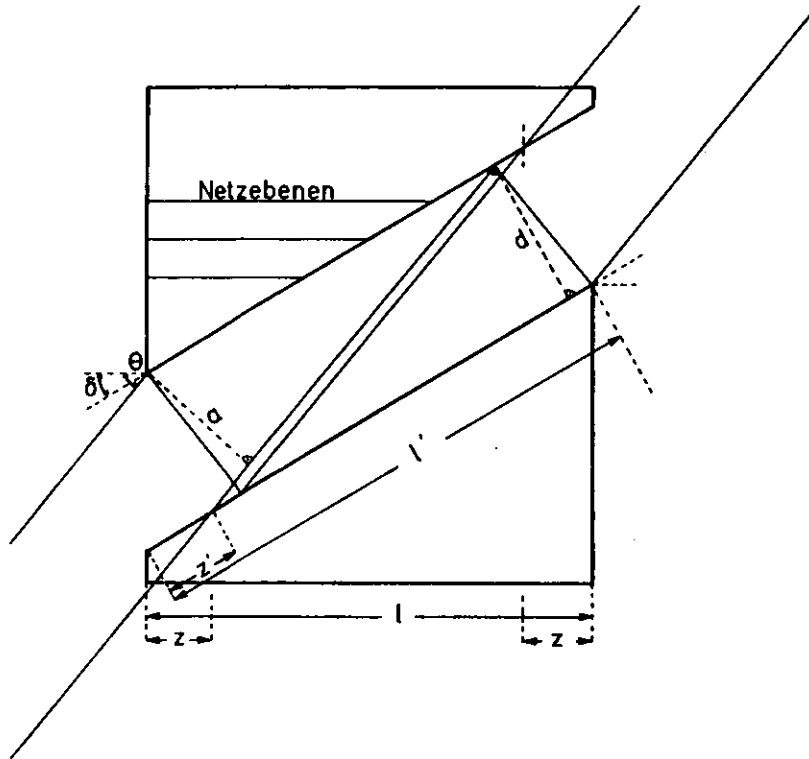


Abbildung 6: Geometrie und Strahlengang eines asymmetrisch geschnittenen Kristalles  
 l - Länge des Kristalles  
 z - Ausschnitt des Kristalles  
 a - einfallender Strahlquerschnitt  
 d - Nut-Breite  
 $\theta$  - halber Streuwinkel  
 $\phi$  - Winkel zwischen den Netzebenen und der Oberfläche des Kristalles

Als Kompromiß wird eine Eingangsdivergenz von 20'' gewählt, da hier schon die Hälfte der möglichen Gamma-Quanten übertragen wird, und die Reflektivität noch nicht merklich abgenommen hat. Aus Abschnitt D.5. erhält man die relevanten Größen unter der Annahme, daß der Monochromator eine Eingangsdivergenz von 20'' akzeptieren soll.

	Gleichung	1.Reflexion	2.Reflexion
Braggwinkel $\theta_B$		7.57°	7.57°
b	(5.15)	-0.19	-5.2
Neigungswinkel $\phi$	(5.6)	5.17°	-5.17°
einfallender Strahlquerschnitt	(5.17)	3.9 mm	20.5 mm
ausfallender Strahlquerschnitt	(5.17)	20.5 mm	3.9 mm
Divergenz der einfallenden Strahlung	(5.16)	20''	3.8''
Divergenz der ausfallenden Strahlung	(5.16)	3.8''	20''
Reflektivität $R_0$	(5.22)	61.8 %	38.2 %

Aus der obigen Formel erhält man mit diesen Werten für eine Nut-Breite von 10 mm für die Länge l des Kristalles folgendes Ergebnis,

$$l = 137.7 \text{ mm.}$$

In Abbildung 7 ist ein solcher Monochromator geometrisch dargestellt.

Auf Grund qualitativer Mängel des beschriebenen Germanium-Kristalles (Haarrisie) war es nicht möglich, den hier beschriebenen Monochromator herzustellen.

Ersatzweise wurde aus zwei einzelnen Germanium-Kristallen ein Doppelmonochromator in paralleler Anordnung aufgebaut.

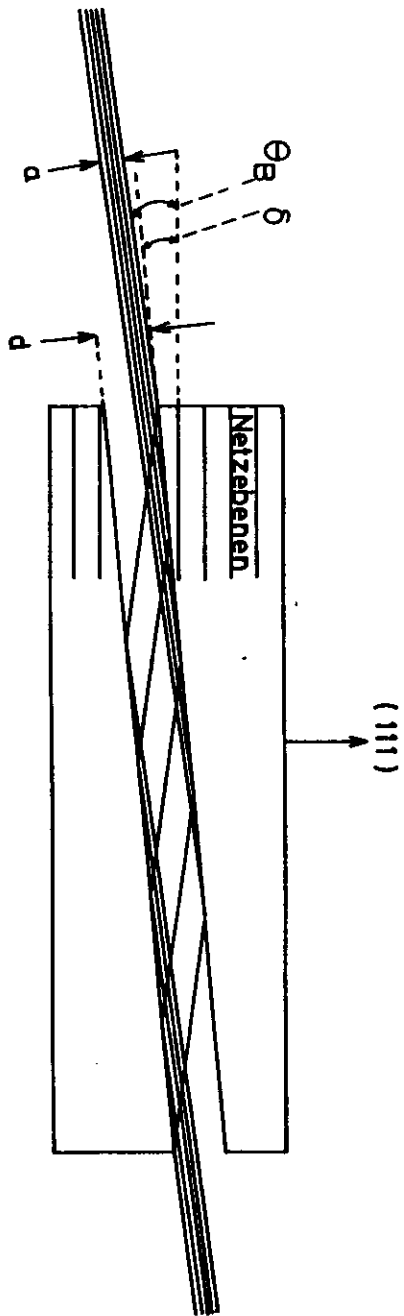


Abbildung 7:

Germanium - Doppelmonochromator für eine Gamma - Energie von 14,4 keV in paralleler Anordnung und asymmetrisch geschnitten. Reflexion an den (111)-Netzebenen.

Braggwinkel  $\theta_B = 7.57^\circ$  ; Neigungswinkel zwischen den Netzebenen und der Kristalloberfläche  $\delta = 5.17^\circ$  ; Nut-Breite  $d = 10$  mm; Länge des Kristalles  $l = 137.7$  mm ; einfallender Strahlquerschnitt  $a = 3.9$  mm

### G. Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wird die Planung und der Aufbau eines Mößbauer-Spektrometers für das Experiment 'Mößbauer-effekt mit Synchrotronstrahlung' beschrieben. Dafür ist ein Verständnis der Dynamischen Theorie der Braggstreuung notwendig. Zwei unterschiedliche Mechanismen sind für die Streuung verantwortlich, die Wechselwirkung der Gamma-Strahlen mit der Elektronenhülle - elektronische Braggstreuung genannt -, und die Wechselwirkung der Gamma-Strahlen mit den Kernen durch resonante Kernanregung - Mößbauerstreuung genannt -. Diese verschiedenen Streumechanismen sind die Ursache für den unterschiedlichen Monochromatisierungsgrad, der mit Hilfe der elektronischen Braggstreuung (1-10 eV) und der Mößbauerstreuung ( $10^{-8}$  eV) erreicht wird. Aus dieser Tatsache ergibt sich für das Spektrometer ein zweistufiger Aufbau aus einem Vormonochromator und einem Feinmonochromator.

Diese Arbeit hat sich auf die Beschreibung des Vormonochromators und die Darstellung der Theorie der elektronischen Braggstreuung beschränkt.

Die Ergebnisse dieser Theorie, wie z.B. die Reflektivität, die Breite der Rockingkurven und der Einfluß, der durch das asymmetrische Schneiden von Kristallen zustande kommt, bedingen die Konzeption des Kernstückes des Spektrometers - des Goniometers -. Dieses erlaubt es, Kristalle um zwei Drehachsen mit einer Winkelauflösung von  $4''$  zu drehen. Die Notwendigkeit für diese hohe Winkelauflösung ergibt sich aus der Breite der Rockingkurven von einigen bis zu einigen zehn Bogensekunden.

Die Ergebnisse der Theorie, die Verfügbarkeit der Kristalle und die Resultate der an ihnen durchgeführten Messungen bestimmen die Auswahl der Kristalle für den Vormonochromator. Es wurde zunächst ein Doppelmonochromator mit zwei einzelnen Germanium-Einkristallen (111-Reflex) gewählt.

Eine anschließende Meßzeit mit der Synchrotronstrahlung von Doris ermöglichte einen ersten Test des Spektrometers. Die vorläufige Auswertung des Versuches läßt erkennen, welche Kristallanordnung für den Vormonochromator in der Zukunft gewählt werden sollte.

In Hinblick auf den mechanischen und elektronischen Aufbau verlief der Test erfolgreich. Ein Problem bleibt die Abschirmung der Streustrahlung, die bei der hohen Elektronenenergie von etwa 4.5 GeV verstärkt auftritt.

Die gemessenen Rockingkurven zeigen das erwartete Ergebnis, das auch auf Grund der vorbereitenden Messungen vermutet wurde und von der Theorie für einen Einkristall vorausgesagt wird.

Die Energieeichung des Vormonochromators im Bereich von 14 keV läßt sich mit Hilfe der K-Absorptionskanten der Elemente Krypton (14.326 keV) und Brom (13.474 keV) durchführen. Die Eichung war jedoch wegen der unterschiedlichen Wärmebelastung des ersten Kristalles (sich ändernder Strahlstrom, wechselnder Reflexionspunkt auf dem Kristall) nur auf einige eV reproduzierbar. Dieses Ergebnis ist auch im Einklang mit der Theorie. Da nach der Bragg-Bedingung die Energie proportional zum reziproken Gitterabstand ist, folgt aus einer Änderung des Gitterabstandes in erster Näherung eine lineare Energieänderung. Diese liegt in der Größenordnung des linearen Ausdehnungskoeffizienten ( $10^{-5}$  bis  $10^{-6}$  pro Grad).

Für die folgenden Messungen sollten deshalb für den Vormonochromator Kristalle verwendet werden, die eine breite Rockingkurve haben. Dafür bieten sich Einkristalle aus Silber bzw. Gold (111-Reflex) mit einer Breite der Rockingkurve von 16'' bzw. 29'' und einer Reflektivität von 90% bzw. 70% an. Zusätzlich kann man auf Grund der besseren Leitfähigkeit von Silber bzw. Gold gegenüber Germanium einen geringeren Einfluß der Wärme auf den Kristall erwarten.

Der künftige Vormonochromator wird also voraussichtlich ein Doppelmonochromator sein, dessen Kristalle eine breite Rockingkurve zum Auffangen des Temperaturganges haben. Abschließend kann man sagen, daß das Problem des Vormonochromators als gelöst betrachtet werden kann.

H. Anhang

A. Lösungen der Differentialgleichung

Setzt man in Gleichung (2.5) für  $\vec{D}$  ebene Wellen ein, folgt

$$\begin{aligned} \text{rot rot} \left\{ \left[ 1 + \Gamma \sum_L F_L \exp[-2\pi i(\vec{L}, \vec{r})] \right] \sum_H \vec{D}_H \exp[i\omega_0 t - 2\pi i(\vec{K}_H, \vec{r})] \right\} = \\ = - \frac{1}{c^2} \frac{\delta^2}{\delta t^2} \left\{ \sum_H \vec{D}_H \exp[i\omega_0 t - 2\pi i(\vec{K}_H, \vec{r})] \right\} ; \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Äquivalentes Umformen ergibt

$$\begin{aligned} \text{rot rot} \left\{ \sum_H \vec{D}_H \exp[i\omega_0 t - 2\pi i(\vec{K}_H, \vec{r})] + \sum_L \sum_G \Gamma F_L \vec{D}_G \exp[-2\pi i(\vec{L}, \vec{r})] \cdot \right. \\ \left. \exp[i\omega_0 t - 2\pi i(\vec{K}_G, \vec{r})] \right\} = - \frac{1}{c^2} \frac{\delta^2}{\delta t^2} \left\{ \sum_H \vec{D}_H \exp[i\omega_0 t - 2\pi i(\vec{K}_H, \vec{r})] \right\} . \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Mit der Braggbedingung (2.6)  $\vec{K}_G + \vec{L} = \vec{K}_{G+L}$  und der Umbenennung  $G + L = H$  folgt

$$\begin{aligned} \text{rot rot} \left\{ \exp(i\omega_0 t) \sum_H \sum_G \left\{ \vec{D}_H + \Gamma F_{H-G} \vec{D}_G \right\} \exp[-2\pi i(\vec{K}_H, \vec{r})] \right\} = \\ = - \frac{1}{c^2} \frac{\delta^2}{\delta t^2} \left\{ \sum_H \vec{D}_H \exp[i\omega_0 t - 2\pi i(\vec{K}_H, \vec{r})] \right\} . \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Weiter folgt

$$\left[ -\vec{K}_H, \left[ \vec{K}_H, \left( \vec{D}_H + \sum_G \Gamma F_{H-G} \vec{D}_G \right) \right] \right] = k^2 \vec{D}_H \quad \text{für alle H} . \quad (\text{A.4})$$

$k$  ist der Betrag des Wellenvektors im Vakuum. Die Zeitableitungen der dielektrischen Funktion werden vernachlässigt.

Mit der Beziehung für das Kreuzprodukt

$$[\vec{A}, [\vec{B}, \vec{C}]] = \vec{B}(\vec{A}, \vec{C}) - \vec{C}(\vec{A}, \vec{B}) ,$$

folgt aus (A.4)

$$\vec{K}_H(-\vec{K}_H, [\vec{D}_H + \sum_G \Gamma F_{H-G} \vec{D}_G]) - [\vec{D}_H + \sum_G \Gamma F_{H-G} \vec{D}_G](-\vec{K}_H, \vec{K}_H) = k^2 \vec{D}_H \quad \text{für alle H} . \quad (\text{A.5})$$

$$\vec{K}_H(-\vec{K}_H, \vec{D}_H) + \vec{K}_H(-\vec{K}_H, \sum_G \Gamma F_{H-G} \vec{D}_G) - \vec{D}_H(-\vec{K}_H, \vec{K}_H) - \sum_G \Gamma F_{H-G} \vec{D}_G(-\vec{K}_H, \vec{K}_H) = k^2 \vec{D}_H \quad (\text{A.6})$$

für alle H. Äquivalentes Umformen ergibt

$$-\vec{K}_H(\vec{K}_H, \vec{D}_H) + \sum_G \left\{ -\Gamma F_{H-G} \vec{K}_H(\vec{K}_H, \vec{D}_G) + \Gamma F_{H-G} \vec{D}_G(\vec{K}_H, \vec{K}_H) \right\} = \{k^2 - (\vec{K}_H, \vec{K}_H)\} \vec{D}_H \quad (\text{A.7})$$

für alle H.

Aus (A.4) folgt, daß  $\vec{D}_H \perp \vec{K}_H$  ist, d.h.,  $(\vec{K}_H, \vec{D}_H) = 0$ , also folgt für alle H

$$\sum_G \left\{ \Gamma F_{H-G} \vec{D}_G(\vec{K}_H, \vec{K}_H) - \Gamma F_{H-G} \vec{K}_H(\vec{K}_H, \vec{D}_G) \right\} = \{k^2 - (\vec{K}_H, \vec{K}_H)\} \vec{D}_H . \quad (\text{A.8})$$

Zieht man den Term für  $G = H$  aus der Summe heraus, folgt weiter für alle H

$$\begin{aligned} \Gamma F_0 \vec{D}_H(\vec{K}_H, \vec{K}_H) - \Gamma F_0 \vec{K}_H(\vec{K}_H, \vec{D}_H) + \sum_{G \neq H} \left\{ \Gamma F_{H-G} \vec{D}_G(\vec{K}_H, \vec{K}_H) - \Gamma F_{H-G} \vec{K}_H(\vec{K}_H, \vec{D}_G) \right\} = \\ = \{k^2 - (\vec{K}_H, \vec{K}_H)\} \vec{D}_H . \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Äquivalentes Umformen ergibt

$$\sum_{G \neq H} \left\{ \Gamma F_{H-G} \vec{D}_G(\vec{K}_H, \vec{K}_H) - \Gamma F_{H-G} \vec{K}_H(\vec{K}_H, \vec{D}_G) \right\} = \{k^2 - (1 + \Gamma F_0)(\vec{K}_H, \vec{K}_H)\} \vec{D}_H \quad (\text{A.10})$$

für alle H.

Diese Gleichungen sind das Fundamentalsystem der Dynamischen Theorie. Sie beschreiben das elektromagnetische Wellenfeld im Kristall.

**B. Amplitudenverhältnisse**

Aus den Gleichungen (2.6) und (2.19) folgt

$$\vec{K}_H = \vec{K}_e + \frac{k \delta_0}{\gamma_0} \vec{n} + \vec{H} \quad (\text{B.1})$$

Quadrieren und Benutzung von Gleichung (2.9) führt zu

$$k^2(1+2\delta_H) = k^2 + \left(\frac{k \delta_0}{\gamma_0} \vec{n}\right)^2 + \vec{H}^2 + 2(\vec{K}_e, \vec{H}) + 2 \frac{k \delta_0}{\gamma_0} (\vec{K}_e, \vec{n}) + 2 \frac{k \delta_0}{\gamma_0} (\vec{n}, \vec{H})$$

Vernachlässigt man den quadratischen Term in  $\delta_0$ , folgt mit  $\gamma_0 = (\vec{n}, \vec{u}_0)$

$$\delta_H = \delta_0 \frac{(\vec{K}_e, \vec{n}) + (\vec{n}, \vec{H})}{(\vec{K}_e, \vec{n})} + \frac{1}{2k^2} \{ \vec{H}^2 + 2(\vec{K}_e, \vec{H}) \} \quad (\text{B.2})$$

Mit den Abkürzungen

$$\frac{1}{b} = 1 + \frac{(\vec{n}, \vec{H})}{(\vec{n}, \vec{K}_e)} \quad \text{und} \quad \alpha = \frac{1}{k^2} \{ \vec{H}^2 + 2(\vec{K}_e, \vec{H}) \} \quad (\text{B.3})$$

folgt

$$\delta_H = \frac{1}{b} \delta_0 + \frac{1}{2} \alpha \quad (\text{B.4})$$

In dem betrachteten Fall ist  $\vec{K}_H - \vec{K}_0 = \vec{H}$ . Dann läßt sich b umformen zu  $(\gamma_H = (\vec{n}, \vec{u}_H))$

$$b = \frac{(\vec{n}, \vec{K}_e)}{(\vec{n}, [\vec{K}_e + \vec{K}_H - \vec{K}_0])} \approx \frac{\gamma_0}{\gamma_H} \quad (\text{B.5})$$

$\alpha$  läßt sich mit Hilfe der Abbildung D.12 geometrisch umformen

$$|\vec{H}| = 2k \sin \theta_B$$

$$(\vec{K}_e, \vec{H}) = k |\vec{H}| \cos(90^\circ + \theta) = -k |\vec{H}| \sin(\theta_B + \Delta\theta) \approx -k |\vec{H}| (\sin \theta_B + \Delta\theta \cos \theta_B)$$

Aus (B.3) folgt somit

$$\alpha \approx \frac{1}{k^2} \{ 4k^2 \sin^2 \theta_B - 4k^2 \sin \theta_B (\sin \theta_B + \Delta\theta \cos \theta_B) \} \quad (\text{B.6})$$

$$\Leftrightarrow \alpha = 2 \Delta\theta \sin 2\theta_B \quad \text{mit} \quad \Delta\theta = \theta_B - \theta \quad (\text{B.7})$$

Aus Gleichung (2.10) erhält man

$$(2\delta_0 + \Gamma F_0) (2\delta_H + \Gamma F_0) = P^2 \Gamma^2 F_H F_{\bar{H}} \quad (\text{B.8})$$

Mit Gleichung (B.4) erhält man eine quadratische Gleichung in  $\delta_0$

$$(2\delta_0 + \Gamma F_0) \left\{ \frac{2}{b} \delta_0 + \alpha + \Gamma F_0 \right\} = P^2 \Gamma^2 F_H F_{\bar{H}} \quad (\text{B.9})$$

$$\Leftrightarrow \delta_0^{\text{m}} = \frac{1}{2} \left\{ -(\Gamma F_0 + \frac{b-1}{2} \Gamma F_0 + \frac{b}{2} \alpha) + \sqrt{b^2 \alpha^2 + 2b^2 \alpha \Gamma F_0 + 2b \alpha \Gamma F_0 + b^2 \Gamma^2 F_0^2 + 2b \Gamma^2 F_0^2 + \Gamma^2 F_0^2 - 4b \alpha \Gamma F_0 - 4b \Gamma^2 F_0^2 + 4b P^2 \Gamma^2 F_H F_{\bar{H}}} \right\}$$

$$\vee \delta_0^{\text{z}} = \frac{1}{2} \left\{ -(\Gamma F_0 + \frac{b-1}{2} \Gamma F_0 + \frac{b}{2} \alpha) - \sqrt{b^2 \alpha^2 + 2b^2 \alpha \Gamma F_0 + 2b \alpha \Gamma F_0 + b^2 \Gamma^2 F_0^2 + 2b \Gamma^2 F_0^2 + \Gamma^2 F_0^2 - 4b \alpha \Gamma F_0 - 4b \Gamma^2 F_0^2 + 4b P^2 \Gamma^2 F_H F_{\bar{H}}} \right\}$$

$$\text{Mit} \quad z = \frac{b-1}{2} \Gamma F_0 + \frac{b}{2} \alpha \quad \text{und} \quad q = b P^2 \Gamma^2 F_H F_{\bar{H}} \quad (\text{B.10})$$

folgt

$$\delta_0^{\text{m}} = -\frac{1}{2} \{ \Gamma F_0 + z - \sqrt{q+z^2} \} \quad \vee \quad \delta_0^{\text{z}} = -\frac{1}{2} \{ \Gamma F_0 + z + \sqrt{q+z^2} \} \quad (\text{B.11})$$

In Gleichung (2.11) wurde das Amplitudenverhältnis x definiert

$$x = - \frac{2\delta_0 + \Gamma F_0}{P \Gamma F_{\bar{H}}}$$

Mit (B.11) ergeben sich daraus zwei Amplitudenverhältnisse  $x_1$  und  $x_2$ .

$$x_1 = \frac{z + \sqrt{q+z^2}}{P \Gamma F_{\bar{H}}} \quad \text{und} \quad x_2 = \frac{z - \sqrt{q+z^2}}{P \Gamma F_{\bar{H}}} \quad (\text{B.12})$$

C. Mosaikkristall

Mit Hilfe des Gleichungssystems (3.3) werden die Reflektivitäten eines Mosaikkristalles mit einer, zwei, ... Schichten berechnet. Dazu setzt man das jeweilige  $P_H^{(n)}$  mit maximalem  $n$  gleich null.

Dann erhält man für die Reflektivität eines Mosaikkristalles mit

$$\begin{aligned} \text{einer Schicht : } R_1 &= \Omega \\ \text{zwei Schichten: } R_2 &= \Omega + \Omega \frac{(\alpha - \Omega)^2}{1 - \Omega R_1} \\ \text{drei Schichten: } R_3 &= \Omega + \Omega \frac{(\alpha - \Omega)^2}{1 - \Omega R_2} + \Omega \frac{(\alpha - \Omega)^4}{(1 - \Omega R_1)(1 - \Omega R_2)} \\ \text{vier Schichten: } R_4 &= \Omega + \Omega \frac{(\alpha - \Omega)^2}{1 - \Omega R_3} + \Omega \frac{(\alpha - \Omega)^4}{(1 - \Omega R_2)(1 - \Omega R_3)} + \Omega \frac{(\alpha - \Omega)^6}{(1 - \Omega R_1)(1 - \Omega R_2)(1 - \Omega R_3)} \end{aligned}$$

usw.

Daraus ergibt sich eine Rekursionsformel für einen Mosaikkristall mit  $n$  Schichten

$$R_n = R_{n-1} \frac{(\alpha - \Omega)^2}{1 - \Omega R_{n-1}} + \Omega$$

Unendlich dicker Kristall:

Um zu beweisen, daß die Formel (3.5)

$$R_\infty = \frac{2\Omega}{1 - \alpha^2 + 2\alpha\Omega + \sqrt{(1 + \alpha^2 - 2\alpha\Omega)^2 - 4(\alpha - \Omega)^2}}$$

für einen dicken Mosaikkristall aus der obigen Rekursionsformel folgt, wird gezeigt, daß (3.5) ein Fixpunkt der Rekursionsformel ist. D.h., es muß gelten

$$R_\infty = R_\infty \frac{(\alpha - \Omega)^2}{1 - \Omega R_\infty} + \Omega$$

$$\Leftrightarrow R_\infty^2 + \frac{1 - (\alpha - \Omega)^2 + \Omega^2}{\Omega} R_\infty - 1 = 0$$

$$\Rightarrow R_\infty = \frac{1 - (\alpha - \Omega)^2 + \Omega^2}{2\Omega} - \sqrt{\left[ \frac{1 - (\alpha - \Omega)^2 + \Omega^2}{2\Omega} \right]^2 - 1}$$

Aus physikalischen Gründen ergibt nur die Gleichung mit der negativen Wurzel eine sinnvolle Lösung.

Für sehr große Absorption, d.h.,  $\alpha \rightarrow 0$ , divergiert die Reflektivität im Fall mit der positiven Wurzel.

Weiter läßt sich äquivalent umformen:

$$R_\infty = \frac{1 - (\alpha - \Omega)^2 + \Omega^2 - \sqrt{(1 - (\alpha - \Omega)^2 + \Omega^2)^2 - 4\Omega^2}}{2\Omega}$$

$$\Leftrightarrow R_\infty = \frac{1 - (\alpha - \Omega)^2 + \Omega^2 - \sqrt{(1 + (\alpha - \Omega)^2 - \Omega^2)^2 - 4(\alpha - \Omega)^2}}{2\Omega}$$

$$\Leftrightarrow R_\infty = \frac{1 - \alpha^2 + 2\alpha\Omega - \sqrt{(1 + \alpha^2 - 2\alpha\Omega)^2 - 4(\alpha - \Omega)^2}}{2\Omega}$$

$$\Leftrightarrow R_\infty = \frac{2\Omega}{1 - \alpha^2 + 2\alpha\Omega + \sqrt{(1 + \alpha^2 - 2\alpha\Omega)^2 - 4(\alpha - \Omega)^2}}$$

Damit ist gezeigt, daß die Formel (3.5) für den Grenzfall eines dicken Mosaikkristalles aus der Rekursionsformel folgt.

I. Literaturverzeichnis

- /BAT64/ Boris W. Batterman; Henderson Cole  
(1964) Reviews of Modern Physics, 36, 3, 681-717
- /BLA64/ P.J. Black; I.P. Duerdoth  
(1964) Proc. Phys. Soc., 84, 169-171
- /BON77/ U. Bonse; W. Graeff  
in: X-Ray Optics; herausgegeben von H.-J. Queisser  
Topics in Applied Physics Vol. 22 (1977)  
Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York
- /BUB62/ R. Bubakova  
(1962) Czechoslovak Journal of Physics,  
B12, 776-783
- /COH77/ R.L. Cohen; G.L. Miller; K.W. West  
(1977) in: AIP Conference Proceedings No. 38  
herausgegeben von G.J. Perlow,  
American Institute of Physics, New York
- /CON68/ D.A. O'Connor  
(1968) J. Phys. C (Proc. Phys. Soc.),  
Ser. 2, Vol. 1, 973-978
- /DUM37/ Jesse W.M. DuMond  
(1937) Physical Review, 52, 872-883
- /FEN77/ H.J. Fenzl, Jülich, private Mitteilung
- /HAN68/ J.P. Hannon; G.T. Trammell  
(1968) Physical Review, 169, 315-329
- /HAN69/ J.P. Hannon; G.T. Trammell  
(1969) Physical Review, 186, 306-325
- /HAN74/ J.P. Hannon; N.J. Carron; G.T. Trammell  
(1974) Physical Review, B9, 2791-2809 und 2810-2831
- /HAR77/ M. Harsdorff, Hamburg, private Mitteilung

- /HIR50/ P.B. Hirsch; G.N. Ramachandran  
(1950) Acta Cryst., 3, 187-194
- /JAC75/ John David Jackson  
Classical Electrodynamics  
(1975) John Wiley & Sons, Inc.
- /MDI74/ Mössbauer Effect Data Index 1974  
herausgegeben von J.G. Stevens und V.E. Stevens  
IFI/Plenum Data Company 1975
- /MIR71/ R.M. Mirzababaev; G.V. Smirnov; V.V. Sklyarevskii;  
A.N. Artem'ev; A.N. Izrailenko; V. Babkov  
(1971) Physics Letters, 37A, 441-442
- /MUE77/ M. Mueller, Hamburg, private Mitteilung
- /PAE77/ S. Pätzold  
(1977) Interner Bericht Desy H2-77/02
- /REN75/ M. Renninger  
(1975) Acta Cryst., A31, 42-49
- /RUB74/ S.L. Ruby  
(1974) Journal de Physique, C6, 209-211
- /SMI69/ G.V. Smirnov; V.V. Sklyarevskii; R.A. Voskanyan;  
A.N. Artem'ev  
(1969) ZhETF Pis. Red., 2, No. 2, 123-127
- /SYN77/ Synchrotronstrahlung bei Desy -  
Ein Handbuch für Benutzer  
herausgegeben von E.E. Koch und C. Kunz  
Hamburg 1977
- /ZAC45/ William H. Zachariasen  
Theory of X-Ray Diffraction in Crystals  
Dover Publications, Inc., New York, 1945
- /ZHD68/ G.S. Zhdanov; R.N. Kuz'min  
(1968) Acta Cryst., B24, 10-12