

**INAUGURAL - DISSERTATION**  
**zur**  
**Erlangung der Doktorwürde**  
**der**  
**Naturwissenschaftlich-Mathematischen**  
**Gesamtfakultät**  
**der Ruprecht-Karls-Universität**  
**Heidelberg**

vorgelegt von  
**Dipl.-Phys. Frank Michael Lang**  
aus Landau in der Pfalz

Tag der mündl. Prüfung: 13.11.2002



**Transversales Spinecho  
an einem  
atomaren Wasserstoffstrahl**

**und**

**Spezielle Quellen für Atom- und Molekülstrahlen**

Gutachter:

**Prof. Dr. Dirk Dubbers**

**Prof. Dr. Annemarie Pucci**



### **Transversales Spinecho an einem atomaren Wasserstoffstrahl und spezielle Quellen für Atom- und Molekülstrahlen**

Im ersten Teil dieser Arbeit werden die atominterferometrischen Grundlagen für das Wasserstoff-Atomstrahl-Spinecho eingeführt. Diese werden zu einer Streutheorie erweitert, bei der die transversale Aufspaltung von Wellenpaketen genutzt wird, um mit dieser speziellen Art des Spinechos dynamische Korrelationsfunktionen direkt zu messen. Die Theorie gibt zudem wichtige Rahmenbedingungen zur experimentellen Realisierung vor. Die Spulen, die für transversales Spinecho nötig sind, werden beschrieben, und erste Messungen am geraden Strahl werden diskutiert.

Der zweite Teil der Arbeit widmet sich speziellen Quellen für Atom- und Molekülstrahlen. Es wird ein neuer Ansatz zur Dissoziation von molekularem Wasserstoff und der Erzeugung eines Überschallstrahls aus atomarem Wasserstoff verfolgt. Dazu werden Plasmen genutzt, die zwischen mikrostrukturierten Elektroden mit Abständen im Sub-Millimeter-Bereich brennen. Messungen zur Strahlcharakterisierung dieser Quelle mittels  $\text{He}^*$  werden diskutiert.

Außerdem wird eine Quelle vorgestellt, mit der es möglich ist, langsame und kalte Atom- und Molekülstrahlen zu erzeugen, indem Gas adiabatisch aus einer sich bewegenden Düse expandiert, die am Ende eines Rotors montiert ist. Das Design dieser Quelle wird präsentiert und anhand von Messungen wird gezeigt, dass mit dieser Quelle beispielsweise ein Argonstrahl mit einer mittleren Geschwindigkeit von 170 m/s und einer Strahltemperatur von 4 K erzeugt werden kann.

### **Transversal in-beam spin-echo using atomic hydrogen and specially designed sources for atomic and molecular beams**

The first part of this thesis deals with in-beam spin-echo using atomic hydrogen. The atom-interferometric description of hydrogen spin-echo is introduced, from which a scattering theory is deduced. Basing on a *transversal* separation of wave-packets, this theory proves that dynamical correlation functions can be measured directly with this special kind of spin-echo experiment. Furthermore requirements of an appropriate spectrometer-design follow from this theory. The coils needed for transversal spin-echo are described and first measurements with the unscattered beam are discussed. The second part of this work is devoted to specially designed sources for atomic and molecular beams. A new approach for dissociating molecular hydrogen and forming a beam of atomic hydrogen is pursued. For this purpose, plasma discharges are used, which are ignited inside the gap of a microstructured electrode system in the sub-millimetric range. Measurements using metastable Helium in order to characterize beams emanating from this kind of source will be discussed.

Furthermore, a source capable of producing both slow and cold atomic as well as molecular beams is presented. The design of the device is presented as well as measurements demonstrating that a supersonic beam consisting of argon atoms with a most probable velocity of 170 m/s and a velocity spread according to a beam temperature of 4 K has been achieved.



gewidmet meiner Mutter  
und meinem Vater



# Einleitung

Seit Estermann und Stern im ersten Drittel des vergangenen Jahrhunderts Streuexperimente mit thermischen Atomstrahlen zum Nachweis der Wellennatur der Atome durchführten [1], entwickelte sich die Atomstrahl-Streuung, vor allem mit Helium, zu einem Instrument von großer Bedeutung für die Strukturuntersuchung in der Oberflächenphysik. Gegenüber anderen oberflächensensitiven Sondenteilchen (wie beispielsweise niederenergetischen Elektronen) dringen Atome aufgrund des Pauli-Prinzips nicht in den Festkörper ein und sind daher nur auf die oberste Atomlage der Oberfläche sensitiv.

Die Helium-Atomstrahl-Streuung hat in der Oberflächenphysik einen ähnlichen Stellenwert, wie die Neutronenstreuung für die Untersuchung dreidimensionaler Systeme wie Flüssigkeiten oder Festkörper. Das von Mezei [2] in der Neutronenphysik erfundene Prinzip des Strahlspinechos (der Spinechobegriff geht zurück auf E. Hahn [3]) erlaubt durch geschickte Manipulation und Analyse der magnetischen Momente der Strahlteilchen, diese zur Flugzeitmessung zu benutzen, ohne auf einen gepulsten Strahl mit einer schmalen Geschwindigkeitsverteilung angewiesen zu sein. Diese Methode konnte erstmals in unserer Arbeitsgruppe auf einen  $^3\text{He}$ -Strahl übertragen [4] und auch schon an einem  $^3\text{He}$ -Atomstrahl-Spinecho-Spektrometer zur Untersuchung von 2D-Oberflächeneigenschaften eingesetzt werden [5, 6]. Das Spinecho-Prinzip arbeitet mit der räumlichen Trennung und anschließender Überlagerung von magnetischen Eigenzuständen *eines* Strahlteilchens. Atomstrahl-Spinecho-Experimente sind aus diesem Grund im Bereich der Atominterferometrie anzusiedeln.

Parallel dazu wurden weitere erfolgreiche Versuche unternommen, das Spinechoprinzip auch auf andere Atomstrahlen zu übertragen, deren Strahlteilchen ein elektronisches magnetisches Moment tragen, wie beispielsweise Lithium [7] oder Wasserstoff [8].

Da das magnetische Moment des atomaren Wasserstoffs ungleich größer ist als das von  $^3\text{He}$ , bietet es sich an, mit Wasserstoffatomen als Sondenteilchen magnetische Strukturen und Dynamik der Proben-Oberfläche zu untersuchen. So soll es einmal möglich sein, mit einem Wasserstoff-Atomstrahl-Spinecho-Spektrometer magnetische Strukturen der Probenoberfläche auf atomarer Ebene zu untersuchen. Mit einem solchen Instrument würden sich bei der Untersuchung magnetischer Dynamik Zeitskalen eröffnen, die heute mit direkten bildgebenden Verfahren wie beispielsweise spinpolarisierter Rastertunnelmikroskopie [9] nicht zugänglich sind.

Diese Arbeit schließt an diejenige von A. Reiner [8] an, in der gezeigt wurde, dass das in-beam-Spinechoprinzip auf das Wasserstoffatom übertragbar ist. In seiner Arbeit beschreibt er Experimente mit Wasserstoff und Deuterium am geraden Strahl, die sich durch eine Erweiterung der Spinecho-Theorie beschreiben lassen. Außerdem findet sich in [8] der Vorschlag für eine Variante des Spinechos, das sogenannte transversale Spinecho.

Im ersten Teil der hier vorliegenden Arbeit wird die Idee des transversalen Spinechos aufgegriffen und weiterentwickelt. Beim transversalen Spinecho wird sowohl eine longitudinale als auch eine laterale (transversale) Aufspaltung der Teilwellenpakete eines Strahlteilchens erzeugt. Nach einer Übersicht über mehrere äquivalente Methoden zur Beschreibung des Spinechoprinzips in Kapitel 1 wird in Kapitel 2 das in [8] entwickelte anschauliche „Fahrplanmodell“ für transversale Aufspaltungen der Eigenzustände einzelner Strahlteilchen erweitert und zur Entwicklung einer Streutheorie für das transversale Spinecho verwendet. Als Konsequenz aus dieser Streutheorie ergibt sich schließlich eine Vorschrift, wie die Spinechospulen in einem Spinecho-Spektrometer ausgerichtet sein müssen, um die direkte Messung von raum-zeitlichen Korrelationen auf einer Probe zu ermöglichen.

Die apparative Beschreibung des Experiments in Kapitel 3 ist bewusst kurz gehalten, da sich in [8] eine ausführliche Beschreibung der Komponenten findet, die für ein Atominterferometer dieser Art von Bedeutung sind.

Die Änderungen, die an den Spinecho-Spulen gegenüber dem longitudinalen Spinecho aus [8] notwendig sind, um Experimente mit transversalem Spinecho durchzuführen, werden detailliert in Kapitel 4 diskutiert. Ebenso werden erste Messungen präsentiert.

Der zweite Teil dieser Arbeit beschäftigt sich mit Quellen für Atom- und Molekülstrahlen. Dies geschieht vor allem aus der Motivation heraus, dass für Spinecho-Experimente mit atomarem Wasserstoff eine intensive, zeitlich stabile Quelle erforderlich ist, die mit hoher Effizienz Wasserstoffmoleküle dissoziiert. Da der bisher am Wasserstoff-Spinecho-Experiment verwendete Mikrowellen-Dissoziator mit vergleichsweise hohem apparativem Aufwand verbunden ist, wurden Anstrengungen unternommen, eine Quelle zu konstruieren, die auf einfache Art und Weise die oben genannten Anforderungen erfüllt. In Kapitel 5 werden deshalb die Grundlagen gelegt, die zur Charakterisierung von Strahlquellen erforderlich sind.

Kapitel 6 widmet sich dann dem Entwurf einer neuartigen Quelle für atomaren Wasserstoff und den damit durchgeführten Experimenten. Da diese Quelle in der Lage ist, auch metastabiles Helium ( $2^3S_1(1s\ 2s)$ ) zu erzeugen, könnte sie auch für eine Modifikation des  $^3\text{Helium}$ -Spinecho-Spektrometers von Interesse sein.

In Kapitel 7 wird schließlich eine gepulste Quelle für Atome oder Moleküle vorgestellt, mit der es möglich ist, langsame und kalte Strahlen zu erzeugen. Dies geschieht dadurch, dass die Düse auf einen Rotor montiert wird, über die das Gas adiabatisch ins Vakuum expandiert [10]. Da sich die Rotorgeschwindigkeit zur Geschwindigkeit der ausströmenden Strahlteilchen addiert, lassen sich so unterschiedliche Strahlgeschwindigkeiten erzeugen. Durch die Überschall-Expansion wird eine Kühlung des Strahls erreicht, die Varianz der Geschwindigkeiten verringert sich. Eine solche Quelle könnte beispielsweise dazu genutzt werden, um kalte Molekül-gase mit Temperaturen in magnetischen Fallen zu erzeugen, die bisher nur mit quantenoptischen Methoden an Atomen durchführbar sind.

# Inhaltsverzeichnis

<b>I</b>	<b>Transversales Spinecho mit atomarem <math>1S_{1/2}</math> Wasserstoff</b>	<b>1</b>
<b>1</b>	<b>Theorie des Atomstrahl-Spinechos</b>	<b>3</b>
1.1	Theorie für ein reines Spin $\frac{1}{2}$ - System . . . . .	3
1.1.1	Erklärung des Strahlspinechos anhand von Larmorpräzessionen . . . . .	4
1.1.2	Qualitative quantenmechanische Beschreibung und Fahrplanmodell . . . . .	7
1.2	Spinecho mit Wasserstoff . . . . .	11
1.2.1	Wasserstoffatome $1S_{1/2}$ im Magnetfeld . . . . .	11
1.2.2	Fahrplanmodell . . . . .	11
1.2.3	Quantenmechanische Beschreibung . . . . .	13
<b>2</b>	<b>Transversales Spinecho</b>	<b>21</b>
2.1	Die gekippte Spule . . . . .	22
2.1.1	Erzeugter Versatz . . . . .	22
2.1.2	Phasendifferenz . . . . .	24
2.1.3	Spinecho-Bedingung . . . . .	24
2.2	Modifiziertes Fahrplanmodell . . . . .	25
2.3	Streutheorie beim transversalen Spinecho . . . . .	26
2.3.1	Begründung für die Verwendung des Fahrplanmodells . . . . .	27
2.3.2	Die Interferenzterme . . . . .	27
2.3.3	Allgemeines zu den Streugeometrien . . . . .	29
2.3.4	Aufspaltungs- und Streuebene parallel . . . . .	29
2.3.5	Aufspaltungsebenen normal zur Streuebene . . . . .	35
2.3.6	Interpretation der Interferenzterme . . . . .	39
<b>3</b>	<b>Aufbau für transversales Spinecho</b>	<b>41</b>
3.1	Ein schematischer Überblick . . . . .	41
3.2	Die Strahlquelle . . . . .	42
3.2.1	Der Dissoziator . . . . .	42
3.2.2	Die Strahlerzeugung . . . . .	43
3.3	Der Polarisator . . . . .	44
3.4	Die Spinecho-Konfiguration . . . . .	46
3.5	Der Analysator . . . . .	46
3.6	Der Detektor . . . . .	47
3.7	Das Vakuumsystem . . . . .	48

<b>4</b>	<b>Die Spulen für das transversale Spinecho</b>	<b>51</b>
4.1	Die Geometrie mit flachen Filamenten . . . . .	51
4.1.1	Die gefertigten Spulen . . . . .	52
4.1.2	Simulation der Spulen . . . . .	53
4.2	Die Geometrie mit gewölbten Filamenten . . . . .	62
4.2.1	Die gefertigten Spulen . . . . .	65
4.2.2	Simulation der Spulen . . . . .	65
4.3	Messungen mit den Spulen . . . . .	70
4.3.1	Die gewickelten Spulen . . . . .	71
4.3.2	Die erodierten Spulen mit gewölbten Filamenten . . . . .	73
4.3.3	Vergleich zwischen gewickelten und erodierten Spulen . . . . .	77
4.3.4	Einfluss eines streuspulen-artigen Feldes am Ort des $\pi$ -Flips . . . . .	79
4.4	Zusammenfassung und Ausblick . . . . .	84
<b>II</b>	<b>Spezielle Quellen für Atom- und Molekülstrahlen</b>	<b>85</b>
<b>5</b>	<b>Theorie von effusiven und Überschall-Quellen</b>	<b>87</b>
5.1	Grundlegendes . . . . .	87
5.1.1	Maxwell-Boltzmann-Verteilung . . . . .	87
5.1.2	Zusammenhang zwischen Geschwindigkeits- und Flugzeitverteilung . . . . .	89
5.1.3	Mittlere freie Weglänge . . . . .	89
5.2	Effusive Quellen . . . . .	90
5.2.1	Die dünnwandige Düse . . . . .	90
5.2.2	Düsen mit kanalförmigen Öffnungen . . . . .	93
5.3	Überschallquellen . . . . .	94
5.3.1	Strömungsgeschwindigkeit . . . . .	95
<b>6</b>	<b>Eine neuartige Quelle für <math>^1\text{H}</math> und <math>\text{He}^*</math></b>	<b>101</b>
6.1	Dissoziation von $\text{H}_2$ mittels Gasentladung . . . . .	102
6.1.1	Zündspannung . . . . .	103
6.1.2	Erzeugung von $^1\text{H}$ . . . . .	103
6.2	Metastabiles Helium in einem Plasma . . . . .	104
6.2.1	Erzeugung in einer Gasentladung . . . . .	105
6.2.2	Untergrundfreier Nachweis . . . . .	105
6.3	Gasentladungen an GEM-Folien . . . . .	107
6.4	Speziell angefertigte Mikroelektrodenstrukturen . . . . .	109
6.5	Versuche mit speziellen Mikroelektrodenstrukturen . . . . .	110
6.5.1	Tests der neuen Elektrodenstrukturen . . . . .	110
6.5.2	Entladungen mit Helium als Strahlgas . . . . .	111
6.5.3	Wasserstoffgasentladungen . . . . .	114
6.6	Zusammenfassung und Ausblick . . . . .	117

<b>7</b>	<b>Eine Quelle für kalte und langsame Molekülstrahlen</b>	<b>119</b>
7.1	Anforderungen an die Quelle . . . . .	119
7.2	Aufbau der rotierenden Quelle . . . . .	120
7.3	Minimal mögliche Geschwindigkeit . . . . .	121
7.4	Einfluss der Fliehkraft . . . . .	123
7.4.1	Zerreissfestigkeit des Rotors . . . . .	123
7.4.2	Drucküberhöhung an der Düse . . . . .	126
7.5	Geschwindigkeits- und Winkelverteilung . . . . .	128
7.6	Messungen an der rotierenden Quelle . . . . .	130
7.6.1	Aufnahme der Messwerte . . . . .	132
7.6.2	Weiterverarbeitung der Daten . . . . .	133
7.6.3	Ergebnisse . . . . .	137
7.7	Zusammenfassung und Ausblick . . . . .	140
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>143</b>
<b>III</b>	<b>Anhang</b>	<b>145</b>
<b>A</b>	<b>Anmerkungen zur Theorie des transversalen Spinechos</b>	<b>147</b>
A.1	Versatz und Phasendifferenz einer gekippten Spule . . . . .	147
A.2	Streu- und Aufspaltungsebene parallel . . . . .	149
A.3	Impulsübertrag bei paralleler Streu- und Aufspaltungsebene . . . . .	150
A.4	Streu- und Aufspaltungsebene parallel . . . . .	151
A.5	Entwicklung von $\Phi_{ij}$ und $\vec{D}_{ij}^{(sc)}$ bei normalen Streu- und Aufspaltungsebenen . . . . .	152
<b>B</b>	<b>Herstellung der drahterodierten Spinecho-Spulen</b>	<b>153</b>



## **Teil I**

# **Transversales Spinecho mit atomarem $1 S_{1/2}$ Wasserstoff**



# Kapitel 1

## Theorie des Atomstrahl-Spinechos

Um den Einstieg in die Theorie des Atomstrahl-Spinechos möglichst einfach zu gestalten, hält sich die Gliederung dieses Kapitels an die historische Entwicklung von Strahl-Spinecho-Experimenten: Zunächst wird deren Theorie für Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchen eingeführt, wie sie 1972 von F. Mezei für Neutronen vorgeschlagen [2] und Mitte der Neunziger auch auf  $^3\text{He}$ -Atome umgesetzt und erfolgreich angewandt wurde [4]. Hierbei wird das Verhalten von Teilchen mit magnetischem Moment auf der Grundlage von Larmorpräzessionen klassisch beschrieben. Äquivalent hierzu ist eine quantenmechanische Darstellung, die auf der Zeeman-Aufspaltung der Eigenzustände von Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchen im Magnetfeld beruht.

Im Anschluss daran wird die Spinecho-Methode erweitert, indem dem Hamilton-Operator des Spin  $\frac{1}{2}$ -Systems die Hyperfeinwechselwirkung zwischen Kern- und Elektronen-Spin hinzugefügt wird. Damit lassen sich schließlich die Ergebnisse der Experimente mit Wasserstoffatomen erklären. Diese sind komplizierter als bei Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchen, da aufgrund der Hyperfeinstruktur aus der Zeeman-Aufspaltung die Breit-Rabi-Aufspaltung wird und es sich nicht mehr um ein reines Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchen handelt.

### 1.1 Theorie für ein reines Spin $\frac{1}{2}$ - System

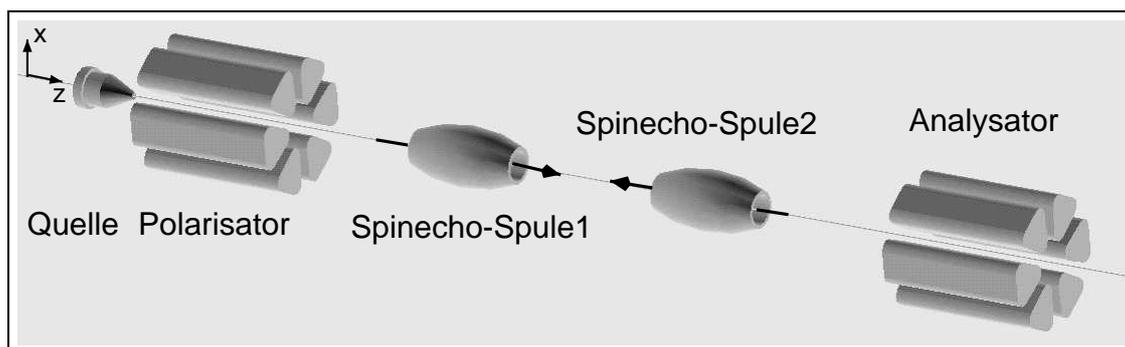


Abbildung 1.1: Schematischer Aufbau eines Spinecho-Experiments mit longitudinalen Spinecho-Feldern. Symbolisch angedeutet sind die Spinecho-Spulen und Polschuhe von Polarisator sowie Analysator. Letztere erzeugen das inhomogene Magnetfeld für die Polarisierung bzw. Analyse des Atomstrahls. Nicht gezeigt sind die Führungsfelder sowie die magnetische Abschirmung, die beide von wesentlicher Bedeutung für die Realisierung von Messungen sind.

In Abb. 1.1 ist stark vereinfacht der schematische Aufbau eines Spinecho-Experiments zu sehen. In Kapitel 3 wird der experimentelle Aufbau noch detailliert beschrieben. Im gezeigten Fall handelt es sich um einen Aufbau mit longitudinalen Spulen, die ein Feld in bzw. entgegengesetzt zur Strahlrichtung  $z$  erzeugen.

gen. Nachdem der Strahl die Quelle in  $z$ -Richtung verlassen hat, wird er im Polarisator<sup>1</sup> in  $x$ -Richtung polarisiert. Anschließend folgt die Spinecho-Anordnung, bestehend aus erster Spinecho-Spule, deren Feld in  $z$ -Richtung orientiert ist, und zweiter Spinecho-Spule, deren Feld entgegen der  $z$ -Richtung zeigt. Nach Verlassen der Spinecho-Anordnung wird im Analysator überprüft, welcher Zustand bezüglich des Spins vorliegt. Wie sich die Strahlteilchen im Feld der Spinecho-Spulen verhalten, lässt sich auf mehrere Arten beschreiben, die zueinander äquivalent sind [11]:

- klassisch durch Larmorpräzession,
- semi-klassisch durch das Fahrplan-Modell und
- vollständig quantenmechanisch.

### 1.1.1 Erklärung des Strahlspinechos anhand von Larmorpräzessionen

Klassische Grundlage eines Spinecho-Experiments mit Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchen ist deren Larmorpräzession in einem Magnetfeld. Dazu müssen die Teilchen senkrecht zur Richtung der Spinecho-Felder polarisiert sein. In Abb. 1.1 ist das durch die Polschuhe eines Polarisator-Sextupols angedeutet. Die Larmorfrequenz, mit der der Spin im Magnetfeld  $B_1$  der ersten Spinecho-Spule präzediert, ist dann gegeben durch

$$\omega_L = g \frac{\mu}{\hbar} B_1 = \gamma B_1 . \quad (1.1)$$

Dabei bezeichnet  $\mu$  das magnetische Moment des Strahlteilchens,  $g$  ist der sogenannte  $g$ -Faktor und  $\gamma$  steht für das gyromagnetische Moment. In Tabelle 1.1 sind entsprechende Werte für einige Nukleonen und Atome aufgeführt.

	$g$	$\mu$ [neV/T]	$\gamma$ [MHz/T]
p	5.58	89	$42.93 \cdot 2\pi$
n	-3.82	-61	$-29.39 \cdot 2\pi$
$^3\text{He}$	-2.1	-67	$-32.433 \cdot 2\pi$
$^1\text{H}$	1	29251	$14160 \cdot 2\pi$

Tabelle 1.1:  $g$ -Faktoren, magnetische und gyromagnetische Momente einiger Nukleonen und Atome.

Der Gesamtwinkel  $\Phi$ , den der Spin eines Teilchens mit der Geschwindigkeit  $v$  aufammelt, hängt von der Zeit  $T$  ab, die sich das Teilchen im Magnetfeld der Spule aufhält. Hat diese eine Länge  $l$ , so wird  $\Phi$  eine geschwindigkeitsabhängige Größe sein:

$$\Phi = \int_0^T \omega_L dt = g \frac{\mu}{\hbar} \int_0^l \frac{B_1(z)}{v} dz = \gamma \frac{\bar{B}_1 l}{v} , \quad (1.2)$$

wobei  $\Phi/2\pi$  gleich der Anzahl vollzogener Larmorpräzessionen ist. Die experimentell entscheidenden Parameter hierbei sind die Geschwindigkeit  $v$  und das Magnetfeldintegral  $\int B_1(z) dz$ . Letzteres kann ersetzt werden durch ein mittleres Magnetfeld der Stärke  $\bar{B}_1$ , multipliziert mit der Länge  $l$  des Feldes.

Die Polarisation des Teilchens nach Durchlaufen des ersten Spinecho-Feldes ergibt sich dann als Projektion des aufgesammelten Gesamtdrehwinkels des Spins auf die  $x$ -Achse:

$$P_x = \cos(\Phi(B_1, v)) . \quad (1.3)$$

Die Polarisation  $P_x$  wird also immer dann maximal, wenn der Spin eines Teilchens mit Geschwindigkeit  $v$  im Magnetfeld der Stärke  $B_1$  eine ganze Anzahl von Umdrehungen vollführen kann.

<sup>1</sup>Eigentlich besteht der Polarisator aus zwei Teilen: einem inhomogenen Magnetfeld, das nach Stern-Gerlach-Manier die Zustandsselektion vornimmt, und einem homogenen Führungsfeld, das für die Erzeugung der globalen Polarisation sorgt. Genaueres hierüber ist in Kapitel 3 zu finden.

## 1.1.1.1 Spinrotation

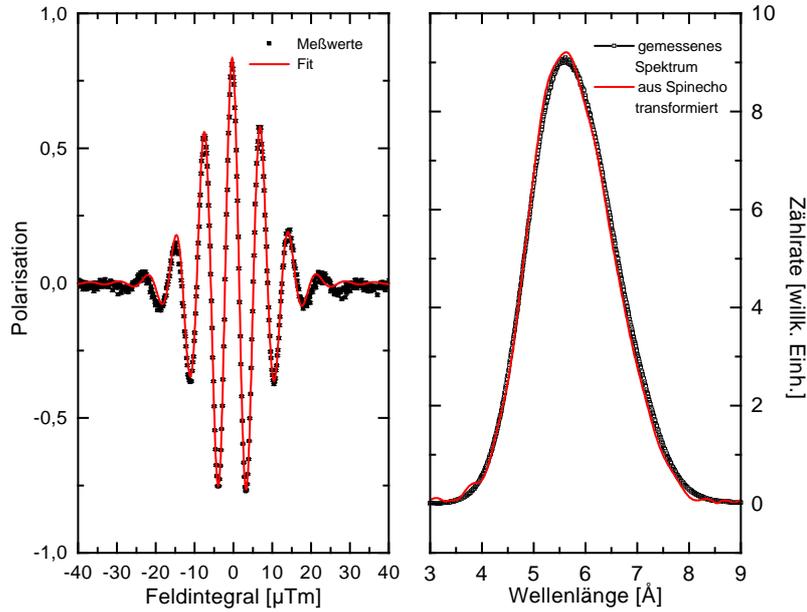


Abbildung 1.2: Spinrotation: Links ist das Spinrotations-Signal eines 4.2 K kalten, kontinuierlichen  $^3\text{He}$ -Strahls gemeinsam mit einem Fit durch die Messpunkte gezeigt. Die Fouriertransformation dieses Fits wird rechts mit einer aus Flugzeitmessungen direkt bestimmten Wellenlängenverteilung desselben Strahls verglichen. Wie theoretisch vorausgesagt, stimmen beide Kurven gut überein.

Wird direkt nach Durchlaufen eines einzigen Spinecho-Feldes  $\vec{B}_1$  die Polarisation bestimmt, so redet man von *Spinrotation*. Dabei wird nach Gl. (1.3) die Polarisation in Abhängigkeit vom Magnetfeld der Spinecho-Spule bestimmt. Allerdings ist zu berücksichtigen, dass messtechnisch gesehen die Polarisation eines einzelnen Teilchens bei Strahlexperimenten nicht bestimmt werden kann. Statt dessen wird über den gesamten Strahl gemittelt. Um also die Messgröße im Experiment korrekt zu beschreiben, muss die Polarisation aus Gl. (1.3) noch mit der Geschwindigkeitsverteilung  $\frac{dn}{dv}$  des Strahls gewichtet werden:

$$P_x = \int \cos(\Phi(B_1, v)) \frac{dn}{dv} dv = \int \cos\left(\gamma \frac{\bar{B}_1 l}{v}\right) \frac{dn}{dv} dv. \quad (1.4)$$

Wird die de-Broglie-Beziehung  $\lambda = \frac{h}{mv}$  ausgenutzt, so lassen sich  $\Phi$  und  $P_x$  in Abhängigkeit von der de-Broglie-Wellenlänge  $\lambda$  schreiben; dabei bezeichnet nun  $\frac{dn}{d\lambda}$  die Wellenlängenverteilung des Atomstrahls:

$$\begin{aligned} \Phi(\lambda) &= \gamma \frac{\bar{B}_1 l m}{h} \lambda \\ P_x &= \int \cos\left(\gamma \frac{m \bar{B}_1 l}{h} \lambda\right) \frac{dn}{d\lambda} d\lambda = \int \cos(\Phi(\lambda)) \frac{dn}{d\lambda} d\lambda. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Offensichtlich stellt das gemessene Polarisationssignal die Cosinus-Fouriertransformierte der Wellenlängenverteilung des Strahls dar. In Abb. 1.2, die eine Spinrotations-Kurve eines 4.2 K kalten  $^3\text{He}$ -Strahls gemeinsam mit der entsprechenden Wellenlängenverteilung zeigt, ist dies gut zu erkennen. Die Spinrotations-Kurve im linken Teil der Abbildung ist folgendermaßen zu verstehen:

- Der Abstand zwischen den einzelnen Maxima der Kurve entspricht genau einer Larmorpräzession der magnetischen Momente der Strahlteilchen.

- Die Einhüllende ergibt sich aus der Fouriertransformierten der Wellenlängenverteilung des Strahls. Weil die Anzahl der vollführten Larmorpräzessionen von der Zeit abhängt, die ein Strahlteilchen im Magnetfeld verbringt, unterscheidet sich die Anzahl der Präzessionen für verschiedene Geschwindigkeitsklassen  $v \pm dv$ . Die Spins unterschiedlicher Geschwindigkeitsklassen zeigen nach Durchlaufen des Feldintegrals in unterschiedliche Richtungen. Bei zunehmendem Betrag des Magnetfeldintegrals dephasieren sie schließlich so stark, dass die Polarisation des Strahls auf Null abgefallen ist.
- die Polarisation des Strahls für ein beliebiges Magnetfeldintegral ist definiert als

$$P = \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}} = \frac{N_{\uparrow} - \bar{N}}{\bar{N}}.$$

$N_{\uparrow}$  bezeichnet die Anzahl von Teilchen, deren Spin in  $x$ -Richtung polarisiert ist (Spin up),  $N_{\downarrow}$  steht für die Zahl entgegengesetzt polarisierter Teilchen (Spin down). Dabei sind die Werte zu nehmen, die sich aus der oberen bzw. unteren Einhüllenden der Kurve ergeben. Außerdem ist zu beachten, dass die letzte Identität nur für Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchen gilt, wie später klar werden wird.  $\bar{N}$  repräsentiert die unpolarisierten Strahlteilchen. Ihre Anzahl ergibt sich aus der Zählrate bei hohem Betrag des Magnetfeldintegrals.

### 1.1.1.2 Spinecho

Da der zunehmende Polarisationsverlust bei steigendem Magnetfeldintegral direkt von der Geschwindigkeitsverteilung der Atome abhängt, kann im Idealfall die ursprünglich vollständige Polarisation des Strahls wiedergewonnen werden.

Dies lässt sich erreichen, indem der Strahl durch ein zweites Magnetfeld  $\vec{B}_2$  geschickt wird, das genau antiparallel zum ersten Spinecho-Feld ist:  $\vec{B}_2 = -\vec{B}_1$ . In diesem Falle kompensieren sich die Magnetfeldintegrale der beiden Spulen für jedes Strahlteilchen unabhängig von seiner Geschwindigkeit. Jedes atomare magnetische Moment vollführt dann in der zweiten Spinecho-Spule die gleiche Anzahl von Larmorpräzessionen wie in der ersten, jedoch mit entgegengesetztem Drehsinn. Damit ist der Strahl nach Durchlaufen beider Magnetfeldintegrale wieder vollständig polarisiert und es kommt zum sogenannten *Spinecho*.

Die Aufnahme von Spinecho-Kurven geschieht ähnlich wie bei der Spinrotation: In Abhängigkeit der Differenz der Magnetfeldintegrale (*der Verstimmung*) zwischen erster und zweiter Spule wird die Polarisation  $P_x$  des Strahls gemessen, die nun eine Funktion der Differenz der Drehwinkel  $\Phi^{(2)}$  in der zweiten und  $\Phi^{(1)}$  in der ersten Spule ist. Für ein Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchen sieht eine Spinecho-Kurve prinzipiell ähnlich aus, wie die in Abb. 1.2 gezeigte Spinrotations-Kurve. Das Maximum der Einhüllenden wird nun Spinecho-Punkt genannt. Für den Spinecho-Punkt gilt  $\frac{\partial P_x}{\partial v} = 0$ . Falls zwischen den beiden Spulen keine inelastischen Prozesse stattfinden, die die Geschwindigkeit der Strahlteilchen ändern, liegt der Spinecho-Punkt bei einer Verstimmung von Null.

### 1.1.1.3 Energieauflösung

Finden zwischen den beiden Spinecho-Spulen inelastische Streuprozesse statt, die die Geschwindigkeit der streuenden Atome um  $\delta v$  ändern, dann ist der resultierende Drehwinkel der Spins, die Restphase  $\delta\Phi$ , bei sich kompensierenden Feldintegralen verschieden von Null:

$$\delta\Phi = \Phi^{(1)} + \Phi^{(2)} \simeq \delta v \left[ \frac{d(\delta\Phi)}{dv_2} \right]_{v_2=v_1} = \Phi^{(1)} \frac{\delta v}{v_1}, \quad (1.6)$$

wobei angenommen wurde, dass die mittlere kinetische Energie des Atomstrahls vor der Streuung durch  $E_1 = \frac{1}{2} m v_1^2$  gegeben ist. Weiterhin wurde angenommen, dass die Magnetfeldintegrale beider Spulen gleich sind und dass der Energieübertrag  $\delta E$  so klein ist, dass  $v_2 = v_1 + \delta v$  mit  $\delta v \ll v_1$  gilt.

Gleichung (1.6) kann nun dazu benutzt werden, die relative Energieauflösung  $\delta E/E$  eines Spinecho-Spektrometers zu bestimmen oder aber, um mittels einer gewünschten Energieauflösung ein Spektrometer zu konzipieren:

$$\frac{\delta\Phi}{\Phi^{(1)}} \simeq \frac{\delta v}{v_1} \simeq \frac{1}{2} \frac{\delta E}{E_1}. \quad (1.7)$$

Demnach ergibt sich bei einer angenommenen, noch auflösbaren Restphase  $\delta\Phi$  von etwa einem Zwanzigstel einer Larmorpräzession und einer mittleren Anzahl von etwa 5000 Larmorpräzessionen eine relative Energieauflösung von  $2 \cdot 10^{-5}$ . Ein 4.2 K kalter Strahl von  $^3\text{He}$ -Atomen mit einer mittleren kinetischen Energie  $E \approx 0.8$  meV sollte demnach theoretisch eine nominale Energieauflösung von 16 neV ermöglichen.

Ist der Energieübertrag der angenommenen inelastischen Prozesse durch  $\delta E = \hbar\omega$  gegeben, so kann nach Gl. (1.7) die Restphase  $\delta\Phi$  in Abhängigkeit von  $\omega$  angegeben werden:

$$\delta\Phi = \tau_{SE} \cdot \omega \quad \text{mit} \quad \delta E = \hbar\omega \quad \text{und} \quad \tau_{SE} = \frac{\hbar\Phi^{(1)}}{2E_1}. \quad (1.8)$$

Der eingeführte Parameter  $\tau_{SE}$  hat die Dimension einer Zeit und wird aus Gründen, die bei Betrachtung im quantenmechanischen Bild klar werden, *Spinecho-Zeit* genannt.

Aufgrund der um  $\delta v$  veränderten Geschwindigkeit der Strahlteilchen liegt der Spinecho-Punkt nun nicht mehr bei einer Verstimmung der beiden Spinecho-Felder von Null. Er kann jedoch bestimmt werden, indem man verlangt, dass die Restphase  $\delta\Phi$  unabhängig von allen Geschwindigkeiten sein soll:  $d(\delta\Phi)/dv_1 = 0$ . Dann erhält man als Bestimmungsgleichung für die Magnetfeldintegrale:

$$\frac{\int B_1(z)dz}{\int B_2(z)dz} \simeq \left(1 + \frac{\hbar\omega}{E}\right)^{-3/2}. \quad (1.9)$$

Oder umgekehrt interpretiert, aus dem durch ein Maximum der Polarisation ersichtlichen experimentell bestimmten Spinecho-Punkt lässt sich der mittlere Energieübertrag  $\hbar\omega$  bestimmen.

## 1.1.2 Qualitative quantenmechanische Beschreibung und Fahrplanmodell

In diesem Abschnitt wird das Verhalten eines Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchens beim Durchflug durch die in Abb. 1.1 gezeigte Spinecho-Anordnung im semi-klassischen Bild beschrieben. Hierbei erfolgt die Beschreibung der Translationsbewegung klassisch, für die Beschreibung des Spins im Magnetfeld wird jedoch die quantenmechanische Drehimpulsalgebra verwendet. Daraus ergibt sich ein Modell, das auf einfache Weise ein qualitatives Verständnis für das Verhalten von Teilchen mit magnetischem Moment in einer Spinecho-Anordnung erlaubt: das Fahrplanmodell. Dieses soll hier zunächst für Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchen eingeführt werden, um dann in Abschnitt 1.2.2 für atomaren Wasserstoff auf Spin 1-Teilchen ausgeweitet zu werden. Im Folgenden wird auch deutlich werden, dass das semi-klassische Fahrplanmodell eine zum klassischen Modell der Larmorpräzession aus Abschnitt 1.1.1 äquivalente Beschreibung ist.

### 1.1.2.1 Magnetische Doppelbrechung

Um das Verhalten eines Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchens in einem Magnetfeld  $\vec{B}$  zu erklären, muss die Zeeman-Aufspaltung eines Zustandes berücksichtigt werden. Bei der quantenmechanischen Behandlung des Drehimpulses  $\vec{S}$  eines Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchens werden zur Bildung simultaner Eigenwerte die kommutierenden Operatoren  $S^2$  und  $S_z$  benutzt. Die zugehörigen Eigenvektoren  $|\pm\rangle$  bilden einen zweidimensionalen Hilbertraum und erfüllen die Eigenwertgleichungen

$$S^2|\pm\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\pm\rangle \quad (1.10)$$

$$S_z|\pm\rangle = \pm\frac{1}{2}\hbar|\pm\rangle. \quad (1.11)$$

Der für die Zeeman-Aufspaltung verantwortliche Hamilton-Operator  $H$  ergibt sich im Bezugssystem des betrachteten Teilchens bei einem angenommenen Magnetfeld  $B_z$  in  $z$ -Richtung wie folgt:

$$H = -\mu_z B_z = \gamma B_z S_z, \quad (1.12)$$

wobei  $\mu_z$  die  $z$ -Komponente des magnetischen Momentes bezeichnet. Die oben eingeführten Zustände  $|\pm\rangle$  erweisen sich als Eigenvektoren zu  $H$ :

$$H|\pm\rangle = E_{\pm}|\pm\rangle \text{ mit } E_{\pm} = \pm \frac{1}{2}\hbar\gamma B. \quad (1.13)$$

Dabei wird die potenzielle Energie des Zustands  $|\pm\rangle$  im Magnetfeld mit  $E_{\pm}$  bezeichnet. Bei einem Spinecho-Experiment werden die spin-tragenden Teilchen in  $x$ -Richtung polarisiert, d.h. sie befinden sich alle im Zustand  $|+_x\rangle$ . Es ist jedoch günstig, diesen Eigenvektor in der Basis der Eigenvektoren der Quantisierungsachse  $z$  auszudrücken. Diese wird für die Zeeman-Aufspaltung durch die Richtung des Magnetfelds vorgegeben. Formal kann dies durch eine aktive Drehung des Zustandes  $|+\rangle$  um  $\pi/2$  um die  $y$ -Achse beschrieben werden. Dabei ist  $D(\alpha, \beta, \gamma)$  der zu einem Spin  $\frac{1}{2}$ -System gehörige Rotationsoperator (siehe beispielsweise [12]):

$$|+_x\rangle = D(0, \pi/2, 0)|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle). \quad (1.14)$$

Beim Durchflug durch ein Magnetfeld ändert sich die Energie der Eigenzustände und für den Zeitentwicklungsoperator  $U$  gilt

$$U = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int H(t) dt\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int H(z) \frac{dz}{v}\right); \quad (1.15)$$

mit  $H(z) = E_{\pm}(z) = \pm \frac{1}{2}\gamma\hbar B(z)$  ergibt sich

$$U_{\pm} = \exp\left(\mp i \frac{\gamma}{2} \int B(z) \frac{dz}{v}\right) = \exp(\mp i\Phi/2), \quad (1.16)$$

wobei nun in  $B(z)$  die Felder beider Spinecho-Spulen enthalten sind und  $\mp\Phi/2$  die vom Zustand  $|\pm\rangle$  im Spinecho-System aufgesammelte Phase ist. Der Vergleich mit (1.2) zeigt, dass die quantenmechanische Phase  $\Phi$  mit dem klassischen Präzessionswinkel übereinstimmt.

In diesem Zusammenhang ist bemerkenswert, dass im klassischen Modell der Larmorpräzession aus Abschnitt 1.1.1 die Energie der Strahlteilchen beim Betreten oder Verlassen von Magnetfeldbereichen *nicht* geändert wird. Das liegt daran, dass im klassischen Bild magnetisches Moment  $\vec{\mu}$  und Magnetfeld  $\vec{B}$  senkrecht aufeinander stehen und deshalb  $\vec{\mu} \cdot \vec{B} = 0$  gilt. Im Fahrplanmodell, dem sich dieser Abschnitt widmet, gilt das Gleiche für die gesamte kinetische Energie des Zustands  $|+_x\rangle$ . Sie bleibt unverändert, weshalb sich auch die de-Broglie-Wellenlänge der Wellenfunktion  $\Psi_{+_x}$  nicht ändert.

Die Wahrscheinlichkeit, dass sich ein Teilchen im Analysator wieder im Zustand  $|+_x\rangle$  befindet, falls es vorher im Zustand  $|+_x\rangle$  war, ergibt sich zu

$$\begin{aligned} P &= |\langle+_x|U|+_x\rangle|^2 \\ &= \frac{1}{2} |\langle+|U_+|+\rangle + \langle-|U_-|-\rangle|^2 \\ &= \frac{1}{4} (U_+U_-^*) (U_+^*U_-) \\ &= \frac{1}{2} (1 + \cos \Phi). \end{aligned} \quad (1.17)$$

Da in dieser Gleichung Terme der Form  $U_+U_-^*$  und ihre komplex Konjugierten auftreten, ist die Wahrscheinlichkeit  $P$  letztlich nicht von absoluten Energien abhängig. Vielmehr hängt sie von Energiedifferenzen ab und ist daher unabhängig von der Wahl des Energienullpunkts.

### 1.1.2.2 Fahrplanmodell

Der Übergang vom Ruhesystem des Teilchens ins Laborsystem verlangt die Berücksichtigung des kinetischen Operators  $p^2/2m$  im Hamiltonoperator. Da der Eintritt in ein Magnetfeld konservativ ist, verändert

sich dabei die Geschwindigkeit der jeweiligen Eigenzustände. Das bedeutet, dass das Magnetfeld auf einen Zustand, der senkrecht zum Magnetfeld polarisiert ist, gewissermaßen doppelbrechend wirkt. Der Zustand  $|-\rangle$  wird (nimmt man  $\gamma > 0$  an) in einem Magnetfeld in  $z$ -Richtung schneller, da seine magnetische Energie negativ ist, während der Zustand  $|+\rangle$  beim Eintritt in das Magnetfeld abgebremst wird.

Im wellenmechanischen Bild bedeutet dies, dass die Schwerpunkte  $z_{\pm}$  der Spinor-Wellenpakete  $\Psi_{\pm}$  auseinanderlaufen. Bezüglich des Schwerpunktes  $z_0$  eines gedachten Wellenpakets  $\Psi_0$  ohne magnetisches Moment ergibt sich für  $\Psi_{\pm}$  ein Versatz  $\delta z = z_{\pm} - z_0$  in Strahlrichtung.

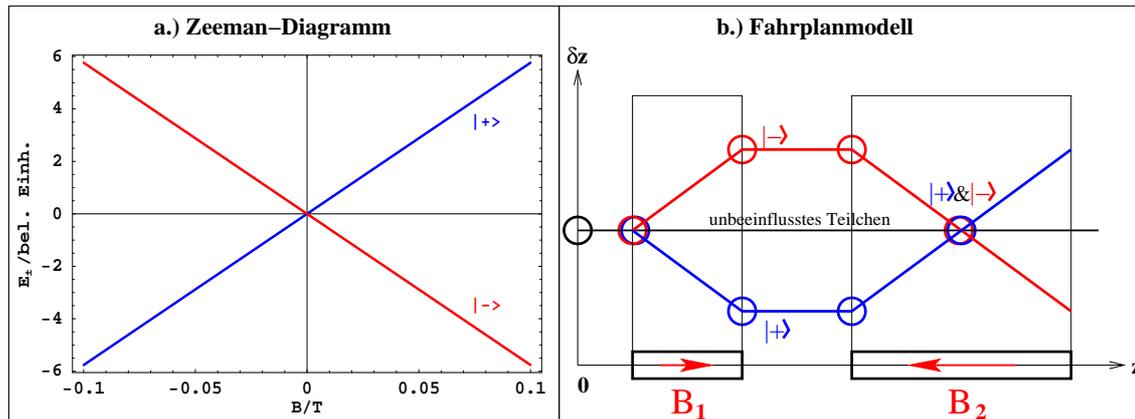


Abbildung 1.3: a.) Zeeman-Diagramm für ein Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchen mit beliebigem magnetischen Moment.

b.) Fahrplanmodell für Spinecho mit einem Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchen: Da der Eintritt in ein Magnetfeld nicht dissipativ ist, wirkt der Magnetfeldbereich quasi als doppelbrechendes Medium. Nach oben wird der Versatz der Teilwellenpakete entlang der Strahlachse gegenüber einem unbeeinflussten Teilchen als Funktion der Strahlachse aufgetragen. Im ersten Feld wird  $|+\rangle$  verlangsamt,  $|-\rangle$  wird beschleunigt. Nach dem Verlassen des Magnetfeldbereichs bewegen sich beide Zustände mit dem konstanten Versatz  $\delta z = \delta z_{|-\rangle} - \delta z_{|+\rangle}$  hintereinander her. Im zweiten Feld, das entgegengesetzt gerichtet ist, verringert sich der Versatz, bis es am Spinecho-Punkt zu einem gemeinsamen Schwerpunkt der Teilwellenpakete kommt.

In Abbildung 1.3, die das sogenannte Fahrplanmodell zeigt, wird diese Situation veranschaulicht. Dabei ist zu beachten, dass der Versatz der Wellenpakete  $\Psi_{\pm}$  in Strahlrichtung  $z$  erfolgt. Dieser Versatz wird als Funktion des Ortes auf der Strahlachse dargestellt<sup>2</sup>. Beginnend bei  $z = 0$  verlässt das im Zustand  $|+_{x}\rangle$  präparierte Strahlteilchen den Polarisator, dargestellt durch die Überlagerung von  $|+\rangle$  und  $|-\rangle$ . In der gezeigten Darstellung ist angenommen, dass  $|+\rangle$  im Magnetfeld  $B_1$  eine geringere Gruppengeschwindigkeit aufweist als in den feldfreien Regionen. Daher bleibt der Zustand gegenüber dem unbeeinflussten Wellenpaket  $\Psi_0$  zurück. Beim Verlassen der ersten Magnetfeldregion erfolgt aufgrund des nicht dissipativen Charakters eine Beschleunigung auf den ursprünglichen Wert der Gruppengeschwindigkeit. Der Versatz zu  $\Psi_0$  bleibt nun konstant. Bei Eintritt in das zweite Spinecho-Feld, das betragsmäßig gleich dem ersten, aber entgegengesetzt gerichtet ist, erfährt  $|+\rangle$  nun eine positive Beschleunigung, der Versatz gegenüber  $\Psi_0$  wird reduziert. Für den Zustand  $|-\rangle$  gilt entsprechend die umgekehrte Überlegung. Dadurch kommt es am Spinecho-Punkt in der Magnetfeldregion  $B_2$  im Bereich um den Trajektorienschnittpunkt wieder zu einer Überlagerung von  $|+\rangle$  und  $|-\rangle$ . Das bedeutet, dass die ursprünglich vorliegende Polarisation  $|+_{x}\rangle$  wieder vorliegt. Aus dem Fahrplanmodell wird klar ersichtlich, dass im elastischen Fall der Spinecho-Punkt an genau der Stelle zu finden ist, an der die Magnetfeldintegrale beider Spulen identisch sind:  $B_1 l = B_2 l$ . Wird das Magnetfeldintegral der zweiten Spule weiter erhöht, so laufen die Teilwellenpakete wieder auseinander, bis sie schließlich nicht mehr überlappen: Die Polarisation, die am Spinecho-Punkt vorlag, ist wieder verschwunden.

<sup>2</sup>Beim Fahrplanmodell, wie es in diesem Kapitel vorgestellt wird, handelt es sich nicht um eine zweidimensionale Darstellung der Teilchentrajektorien. Die Strahlteilchen werden also beim Eintritt in die Magnetfeldbereiche und beim Verlassen derselben *nicht seitlich* abgelenkt. Vielmehr entspricht dieses Modell den Zuglaufplänen, die die Bewegung von *mehreren* Zügen auf *einem* Gleis im Orts-Zeit-Raum darstellen – daher auch der Name *Fahrplanmodell*. Im Unterschied zum Zuglaufplan sind beim Fahrplanmodell Überschneidungen der Trajektorien aber geradezu gewollt.

In dieser Betrachtungsweise brauchen die Zustände  $|+\rangle$  und  $|-\rangle$  also unterschiedlich lange, um die erste Magnetfeldregion zu durchqueren. Unter der Annahme, dass für die potenzielle Energie im Magnetfeld  $E_{\pm} \ll E_0$  gilt, lässt sich mit Hilfe der Energieerhaltung die jeweilige Durchflugsdauer der einzelnen Zustände bestimmen. In erster Näherung gilt dann

$$v_{\pm} \approx v_0 \pm \frac{1}{2} \frac{\hbar \gamma B_1}{m v_0} \quad \Rightarrow \quad t_{\pm} = \frac{l}{v_{\pm}} \approx \frac{l}{v_0} \mp \frac{\hbar \gamma B_1 l}{2 m v_0^3} = t_0 \mp \frac{\tau_{SE}}{2}. \quad (1.18)$$

Die letzte Umformung ergibt sich unter Ausnutzung von Gl. (1.8) und (1.2). Damit kommt der in Abschnitt 1.1.1 eingeführten Größe der Spinecho-Zeit eine anschauliche Bedeutung zu: Findet zwischen den beiden Spinecho-Spulen eine Wechselwirkung des Strahls mit einer Probe statt, so ist die Spinecho-Zeit gerade die Zeit, die zwischen den beiden Wechselwirkungsvorgängen von Zustand  $|+\rangle$  und  $|-\rangle$  mit der Probe vergeht. In diesem Fall bestimmt also die Spinecho-Zeit die Zeitskala, auf der zeitliche Korrelationen einer Probe untersucht werden können<sup>3</sup>.

### 1.1.2.3 Alternative Interpretation der Spinecho-Anordnung

Im quantenmechanischen Bild bei der Betrachtung des Fahrplanmodells zeigt sich, dass das Spinecho-Prinzip geradezu von der Existenz von Feldinhomogenitäten lebt — wenn sie an den richtigen Stellen platziert sind. Folgende klassische Argumentation macht dies deutlich<sup>4</sup>:

$$\vec{F}_{\pm} = -\vec{\nabla} E_{\pm} = -\frac{\partial E_{\pm}}{\partial B} \vec{\nabla} B = -\mu_{\pm} \vec{\nabla} B. \quad (1.19)$$

Nach Gl. (1.19) wird die Kraft, die mit der Änderung des Bewegungszustandes beispielsweise beim Eintreten des Zustands  $|+\rangle$  bzw.  $|-\rangle$  in einen Magnetfeldbereich einhergeht, durch einen Feldgradienten hervorgerufen. Die Existenz dieses Feldgradienten setzt Inhomogenitäten des Magnetfelds voraus.  $E_{\pm}$  ist die potenzielle Energie von  $|\pm\rangle$  aus Gl. (1.13). Das effektive magnetische Moment  $\mu_{\pm} = \partial E_{\pm} / \partial B$  ist direkt aus dem Zeeman-Diagramm in Abb. 1.3 abzulesen: Es handelt sich um die Steigung der Kurven für den Verlauf der potenziellen Energien im Magnetfeld.

Die komplette Spinecho-Anordnung lässt sich also als eine Aneinanderreihung verschiedener Stern-Gerlach-Experimente beschreiben:

- Die inhomogenen Magnetfelder von Polarisator und Analysator stellen eine Umsetzung der bekannten transversalen Stern-Gerlach-Anordnung dar, bei der der Feldgradient senkrecht zur Strahlachse orientiert ist.
- Die zylindersymmetrischen Spinecho-Spulen erzeugen auf der Strahlachse Feldgradienten, die parallel bzw. antiparallel zum Strahl gerichtet sind. Dies wird gern als longitudinale Stern-Gerlach-Anordnung bezeichnet. Eine Spinecho-Spule stellt zwei antiparallel orientierte longitudinale Stern-Gerlach-Anordnungen dar.

Die Spinecho-Anordnung besteht also aus einem transversalen Stern-Gerlach-Experiment, gefolgt von vier jeweils antiparallel orientierten longitudinalen Stern-Gerlach-Experimenten. Den Abschluss bildet ein weiterer transversaler Stern-Gerlach-Magnet zur Analyse. In Abb. 1.1 sind genau die Elemente der Spinecho-Anordnung gezeigt, die für die Erzeugung der benötigten Feldgradienten erforderlich sind. In Kapitel 2 wird noch genauer auf die Auswirkungen der Feldgradienten eingegangen und eine Theorie vorgestellt, die deutlich macht, dass das Spinecho-Prinzip nicht nur die direkte Messung *zeitlicher* Korrelationen ermöglicht, sondern auch Aussagen über *räumliche* Korrelationen ohne die Notwendigkeit eines ortsauflösenden Detektors erlaubt.

<sup>3</sup>Beim  $^3\text{He}$ -Spinecho-Spektrometer ist die Spinecho-Zeit abhängig vom Spulenstrom  $I$  für einen  $^3\text{He}$ -Strahl mit einer Wellenlänge von  $5.6 \text{ \AA}$  gegeben durch  $\tau_{SE} = 9.544 \cdot 10^{-10} \text{ s} \cdot A \cdot I$  [6].

<sup>4</sup>Das Ehrenfest'sche Theorem verleiht dieser Aussage auch im quantenmechanischen Sinn ihre Gültigkeit, so dass Gl. (1.19) auch im quantenmechanischen Regime anwendbar ist.

## 1.2 Spinecho mit Wasserstoff

Die im vorigen Abschnitt beschriebene Spinecho-Theorie für ein reines Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchen wird in diesem Abschnitt auf Experimente mit einem Atomstrahl aus Wasserstoffatomen ( $^1\text{H}$ ) im Grundzustand ( $1S_{1/2}$ ) erweitert. Dabei zeigt sich, dass zusätzliche Effekte auftreten, die ihren Ursprung in der magnetischen Struktur des Wasserstoffs haben. Da die klassische Beschreibung mittels Larmorpräzession keine anschauliche Beschreibung dieser zusätzlichen Effekte liefern kann, beschränkt sich dieser Abschnitt auf die semi-klassische Beschreibung des Fahrplanmodells (Raytracing) und die vollständig quantenmechanische Beschreibung.

### 1.2.1 Wasserstoffatome $1S_{1/2}$ im Magnetfeld

Das Wasserstoffatom im Grundzustand stellt ein gebundenes System aus einem Elektron und einem Proton dar, die beide Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchen sind; ihre Wechselwirkungen mit einem äußeren Magnetfeld  $\vec{B}$  skalieren mit dem Bohrschen Magneton  $\mu_B \simeq 9 \cdot 10^{-24}$  J/T respektive dem Kernmagneton  $\mu_K \simeq 5 \cdot 10^{-27}$  J/T. Da das Kernmagneton deutlich kleiner ist als das Bohrmagneton, kann die Wechselwirkung des Protons mit  $\vec{B}$  vernachlässigt werden. Jedoch ist die Wechselwirkung der beiden Spins untereinander zu berücksichtigen. Zeigt das äußere Magnetfeld in  $z$ -Richtung (i.e.  $\vec{B} = B_z \vec{e}_z$ ), so ergibt sich in diesem Fall der Hamiltonoperator, der die Hyperfeinaufspaltung des Wasserstoffatoms beschreibt, zu:

$$H = a\vec{I}\vec{S} + g_S\mu_B B_z S_z, \quad (1.20)$$

dabei ist  $a$  die Hyperfeinstrukturkonstante ( $\frac{2\pi}{\hbar} 1420$  MHz),  $\vec{I}$  der Protonspin,  $\vec{S}$  der Elektronspin. Bei  $g_S$  handelt es sich um den g-Faktor des Elektrons ( $g_S = 2.0023$ ).

Die Energieeigenwerte dieses Systems werden durch die Breit-Rabi-Formel beschrieben und lauten in der Basis  $|f, m_f\rangle$  des Gesamtdrehimpulses  $\vec{F} = \vec{S} + \vec{I}$ :

$$\begin{aligned} E_1 &= \bar{a} + \bar{b} \\ E_2 &= -\bar{a} + \sqrt{4\bar{a}^2 + \bar{b}^2} \\ E_3 &= \bar{a} - \bar{b} \\ E_4 &= -\bar{a} - \sqrt{4\bar{a}^2 + \bar{b}^2} \end{aligned} \quad (1.21)$$

mit  $\bar{a} = a\hbar^2/4$  und  $\bar{b} = \frac{g_S}{2}\mu_B B$ . Der Verlauf der Aufspaltung der Energieeigenwerte in Abhängigkeit von  $B_z$  ist in Abbildung 1.4.a veranschaulicht. Die zugehörigen Eigenvektoren sind

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |1, 1\rangle \\ |2\rangle &= \cos\theta|1, 0\rangle + \sin\theta|0, 0\rangle \\ |3\rangle &= |1, -1\rangle \\ |4\rangle &= -\sin\theta|1, 0\rangle + \cos\theta|0, 0\rangle, \end{aligned} \quad (1.22)$$

wobei  $\theta = \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{\bar{b}}{2\bar{a}}\right)$  der Mischungswinkel für die Zustände  $|2\rangle$  und  $|4\rangle$  ist. Dabei bilden die Zustände  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$  und  $|3\rangle$  ein Spin 1-Triplett, der Zustand  $|4\rangle$  ein Spin 0-Singulett.

### 1.2.2 Fahrplanmodell

Eine anschauliche Erklärung, wie sich ein Wasserstoffatom in einem Spinecho-System verhält, liefert das in Abschnitt 1.1.2 eingeführte Fahrplanmodell. Auch hier lässt sich wieder allein über die Energieerhaltung argumentieren: Außerhalb des Magnetfeldes hat ein Wasserstoffatom, das sich in einem der Eigenzustände  $|i\rangle$  befindet, lediglich die kinetische Energie  $E_{kin}^{(out)}$ . Innerhalb eines Magnetfeldes muss nun zusätzlich zur kinetischen Energie  $E_{kin}^{(in)}$  die potenzielle Energie  $E_i$  aufgebracht werden. Dies führt zu folgender

Erhaltungsgleichung, wobei der Energie-Nullpunkt auf die Energie des Spin 1-Triplets bei  $B = 0$  gelegt wurde:

$$E_{kin}^{(out)} = E_{kin}^{(in)} + E_i. \quad (1.23)$$

Je nach Vorzeichen von  $E_i$  wird also die kinetische Energie innerhalb des Feldes abgesenkt ( $E_i > 0$ ) bzw. erhöht ( $E_i < 0$ ).

Nach Verlassen des Polarisators befinden sich die Wasserstoffatome im Zustand

$$|1_x\rangle = D(0, \pi/2, 0)|1\rangle = \frac{1}{2}|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|2\rangle + \frac{1}{2}|3\rangle, \quad (1.24)$$

einer kohärenten Mischung der Triplet-Eigenzustände. Hier bezeichnet  $D(\alpha, \beta, \gamma)$  die Drehmatrix eines Spin 1-Systems (siehe wieder beispielsweise [12]). Theoretisch wäre es auch möglich, mit den Zuständen  $|2_x\rangle$  oder  $|3_x\rangle$  zu arbeiten, es wird sich in Abschnitt 3.3 aber zeigen, dass sich bei Verwendung von Stern-Gerlach-Magneten der Zustand  $|1_x\rangle$  besonders zur Präparation der Polarisation eignet.  $|4_x\rangle$  eignet sich nicht zu Durchführung von Spinecho-Experimenten, da dieser Zustand bei einer Drehung um  $\pi/2$  analog zu obiger Gleichung nicht auf eine kohärente Mischung von Eigenzuständen, sondern auf sich selbst abgebildet wird. Da die Entstehung von Spinrotations- oder Spinecho-Gruppen aber gerade von dieser kohärenten Mischung lebt, können bei Verwendung von  $|4_x\rangle$  solche Gruppen nicht beobachtet werden.

Aufgrund der Aussage von Gleichung (1.23) werden die Zustände  $|1\rangle$  und  $|2\rangle$  beim Eintritt in die erste Spinecho-Spule (Magnetfeld in Strahlrichtung  $z$ ) langsamer, da für  $B > 0$   $E_i > 0$  gilt; ihr Versatz  $\delta z$  bezüglich eines unbeeinflussten Teilchens ist negativ. Zustand  $|3\rangle$  hingegen wird beschleunigt und weist einen positiven Versatz auf (vgl. Abbildung 1.4.b).

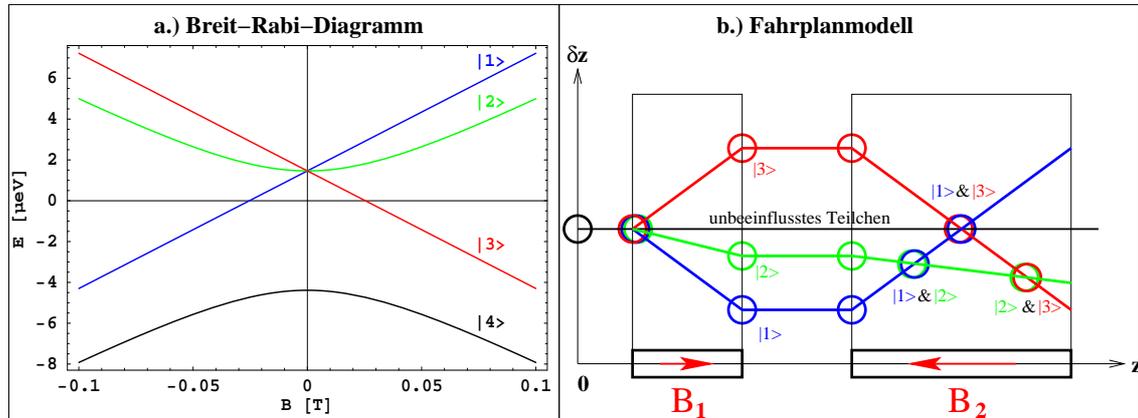


Abbildung 1.4: a.) Breit-Rabi-Diagramm des Wasserstoffatoms.

b.) Fahrplanmodell für Spinecho-Experimente mit Wasserstoff. Aufgetragen ist der Versatz  $\delta z$  der Spinor-Wellenpakete in Abhängigkeit der Position eines magnetisch unbeeinflussten Teilchens entlang der Strahlachse  $z$ . Das Verhalten der einzelnen Teilwellenpakete innerhalb der Spinecho-Spulen ergibt sich unter Beachtung der Aufspaltungsenergie  $E_i$  der Eigenzustände  $|i\rangle$ , die aus dem Breit-Rabi-Diagramm abgelesen werden kann. Zu Interferenzsignalen kommt es nur dann, wenn sich die Spinor-Wellenpakete räumlich überlappen. Ab einer gewissen Aufspaltung ist dies nur noch für jeweils zwei der drei magnetischen Eigenzustände möglich, so dass bei vollständiger Trennung der Interferenzbereiche drei Spinecho-Gruppen entstehen.

Nachdem alle drei Teilwellenpakete die erste Spule verlassen haben, besitzen sie wieder ihre ursprüngliche Gruppengeschwindigkeit, bis sie die zweite Spinecho-Spule erreichen. Da das Magnetfeld dieser Spule entgegen der Strahlrichtung orientiert ist, bedeutet dies, dass die Quantisierungsachse dieser Spule gegenüber der der ersten Spule um  $\pi$  rotiert ist. Werden die magnetischen Eigenzustände  $|i\rangle$  nun bezüglich dieser neuen Quantisierungsachse ausgedrückt, erhält man in der zweiten Spule folgende Situation: Die Zustände  $|1\rangle$  und  $|3\rangle$  vertauschen ihre Rollen, d.h.  $|1\rangle$  wird nun beschleunigt,  $|3\rangle$  abgebremst. Der Zustand  $|2\rangle$  hingegen

ist invariant bezüglich der aktiven Rotation des Hilbertraumes um  $\pi$  und wird auch in der zweiten Spule abgebremst. Diese Situation kann im Breit-Rabi-Diagramm (Abb. 1.4.a) abgelesen werden: Die Rotation um  $\pi$  wird berücksichtigt, indem die Aufspaltungslinien für negative Magnetfelder vervollständigt werden. In der Abbildung sind sie entsprechend eingefärbt.

Zu erkennen ist nun, dass nicht mehr alle drei Schwerpunkte der Teilwellenpakete gleichzeitig zusammenlaufen, sondern dass immer nur zwei Teilwellenpakete zur Interferenz kommen. Es ist also eine Spinecho-Kurve zu erwarten, die drei Spinecho-Gruppen aufgrund der Interferenzen zwischen den Zuständen  $|1\rangle$  und  $|2\rangle$ ,  $|1\rangle$  und  $|3\rangle$  sowie  $|2\rangle$  und  $|3\rangle$  aufweist.

In Abbildung 1.4 wird dies veranschaulicht: Da die Zustände  $|1\rangle$  und  $|3\rangle$  linear bezüglich des angelegten Magnetfeldes aufspalten, ist deren Verhalten direkt vergleichbar mit dem Spinecho eines Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchens, dessen Zeeman-Aufspaltung ebenfalls linear ist. Das nichtlineare Verhalten des Zustandes  $|2\rangle$  ist verantwortlich für die Existenz zweier weiterer Spinecho-Gruppen, deren Spinecho-Punkt deshalb auch nicht bei einer Verstimmung der Magnetfelder von Null zu erwarten ist.

Eine tiefere Begründung dieser eher etwas heuristischen Argumentation wird im nächsten Abschnitt gegeben, in dem das Wasserstoff-Spinecho vollständig quantenmechanisch beschrieben wird.

### 1.2.3 Quantenmechanische Beschreibung

Um den Durchflug der Wasserstoffatome durch die Spinecho-Anordnung zu beschreiben, bietet sich die quantenmechanische Bewegungsgleichung an, bei der die Wellenfunktion am Punkt  $(x_2, t_2)$  mittels des Propagators  $K(x_2, t_2; x_1, t_1)$  mit der Wellenfunktion am Punkt  $(x_1, t_1)$  in Bezug gesetzt wird:

$$\Psi(x_2, t_2) = K(x_2, t_2; x_1, t_1)\Psi(x_1, t_1), \quad (1.25)$$

wobei  $t_2 > t_1$  angenommen wird. Während der Propagator  $K_0(x_2, t_2; x_1, t_1)$  eines freien Teilchens in den meisten Quantenmechanik-Lehrbüchern (z.B. [13]) zu finden ist, wird noch der Propagator  $K_V(x_2, t_2; x_1, t_1)$  eines Teilchens benötigt, das sich innerhalb eines Potentials  $V$  bewegt. Erst damit lässt sich der Durchflug durch die Spinecho-Spulen beschreiben.

#### 1.2.3.1 Propagator für ein räumlich und zeitlich konstantes Potenzial

Propagatoren können im Allgemeinen auf zweierlei Arten interpretiert werden. Zum einen stellen sie die zum Hamiltonoperator gehörige Greensche Funktion dar, zum anderen können sie in der Feynmanschen Interpretation der Quantenmechanik als Pfadintegrale aufgefasst werden [14]. Diese Darstellung wird im Folgenden benutzt.

Ausgehend von der in der klassischen Mechanik eingeführten Wirkung  $S[b, a]$  für die Entwicklung eines klassischen Systems von  $(x_a, t_a)$  nach  $(x_b, t_b)$

$$S[b, a] = \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}, x, t) dt \quad (1.26)$$

mit der Lagrange-Funktion  $L = T - V$ , postulierten Feynman und Hibbs, dass der Propagator  $K[b, a]$  eines quantenmechanischen Systems gegeben ist durch folgendes Pfadintegral über die Wirkung:

$$K[b, a] = \int_a^b \mathcal{D}x(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[b, a]\right), \quad (1.27)$$

dabei symbolisiert  $\mathcal{D}x(t)$  im Gegensatz zu  $dx(t)$ , dass es sich nicht um ein gewöhnliches, sondern um ein Pfadintegral handelt. Ein System, das von  $(x_a, t_a)$  nach  $(x_b, t_b)$  propagiert, beschreitet dabei gleichzeitig alle möglichen Wege, die die beiden Zustände  $a$  und  $b$  miteinander verbinden.

Wird vereinfachend angenommen, dass das Magnetfeld der Spinecho-Spulen statisch und räumlich homogen ist, so kann das Potenzial  $V$  als räumlich und zeitlich konstant betrachtet werden. Für die Wirkung gilt dann

$$S[b, a] = \int_{t_a}^{t_b} T dt - V(t_b - t_a) \quad (1.28)$$

und daraus ergibt sich der Propagator  $K_V[b, a]$  in Abhängigkeit von  $K_0[b, a]$ :

$$K_V[b, a] = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}V(t_b - t_a)\right) K_0[b, a]. \quad (1.29)$$

Nun kann  $V$  durch die entsprechenden Energieeigenwerte  $E_i$  der Breit-Rabi-Formel ersetzt werden, und man erhält den Propagator der magnetischen Eigenzustände  $|i\rangle$  innerhalb der angenommenen Magnetfelder:

$$K_V^{(i)}[b, a] = e^{i\Phi_i} K_0[b, a] \quad \text{mit} \quad \Phi_i = -\frac{1}{\hbar}E_i(t_b - t_a). \quad (1.30)$$

Für die Wellenfunktion  $\Psi^{(i)}$  eines Zustandes  $|i\rangle$ , der beide Spinecho-Spulen durchlaufen und den Detektor  $(x_D, t_D)$  erreicht hat, gilt dann

$$\Psi^{(i)}(x_D, t_D) = K_0(x_D, t_D; x_0, t_0) e^{i\Phi_i^{(2)}} e^{i\Phi_i^{(1)}} \Psi^{(i)}(x_0, t_0), \quad (1.31)$$

wobei die Propagatoren  $K_0$  der einzelnen Teilstrecken (gegeben durch erste und zweite Spinecho-Spule, sowie den Raum dazwischen) kontrahiert wurden und der zusätzliche obere Index der Phasen  $\Phi_i^{(1,2)}$  sich auf das erste bzw. zweite Magnetfeld bezieht.

Mit Hilfe der WKB-Näherung wird der Übergang von einem räumlich konstanten Potenzial zu einem räumlich veränderlichen Potenzial möglich unter der Maßgabe, dass sich das Potenzial (in diesem Fall die  $E_i(x)$ ) innerhalb einer Wellenlänge des betrachteten Teilchens nur unwesentlich ändert:  $E_i(x) \ll E$ . Dann wird aus der Phase  $\Phi$  in (1.30)

$$\Phi = -\frac{1}{\hbar} \int E_i(t) dt = -\frac{1}{\hbar v} \int E_i(x) dx. \quad (1.32)$$

### 1.2.3.2 Detektion

Bei paralleler Stellung der Führungsfelder (siehe dazu Abschnitt 3.5) durchlaufen den Analysator nur Teilchen, die sich im Zustand  $|1_x\rangle$  befinden, das heisst, hier findet im quantenmechanischen Sinn der Messprozess statt, wobei der Analysator quasi als Detektor fungiert. Formalisieren lässt sich die Messung mit dem Operator  $\mathcal{M}$  als Projektion auf den Zustand  $|1_x\rangle$ :

$$\mathcal{M} = \delta(x - x_D)\delta(t - t_D)|1_x\rangle\langle 1_x|. \quad (1.33)$$

Da die relevanten Eigenzustände  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$  und  $|3\rangle$  ein Spin 1-System bilden, können dreikomponentige Spinnoren verwendet werden und es gilt:

$$|1_x\rangle = \frac{1}{2}|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|2\rangle + \frac{1}{2}|3\rangle \quad (1.34)$$

$$|1_x\rangle\langle 1_x| = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{2\sqrt{2}} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2\sqrt{2}} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2\sqrt{2}} & \frac{1}{4} \end{pmatrix}. \quad (1.35)$$

Mit dem Ansatz

$$|\Psi(x, t)\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\Psi^{(1)}(x, t) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi^{(2)}(x, t) \\ \frac{1}{2}\Psi^{(3)}(x, t) \end{pmatrix} \quad (1.36)$$

und der Anfangsbedingung  $\Psi^{(i)}(x_0, t_0) = 1$  erhält man als Mess-Signal

$$\begin{aligned} \langle \Psi(x, t) | \mathcal{M} | \Psi(x, t) \rangle &= \\ &= \frac{3}{8} + \frac{1}{4} \Psi^{(1)} \Psi^{*(2)} + \frac{1}{8} \Psi^{(1)} \Psi^{*(3)} + \frac{1}{4} \Psi^{(2)} \Psi^{*(3)} + \text{cc.} \\ &= \frac{3}{8} + \frac{1}{4} \exp\left(i(\Phi_{12}^{(1)} + \Phi_{12}^{(2)})\right) + \frac{1}{8} \exp\left(i(\Phi_{13}^{(1)} + \Phi_{13}^{(2)})\right) + \frac{1}{4} \exp\left(i(\Phi_{23}^{(1)} + \Phi_{23}^{(2)})\right) + \text{cc.} \end{aligned} \quad (1.37)$$

dabei sind  $\Phi_{ij}^{(1,2)} = \Phi_i^{(1,2)} - \Phi_j^{(1,2)}$  die Phasendifferenzen zwischen  $|i\rangle$  und  $|j\rangle$  in der ersten beziehungsweise zweiten Spinecho-Spule. Verantwortlich für das Auftreten der Spinecho-Gruppen sind demnach die Interferenzterme  $\Psi^{(i)} \Psi^{*(j)}$ ,  $i \neq j$ , die auf die Phasendifferenzen  $\Phi_{ij}$  zurückgeführt werden können. Unter Berücksichtigung der expliziten Form der Phasen  $\Phi_i$  (Gleichung 1.30), einer angenommenen Länge  $l$  der Spulen und der komplex konjugierten Terme ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle \Psi(x, t) | \mathcal{M} | \Psi(x, t) \rangle &= \\ &= \frac{3}{8} + \frac{1}{4} \cos\left(\frac{-ml}{\hbar^2 k} (E_{12}^{(1)} + E_{12}^{(2)})\right) + \frac{1}{8} \cos\left(\frac{-ml}{\hbar^2 k} (E_{13}^{(1)} + E_{13}^{(2)})\right) + \frac{1}{4} \cos\left(\frac{-ml}{\hbar^2 k} (E_{23}^{(1)} + E_{23}^{(2)})\right), \end{aligned} \quad (1.38)$$

wobei  $k$  der Wellenvektor des betrachteten Zustandes ist und  $E_{ij}$  die Energiedifferenz  $E_i - E_j$  zweier Zustände für ein gegebenes Magnetfeld bezeichnet. Da die Terme  $E_{ij}$  im Allgemeinen nichtlinear in  $B_z$  sind, sind nicht mehr die Magnetfeldintegrale ( $\int B(z) dz = \bar{B}_z l$  für ein homogenes Magnetfeld der Länge  $l$ ) die experimentell entscheidenden Parameter (also die Kombination von  $B_z$  und  $l$ ), sondern  $B_z$  und  $l$  sind als getrennte Parameter aufzufassen.

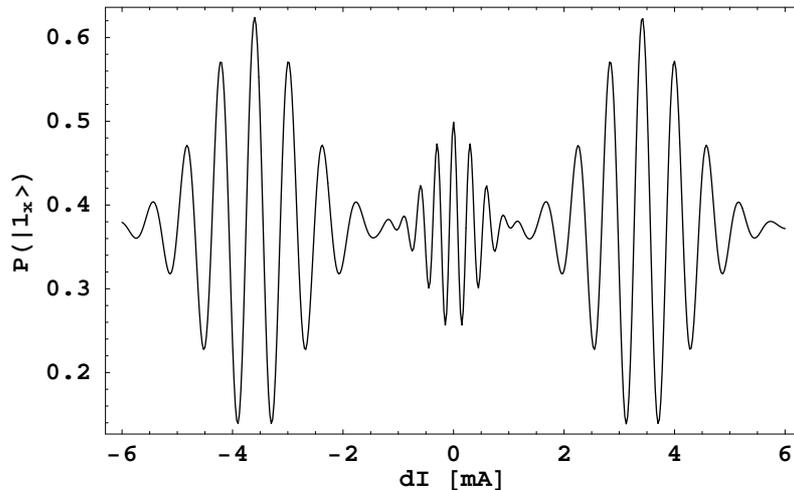


Abbildung 1.5: Theoretisch erwartete Spinecho-Kurve für Wasserstoff bei einem  $B_0$ -Strom von 20 mA durch Longitudinal-Spinecho-Spulen. Aufgetragen ist die Wahrscheinlichkeit  $p(|1_x\rangle)$  den Zustand  $|1_x\rangle$  nachzuweisen in Abhängigkeit der Stromdifferenz  $dI$ , um die der Strom, der das Magnetfeld in der zweiten Spule erzeugt, gegenüber dem in der ersten verstimmt ist. Der Kurve liegt eine gaussförmige Geschwindigkeitsverteilung mit einer wahrscheinlichsten Geschwindigkeit von 3630 m/s und einer Breite von 11 % zugrunde. Die Form der Feldverläufe von erster und zweiter Spinecho-Spule wurde als  $\text{Cos}^2$ -förmig angenommen. Man erkennt drei Spinecho-Gruppen, deren Maxima bei  $5/8, 1/2$  und wieder bei  $5/8$  liegen und einen Offset von  $3/8$ . Ebenfalls zu sehen sind die unterschiedlichen Oszillationsfrequenzen der einzelnen Spinecho-Gruppen.

Wird obiger Ausdruck mit der Geschwindigkeitsverteilung des Atomstrahls gewichtet, so erhält man den theoretischen Verlauf einer Spinecho-Kurve, wie sie in Abbildung 1.5 gezeigt wird. Es ist bereits anhand von Gleichung 1.38 zu erkennen, dass es drei Spinecho-Gruppen geben muss: Maxima des Mess-Signals ergeben sich dann, wenn die  $\cos$ -Terme maximal sind, also ihre Argumente verschwinden.

Da es aber keine Magnetfeldeinstellung (außer  $B_1 = B_2 = 0$ ) gibt, bei der für alle Kombinationen von  $i$  und  $j$  die Energiedifferenzen der zweiten Spule  $E_{ij}^{(2)}$  die der ersten  $E_{ij}^{(1)}$  genau kompensieren, entstehen drei Spinecho-Gruppen. Diese unterscheiden sich durch ihre Oszillationsfrequenz (gegeben durch die Argumente der  $\cos$ -Terme) und die Höhe der Maxima (gegeben durch die Koeffizienten der drei Interferenzterme). Aus obiger Argumentation wird deutlich, dass ein Atomstrahl-Spinecho-Experiment im Bereich der Atominterferometrie anzusiedeln ist.

In [8] finden sich gemessene Spinecho-Kurven, die obige Theorie rechtfertigen<sup>5</sup> und somit im Wesentlichen eine experimentelle Bestätigung der Breit-Rabi-Formel sind.

Im Zeeman-Bereich für kleine Magnetfelder ergibt sich als Mess-Signal aus (1.38) ein Ausdruck, mit dem sich die Spinrotations-Kurven beim Wasserstoff-Spinecho beschreiben lassen:

$$\begin{aligned} \langle \Psi(x, t) | \mathcal{M} | \Psi(x, t) \rangle &= \tag{1.39} \\ &= \frac{3}{8} + \frac{1}{4} \cos \left( \frac{-ml}{\hbar^2 k} (E_1^{(1)} + E_1^{(2)}) \right) + \frac{1}{8} \cos \left( \frac{-ml}{\hbar^2 k} (E_{13}^{(1)} + E_{13}^{(2)}) \right) + \frac{1}{4} \cos \left( \frac{-ml}{\hbar^2 k} (E_3^{(1)} + E_3^{(2)}) \right) \\ &= \frac{3}{8} + \frac{1}{2} \cos \left( -\frac{ml}{\hbar^2 k} (E_1^{(1)} + E_1^{(2)}) \right) + \frac{1}{8} \cos \left( -2\frac{ml}{\hbar^2 k} (E_1^{(1)} + E_1^{(2)}) \right), \end{aligned}$$

wobei der Energienullpunkt so gelegt wurde, dass  $E_2 \equiv 0$  und  $E_1 = -E_3$  gilt. Beide Identitäten wurden bei der letzten Umformung ausgenutzt. Das Rotationssignal beim Wasserstoff-Spinecho ist also komplizierter als bei einem reinen Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchen.

### 1.2.3.3 Mess-Signal und Polarisation

Beim Spin  $\frac{1}{2}$ -Spinecho stellt die in Abschnitt 1.1.1 eingeführte Polarisation die entscheidende Messgröße dar. Sie ist definiert als  $\chi := (N_+ - N_-)/(N_+ + N_-)$ .  $N_{\pm}$  bezeichnet die Anzahl der nachgewiesenen Teilchen bei parallelen bzw. antiparallelen Führungsfeldern. Die in Gl. (1.17) angegebene Form für die Wahrscheinlichkeit, dass ein im Zustand  $|+_{x}\rangle$  präpariertes Teilchen nach Durchlaufen der Spinecho-Anordnung wieder im Zustand  $|+_{x}\rangle$  angetroffen wird, ist streng genommen nur für einen monochromatischen Strahl und ein perfekt arbeitendes Spinecho-System gültig. Da die Polarisation multiplikativen Charakter hat, lassen sich Verluste der Polarisation, die auf inhomogene Präzessionsfelder und andere Unzulänglichkeiten bei Flips, Polarisation und Analyse beruhen, durch Einführung der Größe  $\chi^{(0)}$  berücksichtigen. Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen zum Detektor gelangt, nimmt dann die Form  $P_{\pm} = (1 \pm \chi^{(0)} \cos \Phi)$  an, die Polarisation wird durch  $\chi = \chi^{(0)} \cos \Phi$  beschrieben.

Anstelle nun ständig die Führungsfelder umzupolen, lässt sich bei einer Spinecho-Gruppe der Verlauf der Polarisation auch nach dem Schema  $\bar{\chi} = (Z - M)/(M - U)$  bestimmen. Dabei steht  $Z$  für die Anzahl der gezählten Teilchen an der Stelle, an der die Polarisation bestimmt werden soll,  $M$  ist die Anzahl der Teilchen ausserhalb der Spinecho-Gruppe,  $U$  ist der Untergrund. In Abb. 1.6 links ist die Situation für ein Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchen veranschaulicht.

Spinecho-Experimente mit Spin 1-Systemen haben dagegen als Mess-Signal nicht die Polarisation des Atomstrahls. Die Polarisation in einer Raumrichtung  $\alpha$  ist gegeben durch den Erwartungswert der zugehörigen Pauli-Matrix  $\sigma_{\alpha}$ :

$$P_{\alpha} = \langle \Psi | \sigma_{\alpha} | \Psi \rangle. \tag{1.40}$$

<sup>5</sup>Wird nicht nur das Spin 1-Triplett berücksichtigt, sondern die vollständige Basis der Energieeigenvektoren des Wasserstoffatoms, erhält man ein äquivalentes Ergebnis [8].

Mit der entsprechenden Pauli-Matrix  $\sigma_x$  eines Spin 1-System ([15]) erhält man für die Polarisation  $P_x$  in  $x$ -Richtung:

$$P_x = \langle \Psi | \sigma_x | \Psi \rangle \quad (1.41)$$

$$= \langle \Psi | \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} | \Psi \rangle \quad (1.42)$$

$$\propto \Psi_1 \Psi_2^* + \Psi_2 \Psi_3^* + \text{cc.} \quad (1.43)$$

Der letzte Ausdruck, in dem die Vorfaktoren weggelassen wurden, enthält nur Interferenzen der Eigenzustände  $|1\rangle$  und  $|2\rangle$  respektive  $|2\rangle$  und  $|3\rangle$ . Die nach Gleichung (1.38) offensichtlich zum Signal beitragenden Interferenzen zwischen  $|1\rangle$  und  $|3\rangle$  sind nicht enthalten.

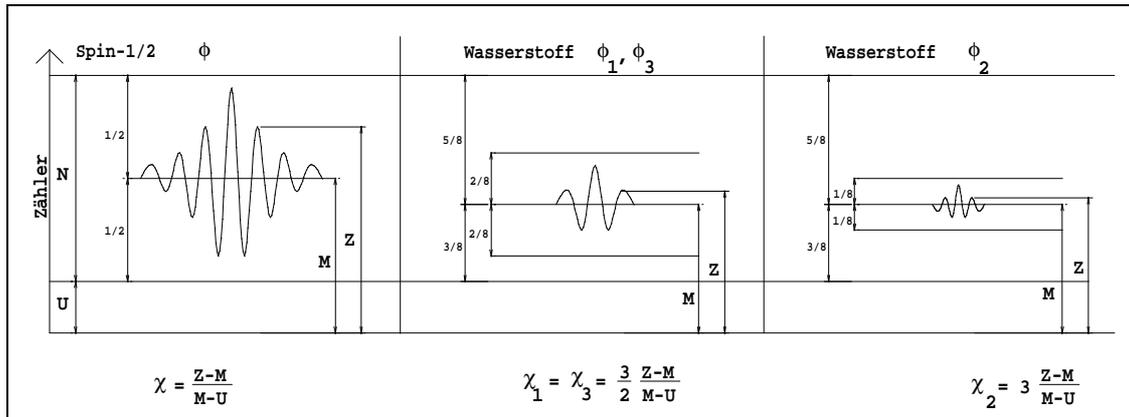


Abbildung 1.6: Bestimmung der Polarisation beim Spin  $\frac{1}{2}$ - und beim Spin 1-System. an einem beliebigen Punkt der Spinecho-Gruppe. Die Zahl  $Z$  der pro Zeiteinheit im Detektor eintreffenden Teilchen setzt sich zusammen aus dem Untergrund  $U$  und dem strahlkorelierten Signal  $Z - U$ . Die gezeigten Spinecho-Gruppen können die eingezeichneten Grenzen nicht überschreiten, die Strahlpolarisationen aller Spinecho-Gruppen sind kleiner als Eins. Aus [8].

Der Grund, warum die Polarisation<sup>6</sup> nicht die Messobservable darstellt, ist der, dass es in einem Spin 1-System drei Teilpopulationen der magnetischen Eigenzustände gibt. Zur Bestimmung der Polarisation müssten also mindestens zwei Teilpopulationen bestimmt werden, d.h. man müsste zusätzlich die Projektion auf  $|2_x\rangle$  oder  $|3_x\rangle$  messen. Bei Spinecho-Experimenten mit Spin  $\frac{1}{2}$ -Systemen, gibt es nur zwei Teilpopulationen, deshalb genügt dort eine Messung zur Bestimmung der Polarisation; wobei sowohl im Falle des Spin 1-Systems als auch im Falle des Spin  $\frac{1}{2}$ -Systems vorausgesetzt werden muss, dass als zusätzliche Information die Gesamtintensität des Strahls bekannt ist.

Auch wenn im Falle eines Spin 1-Systems die Polarisation nicht die Messgröße darstellt wie bei Spin  $\frac{1}{2}$ -Systemen, so beruht eine Spinecho-Messung auch hier auf der vollständigen Polarisation der Teilchen in  $x$ -Richtung – dies ist synonym mit der gezielten Präparation des Zustands  $|1_x\rangle$  zu verstehen. Eine etwaige unvollständige Polarisation verändert die relative Mischung der drei beteiligten Eigenzustände und ist damit direkt messbar. Deshalb ist die Minimierung unvermeidbarer Polarisationsverluste aufgrund apparativer Gegebenheiten (vgl. mit Kapitel 4) nach wie vor nötig, um beispielsweise den Einfluss von Streuprozessen auf das Mess-Signal identifizieren zu können.

Auch im Fahrplanmodell (siehe Abb. 1.4) werden die Schwierigkeiten deutlich, die sich bei der Übertragung des Polarisationsbegriffs vom Spinecho mit Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchen auf Wasserstoffspinecho ergeben: Ein vollständig im Zustand  $|1_x\rangle$  präparierter Strahl besteht aus der kohärenten Überlagerung der Eigenzustände  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$  und  $|3\rangle$ . Sobald die drei Eigenzustände vollständig voneinander getrennt sind, ist es aufgrund der nichtlinearen Abhängigkeit der magnetischen Energie  $E_2$  des Eigenzustands  $|2\rangle$  vom Magnetfeld nicht mehr möglich, alle drei Eigenzustände wieder gemeinsam zur Überlagerung zu bringen. Möglich ist dann nur noch die jeweils paarweise Überlagerung von  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$  und  $|3\rangle$ .

<sup>6</sup>Wenn im Folgenden von Polarisation die Rede ist, so ist dabei stets die Polarisation in  $x$ -Richtung gemeint.

Eine Übertragung des Polarisationsbegriffes bei Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchen auf das Spin 1-System des Wasserstoffs nach dem Schema

$$\chi = \frac{N_+ - N_-}{N_+ + N_-}$$

zur Definition einer Polarisation ist nur geeignet für den Fall, dass die einzelnen Spinecho-Gruppen noch nicht signifikant voneinander getrennt sind. Dann gibt es noch keine komplizierten Interferenzen oder Überlagerungen der einzelnen Spinecho-Gruppen, die einen Einfluss auf die Einhüllende des Signals haben. Da die so ermittelte Polarisation aus einer Überlagerung der Beiträge von den Echogruppen der Phasen  $\Phi_{12}$ ,  $\Phi_{13}$  und  $\Phi_{23}$  besteht, bietet es sich an, in diesem Fall eher von einem *Kontrast* als von *Polarisation* zu sprechen. Bei der Ermittlung des Kontrasts kann im Übrigen nicht auf die Form  $\chi = (Z - M)/(M - U)$  zurückgegriffen werden, die vom Spin  $\frac{1}{2}$ -System her bekannt ist. Dies liegt daran, dass bei Spin 1-System die Polarisation (oder der Kontrast) außerhalb der Spinecho-Gruppen nicht auf den Wert  $1/2$  abfällt, sondern bis auf  $3/8$ . Dies ist beispielsweise in Abb. 1.8 links oben für die Spinrotations-Kurve bei einem  $B_0$ -Strom von 0 mA zu erkennen.

Sind die Spinecho-Gruppen vollständig voneinander getrennt, so ist der oben geprägte Begriff des Kontrastes nicht mehr anwendbar. Angebracht scheint es zu sein, eine „partielle“ Polarisation in Anlehnung an den Spin  $\frac{1}{2}$ -Fall zu definieren, die nur für eine einzelne Spinecho-Gruppe gilt. Dafür ist allerdings Voraussetzung, dass alle drei Gruppen deutlich voneinander getrennt sind und es somit keine komplizierten Überlagerungen von Signalen unterschiedlicher Frequenz und Breite gibt. Unter diesen Voraussetzungen kann für jede Gruppe die Polarisation definiert werden als:

$$\begin{aligned} \chi_{ij} &= \cos \bar{\Phi}_{ij} && \text{bei idealem System und monoenergetischem Strahl,} \\ \chi_{ij} &= \chi_{ij}^{(0)} \cos \bar{\Phi}_{ij} && \text{bei nicht idealem System und monoenergetischem Strahl und} \\ \bar{\chi}_{ij} &= \chi_{ij}^{(0)} \int \cos \bar{\Phi}_{ij} f(v) dv && \text{bei nicht idealem System und polychromatischem Strahl.} \end{aligned} \quad (1.44)$$

Beim Feststellen der Polarisation anhand der gezählten Teilchen der Spinecho-Gruppen müssen die Faktoren berücksichtigt werden, die in (1.37) vor den entsprechenden Interferenztermen stehen. Abbildung 1.6 zeigt, wie anhand gemessener Spinecho-Gruppen deren Polarisation bestimmt werden kann. Benötigt wird die Zählrate des unpolarisierten Strahls  $M$ , der unter der gesamten Gruppe liegende Untergrund  $U$  sowie die Zählrate  $Z$  an der Stelle, an der die Polarisation bestimmt werden soll. Sind diese Größen bekannt, so ergibt sich die Polarisation zu:<sup>7</sup>

$$\begin{aligned} \bar{\chi}_{12} = \bar{\chi}_{23} &= \frac{3}{2} \frac{Z - M}{M - U} \\ \bar{\chi}_{13} &= \frac{3}{1} \frac{Z - M}{M - U}. \end{aligned} \quad (1.45)$$

<sup>7</sup>In Abb. 1.6 sind die Phasen  $\Phi_{12}$  mit  $\phi_1$ ,  $\Phi_{23}$  mit  $\phi_3$  und  $\Phi_{13}$  mit  $\phi_2$  bezeichnet. Gleiches gilt für die Polarisationen  $\chi_i$ .

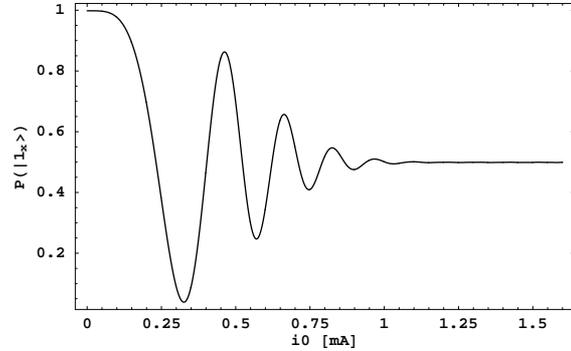


Abbildung 1.7: Verlauf der Wahrscheinlichkeit, für eine Stromdifferenz  $\Delta I = 0$  zwischen beiden Spulen den Zustand  $|1_x\rangle$  nach Durchlaufen der Spinecho-Anordnung nachzuweisen. Aufgetragen als Funktion des Stroms  $I_0$  durch beide Spulen. Die hier gezeigten Werte entsprechen in Abb. 1.8 den Werten bei  $\Delta I = 0$  für den entsprechenden  $B_0$ -Strom  $I_0$ . Die abklingende Schwingung ist auf Interferenzen der drei auseinander laufenden Spinecho-Gruppen zurückzuführen, wie sie in Abb. 1.8 gezeigt sind.

Um die Problematik bei der Definition des Polarisationsbegriffs im Fall des Spin 1-Systems zu verdeutlichen, sei auf die Abb. 1.7 und 1.8 verwiesen. Abb. 1.7 zeigt den Verlauf der Polarisation an der Stelle  $\Delta I = 0$  als Funktion des  $B_0$ -Stroms  $I_0$ . Für Ströme von weniger als 100 mA kann die Polarisation anhand des oben genannten Kontrastes ermittelt werden. Erst ab einem  $B_0$ -Strom von mehr als 1 A wird die Amplitude der mittleren Gruppe nicht mehr von den asymmetrisch nach außen laufenden Gruppen der Phasen  $\Phi_{12}$  und  $\Phi_{23}$  berührt und der Begriff der „partiellen“ Polarisation ist anwendbar. Im dazwischen liegenden Bereich ist es anhand von gemessenen Spinecho-Kurven sehr schwierig, zuverlässige Werte für die Polarisation zu erhalten, da keine der oben genannten Definitionen anwendbar ist. Wie der Abb. 1.8 entnommen werden kann, sind die Schwerpunkte der einzelnen Spinecho-Gruppen im gezeigten Fall zwar schon ab einem  $B_0$ -Strom von etwa 700 mA zu erkennen, aus Abb. 1.7 geht aber hervor, dass es noch zu Interferenzen der einzelnen Echogruppen kommt, die die Amplitude der mittleren Gruppe und damit deren scheinbare Polarisation beeinflussen.

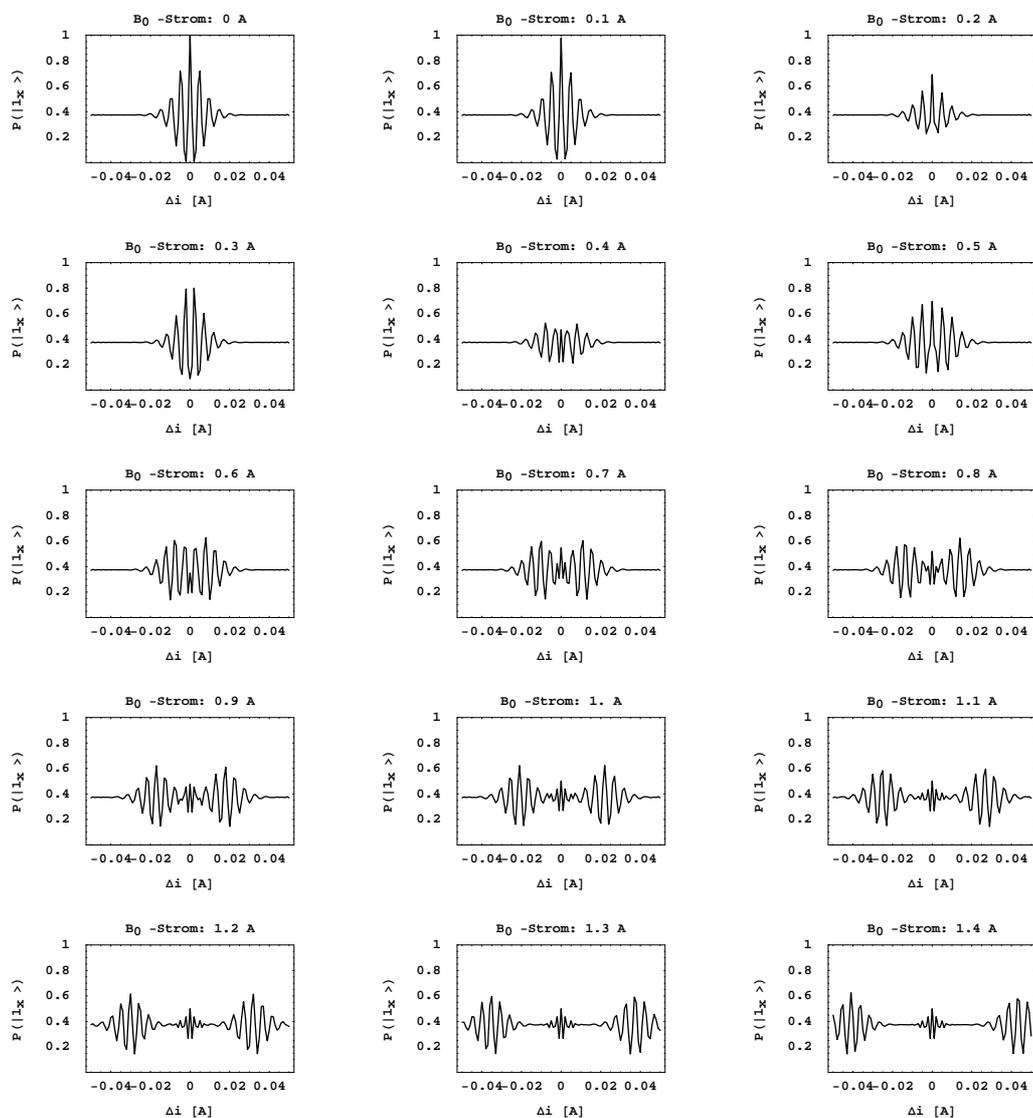


Abbildung 1.8: Erwartetes Auseinanderlaufen der einzelnen Spinecho-Gruppen nach Gl. (1.37). In die explizite Form der Phasen  $\Phi_{ij}^{(1,2)}$  geht der Verlauf der Spulenfelder ein. Für diesen wurde der in Kapitel 4.2.2 simulierte Feldverlauf der drahterdierten Spulen eingesetzt. Die „partiellen“Polarisationen der einzelnen Gruppen nach (1.45) wurden dabei konstant bei 1 gehalten.

## Kapitel 2

# Transversales Spinecho

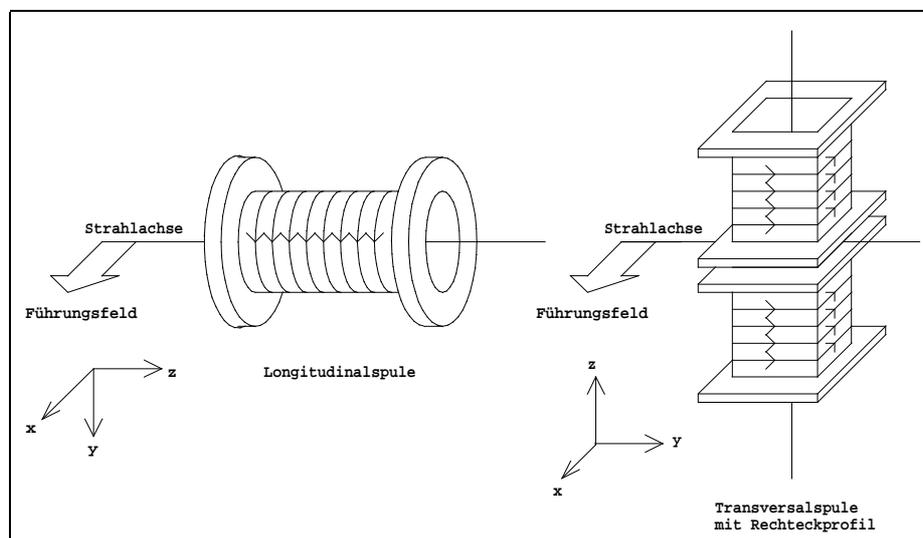


Abbildung 2.1: Festlegung der Koordinatensysteme bei Spulen mit longitudinalem Feld (links) und mit transversalem Feld (rechts). Die Koordinatensysteme sind so orientiert, dass die Polarisationsrichtung des Strahls, die durch die Führungsfelder vorgegeben wird, in  $x$ -Richtung zu liegen kommt. Das Magnetfeld der jeweiligen Spule zeigt immer in  $z$ -Richtung.

In Abschnitt 1.1.2 bzw. 1.2.2 wurde die Aufspaltung der Teilwellenpakete mit Hilfe der Energieerhaltung erklärt. Dabei wird das Magnetfeld als mehrfachbrechendes Medium behandelt, in dem Eigenzustände mit einem magnetischen Moment  $\mu$  die potenzielle Energie  $g\mu\vec{S}\cdot\vec{B}$  haben. Die Änderung der potenziellen Energie geht mit einer Änderung des Bewegungszustandes einher. Klassisch argumentiert ist diese Änderung verbunden mit einer Krafteinwirkung. Wie schon in Abschnitt 1.1.2 erlaubt das Ehrenfest'sche Theorem die Umsetzung dieser klassischen Aussage auf das quantenmechanische Regime. Ein Teilchen mit magnetischem Moment  $\mu$  erfährt also die Kraft

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}E = -\frac{\partial E}{\partial B}\vec{\nabla}B = -\mu\vec{\nabla}B, \quad (2.1)$$

wobei  $\mu = \partial E/\partial B$  gerade die Steigung der Energiekurve eines Zustands  $|i\rangle$  im Breit-Rabi-Diagramm 1.4 darstellt. Aus Gl. (1.19) ist ersichtlich, dass die Kraftwirkung in Richtung des Gradienten des Magnetfeldbetrags erfolgt. Bei Verwendung von zylindersymmetrischen Spinecho-Spulen steht der Gradient auf der Strahlachse genau parallel bzw. antiparallel beim Ein- und Austritt in den Magnetfeldbereich. Aus diesem

Grund erfolgt die Aufspaltung und Überlagerung der Teilwellenpakete entlang der Strahlrichtung, und man redet von *longitudinalem Spinecho*.

Steht dagegen der Gradient unter einem Winkel  $\theta$  zur Strahlachse, so erfolgt auch die Aufspaltung der Teilwellenpakete unter diesem Winkel. Nach Durchqueren des ersten Spinecho-Feldes entsteht so ein Versatz zwischen den Teilwellenpaketen sowohl mit einer longitudinalen als auch einer transversalen Komponente bezüglich der Strahlachse. Wird dieser Versatz in der zweiten Spinecho-Spule rückgängig gemacht, redet man von *transversalem Spinecho*.<sup>1</sup>

Im Folgenden werden die theoretischen Grundlagen gelegt, um eine transversale Aufspaltung der Teilwellenpakete beschreiben zu können. Desweiteren wird eine Streutheorie entwickelt, anhand der ersichtlich wird, was im Falle des transversalen Spinechos die relevante Messgröße ist.

## 2.1 Die gekippte Spule

Abb. 2.1 zeigt zwei mögliche Spulenanordnungen, um eine longitudinale Aufspaltung der Teilwellenpakete zu erreichen. Im linken Fall handelt es sich um eine zylindersymmetrische Spule. Dieser Typ von Spule wird beispielsweise beim Heidelberger <sup>3</sup>He-Spinecho-Spektrometer eingesetzt und erzeugt ein longitudinales Magnetfeld entlang der Strahlachse. Rechts ist eine Rechteckspule gezeigt, wobei die Seitenflächen der Spule entweder parallel oder senkrecht zur Strahlachse orientiert sind. Eine solche Spule erzeugt ein transversales Magnetfeld bezüglich der Strahlachse, wobei der Gradient des Magnetfeldbetrags auf der Strahlachse parallel bzw. antiparallel orientiert ist.

Wird nun diese Spule derart um ihre Achse gedreht, dass die Stirnflächennormale<sup>2</sup> den Winkel  $\theta$  mit der Strahlachse einschließt, so wird aus einem rein longitudinalen Versatz eine Aufspaltung mit longitudinaler und transversaler Komponente [11]. Eine solche Situation ist in Abb. 2.2 gezeigt. Der Übersichtlichkeit halber beschränkt sich die Abbildung auf den Fall eines reinen Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchens, das in  $x$ -Richtung polarisiert ist.

### 2.1.1 Erzeugter Versatz

Das Wellenpaket dieses Teilchens mit dem Wellenvektor  $\vec{k}_0$  ist als kohärente Mischung der Eigenzustände  $|i\rangle$  und  $|j\rangle$  bezüglich der Magnetfeldrichtung der Spule darstellbar. Nach Gl. (1.19) wirkt auf jeden Eigenzustand beim Eintritt in das Magnetfeld eine Kraft parallel bzw. antiparallel zur Richtung von  $\vec{\nabla}B$ , abhängig vom magnetischen Moment  $\mu$  des jeweiligen Wellenpakets. Für jeden Eigenzustand lässt sich der einfallende Wellenvektor  $\vec{k}_0$  zerlegen in eine Komponente  $\vec{k}_{\parallel}$  parallel zu  $\vec{\nabla}B$  und eine Komponente  $\vec{k}_{\perp}$  senkrecht dazu.  $\vec{k}_{\parallel}$  und  $\vec{k}_{\perp}$  spannen ein rechtshändiges Koordinatensystem auf, das bezüglich der  $xy$ -Ebene um den Winkel  $\theta$  verdreht ist. Für die Einheitsvektoren dieses Koordinatensystems<sup>3</sup> gilt

$$\vec{e}_{\parallel} = \begin{pmatrix} \sin \theta \\ \cos \theta \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{e}_{\perp} = \begin{pmatrix} -\cos \theta \\ \sin \theta \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{e}_3 = \vec{e}_z = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

<sup>1</sup>In [8] wird von transversalem Spinecho gesprochen, sobald das Magnetfeld der Spinecho-Spulen senkrecht zum Strahl orientiert ist. Da aber die Richtung des Magnetfeldes keinen Einfluss auf die Richtung der Aufspaltung hat, können auch mit transversalen Spinecho-Feldern longitudinale Aufspaltungen erzeugt werden (siehe Abb. 2.1), mit denen rein zeitliche Korrelationen auf einer Probe untersucht werden können. Wie im Laufe dieses Kapitels noch deutlich werden wird, ist es dagegen mit transversalen Aufspaltungen der Teilwellenpakete möglich, ohne ortsauflösenden Detektor direkt Informationen über räumliche Korrelationen auf der Probe zu erhalten. Dies stellt einen wesentlichen Unterschied zum longitudinalen Spinecho dar, bei dem es keine Möglichkeit gibt, direkt Aussagen über räumliche Korrelationen zu machen. Aus diesem Grund ist es eigentlich konsequenter, erst dann von transversalem Spinecho zu sprechen, wenn transversale Komponenten der Aufspaltung vorliegen.

<sup>2</sup>Die Seitenflächen, durch die der Strahl in die Spule ein- bzw. austritt werden hier und im Folgenden als „Stirnflächen“ bezeichnet.

<sup>3</sup>Im Folgenden ist darauf zu achten, dass das hier verwendete Koordinatensystem rechtshändig ist, im Gegensatz zu dem in [18] verwendeten.

Aufgrund der Vektorzerlegung von  $\vec{k}_0$  bleibt  $\vec{k}_\perp$  von der Krafteinwirkung unberührt, inner- und außerhalb des Magnetfelds gilt  $k_\perp = k_0 \sin \theta$ . Die Auswirkung auf  $\vec{k}_\parallel$  wird vorgegeben durch die Energieerhaltung

$$E = E_{kin}^{(out)} = E_{kin}^{(in)} + E_i(B). \quad (2.3)$$

Dabei beschreibt  $E_{kin}^{(out,in)}$  die kinetische Energie des Zustands  $|i\rangle$  außerhalb bzw. innerhalb des Magnetfelds  $\vec{B}$ .  $E_i(B)$  ist seine potenzielle Energie aufgrund des Magnetfelds,  $E$  repräsentiert die Gesamtenergie. Unter der Voraussetzung<sup>4</sup>  $E_i \ll E_{kin}$  gilt für die Komponenten des Wellenvektors von Zustand  $|i\rangle$

$$k_\parallel^{(i)} \simeq k_\parallel \left( 1 - \frac{1}{2 \cos^2 \theta} \frac{E_i(B)}{E} \right) \quad (\text{in erster Naherung}), \quad (2.4)$$

$$k_\perp^{(i)} = k_\perp,$$

wobei  $k_\parallel = k_0 \cos \theta$  und  $k_\perp = k_0 \sin \theta$  gilt. Analoges gilt fur den Zustand  $|j\rangle$ . Da nach Gl. (2.4) nur die Wellenvektor-Komponenten parallel zum Feldgradienten von diesem verandert werden, fliegen die Eigenzustands-Wellenpakete innerhalb des Magnetfeldbereichs nicht mehr parallel zur Strahlachse, was in Abb. 2.2 ersichtlich ist.

Der Zustand  $|i\rangle$  mit  $E_i < 0$  wird in das Magnetfeld hinein beschleunigt und bewegt sich mit erhohter Gruppengeschwindigkeit auf der in den Halbraum  $x > 0$  gerichteten geknickten Trajektorie. Der Zustand  $|j\rangle$  mit  $E_j > 0$  wird abgebremst und folgt der langeren, nach  $x < 0$  gerichteten Trajektorie. Da die Gruppengeschwindigkeit von  $|i\rangle$  im Magnetfeld groer ist als die von  $|j\rangle$  und zusatzlich noch die Trajektorie fur  $|i\rangle$  kurzer ist als die Trajektorie fur  $|j\rangle$ , wird  $|i\rangle$  die Begrenzung des Magnetfeldbereichs fruher erreichen als  $|j\rangle$ .

Beim Verlassen des Magnetfeldbereichs wirkt auf beide Wellenpakete eine Kraft, die der beim Eintreten in den Feldbereich wirkenden Kraft entgegen gerichtet ist. Sind beide Krafte fur ein Wellenpaket betragsmaig gleich, so bewegen sich die Wellenpakete nach Verlassen des Feldbereichs mit ihrem ursprunglichen Wellenvektor parallel zur Strahlachse versetzt weiter. Aufgrund seines Vorsprungs legt  $|i\rangle$  auerhalb des Magnetfelds schon eine gewisse Strecke zuruck, bevor  $|j\rangle$  das Magnetfeld verlasst. Dies bedeutet, dass beide Wellenpakete mit dem konstanten Versatz

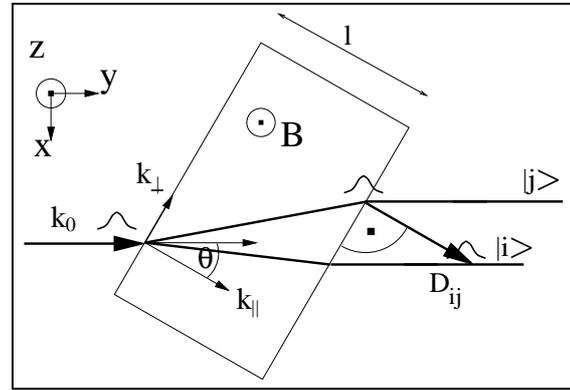


Abbildung 2.2: Gekippte Rechteck-Spule zur Erzeugung eines longitudinalen und transversalen Versatzes zwischen den Teilwellenpaketen.  $z$ -Achse und Magnetfeld zeigen aus der Blattebene heraus. Anders als in [18] ist das hier verwendete Koordinatensystem rechtshandig.

$$\vec{D}_{ij} = \vec{r}_{out}^{(i)} - \vec{r}_{out}^{(j)} \quad (2.5)$$

neben- und hintereinander herfliegen, nachdem das Wellenpaket  $|j\rangle$  den Magnetfeldbereich verlassen hat. Dabei sind  $\vec{r}_{out}^{(i)}$  und  $\vec{r}_{out}^{(j)}$  die Ortsvektoren der Schwerpunkte der Wellenpakete  $|i\rangle$  und  $|j\rangle$  zum Zeitpunkt des Austritts von  $|j\rangle$  aus dem Magnetfeld. Die Anwendung des „Raytracing“-Modells[11] ergibt fur den Versatz  $\vec{D}_{ij}$  schlielich

$$\vec{D}_{ij} = \frac{l}{2 \cos^2 \theta} \frac{E_{ji}}{E} \cdot \vec{e}_\parallel = \underbrace{\frac{l}{2 \cos^2 \theta} \frac{E_j}{E} \cdot \vec{e}_\parallel}_{\text{Versatz von } |j\rangle} - \underbrace{\frac{l}{2 \cos^2 \theta} \frac{E_i}{E} \cdot \vec{e}_\parallel}_{\text{Versatz von } |i\rangle}, \quad (2.6)$$

wobei nach Abb. 2.2 die Lange des Magnetfeldbereichs in Richtung des Feldgradienten mit  $l$  bezeichnet ist. Die in Gl. (2.6) geklammerten Ausdrucke stellen den jeweiligen Versatz eines Teilwellenpaketes bezuglich eines vom Magnetfeld unbeeinflussten Teilchens ohne magnetisches Moment dar. Der Versatz der

<sup>4</sup>Fur atomaren Wasserstoff bei brennender Entladung liegt die wahrscheinlichste Geschwindigkeit typischerweise bei etwa 3600 m/s, was einer kin. Energie von ungefahr 67 meV entspricht. Die gewickelten Transversalspulen sind fur einen Dauerstrom von 200 mA ausgelegt, womit die typische maximale Feldstarke bei ungefahr 5.6 mT liegt. Wie Abb. 1.4 entnommen werden kann, betragt die potenzielle Energie der einzelnen Zustande selbst bei einem Feld von 100 mT noch weniger als 10  $\mu\text{eV}$ , so dass auch im hier vorliegenden Fall  $E_i \ll E_{kin}$  erfullt ist.

beiden Teilwellenpakete ist also in die gleiche Richtung orientiert wie der Feldgradient (vgl. mit Gl. (2.2)). Die longitudinale und die transversale Aufspaltung der Teilwellenpakete sind offensichtlich nicht unabhängig voneinander: Ihr Verhältnis wird durch  $\tan \theta$  bestimmt. Über  $E_{ji} = E_{ji}(B)$  wirkt die Stärke des Magnetfeldes auf die absolute Größe der Aufspaltung.

Die hier hergeleitete Formel (2.6) für den Versatz ist identisch mit der in [8] zwanglos vom Longitudinal-Spinecho auf das Transversal-Spinecho übertragenen Beziehung für die Verschiebung der Teilwellenpakete in  $x$ - und  $y$ -Richtung. Zu beachten ist allerdings, dass beim Übergang von einem rechteckförmigen Verlauf des Magnetfeldes zu einem kontinuierlichen Verlauf  $\frac{l E_{i,j}}{\cos \theta}$  in erster Näherung übergeht in  $\int E_{i,j} dy$ , wobei dann über die Länge des Magnetfeldes  $l' = l / \cos \theta$  in Strahlrichtung zu integrieren ist.

### 2.1.2 Phasendifferenz

Für quantitative Aussagen über das Mess-Signal ist die Kenntnis der Phasendifferenzen der an einer Spinecho-Gruppe beteiligten Teilwellenpakete notwendig. Das „Raytracing“-Modell legt die Benutzung von Propagatoren der Form

$$K(\vec{r}_2, t_2; \vec{r}_1, t_1) = \exp \left( i \vec{k} \cdot (\vec{r}_2 - \vec{r}_1) - \frac{i}{\hbar} E(t_2 - t_1) \right) \quad (2.7)$$

nahe. Dies führt schließlich zu einem Ausdruck für die Phasendifferenz zwischen den beiden Zuständen  $|i\rangle$  und  $|j\rangle$ :

$$\Phi_{ij} = - \frac{|\vec{k}_0|}{\cos(\theta)} \frac{l E_{ij}(B)}{E}. \quad (2.8)$$

Eine genaue Herleitung sowohl dieses Ausdrucks als auch von Gl. (2.6) findet sich in Anhang A.1.

### 2.1.3 Spinecho-Bedingung

Das Spinecho-Prinzip beruht darauf, dass die Teilwellenpakete, die zwischen den beiden Spinecho-Spulen voneinander getrennt sind, durch die zweite Spinecho-Spule wieder kohärent zur Überlagerung gebracht werden können. Aus dieser Forderung lässt sich direkt eine geometrische Spinecho-Bedingung formulieren:

$$\vec{D}_{ij}^{(1)} = -\vec{D}_{ij}^{(2)}. \quad (2.9)$$

Die oberen Indizes kennzeichnen den Versatz der ersten und der zweiten Spinecho-Spule. Der Versatz, den die erste Spule zwischen den Zuständen  $|i\rangle$  und  $|j\rangle$  erzeugt, muss also von der zweiten Spule kompensiert werden. Nach dem bisher Gesagten folgt daraus, dass die Kräfte, die die Teilwellenpakete beim Eintreten in den Magnetfeldbereich und Verlassen desselben erfahren, immer parallel bzw. antiparallel zueinander orientiert sein müssen. Aus dieser Anforderung ergeben sich Bedingungen für den „Verkipfungswinkel“  $\theta$  der Stirnflächen der Magnetfeldbereiche und – implizit über  $E_{i,j}(B)$  – für den Verlauf der Magnetfeldstärke  $B$ ,

$$\theta^{(1)} = \theta^{(2)} \quad \text{und} \quad E_{ij}^{(1)}(B) = -E_{ij}^{(2)}(B), \quad (2.10)$$

die erfüllt werden müssen, um ein Spinecho-Signal zu ermöglichen. Dies ist dann möglich, wenn sich die Phasendifferenzen für Kombinationen bestimmter Zustände  $|i\rangle$  und  $|j\rangle$  kompensieren:

$$\frac{E_{ij}^{(1)}}{\cos(\theta^{(1)})} = - \frac{E_{ij}^{(2)}}{\cos(\theta^{(2)})} \Rightarrow \Phi_{ij}^{(1)} + \Phi_{ij}^{(2)} = 0. \quad (2.11)$$

Es ergibt sich damit die gleiche Situation wie beim Longitudinal-Spinecho, so dass bei Verwendung von atomarem Wasserstoff ( $1S_{1/2}$ ) wieder mit dem Auftreten von drei Spinecho-Gruppen zu rechnen ist.

## 2.2 Modifiziertes Fahrplanmodell

Abbildung 2.3 zeigt das für den Fall des transversalen Spinechos modifizierte Fahrplanmodell. Im oberen, horizontalen Bereich ist die geometrische Anordnung der Magnetfeldbereiche mit den „verkippten“ Stirnflächen zu sehen. Die  $y$ -Achse stellt dabei gleichzeitig die Trajektorie eines Strahlteilchens ohne magnetisches Moment dar, das die Feldanordnung durchläuft, ohne abgelenkt zu werden. Weiterhin zu sehen sind die Trajektorien der Zustände  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$  und  $|3\rangle$ , wie sie sich aus Abschnitt 2.1.1 ergeben.

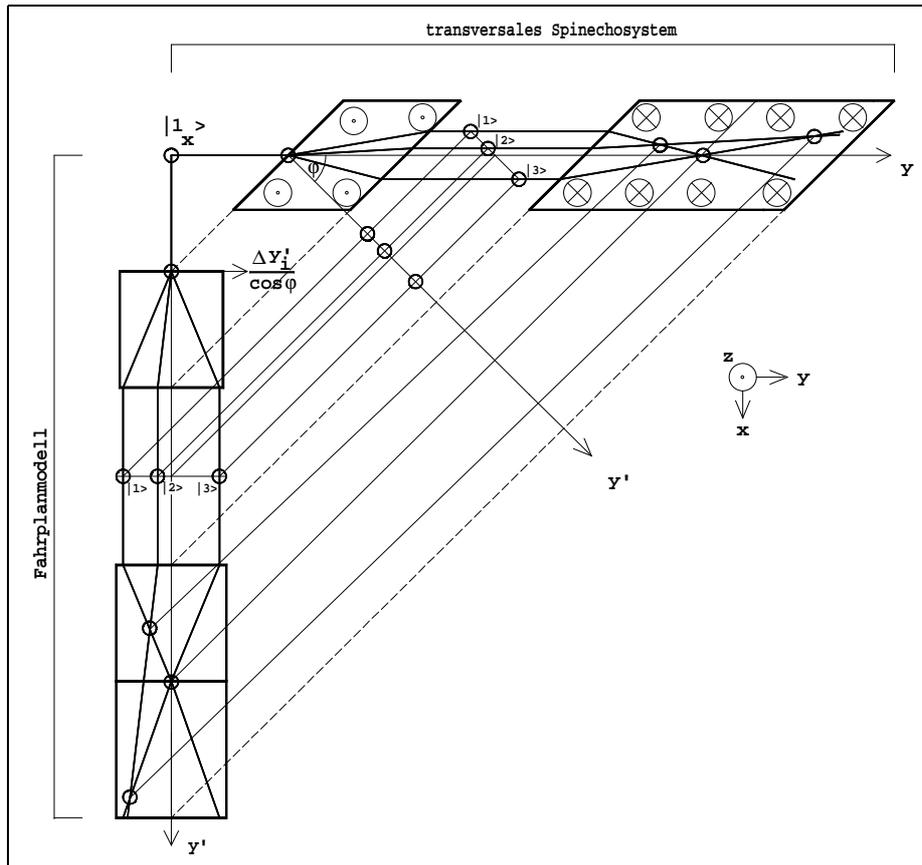


Abbildung 2.3: Modifiziertes Fahrplanmodell für das Transversal-Spinecho am ungestreuten Strahl. In der Horizontalen ist das Spinecho-System bestehend aus den beiden Magnetfeldbereichen zusammen mit den darin verlaufenden Teilwellenpaket-Trajektorien gezeigt. Vertikal ist die Anwendung des schon bekannten Fahrplanmodells in der Richtung der Magnetfeldgradienten gezeigt.

Im Bereich der zweiten Spinecho-Spule sind drei Trajektorien-Schnittpunkte zu erkennen. Aus dieser einfachen geometrischen Betrachtung folgt aber noch nicht, dass die jeweiligen Teilwellenpakete auch *gleichzeitig* am Ort des Schnittpunktes eintreffen. Nur dann kann es überhaupt zu einer Überlagerung der Teilwellenpakete und somit zu einem Spinecho-Signal kommen. Dies gilt in besonderer Weise für die Spinecho-Gruppen an denen Zustand  $|2\rangle$  beteiligt ist.

Erst die Betrachtung des Fahrplanmodells in Richtung der Feldgradienten (in der Abb. 2.3 ist das die diagonal liegende  $y'$ -Richtung) schafft Klarheit über das gleichzeitige Eintreffen der einzelnen Teilwellenpakete an den jeweiligen Schnittpunkten. Die Beschränkung auf die  $y'$ -Richtung ist möglich aufgrund der in Abschnitt 2.1.1 vorgenommenen Aufspaltung der einlaufenden Wellenvektoren in Komponenten parallel und senkrecht zum Feldgradienten. Die für alle Teilwellenpakete unveränderte Komponente normal zur Gradientenrichtung kann zur Bestimmung der Spinecho-Punkte unberücksichtigt bleiben.

Beschränkt man sich also auf die  $y'$ -Richtung, so liegt nun in dieser Richtung wieder eine „longitudinale“ Aufspaltung der Teilwellenpakete vor. Diese Situation kann mit dem vom Longitudinal-Spinecho bekannten Fahrplanmodell beschrieben werden. In Abb. 2.3 ist dieses Modell in der Vertikalen aufgetragen. Damit wird klar, dass in der zweiten Spinecho-Spule also tatsächlich drei Schnittpunkte existieren, an denen jeweils zwei Teilwellenpakete kohärent überlagert werden können. Die Komponente des Wellenvektors senkrecht zur Gradientenrichtung kann bei Erreichen eines Spinecho-Punktes einfach dadurch berücksichtigt werden, dass der jeweilige Schnittpunkt entlang der eingezeichneten Linien aus dem Fahrplanmodell in das transversale Spinecho-System verschoben wird. Damit ist auf einfache Weise gezeigt, dass auch im Fall des transversalen Spinechos mit drei Spinecho-Gruppen zu rechnen ist, was die Eleganz dieser Art, das Spinecho zu beschreiben, verdeutlicht.

### 2.3 Streutheorie beim transversalen Spinecho

Um Kenntnisse über die Dynamik und Struktur von Festkörpern bzw. deren Oberflächen zu erlangen bedient man sich Streuexperimenten. Zur Beschreibung werden gewöhnlich drei von van Hove [16] eingeführte Größen benutzt. Dabei handelt es sich um

- die Korrelationsfunktion  $G(\vec{r}, t)$ , die die Wahrscheinlichkeit im Ensemblemittel angibt, dass sich ein Teilchen zum Zeitpunkt  $t = t_0$  am Ort  $\vec{r} = \vec{r}_0$  befindet, wenn sich zum Zeitpunkt  $t = 0$  am Ort  $\vec{r} = 0$  auch eines befunden hat,
- die intermediäre Streufunktion  $I(\vec{q}, t)$  und
- der Strukturfaktor  $S(\vec{q}, \omega)$ , der die Intensitätsverteilung gestreuter Teilchen bei herkömmlichen Streuexperimenten beschreibt.

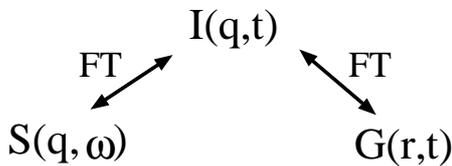


Abbildung 2.4: Zusammenhang zwischen den Größen, die die Struktur eines Vielkörpersystems beschreiben.

Die drei eben genannten Größen stellen äquivalente Beschreibungen der Struktur eines Vielkörpersystems dar und lassen sich durch Fouriertransformation zwischen Orts- und Impulsraum bzw. Zeit- und Energieraum ineinander überführen.<sup>5</sup>

Bei Streuexperimenten, die das Spinecho-Prinzip benutzen, um energieaufgelöst die Dynamik eines Systems zu untersuchen, besteht das Mess-Signal aus der Polarisation des Strahls nach dem Durchqueren der gesamten Spinecho-Strecke.

Im Falle des longitudinalen Spinechos entspricht dieses Signal gerade der Intermediären Streufunktion  $I(\vec{q}, t)$ . Dies gilt sowohl für Streuung an Festkörpern mit Neutronen [2] als auch im Falle der Streuung an Oberflächen mit  $^3\text{He}$ -Atomen [17, 6]. In beiden Fällen erhält man Informationen über zeitliche Korrelationen in beziehungsweise auf der Probe, was darin begründet ist, dass – wie schon in Kapitel 1 beschrieben – zwei longitudinal getrennte Wellenpakete eines Strahlteilchens am gleichen Ort der Probe zu unterschiedlichen Zeitpunkten eintreffen und streuen. Es wird also die zeitliche Kohärenz bei gleichem Impulsübertrag  $\vec{q}$  überprüft, daher der Übergang von  $(\vec{q}, \omega)$  zu den Parametern  $(\vec{q}, t)$ . Die Zeitdifferenz zwischen den beiden Streuvorgängen entspricht gerade der schon genannten Spinecho-Zeit  $\tau_{SE}$ .

Bei transversalen Spinecho-Experimenten, durchgeführt mit Neutronen unter Kleinwinkelstreuung, konnte dagegen gezeigt werden, dass das Mess-Signal, die Polarisation, proportional zur Korrelationsfunktion  $G(\vec{r}, t)$  ist [11]. Der Parameterwechsel von  $(\vec{q}, \omega)$  im herkömmlichen Fall zu  $(\vec{r}, t)$  im Fall des transversalen Spinechos lässt sich dadurch anschaulich erklären, dass die Aufspaltung der Wellenpakete eines Teilchens nun sowohl longitudinale als auch transversale Komponenten bezüglich der Ausbreitungsrichtung besitzt: Im Allgemeinen streuen beide Wellenpakete an unterschiedlichen Orten mit Abstand  $\vec{r}'$  zu unterschiedlichen Zeiten.

<sup>5</sup> $\hbar\omega$  bezeichnet den bei der Streuung auftretenden Energieübertrag,  $\vec{q}$  den dazugehörigen Impulsübertrag.

### 2.3.1 Begründung für die Verwendung des Fahrplanmodells

Die Bornsche Näherung erster Ordnung, mit der sich ein Streuprozess störungstheoretisch in Raum und Zeit beschreiben lässt, führt auf folgende Form der Lippmann-Schwinger-Gleichung, die die gestreute Wellenfunktion  $\Psi_{sc}$  beschreibt:

$$\Psi_{sc}(\vec{r}_D, t_D) = \int K(\vec{r}_D, t_D; \vec{r}_s, t_s) V(\vec{r}_s, t_s) K(\vec{r}_s, t_s; \vec{r}_0, t_0) \Psi_0(\vec{r}_0, t_0) d\vec{r}_s dt_s. \quad (2.12)$$

Der Term nullter Ordnung in der Bornschen Reihe wurde vernachlässigt, da er nur Informationen über das ungestörte System, also ohne Wechselwirkung mit dem Potenzial  $V(\vec{r}_s, t_s)$ , enthält. Lediglich Terme höherer Ordnung tragen die gewünschte Information. Auf experimenteller Seite führt das zu der Einschränkung, nicht im geraden Strahl (im Falle von Neutronen als Strahlteilchen) bzw. nicht im spekularen Reflex<sup>6</sup> bei Oberflächenstreuung mit Atomen zu messen.

Gl. (2.12) ist so zu verstehen, dass eine einlaufende Wellenfunktion  $\Psi_0(\vec{r}_0, t_0)$  von  $(\vec{r}_0, t_0)$  zum Ort der Streuung  $(\vec{r}_s, t_s)$  propagiert. Dort findet die Wechselwirkung mit dem Potenzial  $V(\vec{r}_s, t_s)$  statt. Schließlich propagiert die Wellenfunktion zum Ort der Detektion  $(\vec{r}_D, t_D)$ . Um die endliche Ausdehnung des Streuers und die endliche Wechselwirkungsdauer zu berücksichtigen, erfolgt die Integration über  $\vec{r}_s$  und  $t_s$ .

Die Feynmansche Interpretation der Quantenmechanik benutzt Pfadintegrale, um die Propagatoren  $K(\vec{r}_2, t_2; \vec{r}_1, t_1)$  zu beschreiben. Es lässt sich zeigen, dass dieselbe Form der Propagatoren resultiert [13], wenn lediglich klassische Pfade, also jene mit extremaler Wirkung berücksichtigt werden. Gerade dies wird beim Fahrplan-Modell ausgenutzt. Die Ergebnisse bleiben auch dann korrekt, wenn die quantenmechanische Drehimpulsalgebra angewandt wird.

Wenn sich die Wellenpakete als ebene Wellen behandeln lassen, nehmen die Propagatoren folgende Form an:

$$K(\vec{r}_2, t_2; \vec{r}_1, t_1) = \exp\left(i\vec{k} \cdot (\vec{r}_2 - \vec{r}_1) - \frac{i}{\hbar} E(t_2 - t_1)\right). \quad (2.13)$$

Unter Vernachlässigung der Form der Wellenpakete<sup>7</sup> wird die aufzustellende Streutheorie zwar nicht die Form der Spinecho-Gruppen beschreiben, sehr wohl aber die Position der Spinecho-Punkte vorhersagen.

Der Erwartungswert des Messoperators  $\mathcal{M}$  nimmt bei Berücksichtigung der endlichen Integrationszeit und der endlichen Öffnung eines „realen“ Detektors folgende Form an:

$$\langle \mathcal{M} \rangle = \int \langle \Psi_{sc}(\vec{r}_D, t_D) | \mathcal{M} | \Psi_{sc}(\vec{r}_D, t_D) \rangle d\vec{r}_D dt_D. \quad (2.14)$$

Die „Realität“ des Detektors führt zur Integration über  $\vec{r}_D$  und  $t_D$ . Obige Gleichung führt unter anderem auf Interferenzterme der Form  $\Psi_{sc}^{(i)} \Psi_{sc}^{(j)*}$ .

### 2.3.2 Die Interferenzterme

Um diese Interferenzterme aufstellen zu können, muss bei dem von einem Wellenpaket in der Spinecho-Streugeometrie zurückgelegten Weg unterschieden werden zwischen Wegstrecken, die innerhalb eines Potenzials verlaufen, und solchen, die im potenzialfreien Raum verlaufen.

Exemplarisch wird dazu in Abb. 2.5 der Weg des Zustands  $|i\rangle$  durch die Spinecho-Anordnung verfolgt:  $|i\rangle$  mit Wellenvektor  $\vec{k}$  und Energie  $E$  durchläuft die erste Spinecho-Spule, in der die Phase  $\Phi_i^{(1)}$  aufgesammelt wird. Die Wegstrecke ist dabei so gewählt, dass sie vom Eintritt in den Feldbereich bis zum Punkt  $(\vec{r}_{\text{out}}^i, t_{\text{out}}^i)$  reicht. Damit kann zur Bestimmung der Phasendifferenzen direkt auf Gl. (2.8) zurückgegriffen

<sup>6</sup>Damit ist der Bragg-Reflex nullter Ordnung gemeint, für den  $\theta_i = \theta_f$  gilt.  $\theta_{i,f}$  sind Einfallswinkel und Ausfallswinkel des Strahls bei Streuung an der Oberfläche. Siehe dazu auch Abb. 2.6.

<sup>7</sup>Die Form der Wellenpakete wird durch die Geschwindigkeitsverteilung des Strahls bestimmt.

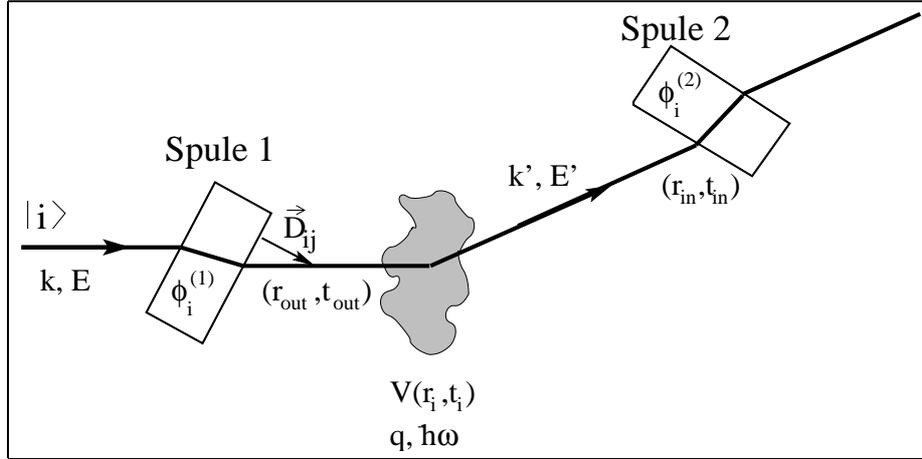


Abbildung 2.5: Schematische Darstellung einer Spinecho-Streugeometrie.

werden. Von diesem Punkt läuft der Zustand im feldfreien Raum zum Ort der Streuung  $\vec{r}_i$ , die zum Zeitpunkt  $t_i$  stattfindet. Hier ändert sich der Wellenvektor um  $\vec{q}$  beim Streuprozess (bei inelastischer Streuung ändert sich zusätzlich die Energie um  $\hbar\omega$ ). Der „kinetische“ Zustand von  $|i\rangle$  lässt sich danach durch

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}, \quad E' = E + \hbar\omega \quad (2.15)$$

beschreiben. Mit neuem Wellenvektor  $\vec{k}'$  und neuer Energie  $E'$  propagiert der Zustand weiter durch den feldfreien Raum bis zur Stelle  $(\vec{r}_{in}^i, t_{in}^i)$ . Dort tritt er in die zweite Spinecho-Spule ein, wo er die Phase  $\Phi_i^{(2)}$  aufammelt.

Nach dem eben Gesagten nimmt Gl. (2.12) folgende Form an:

$$\Psi_{sc}^{(i)}(\vec{r}_D, t_D) = \int e^{i\Phi_i^{(2)}} e^{i\vec{k}'(\vec{r}_{in}^i - \vec{r}_i) - i/\hbar E'(t_{in}^i - t_i)} V(\vec{r}_i, t_i) e^{i\vec{k}(\vec{r}_i - \vec{r}_{out}^i) - i/\hbar E(t_i - t_{out}^i)} e^{i\Phi_i^{(1)}} d\vec{r}_i dt_i. \quad (2.16)$$

Die Interferenzterme zwischen Zustand  $|i\rangle$  und  $|j\rangle$  ergeben sich dann unter der Annahme, dass es sich um verschiedene Zustände  $i \neq j$  handelt, die beide in den gleichen Kanal  $\vec{k}'_i = \vec{k}'_j$  gestreut werden, und dass die Wechselwirkung während des Streuvorgangs nichtmagnetischer Natur ist, wie folgt:

$$\Psi_{sc}^{(i)} \Psi_{sc}^{(j)*} = \iint e^{i\vec{q}(\vec{r}_j - \vec{r}_i) - i\omega(t_j - t_i)} V(\vec{r}_i, t_i) V^*(\vec{r}_j, t_j) e^{i(\Phi_{ij}^{(2)} + \Phi_{ij}^{(1)})} e^{-i(\vec{k}' \vec{D}_{ij}^{(2)} + \vec{k} \vec{D}_{ij}^{(1)})} d\vec{r}_j dt_j d\vec{r}_i dt_i. \quad (2.17)$$

Die Phasendifferenzen  $\Phi_{ij}^{(1),(2)}$  und Versätze  $\vec{D}_{ij}^{(1),(2)}$  in der ersten bzw. zweiten Spule, gekennzeichnet durch (1) bzw. (2), haben die in Abschnitt 2.1 in den Gleichungen (2.6) und (2.8) angegebene Form. Ihre Größe hängt von experimentellen Parametern wie dem Verkippungswinkel  $\theta$  und der Magnetfeldstärke in den Spinecho-Spulen ab. Diese Parameter müssen so gewählt sein, dass die zweite Spule den Versatz, den die erste erzeugt, kompensieren kann. Dazu muss die geometrische Spinecho-Bedingung erfüllt sein, nur dann kann eine Interferenz beobachtet werden.

Ergänzend zu Gl. (2.9) ist bei der Platzierung eines Streuers zwischen beiden Spinecho-Spulen zu berücksichtigen, dass durch die Streuung der Wellenvektor  $\vec{k}$  seine Richtung ändert, im Falle einer inelastischen Streuung gilt dies auch für seinen Betrag. Deshalb unterscheidet sich der Versatz  $\vec{D}_{ij}^{(1)}$  vor der Streuung vom Versatz  $\vec{D}_{ij}^{(sc)}$  nach der Streuung. Aus diesem Grund lautet die geometrische Spinecho-Bedingung im Falle der Streuung

$$\vec{D}_{ij}^{(sc)} = -\vec{D}_{ij}^{(2)}. \quad (2.18)$$

Da die explizite Gestalt von  $\vec{D}_{ij}^{(sc)}$  von der Wahl der Streugeometrie abhängt, werden im nächsten Abschnitt zwei mögliche Geometrien erläutert.

### 2.3.3 Allgemeines zu den Streugeometrien

In Abb. 2.6 ist eine Übersicht über die Parameter gegeben, die eine Oberflächenstreuung charakterisieren. Die Wellenvektoren der einlaufenden und gestreuten Wellenfunktion sind hier mit  $p_i$  und  $p_f$  bezeichnet. Alle Größen vor der Streuung tragen den Index  $i$ , die entsprechenden Größen nach der Streuung werden mit dem Index  $f$  versehen.

Die beiden im Folgenden beschriebenen Streugeometrien beschränken sich im Gegensatz zu der in der Abbildung 2.6 gezeigten allgemeinen Situation auf den Spezialfall  $\xi = \pi/2$ . In einem solchen Fall redet man von „in-plane“-Streuung. Die Streuebene, gegeben durch die Wellenvektoren von einlaufender und gestreuter Wellenfunktion, steht dann senkrecht zur Oberfläche.

Wie schon in Abb. 2.2 wird auch bei der Beschreibung der Streugeometrien das Koordinatensystem so orientiert, dass  $x$  durch die Polarisationsrichtung gegeben ist,  $y$  die Ausbreitungsrichtung des Strahls festlegt und  $z$  die Richtung des Magnetfelds. Die Verkippung der Spinecho-Spulen erfolgt in der  $xy$ -Ebene, die Magnetfeldrichtung bleibt davon unberührt. Wie aus Abschnitt 2.1 zu erfahren war, erfolgt der Versatz der Wellenpakete genau in dieser Ebene. Daher wird im Folgenden die  $xy$ -Ebene als Aufspaltungsebene bezeichnet.

Der Unterschied zwischen den zu beschreibenden Geometrien liegt in der Orientierung von Aufspaltungs- und Streuebene: Während in der einen Geometrie die Aufspaltungs- und Streuebene zusammenfallen, stehen sie in der anderen senkrecht aufeinander. Im Folgenden werden beide Geometrien beschrieben, dabei wird jeweils der Versatz der Teilwellenpakete bestimmt, die Spinecho-Bedingung explizit formuliert, und die Interferenzterme unter Berücksichtigung der endlichen Integrationszeit und Ausdehnung eines „realen“ Detektors ermittelt. In der vorliegenden Arbeit werden rechtshändige Koordinatensysteme verwendet. Dadurch unterscheiden sich die in [18] genannten Ergebnisse an einigen Stellen durch Terme mit anderem Vorzeichen von den hier ermittelten Ergebnissen, nämlich alle Terme, in die ein Versatz in  $x$ -Richtung eingeht.

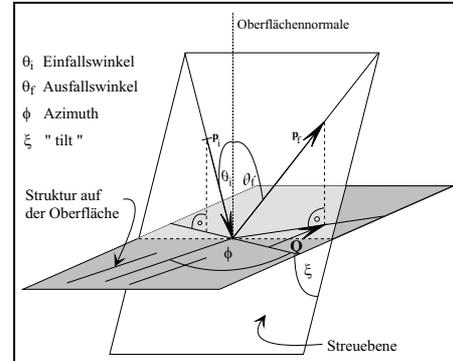


Abbildung 2.6: Parameter bei der Streuung an einer Oberfläche. Aus [17].

### 2.3.4 Aufspaltungs- und Streuebene parallel

Zur Beschreibung der Wegstrecken und Phasenschübe werden zwei Koordinatensysteme eingeführt (siehe dazu Abb. 2.7<sup>8</sup>). Vor der Streuung der einzelnen Zustände wird deren Entwicklung in einem ungestrichenen System  $(x, y, z)$  beschrieben. Dieses Koordinatensystem spannt ein Dreibein auf, dessen Achsen durch die Polarisationsrichtung des Strahls, die Propagationsrichtung der Wellenpakete und die Magnetfeldrichtung gegeben sind (in dieser Reihenfolge). Nach der Streuung wird ein gestrichenes System  $(x', y', z')$  benutzt. Die  $z$ -Achsen beider Dreibeine sind identisch,  $z = z'$ , beide werden durch die Magnetfeldrichtung der ersten Spinecho-Spule vorgegeben.  $y'$  bezeichnet die Ausbreitungsrichtung der Wellenpakete nach dem jeweiligen Streuvorgang.

Diese Streugeometrie entspricht der von A. Reiner vorgeschlagenen Geometrie [8]. Sie zeichnet sich dadurch aus, dass die Quantisierungsachsen der beiden Spinecho-Spulen übereinstimmen, da die Magnetfeldrichtungen beider Spulen immer antiparallel orientiert sind, und zwar unabhängig vom Streuwinkel.

Dies stellt einen entscheidenden Unterschied zum longitudinalen Spinecho dar, bei dem die Quantisierungsachse von erster und zweiter Spule nicht mehr übereinstimmen, sobald an einer Oberfläche gestreut

<sup>8</sup>Beachte, dass im Gegensatz zu [18] hier rechtshändige Koordinatensysteme verwendet werden.

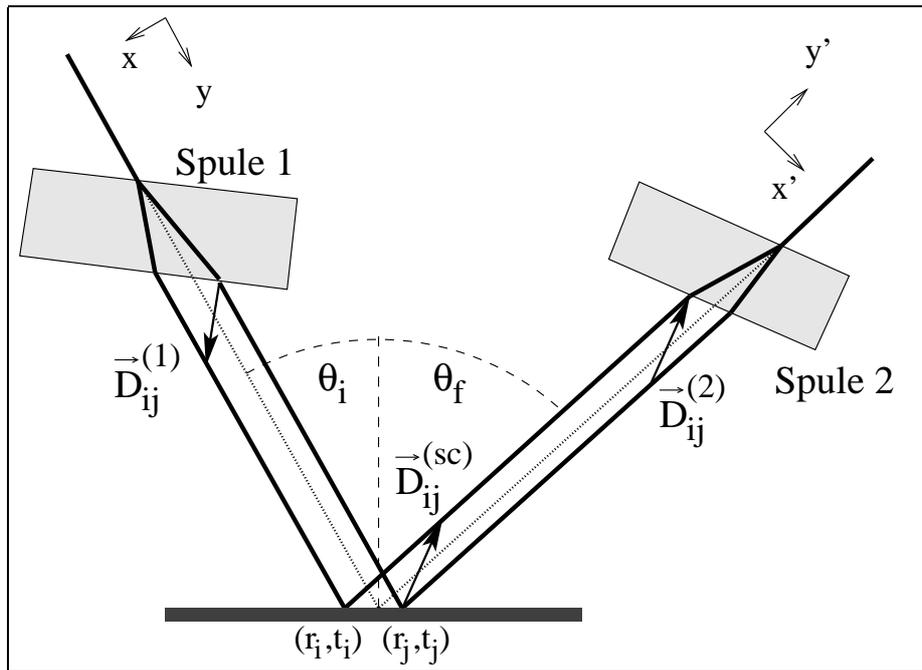


Abbildung 2.7: Streugeometrie im Fall für kongruente Streu- und Aufspaltungsebene. Die Beschreibung erfolgt vor der Streuung im ungestrichenen Koordinatensystem  $(x, y, z)$ , nach der Streuung im gestrichenen  $(x', y', z')$ . Dabei bezeichnet  $y$  bzw.  $y'$  die Ausbreitungsrichtung der Wellenpakete vor respektive nach der Streuung. Die  $z$ - und  $z'$ -Achse stehen bei dieser Geometrie parallel zueinander und weisen, wie die Quantisierungsachse des Magnetfelds, aus der Blattebene heraus. Die Polarisationsrichtung des Strahls ist sowohl vor als auch nach der Streuung durch die  $x$ -Richtung im ungestrichenen Koordinatensystem gegeben. Die Abbildung macht anschaulich deutlich, dass der Versatz der beiden Wellenpakete nach der Streuung von den Einfallswinkel- und Ausfallswinkeln abhängt.

wird. Aus diesem Grund ist beim longitudinalen Spinecho eine Streuspule nötig, die, im klassischen Bild der Larmorpräzessionen gesprochen, die Präzessionsebene der Spins so korrigiert, dass sie nach der Streuung wieder senkrecht zur Flugrichtung des Strahls orientiert ist [6].

Bei der Geometrie mit identischer Aufspaltungs- und Streuebene kann daher auf den Einsatz einer solchen Streuspule verzichtet werden. Allerdings muss die Stirnflächennormale der zweiten Spule in Abhängigkeit vom Streuwinkel so eingestellt werden, dass sie mit der Richtung des Versatzes zwischen beiden Wellenpaketen nach der Streuung  $\vec{D}_{ij}^{(sc)}$  übereinstimmt. Nur dann kann die geometrische Spinecho-Bedingung (2.18) erfüllt werden. Außerdem muss die Polarisationsanalyse in derselben Richtung erfolgen, in der der Strahl polarisiert wurde, nämlich in  $x$ -Richtung.

### 2.3.4.1 Bestimmung des Versatzes $\vec{D}_{ij}^{(sc)}$ nach der Streuung

Aus Abb. 2.8 ist detailliert zu erkennen, wie sich der Versatz  $\vec{D}_{ij}^{(1)}$  bei der Streuung verändert. Zur Zeit  $t_i$ , während  $|i\rangle$  am Punkt  $C$  der Oberfläche streut, befindet sich  $|j\rangle$  noch am Punkt  $A$ . Bis  $|j\rangle$  zum Zeitpunkt  $t_j$  am Punkt  $D$  gestreut wird, muß der Zustand noch den Weg  $\vec{AB} + \vec{BD}$  mit dem Wellenvektor  $\vec{k}$  zurücklegen.

Im Fahrplanmodell können bei klassischer Betrachtung der Fortbewegung von  $|i\rangle$  und  $|j\rangle$  die Differenz im Ort  $\vec{r}_j - \vec{r}_i$  und die Zeitdifferenz  $t_j - t_i$  für die beiden Streuvorgänge bestimmt werden. Die Differenz  $t_j - t_i$  ergibt sich aus  $\frac{m}{\hbar|\vec{k}|}(\vec{AB} + \vec{BD})$ . Die vektorielle Differenz  $\vec{r}_j - \vec{r}_i$  entspricht gerade der Strecke

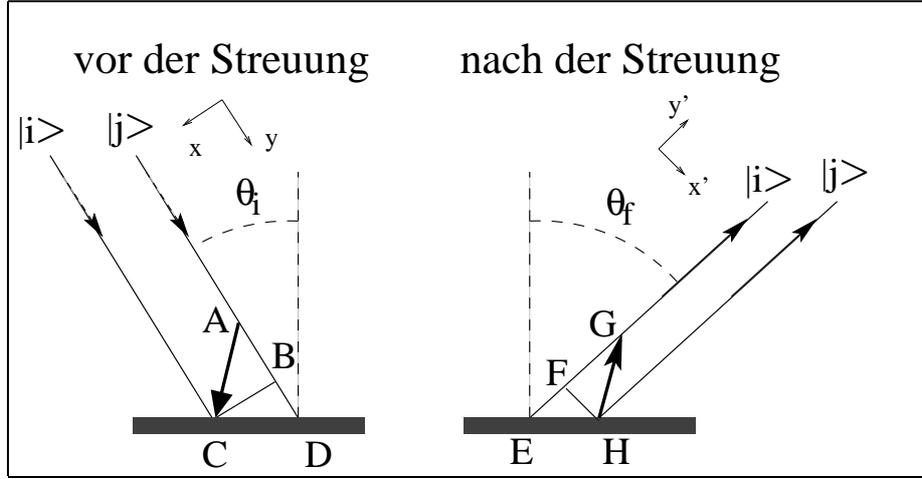


Abbildung 2.8: Zur Veränderung des Versatzes der beiden Wellenpakete  $\vec{D}_{ij}^{(1)}$  vor der Streuung zu  $\vec{D}_{ij}^{(sc)}$  nach der Streuung. Links die Situation vor der Streuung: Der Vektor längs der Strecke  $\overline{AC}$  bezeichnet den Versatz  $\vec{D}_{ij}^{(1)}$ . Nachdem  $|i\rangle$  zum Zeitpunkt  $t_i$  an der Oberfläche gestreut wurde, muß  $|j\rangle$  noch den Weg  $\overline{AB} + \overline{BD}$  zurücklegen.  $\overline{AB}$  wird durch die  $y$ -Komponente des Versatzes vor der Streuung bestimmt,  $\overline{BD}$  durch den Einfallswinkel  $\theta_i$ . Rechts die Situation nach der Streuung: Zum Zeitpunkt  $t_j$ , zu dem  $|j\rangle$  an der Oberfläche streut, hat  $|i\rangle$  schon den Weg  $\overline{EF} + \overline{FG}$  zurückgelegt. Der Versatz  $\vec{D}_{ij}^{(sc)}$  setzt sich zusammen aus der  $y'$ -Komponente  $\overline{FG}$  und der  $x'$ -Komponente  $\overline{FH}$ . Der Ort  $E$  rechts entspricht dem Punkt  $C$  links. Gleiches gilt für  $H$  und  $D$ .

$\overline{CD} = \overline{EH}$ . Mit der Form von  $\vec{D}_{ij}^{(1)}$  nach (2.6) mit (2.2) ergibt sich schließlich folgendes Bild:

$$\begin{aligned} |\vec{r}_j - \vec{r}_i| &= \frac{l \tan \theta}{2 \cos \theta} \frac{E_{ji}}{E} \frac{1}{\cos \theta_i} \\ t_j - t_i &= \frac{m}{\hbar |\vec{k}|} \frac{l}{2 \cos \theta} \frac{E_{ji}}{E} (1 + \tan \theta \tan \theta_i). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Wenn zum Zeitpunkt  $t_j$  der Zustand  $|j\rangle$  an der Oberfläche streut (Punkt  $D$  bzw.  $H$  in Abb. 2.8), hat  $|i\rangle$  schon den Weg  $\frac{\hbar}{m} (t_j - t_i) \vec{k}$  zurückgelegt. Der Versatz der beiden Wellenpakete nach der Streuung lässt sich damit im gestrichelten Koordinatensystem formulieren:

$$\vec{D}_{ij}^{(sc)} = \frac{l}{2 \cos^2 \theta} \frac{E_{ji}}{E} \begin{pmatrix} -\sin \theta \frac{\cos \theta_f}{\cos \theta_i} \\ \frac{|\vec{k}'|}{|\vec{k}|} (\cos \theta + \sin \theta \tan \theta_i) - \sin \theta \frac{\sin \theta_f}{\cos \theta_i} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

Für eine ausführliche Herleitung sei auf Anhang A.2 verwiesen. Der Versatz nach der Streuung ist demnach abhängig von diversen experimentellen Parametern. Dazu zählen der Kippwinkel  $\theta$  der Stirnfläche der ersten Spinecho-Spule bezüglich der Strahlrichtung, implizit über  $E_{ji}(B)$  die Stärke des Magnetfelds der ersten Spule und ein eventueller kleiner Energieübertrag bei der Streuung ( $k'/k \simeq 1 + \frac{\hbar \omega}{2E}$ ). Weiterhin hängt  $\vec{D}_{ij}^{(sc)}$  vom Einfallswinkel  $\theta_i$  und vom Ausfallswinkel  $\theta_f$  ab (auf diese Tatsache wird am Ende von Abschnitt 2.3.4 noch einmal eingegangen).

Der Energieübertrag bei der Streuung kann bei der Festlegung der Spulenparameter als experimentell kontrollierbare Größe verstanden werden: Bei festgehaltenem Einfalls- und Ausfallswinkel führen verschiedene Energieüberträge zu unterschiedlichen Spinecho-Punkten. Durch entsprechende Spuleneinstellungen kann ausgewählt werden, auf welchen Spinecho-Punkt – und damit auf welchen Energieübertrag – fokussiert werden soll.

### 2.3.4.2 Die Spinecho-Bedingung

Die allgemeine Form der geometrischen Spinecho-Bedingung bei Streuexperimenten mit transversalem Spinecho lautet

$$\vec{D}_{ij}^{(sc)} = -\vec{D}_{ij}^{(2)}. \quad (2.21)$$

Sie gibt an, bei welchen Parametereinstellungen von Kippwinkel  $\theta$  und Magnetfeldstärken der ersten und zweiten Spinecho-Spule die Überlagerung der beiden Zustände  $|i\rangle$  und  $|j\rangle$  maximal wird. Genau bei diesen Parametereinstellungen ist der Spinecho-Punkt zu finden.

Im Fall eines Spinecho-Experiments am geraden Strahl (also ohne Streuung) sind die Spinecho-Punkte dadurch gekennzeichnet, dass sich die Phasen, die die Zustände  $|i\rangle$  und  $|j\rangle$  beim Durchlaufen der Spinecho-Anordnung aufsummieren, gerade kompensieren. Die Phasendifferenz für zwei Zustände am Spinecho-Punkt ergibt Null.

Die hier betrachtete Streugeometrie erzeugt aber Phasendifferenzen nicht nur durch die Spinecho-Spulen, sondern auch durch die unterschiedlichen Weglängen der beiden Zustände. Maßgeblich beteiligt am Zustandekommen von Phasendifferenzen sind die in Abb. 2.8 gezeigten Wegstrecken  $\overline{BD}$  für  $|j\rangle$  und  $\overline{EF}$  für  $|i\rangle$ . Soll elastisch gemessen werden, was insbesondere  $|\vec{k}'| \equiv |\vec{k}|$  zur Bedingung macht, so verschwindet die durch Weglängenunterschiede verursachte Phasendifferenz gerade dann, wenn Einfallswinkel gleich sind,  $\theta_i = \theta_f$ . Durch genau diesen Zusammenhang ist der spekulare gestreute Strahl gekennzeichnet, der aber innerhalb des Ansatzes dieser Streutheorie ausgeschlossen ist, da sonst die Gültigkeit von Gl. (2.12) nicht gegeben ist. Deshalb wird verlangt, nicht direkt im spekularen Reflex, sondern dicht daneben zu messen. Für die Beziehung zwischen Einfallswinkel und Ausfallswinkel bedeutet das:

$$\theta_f = \theta_i + \alpha, \quad (2.22)$$

wobei  $\alpha$  klein sein soll. Gl. (2.20) lässt sich dann nach  $\alpha$  entwickeln, sodass für den gestreuten Versatz bei elastischer Streuung ( $|\vec{k}'| \equiv |\vec{k}|$ ) in erster Näherung gilt:

$$\vec{D}_{ij}^{(sc)} = \frac{l}{2 \cos \theta} \frac{E_{ji}}{E} \begin{pmatrix} \tan \theta (\alpha \tan \theta_i - 1) \\ 1 - \alpha \tan \theta \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.23)$$

Damit ergeben sich für die Spinecho-Bedingung (2.21) zwei Gleichungen,

$$\begin{aligned} \frac{l E_{ji}^{(2)}}{2 \cos \theta^{(2)}} &= -\frac{l E_{ji}^{(1)}}{2 \cos \theta^{(1)}} (1 - \alpha \tan \theta^{(1)}) \quad \text{sowie} \\ \tan \theta^{(2)} &= \frac{\tan \theta^{(1)} (1 - \alpha \tan \theta_i)}{1 - \alpha \tan \theta^{(1)}} \simeq \tan \theta^{(1)} \left( 1 + \alpha (\tan \theta^{(1)} - \tan \theta_i) \right). \end{aligned} \quad (2.24)$$

Bei der zweiten Gleichung in (2.24) wurde die Tatsache ausgenutzt, dass der Ausdruck für  $\vec{D}_{ij}^{(sc)}$  in (2.23) nur in erster Ordnung gültig ist. Die Form der Gleichungen in (2.24) ist so gewählt, dass die Phasendifferenzen  $\Phi_{ij}^{(2)}$  und  $\vec{k}' \vec{D}_{ij}^{(2)}$  in Gl. (2.17) einfach bestimmt werden können:

$$\begin{aligned} \Phi_{ij}^{(2)} &= -\frac{|\vec{k}'| l}{\cos \theta^{(2)}} \frac{E_{ij}^{(2)}}{E} = \frac{|\vec{k}'| l}{\cos \theta^{(1)}} \frac{E_{ij}^{(1)}}{E} (1 - \alpha \tan \theta^{(1)}), \\ \vec{k}' \vec{D}_{ij}^{(2)} &= \frac{|\vec{k}'| l}{\cos \theta^{(2)}} \frac{E_{ij}^{(2)}}{2 E} = -\frac{|\vec{k}'| l}{\cos \theta^{(1)}} \frac{E_{ij}^{(1)}}{2 E} (1 - \alpha \tan \theta^{(1)}). \end{aligned} \quad (2.25)$$

Dabei wurde, wie auch in (2.24) die Indizierung (1) bzw. (2) zur Unterscheidung der Parameter von erster und zweiter Spinecho-Spule eingeführt. Die zweite Gleichung in (2.25) gilt in dieser Form, weil der Wellenvektor nach der Streuung im gestrichenen System in Richtung der  $y'$ -Achse orientiert ist, und damit diese Komponente von  $\vec{D}_{ij}^{(2)}$  herausprojiziert.

### 2.3.4.3 Auswirkungen eines „realen“ Detektors

Durch die endliche Integrationszeit eines „realen“ Detektors werden nicht nur Interferenzen zur Zeit  $t_D$  nachgewiesen, sondern auch noch für Teilchen, die etwas schneller oder langsamer sind im Vergleich zu denen, die elastisch gestreut werden. Das bedeutet, dass außer den elastischen Prozessen auch solche registriert werden, die inelastischer Natur sind. Ist der Energieübertrag klein ( $\hbar\omega \ll E$ ), dann gilt in erster Ordnung

$$k' \simeq k \left( 1 + \frac{\hbar\omega}{2E} \right), \quad (2.26)$$

womit die Integration über  $t_D$  durch eine Integration über  $\omega$  ersetzt werden kann.

Durch die endliche Ausdehnung des Detektors werden auch Teilchen registriert, die nicht exakt in Richtung von  $\vec{k}'$  gestreut werden. Es werden nicht nur Interferenzen am Ort  $\vec{r}_D$  gemessen, sondern es wird über die gesamte Öffnungsfläche des Detektors integriert. Dies lässt sich auch so verstehen, dass nicht nur Teilchen nachgewiesen werden, die der Streubedingung  $\theta_f = \theta_i + \alpha$  gehorchen, sondern auch diejenigen, die geringfügig von diesem Winkel abweichen:  $\theta_f \rightarrow \theta_f \pm \delta\alpha$ , wobei  $\delta\alpha$  klein ist.

Ein solches, vom idealen Ausfallswinkel abweichendes Teilchen sieht die Stirnfläche der zweiten Spinecho-Spule um maximal  $\delta\alpha$  verstellt gegenüber einem Teilchen, für das die Streubedingung exakt erfüllt ist. Der Kippwinkel der zweiten Spule geht in die zu berechnenden Phasendifferenzen in Form von  $1/\cos\theta^{(2)}$ -Termen ein. Durch die Abweichung  $\delta\alpha$  wird dieser Term folgendermaßen modifiziert:

$$\frac{1}{\cos\theta^{(2)}} \rightarrow \frac{1}{\cos(\theta^{(2)} + \delta\alpha)} = \frac{1}{\cos\theta^{(2)}} (1 + \delta\alpha \tan\theta^{(2)}). \quad (2.27)$$

Durch den zusätzlichen Streuwinkel  $\delta\alpha$  ergibt sich ein zusätzlicher Impulsübertrag  $\delta q_{\parallel}$ , der berücksichtigt werden muss. Aus der Impulserhaltung  $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}$  kann die entsprechende Erhaltungsgleichung für Impulskomponenten parallel zur Oberfläche bestimmt werden, die  $\delta q_{\parallel}$  berücksichtigt:

$$\sin(\theta_f + \delta\alpha) k = \sin\theta_i k + q_{\parallel} + \delta q_{\parallel}. \quad (2.28)$$

Mit  $q_{\parallel}$  ist der Impulsübertrag im Fall  $\delta\alpha = 0$  bezeichnet. Mit dieser Gleichung ergibt sich folgender Zusammenhang zwischen  $\delta\alpha$  und  $\delta q_{\parallel}$  (für Details wird auf Anhang A.3 verwiesen):

$$\delta\alpha = \frac{\delta q_{\parallel}}{\cos\theta_i k}. \quad (2.29)$$

Zusammenfassend lassen sich also die Integrationen über die endliche Integrationszeit  $t_D$  und die endliche Öffnung des Detektors durch Integrationen über den Energieübertrag  $\omega$  und den Impulsübertrag  $\delta q_{\parallel}$  ersetzen.

### 2.3.4.4 Bestimmung des Interferenzterms

Unter Berücksichtigung der im vorangegangenen Abschnitt beschriebenen Auswirkungen eines „realen“ Detektors nehmen die Phasendifferenzen aus (2.25) der zweiten Spinecho-Spule folgende Form an:

$$\begin{aligned} \Phi_{ij}^{(2)} &= -\Phi_{ij}^{(1)} + \frac{kl}{\cos\theta^{(1)}} \frac{E_{ij}^{(1)}}{E} \left( \frac{\hbar\omega}{2E} - \alpha \tan\theta^{(1)} - \frac{\delta q}{k \cos\theta_i} \tan\theta^{(1)} \right), \\ \vec{k}' \vec{D}_{ij}^{(2)} &= -\vec{k} \vec{D}_{ij}^{(1)} + \frac{kl}{2 \cos\theta^{(1)}} \frac{E_{ij}^{(1)}}{E} \left( \frac{\hbar\omega}{2E} - \alpha \tan\theta^{(1)} - \frac{\delta q}{k \cos\theta_i} \tan\theta^{(1)} \right). \end{aligned} \quad (2.30)$$

Die Entwicklung der Phasen in erster Ordnung kann Anhang A.4 entnommen werden. Aus den Gleichungen kann ist ersichtlich, dass die zweite Spule die von der ersten Spule erzeugte Phasendifferenz kompensieren kann. Allerdings existieren bei der hier behandelten Geometrie aufgrund der Streuung Restphasen in  $\alpha$ ,  $\delta q$  und  $\omega$ . Abschließend gilt also für die Phasendifferenzen aus (2.17):

$$\Phi_{ij}^{(1)} + \Phi_{ij}^{(2)} - \left( \vec{k} \vec{D}_{ij}^{(1)} + \vec{k}' \vec{D}_{ij}^{(2)} \right) = \frac{k l}{2 \cos \theta^{(1)}} \frac{E_{ij}^{(1)}}{E} \left( \frac{\hbar \omega}{2E} - \alpha \tan \theta^{(1)} - \frac{\delta q}{k \cos \theta_i} \tan \theta^{(1)} \right). \quad (2.31)$$

Damit lässt sich der Interferenzterm von  $|i\rangle$  und  $|j\rangle$  für die Streugeometrie mit paralleler Anordnung von Streu- und Aufspaltungsebene formulieren:

$$\begin{aligned} \int d\omega d(\delta q) \Psi_{sc}^{(i)} \Psi_{sc}^{(j)*} &= \int d\omega d(\delta q) \int d\vec{r}_i dt_i \int d\vec{r}_j dt_j V(\vec{r}_i, t_i) V^*(\vec{r}_j, t_j) \\ &\times \exp \left( i(\alpha \cos \theta_i + \delta q)(\vec{r}_j - \vec{r}_i) - i\omega(t_j - t_i) \right) \\ &\times \exp \left( i \frac{k}{2 \cos \theta^{(1)}} \frac{l E_{ij}^{(1)}}{E} \left( \frac{\hbar \omega}{2E} - \alpha \tan \theta^{(1)} - \frac{\delta q}{k \cos \theta_i} \tan \theta^{(1)} \right) \right). \end{aligned} \quad (2.32)$$

Da  $\vec{r}_j - \vec{r}_i$  nur die in der Oberfläche liegende Komponente  $\vec{q}_{\parallel}$  von  $\vec{q}$  herausprojiziert, wurde in obiger Gleichung  $\vec{q}_{\parallel} = \alpha \cos \theta_i + \delta q$  eingesetzt.

Wegen des oszillierenden Charakters der beiden Exponential-Terme ergibt die Integration über  $d\omega$  eine  $\delta$ -Funktion, das gleiche gilt für die Integration über  $d(\delta q)$ :

$$\begin{aligned} d\omega &\longrightarrow \delta(-(t_j - t_i) + \tau) \text{ mit } \tau = \frac{\hbar k l}{2 \cos \theta^{(1)}} \frac{E_{ij}^{(1)}}{2E^2}, \\ d(\delta q) &\longrightarrow \delta \left( (\vec{r}_j - \vec{r}_i) + \vec{R} \right) \text{ mit } R = \frac{l}{2 \cos \theta^{(1)}} \frac{E_{ij}^{(1)}}{E} \frac{\tan \theta^{(1)}}{\cos \theta_i}. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Das Endergebnis erhält man nach einer Integration über  $d\vec{r}_j$  und  $dt_j$ , wobei die Phasen in  $\alpha$  unabhängig von verbleibenden Integrationsvariablen sind und deshalb nicht weiter ausgeführt werden:

$$\int d\omega d(\delta q) \Psi_{sc}^{(i)} \Psi_{sc}^{(j)*} \propto \int d\vec{r}_i dt_i V(\vec{r}_i, t_i) V^*(\vec{r}_i - \vec{R}, t_i + \tau). \quad (2.34)$$

Dieser Gleichung zufolge werden bei der hier gewählten Streugeometrie mit paralleler Anordnung von Streu- und Aufspaltungsebene Informationen über das Streupotenzial  $V(\vec{r}_i, t_i)$  am Ort  $\vec{r}_i$  zum Zeitpunkt  $t_i$  mit Informationen über dieses Streupotenzial  $V(\vec{r}_i - \vec{R}, t_i + \tau)$  an einem um  $\vec{R}$  versetzten Ort und zu einem um  $\tau$  späteren Zeitpunkt korreliert. Bei einem Streuexperiment mit longitudinale Spinecho werden zeitliche Korrelationen überprüft, deren Abstand durch die Spinecho-Zeit gegeben ist. Diese ergibt sich dabei aus dem Versatz der Teilwellenpakete in Strahlrichtung. Wird diese Anschauung auf das transversale Spinecho übertragen, so wird durch den longitudinalen Versatz die Messung zeitlicher Korrelationen möglich. Die Existenz eines transversalen Versatzes ermöglicht die Messung räumlicher Korrelationen.  $\tau$  stellt quasi die Spinecho-Zeit dieses Streuproblems dar,  $\vec{R}$  kann als Spinecho-Abstand interpretiert werden.

Bei der hier beschriebenen Streugeometrie mit paralleler Streu- und Aufspaltungsebene ist diese strikte Trennung von Messung zeitlicher und räumlicher Korrelation allerdings nicht gegeben: Die in Abb. 2.8 gezeigte Wegstrecke  $\overline{BD}$  beeinflusst sowohl  $\vec{r}_j - \vec{r}_i$  als auch  $t_j - t_i$ . Es werden Informationen über räumliche und zeitliche Korrelationen vermischt. Man kann auch davon sprechen, dass durch  $\overline{BD}$  die Phasenschübe, die *physikalisch interessierende* Information enthalten, mit dem rein *apparativ bedingten* Phasenschub vermischt werden. Aus diesem Grund sollte davon abgesehen werden, bei Streuexperimenten mit transversalem Spinecho eine Geometrie wie die gerade beschriebene zu wählen.

Ein weiterer Grund, der gegen die Umsetzung der Geometrie mit parallelen Streu- und Aufspaltungsebenen spricht, wird im Folgenden deutlich: Wie schon vorher erwähnt, hat die Abhängigkeit des gestreuten Versatzes vom Einfallswinkel direkte Konsequenzen auf die experimentelle Umsetzung dieser Streugeometrie. Um die geometrische Spinecho-Bedingung (2.18) erfüllen zu können, sind demnach die Stirnflächen der zweiten Spinecho-Spule so zu gestalten, dass sie auf den gestreuten Versatz ausgerichtet werden können. Eine solche experimentelle Realisierung der zweiten Spinecho-Spule ist mit außerordentlichen Schwierigkeiten verbunden, die es keinesfalls ratsam erscheinen lassen, diese Geometrie zu bevorzugen, nur um auf den Einsatz einer Streuspule verzichten zu können. Hinzu kommt noch, dass bei dieser Geometrie die Analyseinrichtung ebenfalls drehbar auszuführen wäre, da die Polarisationsanalyse in der ursprünglichen  $x$ -Richtung zu erfolgen hat.

### 2.3.5 Aufspaltungsebenen normal zur Streuebene

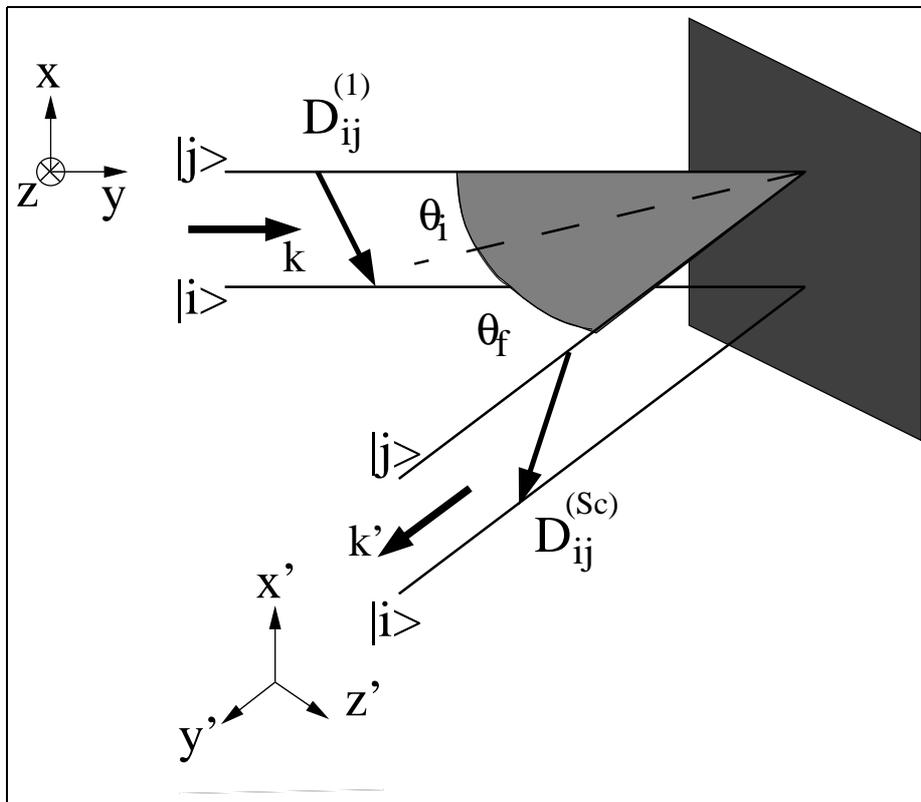


Abbildung 2.9: Streugeometrie mit senkrecht angeordneten Streu- und Aufspaltungsebenen. Wieder wird das ungestrichelte Koordinatensystem vor der Streuung benutzt. Dabei bezeichnet  $x$  die Polarisationsrichtung,  $y$  gibt die Strahlrichtung an, die  $z$ -Achse zeigt aus der Blattebene heraus und beschreibt die Quantisierungsachse des Magnetfelds. Das ungestrichelte Koordinatensystem wird nach der Streuung zur Beschreibung des Problems benutzt. In dieser Geometrie stimmt die  $x$ -Richtung mit der  $x'$ -Richtung überein. Dafür unterscheiden sich die Quantisierungsachsen  $z$  und  $z'$  der beiden Spinecho-Spulen.

Die in diesem Abschnitt beschriebene Streugeometrie unterscheidet sich im Wesentlichen dadurch von der im vorangegangenen Abschnitt behandelten, dass nun die Streu- und Aufspaltungsebenen senkrecht zueinander angeordnet sind. Abb. 2.9 gibt einen Überblick über die vorliegende Geometrie<sup>9</sup>. Auch in diesem Fall werden zwei Koordinatensysteme verwendet, um das Streuproblem zu beschreiben: das ungestrichelte Koordinatensystem vor der Streuung, das gestrichelte danach.

<sup>9</sup>Beachte wieder, dass im Gegensatz zu [18] hier rechtshändige Koordinatensysteme verwendet werden.

Die Definition der Koordinatenachsen folgt der Definition, wie sie bei der Geometrie mit parallelen Streu- und Aufspaltungsebenen benutzt wurde. Im Unterschied zu dieser Geometrie stimmt nun die  $x'$ -Richtung nach der Streuung mit der  $x$ -Richtung vor der Streuung überein. Dies bedeutet, dass die Richtung der Polarisationsanalyse unabhängig vom Streuwinkel ist. Allerdings unterscheiden sich jetzt die Richtungen von  $z$  und  $z'$ , wodurch die Quantisierungsachsen von erster und zweiter Spinecho-Spule in verschiedene Richtungen weisen.

Wie schon im Fall der Streuung mit longitudinalem Spinecho erwähnt, wird durch die unterschiedlichen Quantisierungsachsen der Einsatz einer Streuspule notwendig. Diese Spule bewirkt eine aktive Drehung der Zustände um den Streuwinkel  $\theta = \theta_i + \theta_f$ . Dass der Einsatz einer solchen Spule apparativ einfach zu realisieren und auch theoretisch gut verstanden ist, konnte am Heidelberger  $^3\text{Helium}$ -Spinecho-Spektrometer gezeigt werden [6].

### 2.3.5.1 Versatzes $\vec{D}_{ij}^{(sc)}$ nach der Streuung und Spinecho-Bedingung

Im Vergleich zur Streugeometrie mit parallelen Streu- und Aufspaltungsebenen lässt sich der räumliche und zeitliche Abstand der Streuvorgänge der Zustände  $|i\rangle$  und  $|j\rangle$  bei der hier beschriebenen Geometrie wesentlich einfacher bestimmen: Der räumliche Abstand der Streuzentren ist direkt durch die transversale Komponente des Versatzes  $\vec{D}_{ij}^{(1)}$  in  $x$ -Richtung gegeben, die zeitliche Differenz direkt durch die longitudinale Komponente in  $y$ -Richtung. Abbildung 2.9 macht anschaulich, was aus Gleichung (2.6) mit Hilfe von (2.2) folgt:

$$\begin{aligned} |\vec{r}_j - \vec{r}_i| &= \frac{l \tan \theta^{(1)}}{2 \cos \theta^{(1)}} \frac{E_{ji}^{(1)}}{E} \\ t_j - t_i &= \frac{l m}{\hbar |\vec{k}|} \frac{1}{2 \cos \theta^{(1)}} \frac{E_{ji}^{(1)}}{E}. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Die hier beschriebene Geometrie führt zu keinerlei Wegunterschieden zwischen  $|i\rangle$  und  $|j\rangle$ , die von Einfallswinkel oder Ausfallswinkel der Streuung abhängen. Aus diesem Grund weist auch der Versatz der beiden Zustände nach der Streuung keine Abhängigkeit von diesen beiden Winkeln auf. Deshalb kann die Komponente in  $x'$ -Richtung direkt aus der ersten Gleichheit in (2.35) übernommen werden, für die  $y'$ -Komponente gilt:

$$\vec{D}_{ij,y'}^{(sc)} = \frac{\hbar |\vec{k}'|}{m} (t_j - t_i) = \frac{|\vec{k}'|}{|\vec{k}|} \frac{l}{2 \cos \theta^{(1)}} \frac{E_{ji}^{(1)}}{E}. \quad (2.36)$$

Eventuelle inelastische Streuprozesse wirken sich also nur auf die  $y'$ -Komponente des Versatzes nach der Streuung aus. Die komplette Form von  $\vec{D}_{ij}^{(sc)}$  nimmt damit folgende Gestalt an:

$$\vec{D}_{ij}^{(sc)} = \frac{l}{2 \cos \theta^{(1)}} \frac{E_{ji}^{(1)}}{E} \begin{pmatrix} \tan \theta^{(1)} \\ |\vec{k}'|/|\vec{k}| \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.37)$$

Bei Fokussierung auf rein elastische Prozesse gilt  $|\vec{k}'|/|\vec{k}| \equiv 1$ . Die allgemeine geometrische Spinecho-Bedingung (2.18) wird im speziellen Fall der Geometrie mit normalen Streu- und Aufspaltungsebenen erfüllt durch

$$E_{ji}^{(1)} = -E_{ji}^{(2)} \quad \text{und} \quad \theta^{(1)} = \theta^{(2)}. \quad (2.38)$$

Dies entspricht genau der Spinecho-Bedingung (2.10) im Fall des ungestreuten Strahls. Es ist allerdings zu beachten, dass die Winkel  $\theta^{(1)}$  und  $\theta^{(2)}$  im hier vorliegenden Fall in unterschiedlichen Koordinatensystemen definiert sind.

### 2.3.5.2 Auswirkungen eines „realen“ Detektors

Auch bei dieser Geometrie sollen die Eigenschaften eines realen Detektors berücksichtigt werden. Die endliche Integrationszeit eines „realen“ Detektors wirkt sich bei normalen Streu- und Aufspaltungsebenen genauso aus wie bei paralleler Orientierung dieser Ebenen: Neben den elastischen Prozessen werden auch solche registriert, die inelastischer Natur sind. Unter der erneuten Annahme, dass der Energieübertrag klein ( $\hbar \omega \ll E$ ) ist, gilt in erster Ordnung

$$k' \simeq k \left( 1 + \frac{\hbar \omega}{2E} \right), \quad (2.39)$$

womit die Integration über  $t_D$  wieder in eine  $\omega$ -Integration überführt werden kann.

Die endliche Ausdehnung des Detektors führt auch hier dazu, dass Teilchen registriert werden, die nicht exakt in Richtung von  $\vec{k}'$  gestreut werden. Es findet also erneut eine Integration über die gesamte Öffnungsfläche des Detektors statt. Wie im Fall der parallelen Anordnung von Streu- und Aufspaltungsebene werden nicht nur Teilchen nachgewiesen werden, die der exakten Streubedingung  $\theta_f = \theta_i + \alpha$  gehorchen, sondern auch diejenigen, die geringfügig vom exakten Winkel abweichen:  $\theta_f \rightarrow \theta_f \pm \delta\alpha$ , wobei wiederum die Annahme gemacht wird, dass  $\delta\alpha$  klein ist. Die Modifikation der  $1/\cos\theta^{(2)}$ -Terme in den Phasendifferenzen geschieht in der gleichen Weise wie im Abschnitt 2.3.4:

$$\frac{1}{\cos\theta^{(2)}} \rightarrow \frac{1}{\cos(\theta^{(2)} + \delta\alpha)} = \frac{1}{\cos\theta^{(2)}} (1 + \delta\alpha \tan\theta^{(2)}). \quad (2.40)$$

Durch die abweichende Anordnung der Streu- und Aufspaltungsebenen ergibt sich nun ein von (2.29) abweichender Zusammenhang zwischen  $\delta\alpha$  und dem dadurch bedingten zusätzlichen Impulsübertrag  $\delta q_{\parallel}$ . Da in der hier beschriebenen Geometrie  $\vec{r}_j - \vec{r}_i$  senkrecht zur Streuebene orientiert sind, gilt unter der Annahme  $\delta\alpha \approx 0$  der einfache Zusammenhang

$$\sin\delta\alpha = \frac{\delta q}{k} \quad \Longrightarrow \quad \delta q \simeq k \delta\alpha. \quad (2.41)$$

### 2.3.5.3 Bestimmung des Interferenzterms

Bei der Bestimmung des Interferenzterms werden wieder die realen Eigenschaften des Detektors berücksichtigt: die endliche Integrationszeit und der Raumwinkel, über den der Detektor integriert. Das Vorgehen geschieht analog zur Bestimmung des Interferenzterms bei der Geometrie mit parallelen Streu- und Aufspaltungsebenen. Zunächst werden die Phasendifferenzen  $\Phi_{ij}^{(2)}$  und  $\vec{k}' \vec{D}_{ij}^{(2)}$  bestimmt, die in (2.17) eingehen. Dabei wird der veränderte Zusammenhang zwischen  $\delta q$  und  $\delta\alpha$  sowie die Spinecho-Bedingung (2.38) berücksichtigt. Die Phasendifferenzen ergeben sich dann zu

$$\begin{aligned} \Phi_{ij}^{(2)} &= -\Phi_{ij}^{(1)} + \frac{kl}{\cos\theta^{(1)}} \frac{E_{ij}^{(1)}}{E} \left( \frac{\delta q}{k} \tan\theta^{(1)} + \frac{\hbar\omega}{2E} \right), \\ \vec{k}' \vec{D}_{ij}^{(2)} &= -\vec{k} \vec{D}_{ij}^{(1)} + \frac{kl}{2\cos\theta^{(1)}} \frac{E_{ij}^{(1)}}{E} \left( \frac{\delta q}{k} \tan\theta^{(1)} + \frac{\hbar\omega}{2E} \right). \end{aligned} \quad (2.42)$$

Auch in dieser Geometrie werden die Phasendifferenzen der ersten Spule von der zweiten kompensiert. Wegen des realen Detektors existieren auch hier Restphasen in  $\delta q$  und  $\omega$ , die allerdings nicht vom Einfallswinkel abhängen. Es gilt also:

$$\Phi_{ij}^{(1)} + \Phi_{ij}^{(2)} - \left( \vec{k} \vec{D}_{ij}^{(1)} + \vec{k}' \vec{D}_{ij}^{(2)} \right) = \frac{kl}{2\cos\theta^{(1)}} \frac{E_{ij}^{(1)}}{E} \left( \frac{\delta q}{k} \tan\theta^{(1)} + \frac{\hbar\omega}{2E} \right). \quad (2.43)$$

Auch hier ergibt die Integration über  $d\omega$  und  $d(\delta q)$  jeweils  $\delta$ -Funktionen, sodass für den Interferenzterm schließlich gilt:

$$\int \Psi_{\text{sc}}^{(i)} \Psi_{\text{sc}}^{(j)*} d\omega d(\delta q) = \int V(\vec{r}_i, t_i) V(\vec{r}_i + \vec{R}, t_i + \tau) d\vec{r}_i dt_i \quad (2.44)$$

mit den Parametern

$$R = \frac{\tan \theta^{(1)} l}{\cos \theta^{(1)}} \frac{E_{ji}^{(1)}}{2E} \quad (2.45)$$

und

$$\tau = -\frac{ml}{\hbar |\vec{k}|} \frac{1}{2 \cos \theta^{(1)}} \frac{E_{ji}^{(1)}}{E}.$$

Bei der Geometrie mit normalen Streu- und Aufspaltungsebenen stimmen die hier erhaltenen Ausdrücke für  $\tau$  und  $R$  mit den klassisch berechneten in (2.35) überein. Die Trennung zwischen zeitlicher und räumlicher Korrelation ist bei dieser Geometrie gegeben, es kommt nicht zu einer Vermischung wie bei der Geometrie mit parallelen Streu- und Aufspaltungsebenen.

Als Ergebnis der Behandlung beider Streugeometrien in diesem und im vorangegangenen Abschnitt bleibt festzuhalten, dass nur mit der Geometrie, bei der die Aufspaltungsebenen senkrecht zur Streuebene orientiert sind, die Messung raum-zeitlicher Korrelationen auf einer Probenoberfläche möglich ist. Dies hat direkte Konsequenzen auf den Bau des Transversal-Spinecho-Spektrometers: Es ist nun festgelegt, wie die Spinecho-Spulen bezüglich der Streuebene angeordnet werden müssen und dass ein Streuspulenfeld benötigt wird. Details zum Spektrometer sind in [18] zu finden.

### 2.3.5.4 Magnetische Wechselwirkungen

Spinecho-Experimente mit Wasserstoff sind deshalb besonders interessant, da das H-Atom wegen des ungepaarten Hüllenelektrons im Vergleich zu  $^3\text{He}$  ein großes magnetisches Moment besitzt. Außerdem fällt die Abschirmwirkung externer Felder durch die Hüllenelektronen weg, da ja gerade dort das magnetische Moment lokalisiert ist. Man erwartet deshalb auch magnetische Wechselwirkungen mit der Probenoberfläche. Diese würden einen zusätzlichen Term im Streupotenzial bedingen, der proportional zu  $\vec{S} \cdot \vec{B}$  ist.  $\vec{B}$  beschreibt das Magnetfeld der Oberfläche,  $\vec{S}$  den Spin des Strahlatoms. Ein solcher Term wurde in der oben hergeleiteten Theorie nicht berücksichtigt.

Wenn die Streuung noch in der ersten Bornschen Näherung, also als Punktstreuung, beschrieben werden darf, dann wäre vor allem die Fragestellung interessant, ob der magnetische Zusatzterm im Streupotenzial Übergangselemente zwischen den Spinor-Eigenzuständen enthält. Sollte die Wechselwirkung mit der Oberfläche kontinuierlicher Art sein (ähnlich einer Spin-Bahn-Wechselwirkung), so stellt sich die Frage, ob der Eintritt des Strahlteilchens in das Magnetfeld der Probe adiabatisch oder nichtadiabatisch erfolgt. Um die Größenordnung der dabei entstehenden Phasendifferenzen abzuschätzen, kann man sich folgender Beziehung bedienen: Die Anzahl der Larmorpräzessionen im Feld der Probe, bei denen die Zustände  $|1\rangle$  und  $|3\rangle$  beteiligt sind, ist gegeben durch

$$\frac{\Phi}{2\pi} \simeq \frac{E_{13}}{\hbar} t \simeq 2\mu_B \frac{Bl}{\hbar v}. \quad (2.46)$$

Die Länge des Probenmagnetfelds, das das Wasserstoffatom während des Streuvorgangs durchquert, betrage  $100 \text{ \AA}$  bei einer mittleren Feldstärke von  $\bar{B}$  von 1 T. Bei einer Teilchengeschwindigkeit  $v$  von 3000 m/s ergibt sich dann eine zusätzliche Phase von einer zehntel Larmorpräzession. Selbst wenn die Übergänge in das Magnetfeld hinein und aus ihm heraus nichtadiabatischen Charakter besitzen, würde die zusätzliche Phase eine messbare Verschiebung des Spinecho-Punktes bedeuten. Der Einfluss eines Probenmagnetfelds stellt also einen nicht zu vernachlässigenden Effekt dar.

### 2.3.5.5 Longitudinales Spinecho

Das longitudinale Spinecho lässt sich als Spezialfall der gerade beschriebenen Geometrie verstehen. Bei einem Kippwinkel  $\theta = 0$  verschwindet die  $x$ -Komponente des Versatzes zwischen  $|i\rangle$  und  $|j\rangle$ , wie beispielsweise (2.37) entnommen werden kann.

Unter diesen Umständen lassen sich alle gerade beschriebenen Berechnungen durchführen, bis auf die  $d(\delta q)$ -Integration. Durch diese Integration, die durch die Einführung von  $\delta\alpha$  berücksichtigt wird, geht die endliche Detektoröffnung in die Bestimmung der Interferenzterme mit ein. Aus Gleichung (2.40) geht für den Fall  $\theta = 0$  hervor, dass es beim longitudinalen Spinecho keine Abhängigkeit von  $\delta\alpha$  gibt. Die endliche Detektoröffnung hat damit keinen Einfluss auf das Mess-Signal und die Integration über  $d(\delta q)$  fällt weg. Damit nimmt der Interferenzterm die Form

$$\begin{aligned} \int \Psi_{\text{sc}}^{(i)} \Psi_{\text{sc}}^{(j)*} d\omega &= \iiint V(\vec{r}_i, t_i) V^*(\vec{r}_j, t_j) e^{i\vec{q}(\vec{r}_j - \vec{r}_i)} e^{-i\omega(t_j - t_i - \tau)} d\vec{r}_j dt_j d\vec{r}_i dt_i d\omega \\ &= \iiint V(\vec{r}_i, t_i) V^*(\vec{r}_j, t_i + \tau) e^{i\vec{q}(\vec{r}_j - \vec{r}_i)} d\vec{r}_i dt_i d\vec{r}_j \\ &= \iiint V(\vec{r}_i, t_i) V^*(\vec{r}_i + \vec{R}, t_i + \tau) e^{i\vec{q}\vec{R}} d\vec{r}_i dt_i d\vec{R} \end{aligned} \quad (2.47)$$

an. Man kann erkennen, dass die Interferenzterme des longitudinalen Spinechos gerade die Fouriertransformierten der Interferenzterme beim transversalen Spinecho sind. In obiger Gleichung wurde  $\vec{r}_j = \vec{r}_i + \vec{R}$  sowie die Spinecho-Zeit  $\tau$  verwendet. Für sie ergibt sich aus (2.45) für den Fall  $\theta = 0$

$$\tau = -\frac{m l}{2 \hbar |\vec{k}|} \frac{E_{ji}}{E}. \quad (2.48)$$

### 2.3.6 Interpretation der Interferenzterme

Bereits in der Einführung zu Abschnitt 2.3 wurde erwähnt, dass sich die Mess-Signale bei Streuexperimenten mit Neutronen-Spinecho auf die von van Hove [16] eingeführten Funktionen  $G(\vec{r}, t)$ ,  $I(\vec{q}, t)$  und  $S(\vec{q}, \omega)$  zurückführen lassen. Bei den genannten Funktionen handelt es sich um die Korrelationsfunktion, die intermediäre Streufunktion und um den Strukturfaktor (in dieser Reihenfolge). Dies soll nun etwas näher beleuchtet werden und mit der Situation bei Streuung von Atomen an Oberflächen verglichen werden.

#### 2.3.6.1 Spinecho mit Neutronen

Da die Wellenlänge von Neutronen bei Streuexperimenten an Festkörpern meist um Größenordnungen über der Reichweite der Kernkräfte liegt<sup>10</sup>, kann das Streupotenzial, welches das Neutron „sieht“, als Punktpotenzial angenommen werden. Dieses sogenannte Fermische Pseudopotenzial (siehe beispielsweise [19]) ist direkt proportional zur Dichte  $\rho$  der Kerne im Festkörper,

$$V(\vec{r}(t)) = 2\pi \hbar^2 \frac{a}{m} \rho(\vec{r}(t)). \quad (2.49)$$

Der Parameter  $a$  wird als Streulänge bezeichnet, er legt die Wechselwirkungsstärke fest. Unter Verwendung dieses Potenzials ist das Mess-Signal bei transversalem Spinecho (2.44) direkt proportional zur Korrelationsfunktion  $G(\vec{R}, t)$  [11, 16]:

$$G(\vec{R}, t) \propto \left\langle \int \rho(\vec{r}, t) \rho(\vec{r} + \vec{R}, t + \tau) d\vec{r} dt \right\rangle. \quad (2.50)$$

Bei Verwendung von longitudinalem Spinecho ist das Signal (2.47) gerade die räumliche Fouriertransformierte obiger Gleichung, in diesem Fall wird also die intermediäre Streufunktion  $I(\vec{q}, t)$  gemessen.

<sup>10</sup>Bei thermischen Neutronen liegt die de-Broglie-Wellenlänge etwa bei  $10^{-10}$  m im Vergleich zu  $10^{-15}$  m für die Reichweite der Kernkräfte.

### 2.3.6.2 Spinecho mit Atomen

Die Wechselwirkung von Atomen mit einer Festkörperoberfläche ist ungleich schwerer zu beschreiben als die gerade genannte Wechselwirkung von Neutronen mit Festkörpern. Ein Grund dafür liegt in der Form des Streupotenzials. Dieses besteht sowohl aus einem attraktiven Teil, der von van-der-Waals-Wechselwirkungen herrührt, als auch aus einem repulsiven Teil, dessen Ursache im Pauli-Prinzip begründet liegt. Meist werden analytisch leicht handhabbare Modellpotenziale verwendet, um die explizite Form des realen Potenzials zu beschreiben. Als Beispiele seien hier das Lennard-Jones-Potenzial oder das Morse-Potenzial genannt. Doch selbst dann sind die Streupotenziale bei der Bestimmung von Streuintensitäten nur numerisch fassbar.

Wenn das Wechselwirkungspotenzial mit einem Atom der Oberfläche unter Vernachlässigung zeitlicher Abhängigkeiten durch

$$V(\vec{r}) = f(|\vec{r} - \vec{r}'|) =: f(r, r') \quad (2.51)$$

gegeben ist, dann gilt für das Streupotenzial der gesamten Oberfläche:

$$V(\vec{r}) = \int \rho(r') f(r, r') dr' , \quad (2.52)$$

wobei  $\vec{r}'$  den Ort des betrachteten Atoms bezeichnet,  $f$  eine dem Potenzial entsprechende abstandsabhängige Funktion darstellt und  $\rho$  die Oberflächendichte der Festkörperatome ist. Setzt man ein solches Potenzial in (2.44) ein, so ergibt sich folgender Ausdruck:

$$\int \Psi_{\text{sc}}^{(i)} \Psi_{\text{sc}}^{(j)} d\omega d(\delta q) \propto \iiint \rho(r') \rho(r'') f(r_i, r') f(r_i + R, r'') dr_i dr' dr'' . \quad (2.53)$$

Die Integrationen über  $r'$  und  $r''$  sind eine Konsequenz aus der Langreichweitigkeit der Wechselwirkung. Da ihre Integrationsvariablen unabhängig voneinander sind, bleibt die in  $\rho$  enthaltene strukturelle Information unkorreliert. Bei Atomstrahl-Spinecho-Streuexperimenten wird demnach nicht die Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion (transversales Spinecho) bzw. die intermediäre Streufunktion (longitudinales Spinecho) im van Hove'schen Sinn gemessen. Vielmehr wird beim transversalen Spinecho eine Potenzial-Potenzial-Korrelationsfunktion bestimmt.

## Kapitel 3

# Der Aufbau zu den Messungen mit transversalem Spinecho

In diesem Kapitel sollen die einzelnen Komponenten beschrieben werden, die zur Durchführung von Atomstrahl-Spinecho-Messungen im Allgemeinen und unter Verwendung von atomarem Wasserstoff im Besonderen notwendig sind.

### 3.1 Ein schematischer Überblick

Bei Strahl-Spinecho-Experimenten handelt es sich wie bei NMR-Experimenten um Aufbauten, bei denen magnetische Momente von Teilchen präpariert, manipuliert und anschließend ihre Ausrichtung im Raum analysiert werden. „Manipulieren“ meint die Drehung der Quantisierungsachse in beliebige Richtungen, das Ein- und Auskoppeln in die Präzessionsfelder der Spinecho-Spulen hinein und aus ihnen heraus.

Im Unterschied zu „konventioneller“ NMR werden nicht die magnetischen Momente von Teilchen aus einer festen oder flüssigen Probe manipuliert, sondern vielmehr die Spins von frei fliegenden Strahlteilchen. Aus diesem Grund werden Strahl-Spinecho-Experimente auch als „in-beam-NMR“ bezeichnet. Die für das Spinecho-Prinzip notwendigen  $\pi/2$ - und  $\pi$ -Flips werden bei den „in-beam-NMR“-Experimenten durch Nullfeldbereiche erzeugt, in denen ein nicht-adiabatischer Übergang von einem Magnetfeld in ein anderes erfolgt.<sup>1</sup> Diese Nullfeldbereiche stellen das Analogon zur Einstrahlung resonanter elektro-magnetischer Pulse dar, mit denen bei NMR an Flüssigkeiten oder Festkörpern die magnetischen Momente der untersuchten Probe um entweder  $\pi/2$  oder  $\pi$  gedreht werden.

Bei einer nicht-adiabatischen Zustandsänderung, wie sie im Bereich der Nullfeldregionen stattfindet, geschieht diese Änderung der Quantisierungsachse so schnell, dass das System nicht mehr folgen kann, es behält seinen Anfangszustand und damit seine Orientierung im Laborsystem bei. Dieser ist dann durch eine Mischung der Eigenzustände bezüglich der neuen Quantisierungsachse darstellbar, wie es schon in Kapitel 1 ausgiebig genutzt wurde. Bei einer adiabatischen Zustandsänderung behält das System seinen Anfangszustand bei; befindet es sich zu Beginn in einem Eigenzustand, so wird es nach der Zustandsänderung im entsprechend gedrehten Eigenzustand sein.

Abb. 3.1 zeigt die schematische Anordnung der für die Durchführung von Atomstrahl-Spinecho-Messungen notwendigen einzelnen Baugruppen sowie die Orte, an denen die für das Experiment wichtigen  $\pi/2$ - und  $\pi$ -Flips stattfinden: Aus der Quelle kommend, durchqueren die Strahlteilchen zunächst einen Polarisator, der aus einem inhomogenen Magnetfeld und einem homogenen, in  $x$ -Richtung orientierten Führungsfeld besteht. Der Übergang zwischen diesen beiden Feldern geschieht adiabatisch.

---

<sup>1</sup>Eine Ausnahme hiervon bilden die so genannten „Resonanz-Spinecho-Experimente“: Die zeitliche Abfolge von Pulsfolgen, die bei NMR für die Hochfrequenzübergänge sorgt, wird hier durch Feldregionen realisiert, die der Teilchenstrahl sukzessive durchquert. In diesen Feldregionen wird HF-Frequenz eingestrahlt. Insofern stellen Resonanz-Spinecho-Experimente eigentlich die direkte Umsetzung der Spinecho-Methode der NMR auf einen Teilchenstrahl dar.

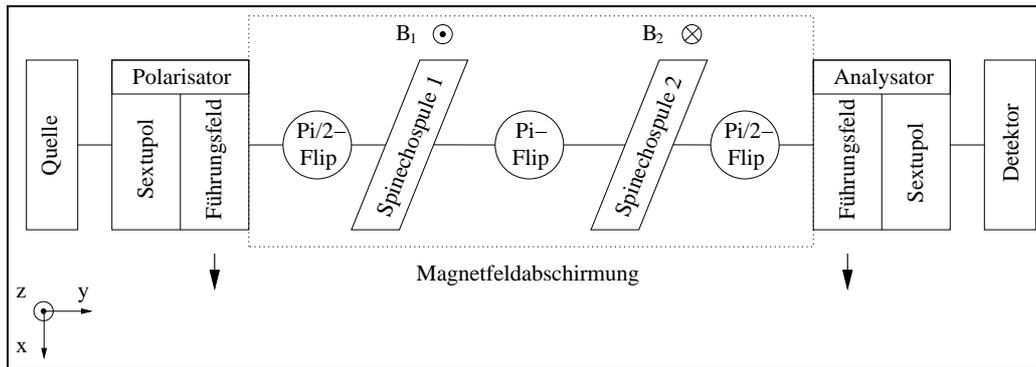


Abbildung 3.1: Schematischer Aufbau der Atomstrahl-Spinecho-Maschine für die Messungen zum transversalen Spinecho. Die Richtung der Führungsfelder sowie der Spinecho-Spulen ist angedeutet. Am Ein- und Ausgang der Magnetfeldabschirmung erfolgen die  $\pi/2$ -Flips, zwischen den Spinecho-Spulen der  $\pi$ -Flip. Alle diese Übergänge sind nicht-adiabatischer Natur.

In der darauffolgenden Nullfeldregion erfolgt der erste  $\pi/2$ -Flip: Der Spin der Strahlteilchen koppelt nicht-adiabatisch in das Feld der ersten Spinecho-Spule ein. Wie die nun senkrecht zum Magnetfeld polarisierten Strahlteilchen zu beschreiben sind, wurde in Kapitel 1 bereits ausführlich erklärt. Der ersten Spinecho-Spule folgt eine weitere Nullfeldregion, in der der  $\pi$ -Flip stattfindet. Das Feld der zweiten Spinecho-Spule sorgt für die Entstehung des Spinechos. Um die Polarisation der Strahlteilchen nach dem Durchqueren der beiden Spinecho-Spulen messen zu können, müssen die Spins allerdings noch einen weiteren  $\pi/2$ -Flip vollführen. Dies geschieht in der letzten Nullfeldregion.

Die magnetischen Momente koppeln wieder nicht-adiabatisch in das homogene Führungsfeld des Analysators ein, das parallel bzw. antiparallel zur  $x$ -Achse orientiert ist und im weiteren Verlauf entlang der Strahlachse adiabatisch in ein inhomogenes Magnetfeld übergeht. Um die nicht-adiabatischen Nullfeldübergänge zu ermöglichen, ist der zwischen den Führungsfeldern befindliche Teil des Aufbaus in einer magnetischen Abschirmung aus  $\mu$ -Metall untergebracht. Die inhomogenen Felder von Polarisator und Analysator ermöglichen eine Zustandsselektion analog zu einem Stern-Gerlach-Experiment. Abschließend werden die so zustandsselektierten Strahlteilchen mit einem Detektor nachgewiesen.

## 3.2 Die Strahlquelle

Da die Entwicklung einer neuartigen Quelle für atomaren Wasserstoff Teil dieser Arbeit ist, soll in diesem Abschnitt nur kurz auf die wichtigsten Aspekte und den bisher verwendeten Dissoziator eingegangen werden, für weitere Details sei auf Kapitel 5 verwiesen, dort werden ausführlich unterschiedliche Strömungsarten aus einer Düse ins Vakuum erläutert, sowie auf Kapitel 6, welches die neue Quelle beschreibt.

### 3.2.1 Der Dissoziator

Unter Normalbedingungen kommt Wasserstoff in gasförmigem Zustand nur in seiner molekularen Form  $H_2$  vor. Um also Experimente mit Strahlen aus atomarem Wasserstoff durchführen zu können, muss in der Quelle neben der Expansion des Gases ins Vakuum außerdem dafür gesorgt werden, dass der molekulare Wasserstoff dissoziiert wird. Die Bindungsenthalpie von  $H_2$  beträgt bei Zimmertemperatur 435.99 kJ/mol, was einer Bindungsenergie von 4.52 eV pro Bindung entspricht [20].

Im Wesentlichen wird zwischen zwei verschiedenen Methoden der Dissoziation unterschieden: Zum einen gibt es die thermische Dissoziation an einer heißen Oberfläche, zum anderen besteht die Möglichkeit, die Dissoziation durch Elektronenstoß in einer Gasentladung zu bewerkstelligen. Der für die Messungen zum transversalen Spinecho verwendete Dissoziator [21] gehört zur zweiten Kategorie, wobei die Gasentladung

durch Mikrowellen einer Frequenz von etwa 1.4 GHz gespeist wird. In Abb. 3.2 ist ein Schnitt durch den Dissoziator gezeigt. Die Gasentladung brennt in einem Quarzglasrohr, das mittig durch den Resonator geführt wird. Der Durchmesser des Rohrs liegt bei 3 mm außen und 0.3 – 1 mm innen. Die Verengung auf der Vakuumseite wird durch Wärmebehandlung des Quarzrohres erzeugt. Die Abdichtung erfolgt durch einen über das Quarzrohr gestreiften O-Ring. Auf der Normaldruckseite wird das Gas durch ein Kupferrohr zugeführt, welches in einem Swagelok-Übergangsstück endet. Auch auf dieser Seite wird die Dichtung gegenüber dem Quarzrohr durch O-Ringe erreicht.

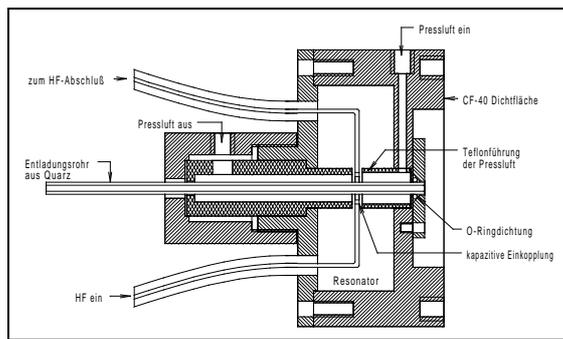


Abbildung 3.2: Quelle für atomaren Wasserstoff. In einem pressluftgekühlten Quarzglasrohr brennt eine Gasentladung, die durch kapazitiv in den Resonator eingekoppelte Mikrowellenstrahlung gespeist wird. Die Ringelektrode in der Mitte des Resonators umschließt das Quarzglasrohr. Nach [8].

Die zum effektiven Betrieb typischerweise notwendigen Entladungsleistungen liegen je nach Druck im Quarzglasrohr im Bereich von etwa 80 bis 120 W. An der Einkoppel-Elektrode, die das Quarzröhrchen umschließt, ist ein ein  $180 \Omega$  Leistungswiderstand angeschlossen, um die Reflektion von Mikrowellenleistung zurück zum Mikrowellengenerator zu minimieren.

Der Wärmeeintrag durch die eingespeiste Mikrowellenleistung und die brennende Gasentladung ist so beträchtlich, dass das Quarzrohr durch Pressluft gekühlt werden muss. Dadurch wird vermieden, dass die zur Dichtung verwendeten O-Ringe schmelzen. Für eine effektive Kühlung befindet sich um das Quarzrohr ein weiteres Rohr aus Teflon, das die Pressluft entlang des Quarzröhrchens durch den Resonator führt. In Abb. 3.3 sind die Auswirkungen des Wärmeeintrags bei

brennender Entladung auf die Flugzeitverteilungen eines Strahls aus Helium gezeigt. Aus den Fits an die Daten ergibt sich eine Temperaturdifferenz von  $(250 \pm 10)$  K zwischen der Verteilung ohne und mit brennender Entladung.

Die Entladung wird durch einen Funkengenerator gezündet, sobald die Mikrowellenleistung am Resonator anliegt. Dabei hat es sich als günstig erwiesen, den Funken möglichst nahe am Resonator zu erzeugen. Um die nötige Entladeleistung im Dauerbetrieb zu reduzieren, kann dem Wasserstoff in geringem Maße Helium beigemischt werden.

### 3.2.2 Die Strahlerzeugung

Nachdem die im Dissoziator erzeugten Wasserstoff-Atome die Düse verlassen haben, wird durch mehrere strahlformende Blenden ein kleiner Raumwinkel ausgeschnitten. Die erste Blende ist der sogenannte „Skimmer“, der einen Abstand von etwa 3 – 4 mm zur Düse hat. Die Skimmerblende hat eine konische Form, deren Spitze zur Düse zeigt. So wird bewirkt, dass Teilchen, die nicht zur Strahlbildung herangezogen werden, effektiv und schnell von der Skimmeröffnung entfernt werden. Der Staudruck vor dem Skimmer wird dadurch ebenso reduziert wie die Abschwächung des Strahls aufgrund von Wechselwirkungen mit Restgasteilchen.

In etwas weiterem Abstand folgt der sogenannte „Kollimator“, der den Raumwinkel noch weiter einschränkt. Der Durchmesser dieser beiden Blenden beträgt 1 mm. Zwischen beiden ist für konventionelle Flugzeitmessungen ein Chopper angebracht. In Abb. 3.3 sind Flugzeitspektren gezeigt, die mit diesem Chopper gemessen wurden. Das linke Spektrum wurde an einem reinen Heliumstrahl bei einem Fluss von 1.8 sccm ohne brennende Entladung bei Raumtemperatur aufgenommen.<sup>2</sup> Danach wurde dem Strahl 5 sccm molekularer Wasserstoff  $H_2$  beigemischt, die Entladung gezündet und die Entladungsleistung auf 81 W geregelt. Bei diesen Quellparametern wurde dann das rechte Spektrum aufgenommen, wobei mit dem Massenspektrometer nur Helium nachgewiesen wurde.

<sup>2</sup>Ein Fluss von 1 sccm entspricht etwa  $4.5 \cdot 10^{17}$  Teilchen pro Sekunde.

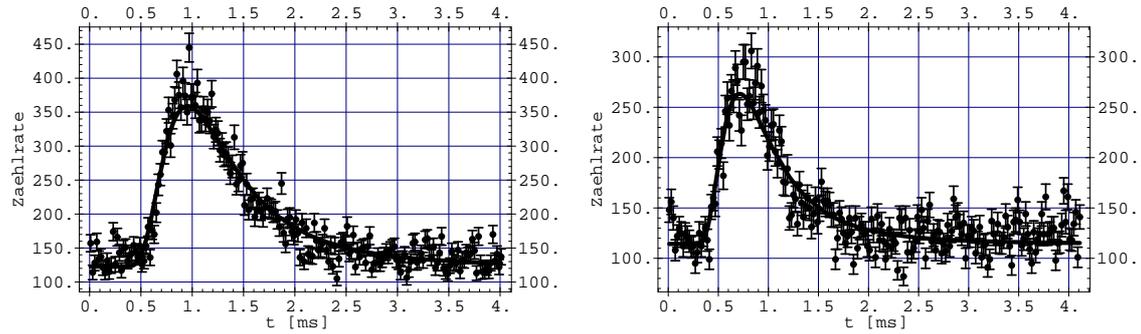


Abbildung 3.3: Flugzeitmessungen an einem He-Strahl ohne brennende Gasentladung (links) und mit brennender Gasentladung bei 81 W Mikrowellenleistung (rechts). Damit die Fits an die Daten zu erkennen sind, ist jeweils nur jeder zweite Datenpunkt geplottet. Die Flugstrecke betrug in beiden Fällen 1.5 m. Aus den an jeweils alle Datenpunkte gefitteten Flugzeitverteilungen ergibt sich eine Temperaturerhöhung von  $(250 \pm 10)$  K, wenn die Entladung gezündet wird.

Die Form der Flugzeitspektren weist darauf hin, dass die Art der Strömung aus der Düse effusiven Charakters ist. Die Spektren sind direkt mit Abb. 5.2 in Kapitel 5 zu vergleichen. Dort wird ausführlich auf den Unterschied zwischen effusiver und Überschall-Strömung eingegangen. An die Daten wurde eine Verteilung nach Gl. (5.6) gefittet. Die Analyse der Fitparameter, zu denen auch die Quelltemperatur  $T_0$  gehört, ergibt, dass die Quelle bei den oben genannten Flüssen und einer in das Entladungsplasma eingespeisten Leistung von 81 W gegenüber dem Betrieb bei Raumtemperatur (ohne Entladung) um  $(250 \pm 10)$  K aufgeheizt wird.

### 3.3 Der Polarisator

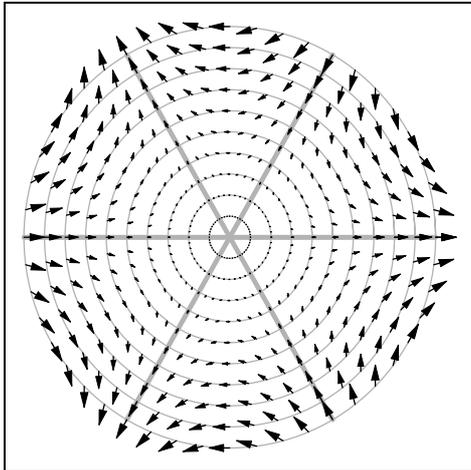


Abbildung 3.4: Feldvektoren eines idealen Sextupolmagneten. Aus [8].

Im Anschluss an die Strahlformung werden die Wasserstoffatome in einem inhomogenen Magnetfeld polarisiert. Wie schon in Abschnitt 1.1.2.3 erwähnt, handelt es sich dabei um eine Stern-Gealach-Anordnung mit senkrecht zur Strahlachse stehenden Gradienten. Da der Strahl einen kreisförmigen Querschnitt aufweist, ist es angebracht, dass auch der Gradient des inhomogenen Magnetfelds Zylindersymmetrie bezüglich der Strahlachse besitzt. Magnetische Multipolfelder erfüllen diese Anforderung. Das Magnetfeld eines  $2N$ -Pols, wie es in der nebenstehenden Abbildung für den Fall eines Sextupols ( $N = 3$ ) gezeigt ist, lässt sich in kartesischen Koordinaten  $(x, y, z)$  beschreiben durch

$$\vec{B} = B_{ps} \left( \frac{r}{r_{ps}} \right)^{N-1} \begin{pmatrix} \cos(N-1)\varphi \\ \sin(N-1)\varphi \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.1)$$

Dabei bezeichnet  $r_{ps}$  den Radius, auf dem sich die Polspitzen befinden,  $B_{ps}$  ist das Polspitzenfeld des  $2N$ -Pols.  $(r, \varphi, z)$  sind Zylinderkoordinaten. Die Ausrichtung der kartesischen Koordinaten folgt der in Abb. 3.1 gezeigten Definition:  $x$ -Achse in Polarisationsrichtung,  $y$  in Strahlrichtung und  $z$  in Richtung der Quantisierungsachse der ersten Spinecho-Spule.

Nach Gl. (1.19) wirkt auf einen Zustand  $|i\rangle$  mit magnetischem Moment  $\mu_i$  in einem inhomogenen Magnetfeld die Kraft

$$\vec{F}_i = -\vec{\nabla} E_i = -\frac{\partial E_i}{\partial B} \vec{\nabla} B = \mu_i \vec{\nabla} B. \quad (3.2)$$

Die in diese Gleichung letztlich eingehenden Größen aus (3.1), Magnetfeldbetrag und Gradient, hängen nur von  $r$  ab, die Zylindersymmetrie ist also gegeben:

$$B = B_{ps} \left( \frac{r}{r_{ps}} \right)^{N-1}, \quad (3.3)$$

$$B' = \frac{\partial B}{\partial r} = (N-1) \frac{B_{ps}}{r_{ps}} \left( \frac{r}{r_{ps}} \right)^{N-2}.$$

Damit ist die Kraftwirkung aus (3.2) immer radial gerichtet. Außerdem ist in Abb. 3.4 zu erkennen, dass die Richtung des Magnetfelds radial konstant bleibt, in azimuthaler Richtung  $\varphi$  dagegen dreht sich die Magnetfeldrichtung. Wegen der endlichen Ausdehnung des Strahls sind die magnetischen Momente also nach Durchlaufen des magnetischen Multipols zunächst nur lokal in Abhängigkeit von  $\varphi$  ausgerichtet. Für die Erzeugung der globalen Polarisation sorgt der adiabatische Übergang in das homogene Führungsfeld.

Bei den in dieser Arbeit beschriebenen Experimenten werden Sextupolmagnete verwendet, da in diesem Fall der Gradient des Magnetfelds nach (3.3) proportional zu  $r$  ist. Ein Sextupol kann also Teilchen mit konstantem magnetischem Moment, die von einem Punkt ausgehen, bei geeigneter Wahl von Feldstärke und Länge in Strahlrichtung wieder auf einen Punkt abbilden. Einzig auf der Strahlachse  $r = 0$  übt der Sextupol keine Kraft auf Strahlteilchen aus, da dort nach (3.3)  $B' = 0$  gilt. Diese unpolarisierten Strahlteilchen lassen sich aber durch den Einsatz einer „Perle“ auf der Strahlachse ausblenden. Wie Abb. 3.5 entnommen werden kann, ist der Zustand  $|1\rangle$  wegen seines magnetischen Momentes besonders für die Zustandsselektion geeignet, da er am stärksten in Richtung der Strahlachse abgelenkt wird.

Der in diesem Experiment verwendete Polarisatormagnet ist elektrisch durchstimmbare, mit einer Länge von 200 mm und einem Polspitzenradius  $r_{ps}$  von 3 mm. Das Polspitzenfeld  $B_{ps}$  lässt sich zwischen 0 und 200 mT variieren. Details zu diesem Magneten finden sich in [22].

Die nach dem Sextupol lokal vorliegende Polarisation wird durch ein homogenes, in  $x$ -Richtung orientiertes Magnetfeld, das sogenannte Führungsfeld, in eine globale Polarisation überführt. Bedingung dafür ist, dass der Übergang zwischen Sextupol- und Führungsfeld über den gesamten Strahlquerschnitt adiabatisch erfolgt. Dann werden die Spins langsam in die Richtung der Quantisierungsachse des Führungsfeldes „hineingedreht“. Der Übergang aus dem Führungsfeld in das Feld der ersten Spinecho-Spule erfolgt nicht-adiabatisch. In Abb. 3.1 ist dieser Übergang mit Pi/2-Flip bezeichnet, da hier eine Drehung des Spins um  $90^\circ$  erfolgt. Der Zustand  $|1_x\rangle$  ist dann wie in (1.24) als Mischung der Zustände  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$  und  $|3\rangle$  darstellbar.

Ein Polarisator, der auf dem Stern-Gerlach-Effekt beruht, besteht nach dem eben Gesagten also immer aus einem inhomogenen Magnetfeld zur Fokussierung bzw. Defokussierung der Strahlteilchen sowie einem homogenen Führungsfeld, das die Polarisationsrichtung festlegt.

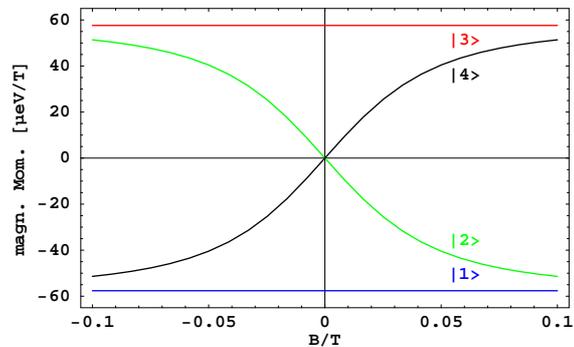


Abbildung 3.5: Verlauf der magnetischen Momente der Hyperfeinzustände von Wasserstoff in Abhängigkeit des Magnetfelds.

### 3.4 Die Spinecho-Konfiguration

Wie in den Kapiteln 1 und 2 deutlich wurde, ist die gezielte Manipulation und Selektion von magnetischen Eigenzuständen der Strahlteilchen von entscheidender Bedeutung für die Durchführung von Spinecho-Experimenten. Aus diesem Grund ist die gesamte Spinecho-Strecke zwischen den Führungsfeldern von Polarisator und Analysator in einem Rohr aus  $\mu$ -Metall montiert. Dabei handelt es sich um hochpermeables Material mit  $\mu \approx 10^5$ . Auf diese Weise werden äußere Magnetfelder wie beispielsweise das Erdmagnetfeld reduziert und störende Einflüsse auf die magnetischen Momente der Strahlteilchen unterdrückt.

In Abb. 3.6 ist ein Teil der Magnetfeldabschirmung zu sehen. Links ist eines der Halbrohre gezeigt, aus denen die Abschirmung zusammengesetzt ist. Die Wandstärke der Halbrohre beträgt 1 mm. Im rechten Teil der Abbildung ist ein zusammengesetztes Rohr zu sehen, bei dem die Position der Spinecho-Spulen und einer Blende zur Zustandsselektion angedeutet sind. Die Blende befindet sich am Ort des Polarisatorfokus. Die Gesamtlänge der Spinecho-Anordnung beträgt 60 cm. Die Spinecho-Spulen sind so angeordnet, dass ihre Mitten jeweils 20 cm vom Ende des  $\mu$ -Metallrohrs entfernt sind. Ebenso beträgt der Abstand zwischen den beiden Spulen 20 cm, gemessen von Mitte zu Mitte. Das gezeigte  $\mu$ -Metallrohr befindet sich innerhalb eines weiteren, konzentrisch angeordneten  $\mu$ -Metallrohrs. Beide Rohre sind jeweils mit einer Entmagnetisierungsspule umwickelt, die dazu dient, im Material vorhandene Remanenzen zu beseitigen. Dies geschieht durch Betrieb der Entmagnetisierungsspule mit 50 Hz Wechselstrom: Die Stromamplitude wird von einem großen Wert, durch den das  $\mu$ -Metall in Sättigung getrieben wird, langsam (in Bezug auf die Netzfrequenz) bis auf Null reduziert. Dadurch wird die Hystereseschleife immer kleiner, bis das Material am Ende entmagnetisiert ist. Dieser Vorgang ist für eine gute Abschirmwirkung unerlässlich und muss gegebenenfalls mehrmals hintereinander wiederholt werden. Mit der vorhandenen Abschirmung kann das Erdmagnetfeld von 40  $\mu$ T außerhalb der Rohre auf 200 nT im Innern abgeschwächt werden.

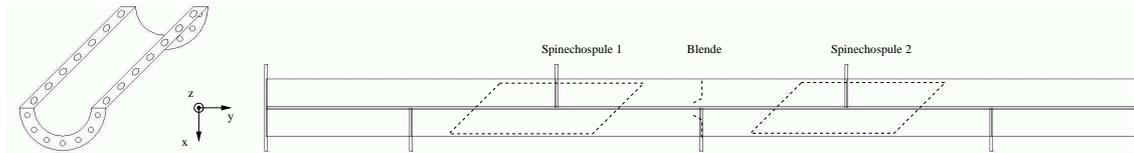


Abbildung 3.6: Die verwendete  $\mu$ -Metall-Abschirmung besteht aus mehreren, zusammengesetzten Halbrohren, die an den Nahtstellen verschraubt sind. Links ist ein einzelnes Halbrohr gezeigt, rechts ein komplett montiertes Rohr. Die Position der Spinecho-Spulen in der Abschirmung sowie der Blende zwischen den Spulen ist angedeutet.

Der Bau von Spinecho-Spulen stellt eine konstruktiv schwierige Aufgabe dar: Die beiden Spulen müssen möglichst identisch gefertigt werden, um zu gewährleisten, dass die Gradientenverläufe beider Spinecho-Magnetfelder möglichst gut übereinstimmen. Nur so kann sichergestellt werden, dass der Versatz, den die erste Spinecho-Spule erzeugt hat, von der zweiten kompensiert werden kann und so die Eigenzustände wieder kohärent zur Überlagerung gebracht werden können. Da die Analyse und Neuentwicklung von Spulen für das transversale Spinecho einen wesentlichen Teil dieser Arbeit darstellen, ist ihnen ein eigenes Kapitel gewidmet. Für genaue Details zu den untersuchten Spulen sei auf Kapitel 4 verwiesen.

### 3.5 Der Analysator

Genau wie der Polarisator besteht der hier verwendete Analysator aus einem inhomogenen Magnetfeld zur Zustandsselektion sowie einem homogenen Führungsfeld, das in diesem Fall die Analysationsrichtung festlegt. Im Gegensatz zum Polarisator kommt nun aber das Führungsfeld vor dem Sextupol. Dies ist notwendig, um nach dem nicht-adiabatischen Übergang (in Abb. 3.1 der zweite  $\text{Pi}/2$ -Flip) vom Feld der zweiten Spinecho-Spule in das homogene Führungsfeld die Spins adiabatisch in das Feld des Sextupols zu überführen.

Das Sextupol-Feld des Analysators wird durch einen Permanentmagneten erzeugt, der ein Polspitzenfeld  $B_{ps}$  von 1400 mT bei einem Polspitzenradius  $r_{ps}$  von 5 mm über eine Länge von 50 mm zur Verfügung stellt.

Anhand der Orientierung des Analysator-Führungsfeldes bezüglich des Polarisator-Führungsfeldes wird festgelegt, ob der Zustand  $|1_x\rangle$  (im Fall paralleler Führungsfelder) oder der Zustand  $|3_x\rangle$  (bei antiparallelen Führungsfeldern) auf die Strahlachse fokussiert wird und somit in den Detektor gelangt.

### 3.6 Der Detektor

Die in die Detektorkammer gelangenden Strahlteilchen werden durch ein kommerzielles Quadrupol-Massenspektrometer nachgewiesen. Abbildung 3.7 zeigt den schematischen Aufbau eines solchen Geräts. Dabei werden Teilchen, die in das Ionisationsvolumen des Spektrometers gelangen, durch Elektronenstoß ionisiert und mit Hilfe elektrostatischer Abzugsblenden beschleunigt und fokussiert. Die anschließende elektrische Quadrupolsektion lässt nur Teilchen mit einem bestimmten Ladungs-Masse-Verhältnis passieren. Im Anschluss an diese Selektion treffen die Teilchen auf ein Channeltron, wo sie durch kontinuierliche Elektronenvervielfachung schließlich als Strompuls nachgewiesen werden können.

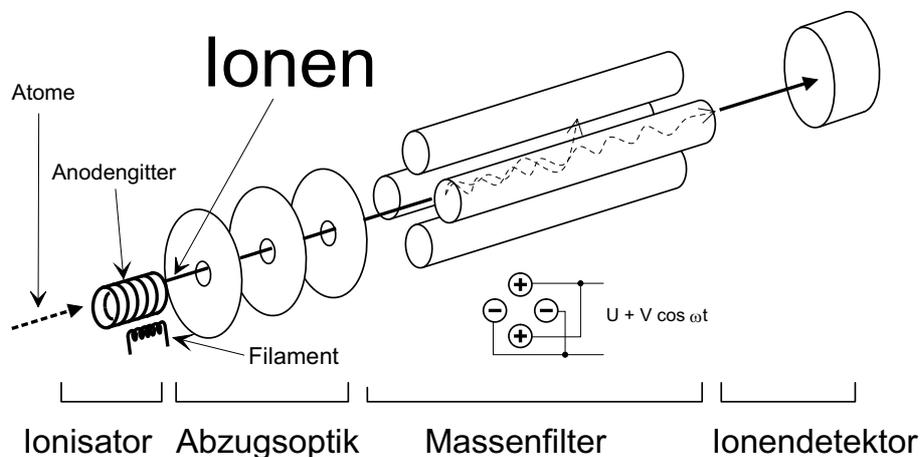


Abbildung 3.7: Schema eines Quadrupol-Massenspektrometers. Aus [23].

Diese Art des Nachweises ist gerade für atomaren Wasserstoff mit großen Untergrundproblemen verbunden. Zurückzuführen sind sie auf die Möglichkeit der Fragmentation von  $H_2$ -Molekülen durch Elektronenstoß, ähnlich wie in einem Plasma. Details zur Fragmentation von  $H_2$  sind in Abschnitt 6.1 zu finden, deshalb wird hier nicht weiter darauf eingegangen.

Die zum Untergrund beitragenden Wasserstoffmoleküle können einerseits direkt aus dem Strahl stammen, wenn nämlich der Dissoziator nicht vollständig dissoziiert. Wasserstoff, der diffus von der Quelle über die Spinecho-Strecke bis zum Detektor gelangt, lässt sich durch den Einsatz von Blenden als differenzielle Pumpstufe reduzieren. Andererseits stellt Wasserstoff einen bedeutenden Anteil am immer vorhandenen Restgas. Dieser Wasserstoff stammt aus den Rezipientenwänden, wo er im Festkörper gebunden sein kann und erst mit der Zeit desorbiert. Außerdem besteht die Möglichkeit, dass Wasserstoff durch die Rezipientenwände von außen ins Vakuum gelangen kann. Eine weitere Quelle für Wasserstoffuntergrund stellt an den Wandungen adsorbiertes Wasser dar, das ebenfalls nur langsam ins Vakuum abgegeben wird. Auch  $H_2O$ -Moleküle können durch Fragmentation atomaren Wasserstoff liefern.

Um das Signal-Untergrund-Verhältnis zu verbessern, gibt es mehrere Möglichkeiten. Zu nennen sind untergrundfreie Nachweismethoden, die Wasserstoff nur in atomarer Form nachweisen, nicht aber als Molekül oder Molekülbestandteil. In [8] werden einige davon kurz beleuchtet. Die andere Möglichkeit besteht darin, sich die Methode des Spinechos zunutze zu machen. Da die interessierende Phaseninformation dem Spin-Freiheitsgrad aufgeprägt ist, sind nur die Strahlteilchen von Belang, die mit der „richtigen“ Spin-Stellung am Analysator ankommen. Dieser filtert über den Stern-Gerlach-Effekt die entsprechenden Teilchen heraus und fokussiert sie auf die Detektorblende. Die Kenntnis der Flugzeit ist für eine gute Energieauflösung

nicht nötig (siehe (1.7)). Deshalb kann gezielt die Ionisationswahrscheinlichkeit für Strahlteilchen erhöht werden, indem das Ionisationsvolumen entlang der Strahlrichtung ausgedehnt wird. für konventionelle Flugzeitmessungen bedeutet dies eine Verschlechterung der Energieauflösung, nicht aber bei Verwendung des Spinecho-Prinzips. Ein solcher Detektor ist erfolgreich am  $^3\text{He}$ -Spinecho-Spektrometer in Betrieb [17] und erste Modifikationen von Teilen des  $^3\text{He}$ -Detektors für den Einsatz am Wasserstoff-Spinecho wurden bereits durchgeführt [23].

### 3.7 Das Vakuumsystem

Damit der Atomstrahl auf seinem Weg von der Quelle bis zum Detektor nicht merklich abgeschwächt wird, muss die mittlere freie Weglänge (siehe dazu Abschnitt 5.1.3, als Faustformel mag hier  $\bar{l} \approx 5 \text{ cm}/p[\text{mtorr}]$  genügen) ungefähr eine Größenordnung über der Länge des Experiments liegen. Bei einer Strahlänge von 1 m sollte also der Basisdruck<sup>3</sup> bei etwa  $p \approx 5 \cdot 10^{-3} \text{ mtorr} \approx 6 \cdot 10^{-6} \text{ mbar}$  liegen, damit die mittlere freie Weglänge von der Größenordnung 10 m ist. Im Detektor sind die Anforderungen an den Basisdruck noch größer, um den im Abschnitt 3.6 erwähnten Wasserstoff-Untergrund möglichst gering zu halten. Um dies zu erreichen, ist einiger vakuumtechnischer Aufwand zu betreiben; die gesamte Vakuumapparatur wird dazu in mehrere differenzielle Pumpstufen unterteilt. Abb. 3.8 zeigt einen schematischen Überblick über die zur Erzeugung des Vakuums genutzten Pumpen.

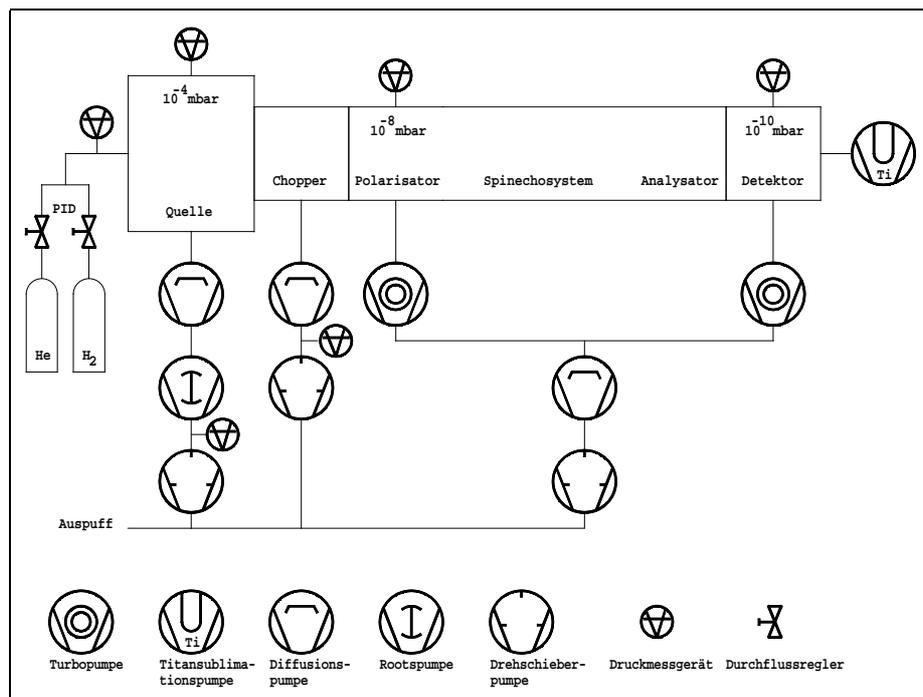


Abbildung 3.8: Schematischer Aufbau des Vakuumsystems.

Der Gaseinlass wird über zwei Gasflussregler bewerkstelligt, mit denen ein  $\text{H}_2/\text{He}$ -Gemisch eingestellt werden kann, das zum Betreiben des Plasmas im Dissoziator geeignet ist.

Im Bereich der Strahlerzeugung, der Quellkammer, fällt der höchste Gasballast an, da durch die Skimmerblende etwa 90% aller Teilchen, die die Düse verlassen, nicht zur Strahlbildung genutzt werden und somit aus der Quellkammer abgepumpt werden müssen. Dazu dient eine Öldiffusionspumpe mit einer Saugleistung von 8000 l/s, an deren Vorvakuumseite eine Wälzkolbenpumpe und eine Drehschieberpumpe in

<sup>3</sup>Der Restgasdruck ohne Strahlbetrieb wird als Basisdruck bezeichnet.

Reihe pumpen. Die Chopperkammer, zwischen Quelle und Polarisator angebracht, um auch konventionelle Flugzeitmessungen durchführen zu können, wird ebenfalls direkt mit einer Öldiffusionspumpe evakuiert.

Die übrigen differenziellen Pumpstufen, voneinander durch Blenden getrennt, werden über ein dreistufiges Pumpsystem evakuiert. Dieses besteht auf der Hochvakuumseite aus einer Turbopumpe, mit der schwere Restgasteilchen besonders effektiv gepumpt werden können. Gefolgt wird sie von einer Öldiffusionspumpe, die ein hohes Kompressionsverhältnis für leichte Teilchen hat und somit ein Rückwärtsdiffundieren von Wasserstoff auf der Auspuffseite zur Vakuumseite verhindert. Am Auspuff der Diffusionspumpe arbeitet eine Drehschieberpumpe.

In der Detektorkammer ist zusätzlich eine Titansublimationspumpe montiert, um gezielt den Wasserstoff-Untergrund zu reduzieren. Dort kann der Basisdruck bis auf einige  $10^{-10}$  mbar abgesenkt werden.



## Kapitel 4

# Die Spulen für das transversale Spinecho

Nachdem in Abschnitt 2.1 die theoretischen Grundlagen für das Transversal-Spinecho gelegt wurden, folgt in diesem Kapitel die Beschreibung der Spulen, die zur Erzeugung der transversalen Aufspaltung der Eigenzustands-Wellenpakete<sup>1</sup> verwendet wurden. Bis jetzt ist es allerdings noch nicht gelungen, eine Spinecho-Kurve aufzunehmen, die die erwarteten drei Spinecho-Gruppen<sup>2</sup> aufweist, wobei sowohl der Abstand der einzelnen Gruppen zueinander als auch die Wiggelfrequenz<sup>3</sup> innerhalb der Gruppen zur Spulen-Konstanten passen.

Zunächst werden die in [8] vorgeschlagenen Spulen beschrieben und diskutiert. Dann folgt die Beschreibung der notwendigen Änderungen und der daraus resultierenden Spulen.

### 4.1 Die Geometrie mit flachen Filamenten

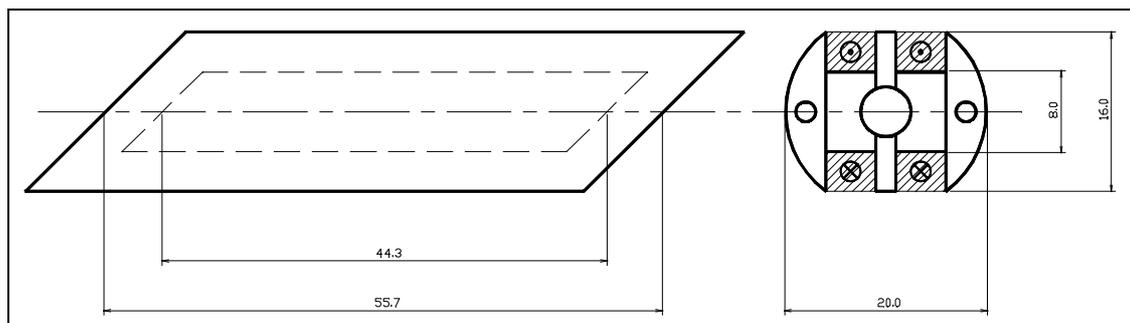


Abbildung 4.1: Erste Version der Transversalspulen. Links ist die Seitenansicht des Wickelkörpers mit den angeschrägten Stirnflächen zu sehen, wobei die Strahlachse horizontal von links nach rechts verläuft. Rechts ist der Blick auf eine Stirnfläche gezeigt. In den Aussparungen für die Wicklungen ist der Stromfluss angedeutet. Durch die große Bohrung in der Mitte verläuft der Strahl. Hier zeigt die Strahlachse in die Blattebene hinein. Die kleinen Bohrungen links und rechts sollen den Pumpquerschnitt erhöhen.

<sup>1</sup>Im Folgenden wird oft auch der Begriff „Teilwellenpaket“ als Synonym für die Wellenpakete der Eigenzustände benutzt.

<sup>2</sup>Als Spinecho-Gruppe wird das Interferenzmuster bezeichnet, das sich durch Übereinanderverschieben von zwei Eigenzustands-Wellenpaketen  $|i\rangle$  und  $|j\rangle$  ergibt.

<sup>3</sup>Die Wiggelfrequenz ist die Frequenz, mit der die Strahlpolarisation bei Verstimmung der beiden Spinecho-Spulen gegeneinander oszilliert.

### 4.1.1 Die gefertigten Spulen

In Abbildung 4.1 sind die Dimensionen der Transversal-Spulen gezeigt, wie sie bei ersten Messreihen zum Einsatz kamen. Unter der Maßgabe, die Transversal-Spulen in der existierenden  $\mu$ -Metall-Abschirmung mit Innendurchmesser 20 mm unterzubringen und das erforderliche Magnetfeld-Integral erzeugen zu können, wurde eine längliche Parallelogramm-Geometrie gewählt. Die Spulen bestehen jeweils aus zwei Teilspulen links und rechts der Strahlachse, die auf einer der Längsseiten des Wickelkörpers miteinander kontaktiert werden. Die beiden Teilspulen fungieren quasi als „Helmholtzspulenpaar“.<sup>4</sup> Durch die Kontaktierungen der Teilspulen miteinander kommt es zwangsläufig zu einer Abweichung vom idealen Stromverlauf in der Spule. Um die Auswirkungen der daraus resultierenden Streufelder zu minimieren, wurde die Kontaktstelle auf halber Länge des Wickelkörpers platziert. Die Streufelder liegen dann im adiabatischen Bereich des Magnetfeldes der Spule und nicht in den Bereichen, wo die Spins nicht-adiabatisch in das Spulenfeld ein- und ausgekoppelt werden.

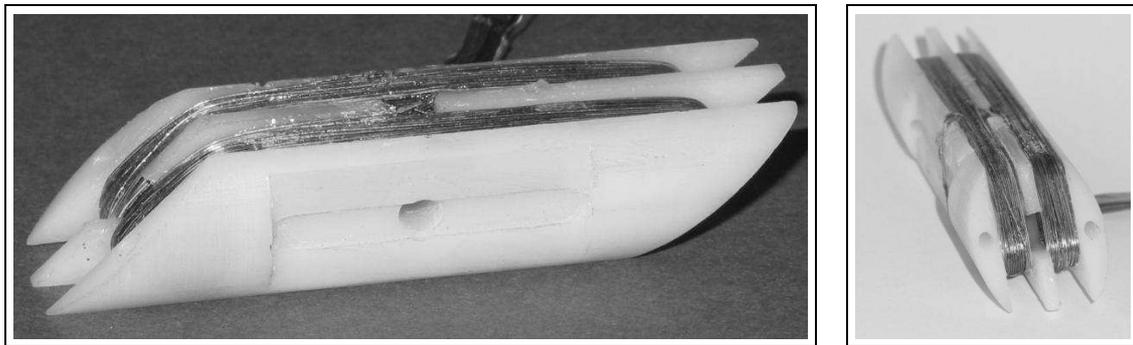


Abbildung 4.2: Blick auf die fertige Spule (direkt zu vergleichen mit Abbildung 4.1). Links ist die Biegung der Wicklungen über die gesamte Stirnfläche zu sehen, rechts zeigt sich der endliche Krümmungsradius der Drähte an den Ecken des Wickelkörpers deutlich.

Die Stirnseiten der Spulen sind angeschrägt, um die Wellenpakete der Eigenzustände sowohl longitudinal als auch transversal trennen zu können. Entscheidend für die Richtung der Aufspaltung ist die Orientierung des Magnetfeld-Gradienten der Spulen (siehe Abschnitt 2.1). Dieser zeigt in die Richtung der Stirnflächen-Normalen. Die Richtung des Magnetfeld-Gradienten wurde so gewählt, dass er gegenüber der Strahlachse um  $45^\circ$  gekippt ist; dadurch werden gleich große longitudinale und transversale Aufspaltungen erzeugt.

Die beiden gefertigten Spulen weisen jeweils 183 Wicklungen für die linke und 184 Wicklungen für die rechte Teilspule auf.<sup>5</sup> Damit lässt sich bei einem Strom von 200 mA durch die Spule in ihrem Innern auf der Strahlachse ein Magnetfeld von 5.6 mT erzeugen [24].

Abbildung 4.2 zeigt den Blick auf eine fertig gewickelte Transversal-Spule. Die Kontaktierung der beiden Teilspulen auf der Oberseite ist gut zu erkennen. Beim Abpumpen der Maschine und bei Strahlbetrieb hat es sich als problematisch erwiesen, dass die Wicklungen der Spulen die Strahlöffnung zu einem großen Teil verdecken:

- Durch den verringerten Pumpquerschnitt, über den am Volumen zwischen den Spulen sowie im Innern der Spulen selbst gepumpt werden kann, kam es zu längeren Wartezeiten, bis im Strahlrohr der zum Betrieb eines Atomstrahl-experiments notwendige Basisdruck (siehe Abschnitt 3.7) erreicht ist.
- Im Strahlbetrieb konnten die Anteile des Strahls, die an Elementen der Spinecho-Anordnung diffus gestreut wurden, nur unzureichend abgepumpt werden. Hierzu zählen vor allem Teilchen, die

<sup>4</sup>Die geometrische Bedingung für Helmholtzspulen, dass ihr Abstand dem Radius der Spulen entspricht, kann wegen der hier gegebenen geometrischen Randbedingungen allerdings nicht erfüllt werden.

<sup>5</sup>Beide Teilspulen werden gleichzeitig gewickelt: Ist eine Lage der linken Teilspule voll, wird zur rechten Teilspule gewechselt, bei der nächsten Lage entsprechend umgekehrt.

von der Blende mit 1 mm Durchmesser zwischen den beiden Spulen aus dem Strahl ausgeblendet werden. Durch diesen erhöhten Untergrund-Druck innerhalb der  $\mu$ -Metall-Abschirmung wurde der eigentliche Atomstrahl abgeschwächt.

- Beim Betrieb der Spulen kommt es durch den geringen Abstand der Wicklungen zur Strahlachse zwangsläufig zu unerwünschten Magnetfeld-Komponenten senkrecht zum transversalen Magnetfeld, die einen großen Einfluss auf die Strahlpolarisation haben. Was dies für die Maschinenfunktion bedeutet, wird später diskutiert.

In Abbildung 4.2 ist noch ein weiteres Manko der ersten Generation der Transversalspulen zu erkennen: Im Gegensatz zu der in [8] simulierten Geometrie haben die gewickelten Spulen keine idealen Parallelogramm-Filamente. Vielmehr weisen die Ecken der Wicklungen einen endlichen Krümmungsradius auf, wobei vor allem die äußeren Lagen signifikant von der idealen Geometrie abweichen. Diese Krümmung reicht sogar bis in den Bereich der Strahl-Aussparung hinein. Außerdem ist im linken Bild von Abbildung 4.2 zu erkennen, dass die Wicklungen über die gesamte Stirnfläche eine Biegung aufweisen. In Abschnitt 4.1.2 werden die daraus resultierenden Effekte noch genauer diskutiert. Das gleiche gilt für die Seitenflächen der Spulen: Auch hier zeigt sich eine Biegung der Wicklungen, die sich über die gesamte Spulenlänge erstreckt.

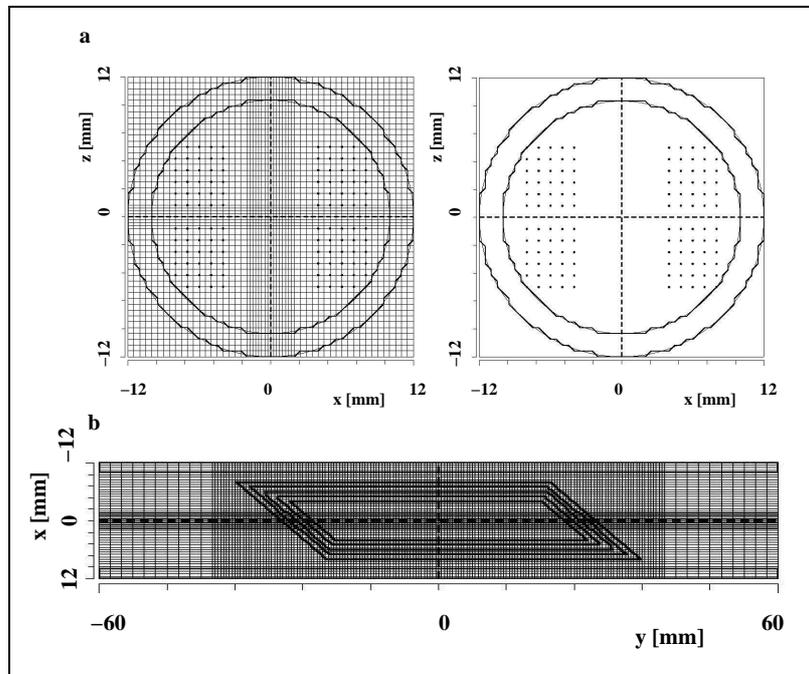


Abbildung 4.3: Realisierung der Parallelogramm-Geometrie auf dem Gitter für die Simulation mit MAFIA. Die beiden Teilspulen werden durch jeweils 30 Filamente angenähert, die Wandstärke des  $\mu$ -Metalls beträgt 1 mm. Teil a zeigt die Sicht in Strahlrichtung, die Filamente liegen auf Kreuzungspunkten der Gitterlinien; Teil b zeigt den Blick in Richtung des Spinecho-Feldes, hier verläuft das  $\mu$ -Metall entlang der Gitterlinien.

#### 4.1.2 Simulation der Spulen

Das Magnetfeld der Transversalspulen lässt sich, im Gegensatz zu den Spulen für das Longitudinal-Spinecho [17], nur schwer analytisch berechnen, da keine so hohe Symmetrie mehr gegeben ist. Aus diesem Grund wurde das Magnetfeld der Spulen mit dem Programm MAFIA unter Verwendung der Finite Integrale Technik FIT berechnet. Dazu müssen einige Idealisierungen vorgenommen werden. So wird bei den Simulationen von einer konstanten Permeabilität  $\mu$  für die gesamte  $\mu$ -Metall-Abschirmung

ausgegangen. Außerdem ergeben sich dadurch, dass auf einem diskreten Gitter gerechnet wird, Einschränkungen in der detailgetreuen Abbildung der realen Situation auf eben jenes Gitter. Darauf wird später noch eingegangen.

#### 4.1.2.1 Parallelogramm-Geometrie

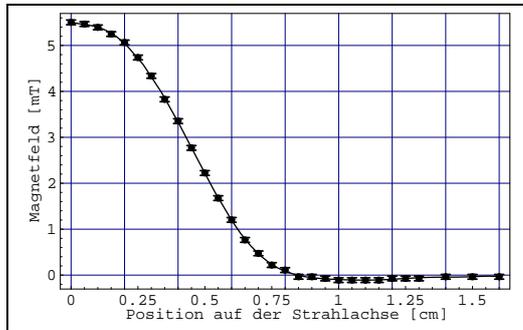


Abbildung 4.4: Gemessener Verlauf des transversalen Magnetfelds  $B_z$  entlang der Strahlachse beim Eintritt in eine transversale Spinecho-Spule [24]. Die durchgezogene Kurve stellt einen polynomialen Fit an die Messdaten dar.

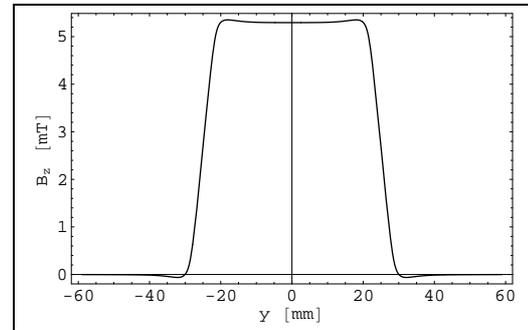


Abbildung 4.5: Simulierter Verlauf der  $z$ -Komponente des Magnetfelds auf der Strahlachse ( $x = z = 0$ ) für 367 Wicklungen bei einem angenommenen Spulenstrom von 200 mA.

Bei der Parallelogramm-Geometrie<sup>6</sup> werden die Transversal-Spulen durch Parallelogramme angenähert, was gegenüber der realen Situation, wie sie in Abbildung 4.2 zu sehen ist, eine zu große Idealisierung darstellt.

Abbildung 4.3 zeigt die Realisierung der Geometrie auf dem zur Simulation mit MAFIA verwendeten Gitter. Der Nullpunkt des Koordinatensystems wurde ins Zentrum der Spule auf die Strahlachse gelegt. Im oberen Teil (a) ist der Blick entlang der Strahlachse gezeigt, unten (b) ist der Blick senkrecht dazu, in Richtung des Magnetfeldes gezeigt. Beim  $\mu$ -Metall und den gekippten Stirnflächen der Spulen ist zu erkennen, wie die Vorgaben für die einzelnen Elemente an das Gitter angepasst werden.

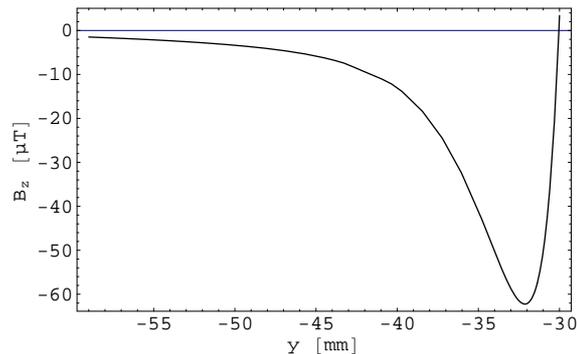


Abbildung 4.6: Simulierter Feldverlauf der  $z$ -Komponente des Magnetfelds auf der Strahlachse außerhalb der Spule. Der Überschwinger zu negativen Feldstärken ist gut erkennbar.

#### 4.1.2.2 Ergebnisse der Parallelogramm-Simulation

In den Abbildungen 4.5 bis 4.8 sind die Ergebnisse der Simulation gezeigt. Beim Verlauf der  $z$ -Komponente des Magnetfelds zeigen sich außerhalb der Spule negative Beiträge, die zum Rand des simulierten Volumens gegen Null gehen. Die Ursache für dieses Verhalten ist in der Positionierung der Wicklungen an den Stirnflächen der Spule zu suchen. Dort werden die Wicklungen sehr dicht an der Strahlachse vorbeigeführt, wie schon aus Abbildung 4.2 hervorgeht. Damit ist der Abstand zum  $\mu$ -Metall so groß, dass es energetisch günstiger wird, den magnetischen Fluss nicht komplett über das  $\mu$ -Metall, sondern teilweise auch über das Vakuum zu schließen. Die Überschwinger auf beiden Seiten des Nulldurchgangs von  $B_z$  weisen darauf

<sup>6</sup>Diese Geometrie wurde schon in [8] beschrieben, sie wird hier in leicht veränderter Form nochmals aufgeführt (die Neigung der Stirnfläche wurde den in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen angepasst), um einen direkten Vergleich der simulierten Geometrien untereinander zu ermöglichen. Außerdem werden hier die Magnetfeld-Komponenten senkrecht zum transversalen Spinecho-Feld  $B_z$  diskutiert, die in [8] nicht ausreichend berücksichtigt wurden.

hin, dass der Abstand der Teilspulen zur Strahlachse so gering ist, dass sich die einzelnen Filamente noch bemerkbar machen. Der Idealfall, die Spinecho-Spulen wie in der Neutronenphysik aus jeweils einer einzigen Spule zu fertigen, verbietet sich, da Atomstrahl-Spinecho-Anlagen darauf angewiesen sind, dass der Strahl nicht durch Materialien, die in den Strahlgang gebracht werden, blockiert wird.

Abbildung 4.4 zeigt den Verlauf des transversalen Magnetfelds einer gefertigten Spule als Funktion der Position auf der Strahlachse. Der Verlauf ist direkt mit dem aus Abbildung 4.5 zu vergleichen und zeigt eine gute Übereinstimmung. Bei genauerer Betrachtung stellt man allerdings fest, dass der gemessene Feldanstieg etwas steiler verläuft, als es von der Simulation vorausgesagt wird. Dies lässt sich dadurch erklären, dass die Hallsonde, mit der das Feld vermessen wurde, möglicherweise nicht genau auf der Ebene der Strahlachse in die Spule hinein bewegt wurde. Dann befindet sie sich näher an der einen Teilspule als an der anderen, was tatsächlich einen steileren Feldverlauf bedingt.

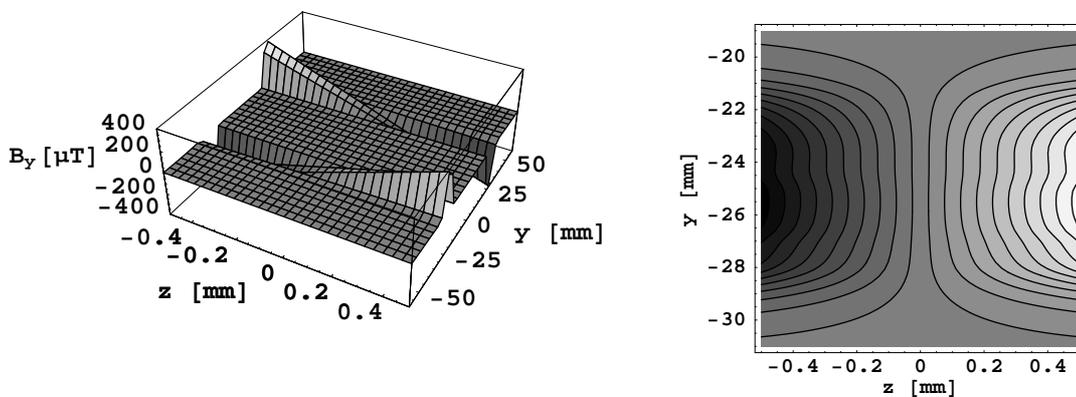


Abbildung 4.7: Verlauf der  $y$ -Komponente des Magnetfelds für  $x = 0$ . Die Strahlachse verläuft bei  $z = 0$ . Die Bilder zeigen einen Streifen, der in seiner Breite etwa dem maximalen Strahldurchmesser entspricht. Links ist der Verlauf als Höhenprofil für den Durchgang durch die komplette Spule dargestellt. Rechts sind die Höhenlinien gezeigt, wobei sich die Darstellung nur auf den vorderen Teil der Spule beschränkt. Die Farbskala reicht von schwarz ( $-400 \mu\text{T} < B_y < -360 \mu\text{T}$ ) bis weiß ( $+360 \mu\text{T} < B_y < +400 \mu\text{T}$ ). In dem grauen H-förmigen Bereich in der Mitte gilt  $+20 \mu\text{T} > B_x > -20 \mu\text{T}$ .

Abbildung 4.7 zeigt den Verlauf der  $y$ -Komponente des Magnetfelds in der  $y$ - $z$ -Ebene (diese Ebene wird aufgespannt durch die Strahlachse  $y$  und die Magnetfeld-Richtung  $z$ ). Wie aufgrund der Geometrie erwartet wird, gilt auf der Strahlachse ( $z = 0$ )  $B_y = 0 \forall y$ , da alle Feldlinien die  $y$ - $z$ -Ebene, die die Strahlachse enthält, senkrecht schneiden. Erst wenn die Strahlachse in der betrachteten Ebene verlassen wird, ergeben sich in den Eintritts- und Austrittsbereichen der Spule nichtverschwindende Beiträge zum Magnetfeld. Auch das Vorzeichen dieser Beiträge verhält sich wie erwartet:

- Parallel zur Strahlachse erwartet man unterschiedliche Vorzeichen für die Magnetfeld-Komponente  $B_y$  an den Enden der Spule, da die Magnetfeld-Linien durch die Strahlaussparung jeweils nach außen aufgeweitet werden.
- In  $z$ -Richtung ist diese Aufweitung symmetrisch zu  $z = 0$ , was zu einem Vorzeichenwechsel führt, wenn man sich senkrecht zur Strahlachse in der betrachteten Ebene bewegt. Wegen der Symmetrie gilt außerdem:  $B_y(x_0, y_0, z_0) = -B_y(x_0, y_0, -z_0)$ .

Der Höhenlinien-Plot aus dem Eintrittsbereich in die Spule zeigt ebenfalls deutlich, dass auf der Strahlachse  $B_y = 0$  gilt. Senkrecht zur Strahlachse nimmt  $B_y$  für  $z \rightarrow -0$  im gleichen Maße zu, wie es für  $z \rightarrow +0$  abnimmt. Auch dieses Verhalten ergibt sich aus der Geometrie.

Betrachtet man nun  $x$ - $y$ -Ebenen (diese werden aufgespannt durch die Polarisationsrichtung  $x$  der Strahlteilchen und die Strahlachse  $y$ ), die senkrecht auf der gerade betrachteten  $y$ - $z$ -Ebene stehen, so erwartet man

aufgrund der Geometrie für  $z = 0$  (also in der Ebene, die die Strahlachse enthält), dass  $B_y$  überall identisch verschwindet. Das Ergebnis der Simulation stimmt bis auf Randbereiche an den Enden des  $\mu$ -Metall-Rohrs in der Nähe von  $y = \pm 60$  mm, an denen sich die endliche Ausdehnung des Rohres bemerkbar macht, mit den Erwartungen überein: An keinem Punkt erreicht  $B_y$  Werte, die mehr als  $10^{-6}$  mT betragen. Aus diesem Grund wurde auf eine Darstellung verzichtet, der Sachverhalt kann aber anhand von Abbildung 4.7 nachvollzogen werden: Das Höhenprofil bei  $z = 0$  verläuft flach (in dieser Darstellung ist das gerade die Schnittlinie der  $x$ - $y$ -Symmetrieebene zwischen den Teilspulen und der dargestellten  $y$ - $z$ -Ebene).

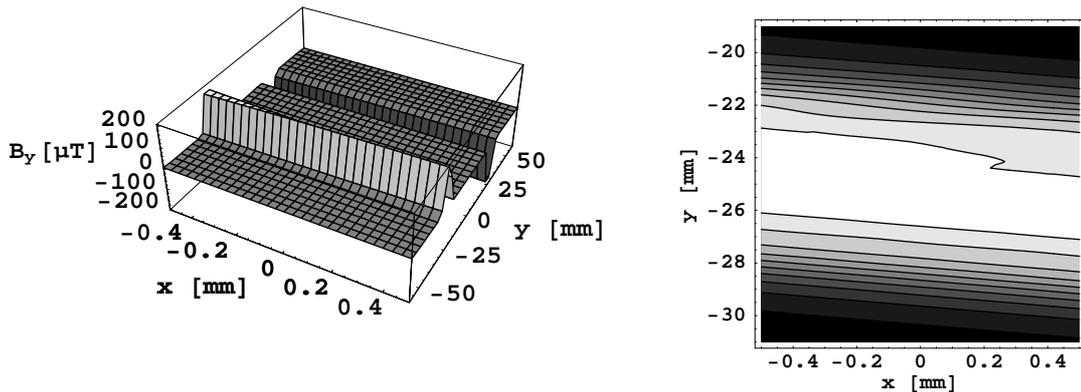


Abbildung 4.8: Verlauf der  $y$ -Komponente des Magnetfelds für  $z = 0.25$  mm, etwa einen halben Strahlradius von der Strahlachse entfernt. Die Bilder zeigen einen Streifen, der in seiner Breite etwa dem maximalen Strahldurchmesser entspricht. Links ist wieder der Verlauf als Höhenprofil durch die ganze Spule gezeigt. Die rechte Abbildung beschränkt sich wieder auf den vorderen Eintrittsbereich in die Spule. Die Farbskala reicht von schwarz ( $0 \mu\text{T} < B_x < 20 \mu\text{T}$ ) bis weiß ( $180 \mu\text{T} < B_x < 200 \mu\text{T}$ ).

Auf  $x$ - $y$ -Ebenen abseits der Strahlachse erwartet man dagegen an den Rändern der Spulen endliche Werte für  $B_y$ , da nun die Symmetrieebene zwischen den Teilspulen des „Helmholtzspulenpaars“ verlassen wird. Abbildung 4.8 zeigt das Verhalten von  $B_y$  in einer solchen  $x$ - $y$ -Ebene. Der Abstand dieser Ebene zur Strahlachse beträgt  $0.25$  mm. Gut zu erkennen ist das unterschiedliche Vorzeichen von  $B_y$  an den Spulenden. Dieses rührt daher, dass an den Enden die Feldlinien, wie schon erwähnt, nach außen aufgeweitet werden und so entgegengesetzt gerichtete Feldkomponenten in Strahlrichtung entstehen. Da die Ebene einen konstanten Abstand zu den Filamenten ober- und unterhalb hat, ist der „Hügel“ auf der einen Seite der Spule überall gleich hoch. Das gleiche gilt für die Tiefe des „Grabens“ am anderen Ende der Spule.

Aus dem Höhenlinienplot geht hervor, dass der „Hügel“ nicht senkrecht zur Strahlachse verläuft, sondern vielmehr dagegen verkippt ist. Die Höhenlinien sollten parallel zu den Filamenten der Spule unter einem Winkel von  $45^\circ$  zur Strahlachse verlaufen.<sup>7</sup> Aus Gründen der Rechenzeit und des Speicheraufwands ist die mögliche Anzahl der Gitterpunkte allerdings begrenzt, der vorgegebene Filamentverlauf wird durch kurze Filamentstücke angenähert, die rechtwinklig von Gitterpunkt zu Gitterpunkt verlaufen. Diese Filamentstücke stehen also jeweils senkrecht oder parallel zur Strahlachse. Durch diese Näherung lassen sich die zu erkennenden Unregelmäßigkeiten erklären.

Die Aufweitung der Feldlinien an den Spulenden erfolgt senkrecht zur Stirnfläche der Spule in Richtung des Feldgradienten.  $x$ - und  $y$ -Komponenten des Spulenfeldes werden durch genau diese Aufweitungen erzeugt. Da die Stirnfläche unter  $45^\circ$  zur Strahlachse  $y$  steht, erwartet man also beim Verlassen der Symmetrieebene zwischen den Teilspuln, dass sich die  $x$ - und die  $y$ -Komponente des Spulenfeldes zumindest betragsmäßig identisch verhalten. Aus der Simulation ergibt sich genau dieses Verhalten, weshalb hier auf eine Darstellung von  $B_x$  verzichtet wird.

<sup>7</sup>In diesem Zusammenhang ist allerdings zu beachten, dass die Skalen von  $x$ - und  $y$ -Achse im gezeigten Plot nicht übereinstimmen.

### 4.1.2.3 Folgerungen aus der Parallelogramm-Simulation

Nachdem die zu erwartenden Feldverläufe bekannt sind, lassen sich Werte für wichtige Größen der vorliegenden Feldkonfiguration vorhersagen. Dazu zählen vor allem das Magnetfeld-Integral, das von der Spule erzeugt werden kann, und dessen Inhomogenität. Auf der Strahlachse ergibt sich für das Magnetfeld-Integral der folgende qualitative Zusammenhang mit Wicklungszahl  $N$  und Spulenstrom  $I$ :

$$\frac{\int |\vec{B}(0, y, 0)| dy}{\mu T m} = 0.363 \frac{I}{\text{mA}} \frac{N}{100}. \quad (4.1)$$

Nach dieser Simulation ergibt sich auf der Strahlachse für die gefertigten Spulen ( $N = 367$ ) eine Spulen-Konstante von  $1.33 \cdot 10^{-3} \text{ Tm/A}$ . Der relative Fehler für diesen Wert bewegt sich etwa bei 0.5%. Ursache sind Abweichungen im Feldintegral, die ein Strahlteilchen „sieht“, wenn es sich nicht auf der Strahlachse bewegt. Für das maximale Feld in  $z$ -Richtung ergibt sich ein Wert von 0.026 mT/mA.

Außerdem ist von Interesse, wie das Messsignal, die Strahlpolarisation, von diesen Inhomogenitäten beeinflusst wird. Betrachtet wird dabei die Polarisation der mittleren Spinecho-Gruppe, die durch die Überlagerung der Zustände  $|1\rangle$  und  $|3\rangle$  zustande kommt. Wie Abbildung 1.4 entnommen werden kann, ist die Aufspaltung dieser zwei Zustände nach Durchqueren eines gegebenen Magnetfelds am größten.

Das von einem sich durch das Magnetfeld der Transversalspule bewegenden Strahlteilchen aufgesammelte Magnetfeld-Integral ist im Allgemeinen abhängig von der Trajektorie durch das Magnetfeld. Auf Trajektorien parallel zur Strahlachse sieht das Strahlteilchen nur dann das gleiche Magnetfeld-Integral, wenn das Magnetfeld über den gesamten Strahlquerschnitt homogen verteilt ist.

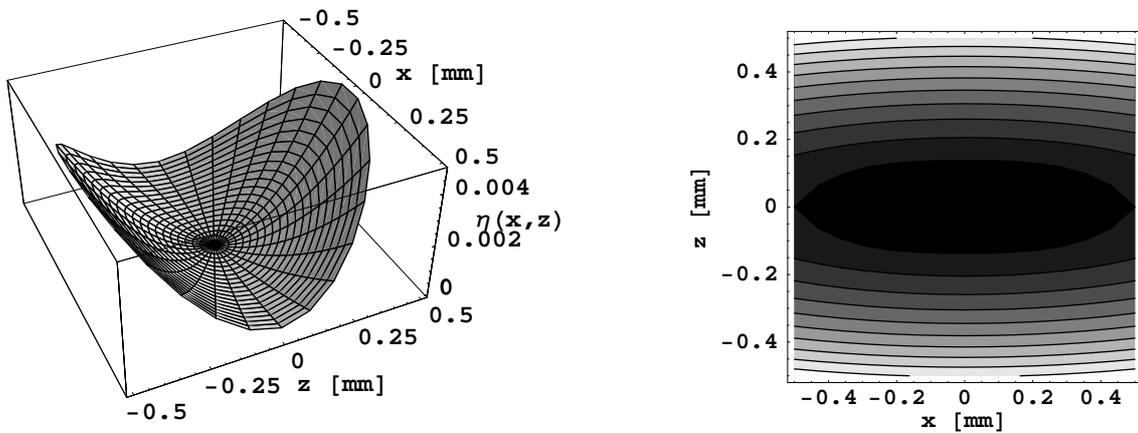


Abbildung 4.9: Inhomogenitäten des Feldintegrals einer transversalen Spinecho-Spule für alle Trajektorien im Strahl parallel zur Strahlachse. Links ist die dreidimensionale Darstellung gezeigt, wobei sich die Darstellung auf Werte im Strahl beschränkt. Rechts sind die Werte als Höhenlinien dargestellt, wobei größere Werte mit helleren Graustufen belegt sind.

Aus Abbildung 4.7 geht aber schon hervor, dass dies nicht der Fall ist. In Abbildung 4.9 ist die Inhomogenität der Spule (nach [25])

$$\eta(x, z) = \frac{\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} |\vec{B}(\vec{x})| dy - \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} |\vec{B}(0, y, 0)| dy}{\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} |\vec{B}(0, y, 0)| dy} \quad (4.2)$$

über den gesamten Strahlquerschnitt mit einem ungefähren Durchmesser von 1 mm dargestellt. In Formel (4.2) bezeichnet  $L$  die Länge des Magnetfeldes. Im Allgemeinen ist diese nicht mit der Spulenlänge identisch. Die transversale Aufspaltung der Teilwellenpakete erfolgt parallel zu  $z = \text{const}$ . Im Gegensatz zur Berechnung der Inhomogenität  $\eta$  in [8] wurden hier auch die Komponenten  $B_x$  und  $B_y$  berücksichtigt. An den Rändern des Strahls ist damit  $\eta$  um bis zu einer Größenordnung größer als der Wert, der in [8] für die Inhomogenität  $\eta$  genannt wird.

Betrachtet man einen monochromatischen Strahl mit Radius  $r$ , dessen Teilchen sich auf unterschiedlichen Trajektorien parallel zur Strahlachse durch die Spule bewegen, so stellt man fest, dass dieser aufgrund der Inhomogenität  $\eta$  aus (4.2) etwas depolarisiert wird. Die Präzessionsphasen  $\Phi_{12}$ ,  $\Phi_{13}$  und  $\Phi_{23}$  weisen Abweichungen vom idealen Wert (auf der Strahlachse) in Abhängigkeit vom Trajektorienverlauf auf. Dieser kann beschrieben werden durch  $r'$ , den Abstand zur Strahlachse, und  $\theta$ , den Azimutwinkel. Die Effizienz einer Spinecho-Spule erhält man durch Integration über den gesamten Strahlquerschnitt

$$\epsilon = \left| \frac{\iint e^{i\Phi_{jk}(1+\eta(r',\theta))} r' dr' d\theta}{\iint r' dr' d\theta} \right|, \quad (4.3)$$

die Integrationen werden von 0 bis  $r$  und von 0 bis  $2\pi$  durchgeführt. Die Effizienz eines Spinecho-Systems aus zwei identischen Spinecho-Spulen ergibt sich dann unter der Annahme, dass Abstand und Winkel der Teilchentrajektorien in beiden Spulen gleich sind, einfach durch  $\epsilon^2$ . Diese Größe beschreibt den Abfall der Strahlpolarisation, der durch Inhomogenitäten der beiden Spulenfelder hervorgerufen wird. Ihr Verlauf wird auch als Maschinenfunktion bezeichnet. Für ein ideales Spinecho-System verschwinden diese Inhomogenitäten, die Effizienz  $\epsilon^2$  oder Maschinenfunktion eines solchen Systems beträgt 1, unabhängig von der Größe der Präzessionsphasen.

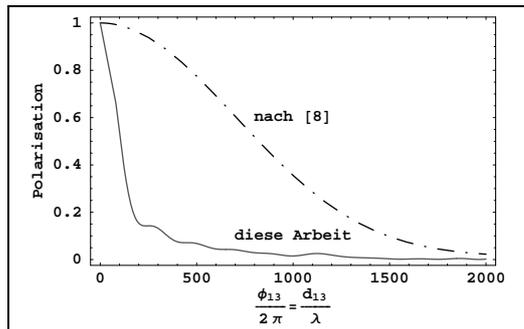


Abbildung 4.10: Polarisationsverlust durch Inhomogenitäten der Feldintegrale auf Trajektorien parallel zur Strahlachse bei zwei identischen transversalen Spinecho-Spulen.

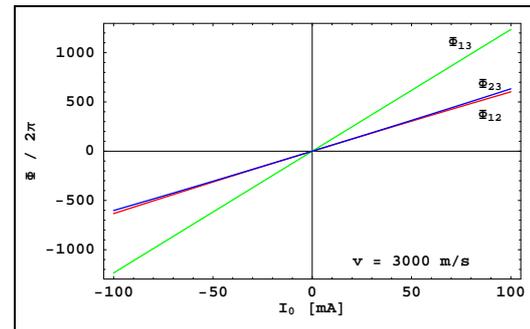


Abbildung 4.11: Präzessionsphase nach der ersten Spinecho-Spule auf der Strahlachse bei einer Strahlgeschwindigkeit von 3000 m/s.

In Abbildung 4.10 ist dieser Verlauf der Strahlpolarisation als Funktion der transversalen Aufspaltung der Teilwellenpakete gezeigt. Der strichpunktierte Verlauf stammt aus [8] und zeigt den ursprünglich erwarteten Verlauf für die Strahlpolarisation. Demnach wäre noch bei einer Aufspaltung von etwa 1000  $\lambda$  mit einer Polarisation von 35% zu rechnen. Allerdings wurde in der genannten Arbeit zur Bildung des Magnetfeld-Integrals nur  $B_z$  unter Berücksichtigung des Vorzeichens beim Magnetfeld-Integral herangezogen. Die Komponenten  $B_x$  und  $B_y$  wurden in ihrer Wirkung unterschätzt.

Berücksichtigt man dagegen die zusätzlich auftretenden Komponenten  $B_x$  und  $B_y$  bei der Bildung des Magnetfeld-Integrals, so ergibt sich ein deutlich anderer Verlauf. Dieser ist ebenfalls in Abbildung 4.10 zu sehen. Demnach ist die Strahlpolarisation schon bei einer Aufspaltung von etwa 130  $\lambda$  auf den Wert von 35% abgefallen. Die mit diesen Spulen erreichbare Aufspaltung liegt also bei wesentlich niedrigeren Werten als bisher angenommen. Bei den in Abbildung 4.10 gezeigten Polarisationsverläufen ist außerdem noch zu beachten, dass hier zwei absolut identische Spulen angenommen wurden. Polarisationsverluste aufgrund von schrägen Trajektorien oder durch niedrige Effizienzen der erforderlichen Flips zwischen den einzelnen

Magnetfeldern der Spinecho-Anordnung gehen nicht in Gl. (4.2) ein, da dort nur der Betrag des Magnetfeldes ausgewertet wird. Einflüsse, die auf Inhomogenitäten in der Magnetfeldrichtung des Spulenfeldes beruhen, wurden nicht berücksichtigt. Insofern stellt Abbildung 4.10 die theoretisch maximal mögliche Polarisation bei gegebener Aufspaltung der Teilwellenpakete dar. Nach Abbildung 4.11 in Verbindung mit Abbildung 4.10 wäre die Polarisation bei einem monoenergetischen Strahl mit einer Geschwindigkeit von 3000 m/s schon nach 100 mA auf Werte von weniger als 20% abgefallen.

#### 4.1.2.4 Berücksichtigung der abgerundeten Ecken

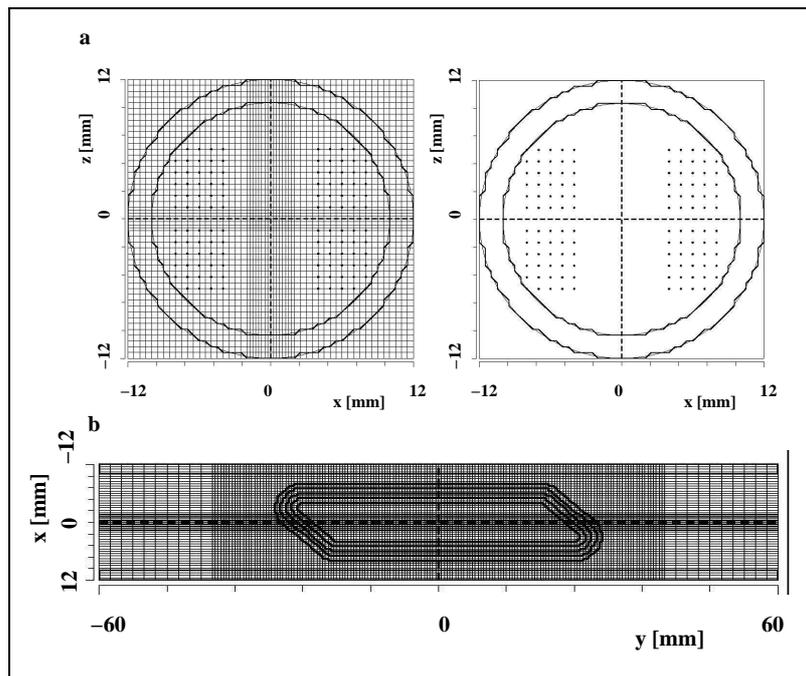


Abbildung 4.12: Realisierung der Parallelogramm-Geometrie mit abgerundeten Ecken auf dem gleichen Gitter wie bei der reinen Parallelogramm-Spule. Auch hier werden die Teilspulen durch jeweils 30 Filamente angenähert. Diese Geometrie entspricht eher der Situation, wie sie bei den gewickelten Spulen vorliegt, wie ein Vergleich mit Abbildung 4.2 zeigt.

Die in [8] vorgeschlagene und hier ab Seite 53 beschriebene Geometrie stellt durch die Annahme von verschwindend geringen Krümmungsradien der Wicklungen an den Ecken des Wickelkörpers eine starke Idealisierung dar. Dies gilt vor allem für die äußeren Wicklungslagen der Spule. Aus Bild 4.2 geht schon hervor, dass die Abrundung bis in den Bereich der Strahlaussparung am Wickelkörper reicht. Insgesamt weisen die Stirnflächen über ihre gesamte Länge eine leichte Krümmung auf. Diese Krümmung ist fertigungstechnisch bedingt.

In Abbildung 4.12 ist eine Geometrie zu sehen, die versucht, der realen Situation möglichst nahe zu kommen. Gut zu erkennen ist, dass die spitzen Ecken durch konzentrische Kreissegmente abgerundet wurden. Vor allem das äußerste Filament weist deutliche Unterschiede zur Geometrie von Seite 53 auf. Die Rundungen reichen bis in den Strahlbereich hinein, in dem bei allen Simulationen die Gitterpunktdichte erhöht wurde. Auf eine Umsetzung der Stirnflächenkrümmung wurde allerdings verzichtet, da sich dieser große Krümmungsradius auf dem diskreten Gitter nicht genügend realistisch umsetzen lässt. Die beiden Geometrien sind also bis auf die abgerundeten Ecken identisch, und daher werden im Folgenden nur noch die Unterschiede der beiden Feldkonfigurationen beschrieben.

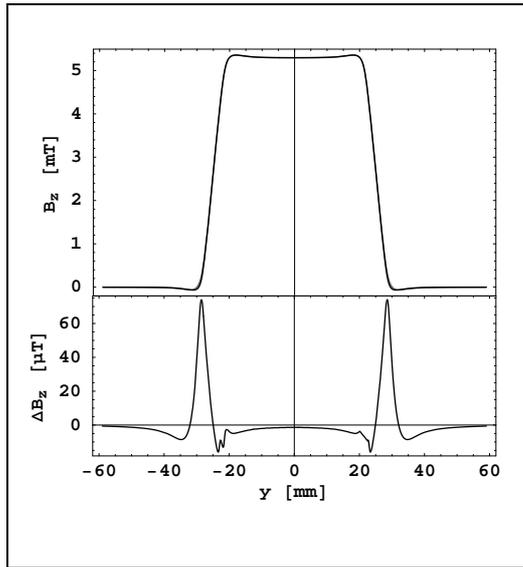


Abbildung 4.13: Verlauf der  $B_z$ -Komponente mit und ohne Berücksichtigung der abgerundeten Ecken entlang der Strahlachse. Beide Verläufe unterscheiden sich nur sehr wenig, deshalb zeigt der untere Plot die Differenz zwischen den Verläufen bei den beiden Geometrien.

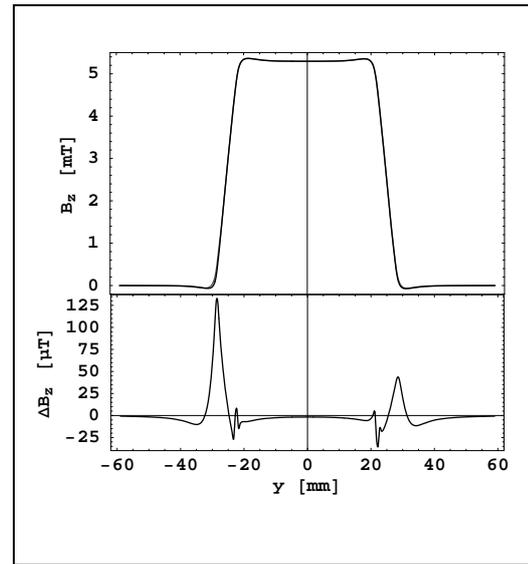


Abbildung 4.14: Verlauf der  $B_z$ -Komponenten beider Geometrien. Wie in Abbildung 4.13, aber nun abseits der Strahlachse (bei  $(x = -0.29 \text{ mm}, y = 0.41 \text{ mm})$  wie in Abbildung 4.15). Der untere Verlauf zeigt wieder die Differenz entlang der Strahlachse.

#### 4.1.2.5 Unterschiede zwischen beiden Simulationen

Da sich beide Geometrien vor allem in den Randbereichen der Spinecho-Spule unterscheiden, werden dort auch die größten Unterschiede für die resultierenden Felder erwartet. Zeigt sich beim Vergleich der beiden Geometrien, dass die Unterschiede der einzelnen Komponenten auf beiden Seiten der Spule gleich sind, so kann davon ausgegangen werden, dass die beschleunigenden und abbremsenden Feldgradienten auf beiden Seiten der Spule identisch und antiparallel orientiert sind. Nur in diesem Falle ist es möglich, die Teilwellenpakete eines Strahlteilchens, das die Spinecho-Anordnung durchquert, vollständig zur Überlagerung zu bringen: Weisen die Gradienten an beiden Enden der ersten Spule zu große Unterschiede in Richtung und Betrag auf, so werden im Allgemeinen die Trajektorien der Teilwellenpakete eines einzelnen Teilchens zwischen den beiden Spinecho-Spulen vom Idealfall (parallel zur Strahlachse) abweichen. Dann ist es nur teilweise oder sogar überhaupt nicht möglich, die Teilwellenpakete mit der zweiten Spinecho-Spule wieder zur Überlagerung zu bringen. Dies führt zu einem reduzierten oder völlig verschwindenden Wert der Polarisation gegenüber dem maximal möglichen. Wichtig wird dieser Effekt vor allem für Strahlteilchen, die „off-axis“<sup>8</sup> durch die Spinecho-Anordnung fliegen, da dort die Einflüsse der Filamentrundungen am stärksten sind.

Beschränkt man sich zunächst nur auf die Strahlachse, so wird deutlich, dass aufgrund der Symmetrie der beiden Geometrien direkt auf der Strahlachse die beiden Komponenten  $B_x$  und  $B_y$  sowohl bei der reinen Parallelogrammgeometrie als auch bei der mit abgerundeten Ecken verschwinden müssen. Hier hat die Modifikation der Ecken also keine Auswirkung. Bei der  $B_z$ -Komponente werden die Unterschiede vor allem in den äußeren Randbereichen beim Eintritt und beim Verlassen der Spule auftreten.

In Abbildung 4.13 ist der Verlauf von  $B_z$  auf der Strahlachse für beide Geometrien dargestellt. Die schwarze Kurve zeigt den Verlauf für die Geometrie mit den abgerundeten Ecken, die graue spiegelt den Verlauf für die Parallelogramm-Geometrie wider. Da die Unterschiede sehr gering ausfallen, ist darunter die Differenz der beiden  $B_z$ -Verläufe auf dem Weg durch die Spule gezeigt. Gleiches gilt auch für Abbildung 4.14 und den Verlauf von  $B_x$  und  $B_y$  in Abbildung 4.15. In den wesentlichen Zügen stimmen die Unterschiede an beiden Enden der Spule überein. Wie erwartet treten die größten Unterschiede an den Außenseiten der

<sup>8</sup>Gemeint sind damit alle Trajektorien parallel zur Strahlachse, die nicht mit dieser zusammenfallen.

Spule auf. Bezogen auf das Maximum der Feldverteilung handelt es sich jedoch nur um Prozent-Effekte. Aus diesem Grund ist im oberen Teil der Abbildung im Wesentlichen nur der Verlauf für die Geometrie mit abgerundeten Ecken zu erkennen. Beiden  $B_z$ -Verläufen gemeinsam sind die Überschwinger des Magnetfelds an den Enden der Spule. Dieser konnte schließlich auch bei den gefertigten Spulen nachgewiesen werden, wie Abbildung 4.4 zu entnehmen ist.

Abseits der Strahlachse ändert sich das Bild: Die Differenzen werden größer und vor allem geht die Symmetrie zwischen den beiden Spulenden verloren. Diese Situation ist in Abbildung 4.14 dargestellt. Die Form der Differenz ist auf beiden Seiten zwar ähnlich, allerdings ist das Verhältnis der Maxima nicht mehr 1,0, sondern liegt nun bei 2,98.

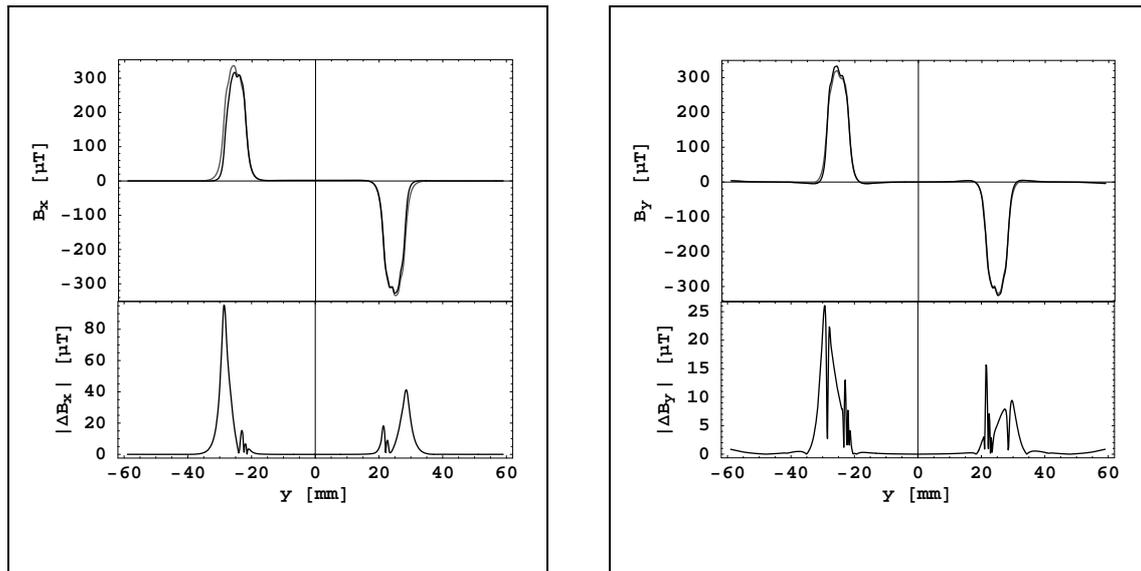


Abbildung 4.15: Unterschiede bei  $B_x$  (links) und  $B_y$  (rechts) zwischen den Geometrien mit und ohne abgerundete Ecken. Gezeigt sind jeweils die Feldverläufe (oben) entlang einer zur Strahlachse parallelen Trajektorie bei ( $x = -0.29$  mm,  $y = 0.41$  mm) und die Differenz zwischen beiden Geometrien (unten).

Bei den Komponenten senkrecht zum Transversalfeld  $B_z$  verhält es sich ähnlich, allerdings sind hier die relativen Änderungen gravierender als beim Transversalfeld: Während sich dort die Abweichungen auf dem Niveau von etwa einem Prozent abspielen, liegen die Abweichungen im Bereich von etwa 28% bei  $B_x$  und 8% bei  $B_y$ , jeweils für die Maxima<sup>9</sup>. Die Unterschiede zwischen den Verläufen von  $B_x$  und  $B_y$  sind getrennt in Abbildung 4.15 dargestellt. Im oberen Teil sind die Verläufe für die Geometrie mit abgerundeten Ecken (schwarze Kurve) bzw. die Parallelogramm-Geometrie (grau) gezeigt. Der untere Teil zeigt die Differenz zwischen den Verläufen beider Geometrien für die jeweilige Komponente. Auch hier fällt wieder auf, dass sich die Geometrien vor allem für  $y < 0$  unterscheiden. Dies ist darin begründet, dass für die betrachtete Trajektorie bei  $x = -0.29$  mm und  $y = 0.41$  mm der Einfluss der Rundungen an der spitzen Ecke des Wickelkörpers schon deutlich spürbar wird. Das Verhältnis der maximalen Abweichungen für  $x < 0$  und  $x > 0$  liegt für  $B_x$  bei etwa 2,29 und für  $B_y$  bei 2,72.

Zusammen mit dem Verhalten der Magnetfeld-Komponente  $B_z$  führt das dazu, dass der Feldgradient bei Eintritt ins Magnetfeld nicht mehr mit dem Feldgradienten beim Verlassen des Magnetfeldes übereinstimmt. Dieser Effekt wird durch die Krümmung über die gesamte Stirnfläche und eventuell vorliegende Wickelfehler<sup>10</sup> innerhalb der unteren Lagen der Spule in der realen Laborsituation noch verstärkt.<sup>11</sup>

<sup>9</sup>In diesem Zusammenhang beachte man, dass in Abbildung 4.13 und 4.14  $B_z$  in mT, die Differenz aber in  $\mu\text{T}$  skaliert ist. In Abbildung 4.15 sind sowohl  $B_{x/y}$  als auch die Differenzen in  $\mu\text{T}$  gezeigt.

<sup>10</sup>Beim Wickeln der Spulen kann es vorkommen, dass Drähte von oberen Lagen vor allem an den spitzen Enden der Wickelkörper zwischen die Drähte von darunterliegenden Wicklungen geraten. Dann verläuft der Stromfluss in der Stirnfläche nicht für alle Filamente parallel.

<sup>11</sup>Beide Effekte wurden wegen des bei der Simulation mit MAFIA verwendeten diskreten Gitters nicht berücksichtigt.

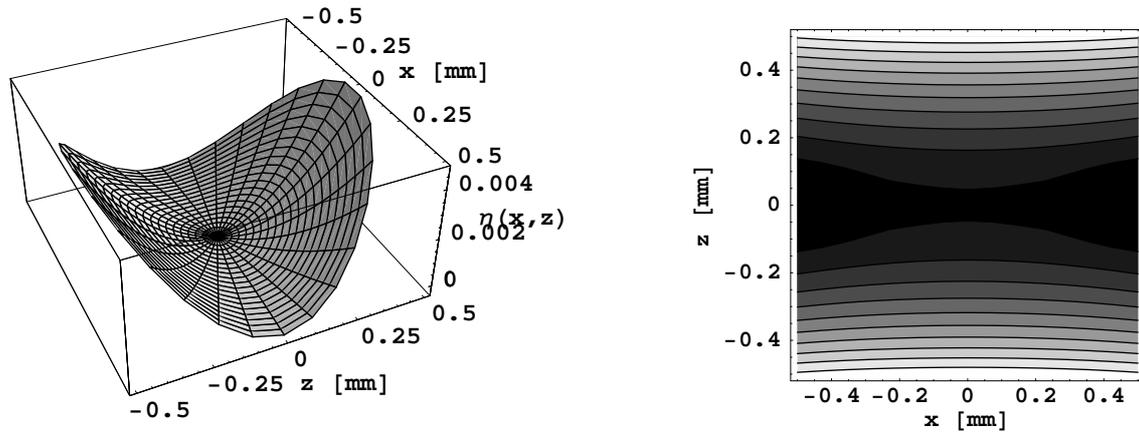


Abbildung 4.16: Inhomogenität des Feldintegrals bei strahlparallelen Trajektorien als Funktion der Position im Strahl für die Geometrie mit abgerundeten Ecken. In der linken Darstellung als dreidimensionale Kontur, rechts als Höhenlinien gezeigt. Auch hier weisen hellere Grauwerte größere Werte der Inhomogenität aus.

Wie auf Seite 57 lässt sich für die Geometrie mit abgerundeten Ecken die Inhomogenität des Magnetfeld-Integrals für parallele Trajektorien zur Strahlachse als Funktion des Ortes im Strahlquerschnitt berechnen. Abbildung 4.16 zeigt die Inhomogenität für den gesamten Strahlquerschnitt. Die Größenordnung ist die gleiche wie in Abbildung 4.9, die die Inhomogenität für die Parallelogramm-Geometrie darstellt. Allerdings befindet sich jetzt auf der Strahlachse kein Minimum, sondern ein Sattelpunkt, was besonders aus dem rechten Teil der Abbildung 4.16 deutlich wird.

Die wesentlichen Unterschiede zwischen den beiden flachen Geometrien liegen darin, dass sich bei der Spule mit abgerundeten Ecken die Feldgradienten beim Betreten und Verlassen des Magnetfeld-Bereichs unterscheiden. Dies gilt für Strahlteilchen, die auf einer achsparallelen, in  $x$ -Richtung verschobenen Flugbahn abseits der Strahlachse durch das Feld der Spule fliegen. Da diese Unterschiede der Feldgradienten aber nicht in die Berechnung der Inhomogenität nach (4.2) eingehen, unterscheiden sich die Inhomogenitäten und damit auch die Polarisationsverläufe der beiden Geometrien nicht wesentlich voneinander. Aus diesem Grund wird auf eine erneute Darstellung der Maschinenfunktion verzichtet und statt dessen auf Abbildung 4.10 verwiesen.

Wie die Simulation beider Geometrien mit flachen Filamenten zeigt, erscheinen Spulen dieser Bauart nicht geeignet für den Einsatz beim transversalen Spinecho: Durch die vergleichsweise großen Feldkomponenten in Strahl- sowie in Polarisationsrichtung beim Betreten und Verlassen der Magnetfeld-Bereiche kommt es zu deutlichen Inhomogenitäten im Magnetfeld-Integral der Spulen. Außerdem hat der endliche Wicklungsradius an den Ecken des Wickelkörpers einen negativen Einfluss auf die Ausrichtung des Feldgradienten abseits der Strahlachse. Gleiches gilt für die Krümmung der Stirnflächen selbst, welche bei den Simulationen allerdings nicht berücksichtigt wurde.

## 4.2 Die Geometrie mit gewölbten Filamenten

Aufgrund der Erkenntnisse aus dem vorherigen Kapitel 4.1 wurde schließlich ein neues Spulendesign entwickelt, das die zwei hauptsächlichen Designfehler der ersten Familie von Transversal-Spinecho-Spulen minimieren soll:

- Durch den geringen Abstand zwischen Strahl und Spulenwicklungen auf den Stirnseiten der Spulen kommt es zu großen unerwünschten Magnetfeld-Komponenten senkrecht zum transversalen Magnetfeld. Diese Komponenten sind im Bereich des Strahlquerschnitts nicht homogen, dadurch kommt es

zu einem drastischen Abfall der Polarisation bei größer werdenden Aufspaltungen der Teilwellenpakete.

- Durch die relativ hohen Abweichungen von der idealen Parallelogramm-Geometrie, verursacht durch endliche Krümmungsradien an den Ecken des Wickelkörpers, die Krümmung der Stirnfläche sowie Ungenauigkeiten beim Wickeln der Spulen, kommt es abseits der Strahlachse<sup>12</sup> zu Abweichungen der tatsächlichen Orientierung des Feldgradienten von der vorgegebenen Richtung. Auch dies führt zu einer verringerten Strahlpolarisation, wurde aber in Abbildung 4.10 nicht berücksichtigt.

Es musste also ein Design gefunden werden, das gegenüber den gewickelten Transversal-Spulen folgende Verbesserungen aufweist:

- Die Richtung des Stroms soll möglichst über die gesamte Stirnfläche der Spule zuverlässig vorzugeben sein. Störende Randeffekte bei Änderung der Stromrichtung sind möglichst weit vom Strahl entfernt zu halten.
- Der Einfluss der Komponenten  $B_x$  und  $B_y$  auf den Strahl ist zu reduzieren.

Als weitere Randbedingung sollten die neuen Spulen ebenfalls in die vorhandene  $\mu$ -Metall-Abschirmung passen und durch ein entsprechendes Magnetfeld-Integral für eine ausreichende Aufspaltung der Teilwellenpakete sorgen.

Um die Stirnflächen der Spulen exakt festzulegen, wurden die stromführenden Teile der Spule nicht aus dünnem, flexiblem Draht gewickelt, sondern aus massivem Kupfer gefertigt. Die Wahl fiel auf Drahterodieren als Fertigungstechnik, weil damit noch vergleichsweise filigrane Strukturen erzeugt werden können. Abbildung 4.17 zeigt den ersten Prototypen einer Wicklungslage für eine drahterodierte Spule. Die Ausmaße der Wicklungen entsprechen den Maßen des Wickelkörpers für die Spulen aus Kapitel 4.1.1. Die Lage wird aus einem Kupferblech herausgerodiert. Materialspannungen, die beim Herstellungsprozess des Bleches entstehen, sorgen dafür, dass die einzelnen Wicklungen dieser Lage im gezeigten Bild noch nicht parallel zueinander angeordnet sind. Durch Einlegen von isolierenden Distanzstücken werden die Wicklungen schließlich parallel zueinander ausgerichtet.

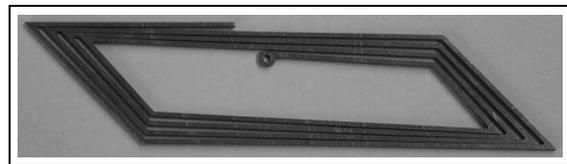


Abbildung 4.17: Erster Entwurf für das Filament einer drahterodierten Spule.

Damit lassen sich die Krümmungsradien an den Ecken sehr stark reduzieren und die Einflüsse dadurch hervorgerufener Streufelder auf den Strahl minimieren. Außerdem ist gewährleistet, dass die Stirnflächen der Spule und damit zumindest der Gradient der  $B_z$ -Komponente auf der gesamten Breite unter einem Winkel von jeweils  $45^\circ$  zur Strahlachse stehen.

Um die  $x$ - und  $y$ -Komponenten des Spulenfeldes im Bereich des Strahls und damit ihren störenden Einfluss zu reduzieren, könnte zunächst einmal daran gedacht werden, die Spinecho-Spulen aus einer einzigen Spule zu fertigen, anstatt sie aus zwei getrennten Teilspulen zusammenzusetzen. Dadurch würden unerwünschte  $B_x$ - oder  $B_y$ -Komponenten eines Filaments von jeweils benachbarten Filamenten kompensiert. Allerdings verbietet sich, wie schon erwähnt, bei Atomstrahlexperimenten aus naheliegenden Gründen (im Gegensatz zu vielen Experimenten mit Neutronenstrahlen) der Einsatz von Material im Strahlvolumen.

Als Beispiel für ein Neutronen-Experiment, welches auf dem Spinecho-Prinzip mit gekippten Spulen beruht, sei SESANS genannt. Bouwman et al. [26] setzen bei ihrem Kleinwinkel-Neutronen-Spinecho-Spektrometer magnetisierte Folien zur Realisierung der Spin-Flips ein. Diese Folien befinden sich direkt im Neutronenstrahl zwischen den Polschuhen von Elektromagneten, welche die Präzessionsfelder erzeugen. Die Folien sind um  $45^\circ$  gegenüber der Strahlachse und der Magnetfeld-Richtung verkippt. Innerhalb der Folie, deren Magnetisierung durch das transversale Feld in Sättigung getrieben ist, entsteht ein Magnetfeld in Richtung der Folienebene. Die Projektion des transversalen Feldes in die Folienebene zeigt in die gleiche Richtung wie das Sättigungsfeld der Folie. Der Spin polarisierter Neutronen, der zunächst in Richtung des transversalen Magnetfeldes orientiert ist, behält bei Eintritt in die Folie seine Richtung bei.

Als Beispiel für ein Neutronen-Experiment, welches auf dem Spinecho-Prinzip mit gekippten Spulen beruht, sei SESANS genannt. Bouwman et al. [26] setzen bei ihrem Kleinwinkel-Neutronen-Spinecho-Spektrometer magnetisierte Folien zur Realisierung der Spin-Flips ein. Diese Folien befinden sich direkt im Neutronenstrahl zwischen den Polschuhen von Elektromagneten, welche die Präzessionsfelder erzeugen. Die Folien sind um  $45^\circ$  gegenüber der Strahlachse und der Magnetfeld-Richtung verkippt. Innerhalb der Folie, deren Magnetisierung durch das transversale Feld in Sättigung getrieben ist, entsteht ein Magnetfeld in Richtung der Folienebene. Die Projektion des transversalen Feldes in die Folienebene zeigt in die gleiche Richtung wie das Sättigungsfeld der Folie. Der Spin polarisierter Neutronen, der zunächst in Richtung des transversalen Magnetfeldes orientiert ist, behält bei Eintritt in die Folie seine Richtung bei.

<sup>12</sup>Die Krümmung der Stirnflächen kann sogar dazu führen, dass selbst auf der Strahlachse die Feldgradienten an beiden Enden der Spule nicht antiparallel orientiert sind.

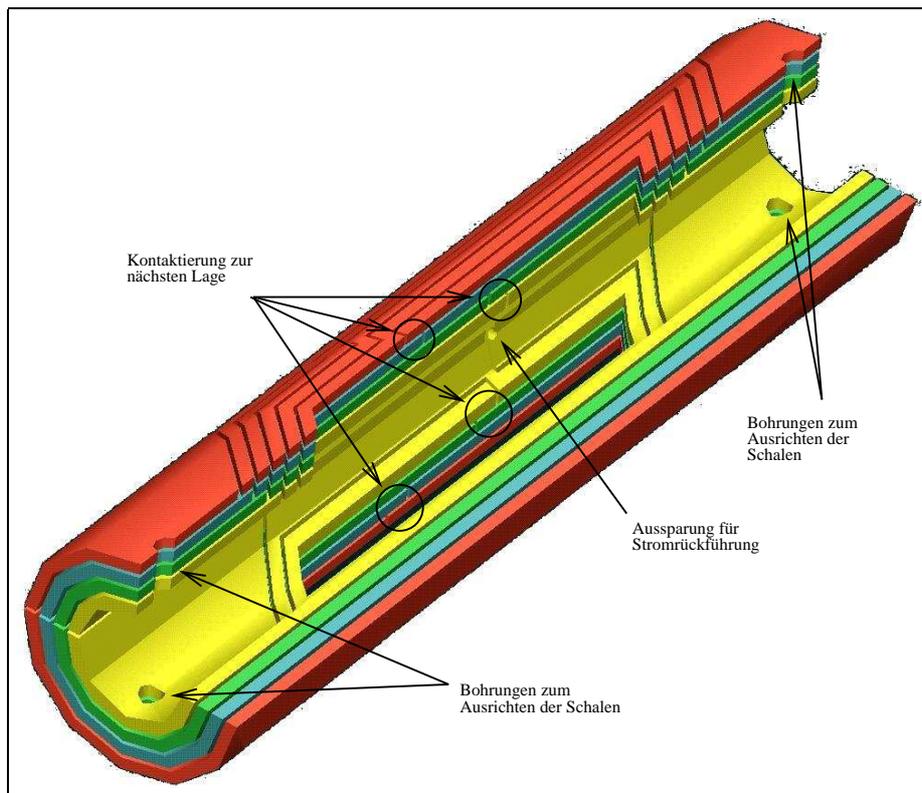


Abbildung 4.18: Schnitt durch eine Spinecho-Spule mit gewölbten Filamenten. Die Spule besteht aus einer oberen und einer unteren Teilspule. Der Anschauung wegen ist die obere Teilspule im Schnitt gezeigt. Die Kreise markieren die Stellen, an denen jeweils die beiden inneren bzw. die beiden äußeren Schalen einer Teilspule miteinander kontaktiert sind. Die Bohrungen an den Enden der einzelnen Schalen dienen dem Ausrichten der gesamten Anordnung.

Innerhalb der Folie beginnt der Neutronenspin nun, um das Feld in der Folienebene zu präzedieren. Bei richtiger Wahl der Folienstärke kann erreicht werden, dass diese Präzession gerade  $\pi/2$  bzw.  $\pi$  beträgt. Beim Verlassen der Folie behält der Spin wieder seine Richtung bei, die sich nun aber um  $\pi/2$  bzw.  $\pi$  von der vorherigen unterscheidet, während die Richtung des transversalen Magnetfelds beibehalten wurde. Die magnetisierten Folien wirken quasi als Spin-Flipper. Gleichzeitig sorgen sie dafür, dass der Übergang zwischen dem Teil des transversalen Feldes, der als Führungsfeld fungiert und dem Teil des Transversalfeldes, in dem der Spin präzediert, wohldefiniert ist.

Bei einem Atomstrahl-Spinecho mit verkippten Spulen muss dagegen ein anderer Weg beschritten werden. Da das Magnetfeld-Integral der Transversal-Spule durch die parallel zur Strahlachse verlaufenden Teile der Filamente erzeugt wird, ist die Richtung des Feldgradienten im Wesentlichen durch den Versatz dieser Teilstücke längs der Strahlachse vorgegeben. Da die Filamentabschnitte an den Stirnflächen somit nur zum Schließen des Stromkreises benötigt werden, bietet es sich schließlich an, die unerwünschten Einflüsse dieser Abschnitte auf den Strahl dadurch zu reduzieren, dass deren Abstand zur Strahlachse vergrößert wird. Damit ist es zwar nicht möglich, dass sich die Komponenten  $B_x$  und  $B_y$  im Strahlvolumen jeweils kompensieren, allerdings sollten sie sich so deutlich reduzieren lassen. Das gleiche Konzept wurde in unserer Arbeitsgruppe beim Resonanz-Spinecho für die Ein- und Auskoppelspulen und bei der Suche nach der anomalen Larmorphase in Form von „Maulspulen“ erfolgreich angewandt [27, 28].

### 4.2.1 Die gefertigten Spulen

Die Maßgabe, dass die neuen Spulen ebenfalls in die vorhandene  $\mu$ -Metall-Abschirmung passen sollen, gibt den maximalen Abstand der Stirnflächen-Filamente zur Strahlachse vor. Abbildung 4.18 zeigt den CAD-Entwurf der so veränderten Spule. Auch diese Spule besteht aus zwei Teilspulen, die ihrerseits aus mehreren halbrohrförmigen Schalen bestehen. Der wesentliche Unterschied zu den bisherigen Spulen ist der, dass der Stromfluss nicht mehr nur in einer Ebene erfolgt. Die Schalen haben einerseits tragende Funktion für die Spule, andererseits enthalten sie auch die Filamente, durch die im Betrieb der Strom fließt. Ein solches Filament, projiziert auf die Ebene zwischen den Teilspulen, hat etwa die Form, wie sie in Abbildung 4.17 zu sehen ist. Dieser Filamentverlauf wird auf eine halbkreisförmige Schale projiziert.

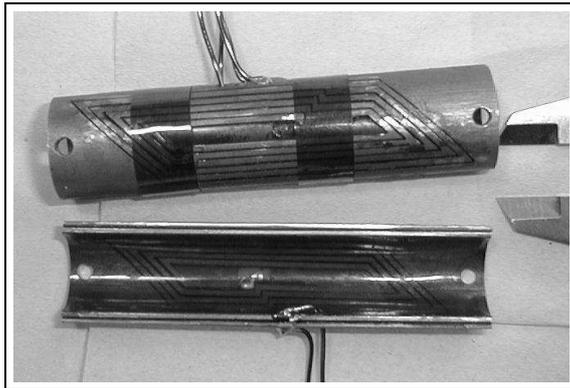


Abbildung 4.19: Die obere Spule ist fertig kontaktiert. Sie besteht aus Teilspulen mit jeweils nur zwei Schalen, die im nächsten Arbeitsschritt noch aufeinander ausgerichtet werden müssen. Unten ist eine Teilspule der anderen Spinecho-Spule zu sehen. Hier ist die Kontaktierung für die Stromversorgung zu erkennen. Die Schieblehre zeigt 1 cm an.

Die Wicklung verläuft also auf den beiden Längsseiten parallel zur Strahlachse. An den unter einem Winkel von  $45^\circ$  zur Strahlachse stehenden Stirnflächen wird der Strom auf einer Bahn mit konstantem Abstand zur Strahlachse geführt. Zu erkennen ist dies beispielsweise in Abbildung 4.19. Dadurch ist gewährleistet, dass der Strom an den Stirnflächen dem Strahl nicht näher kommt als in den Filamenten parallel zum Strahl. So können die unerwünschten Magnetfeld-Komponenten  $B_x$  und  $B_y$ , die zu einem drastischen Abfall der Polarisation führen, im Bereich des Strahls um eine Größenordnung reduziert werden. Genauer dazu findet sich in Abschnitt 4.2.2.

Der Stromfluss durch eine der beiden Teilspulen beginnt zunächst in der äußersten Schale, wo er von außen nach innen geführt wird. Am Ende des Filaments wechselt der Strom über eine Kontaktierung in die zweitäußerste Schale. Die Kontaktstellen sind in Abbildung 4.18 für alle Schalen mit

Kreisen markiert. In der zweitäußersten Schale fließt der Strom unter Beibehaltung des Drehsinns von innen nach außen, wo sich am Rand der Schale die Kontaktierung zur zweitinnersten Schale befindet. In der Abbildung ist diese Kontaktstelle nicht zu sehen. Nachdem der Strom durch die zweitinnerste Schale von außen nach innen geflossen ist, erfolgt schließlich der Übergang auf die innerste Schale. Diese Kontaktstelle ist wieder sichtbar und mit einem Kreis markiert. In der innersten Schale erfolgt der Stromfluss wieder von innen nach außen. Am Ende des innersten Filaments wird der Stromkreis durch einen Draht geschlossen. Dieser Draht wird durch eine Aussparung, die sich in allen Schalen befindet, ganz nach außen geführt. Auch diese Öffnung ist im Bild zu erkennen.

Abbildung 4.20 zeigt den Schnitt durch eine Spinecho-Spule. Die Schnittebene ist durch Strahl- und Magnetfeld-Richtung gegeben. Die innerste Schale besitzt zwei Wicklungen, die äußerste fünf. Dies ist deshalb notwendig, da alle Filamente etwa den gleichen Leitungsquerschnitt aufweisen sollen. Auf der innersten Schale steht dann aber weniger Material für das Filament zur Verfügung als auf der äußersten. Dabei wird die zusätzliche Wicklung jeweils an der Außenseite angefügt, sodass die Stirnflächen der Spule eine trichterartige Form aufweisen. Dadurch haben die inneren Windungen jeder Schale die gleichen Ausmaße.

Die Fertigung dieser Spulen geschieht in mehreren Abschnitten, die ausführlich in Anhang B beschrieben sind.

### 4.2.2 Simulation der Spulen

In diesem Abschnitt wird die MAFIA-Simulation für die Spulen mit den gewölbten Filamenten beschrieben. Das verwendete Gitter ist dabei das gleiche wie bei den bisher beschriebenen Simulationen. Auf eine Abbildung der Geometrie-Realisierung wird hier verzichtet, weil die Filamente nun nicht mehr zweidimensionale Gebilde sind und deshalb entsprechende Schnitte niemals den kompletten Stromfluss darstellen

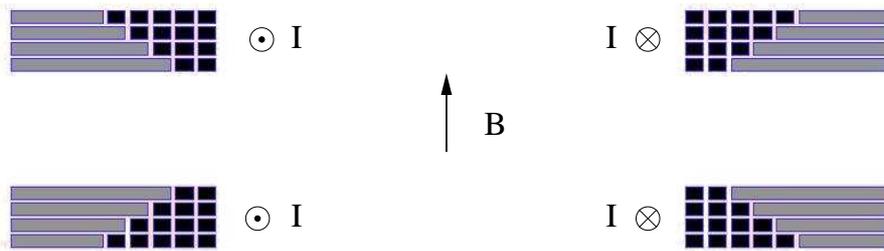


Abbildung 4.20: Schnitt durch die Spinecho-Spule in der Ebene, die durch Strahlachse und Magnetfeld-Richtung gegeben ist. Die schwarzen Rechtecke stellen die stromführenden Teile der Spule dar. Ausgehend von zwei Wicklungen in der innersten Lage kommt in jeder neuen Lage an der Stirnseite eine weitere Wicklung hinzu. Gut zu erkennen ist die dadurch resultierende Trichterform an beiden Stirnflächen. Strom- und Magnetfeld-Richtung sind durch die Pfeile gekennzeichnet.

können. Das Koordinatensystem ist genau so orientiert wie bei den Simulationen für die Geometrien mit flachen Filamenten: Das transversale Magnetfeld der Spule zeigt in  $z$ -Richtung, der Strahlengang folgt der  $y$ -Richtung, und die  $x$ -Richtung steht senkrecht auf den beiden anderen.

Nachdem die Spule in EUCLID konstruiert worden ist, wurden die Koordinaten der Punkte exportiert, an denen der gerade Filamentverlauf in den Bogen der Wölbung übergeht. Die Daten wurden daraufhin in MATHEMATICA importiert und die Wölbungen durch Polygonzüge mit jeweils 16 Stützstellen angenähert, anschließend wurde die Geometrie mit MAFIA erzeugt und das Magnetfeld simuliert.

#### 4.2.2.1 Ergebnis der Simulation

In Abbildung 4.21 ist der Magnetfeld-Vektor dargestellt, wie er sich aus der Simulation ergibt. Der Deutlichkeit halber wurde darauf verzichtet, die  $\mu$ -Metallabschirmung darzustellen. Die drei ebenen Darstellungen zeigen jeweils die Sicht auf die Ebene, die normal zur angegebenen Richtung steht. In der Ansicht in  $x$ -Richtung ist die mittlere Spalte der Vektorpfeile im Bereich des Strahlvolumens und hat also direkten Einfluss auf die Strahlpolarisation. In der Ansicht in  $z$ -Richtung ist die mittlere Zeile von Relevanz. Der Blick in  $y$ -Richtung zeigt, dass im Bereich des Strahlvolumens (Mitte dieser Teilansicht) in Richtung des Strahls (in die Papierebene hinein) keine Abweichungen des Magnetfelds von der  $z$ -Richtung zu erkennen sind. Diese treten erst ober- und unterhalb des Strahls in der Nähe der Filamente auf. Dies ist auch in der  $x$ -Ansicht zu erkennen: Alle Vektorpfeile im Bereich des Strahlvolumens zeigen in  $z$ -Richtung. Auch in der dreidimensionalen Ansicht rechts unten in Abbildung 4.21 ist bei genauer Betrachtung zu erkennen, dass zwar immer noch störende Magnetfeld-Komponenten in der  $x$ - bzw.  $y$ -Richtung vorhanden sind, diese aber im Wesentlichen direkt ober- und unterhalb der Filamentbögen der Stirnfläche und nicht im Strahlvolumen zu finden sind. Wie sich aus der folgenden Betrachtung der einzelnen Komponenten ergibt, konnte mit der vorliegenden Geometrie der störende Einfluss der Stirnflächen-Filamente auf das Strahlvolumen deutlich reduziert werden.

In den Abbildungen 4.22 und 4.23 ist der gemessene und der simulierte Verlauf der  $z$ -Komponente des Magnetfelds auf der Strahlachse zu sehen. Die Messung der transversalen Magnetfeld-Komponente bestätigt die Vorhersagen aus der Simulation. Dieser Verlauf ist direkt zu vergleichen mit beispielsweise dem aus Abbildung 4.5.

Zunächst fällt auf, dass der gesamte Verlauf nun wesentlich „weicher“ ist als bei den Spulen mit flachen Filamenten. Außerdem sind die Überschwinger auf beiden Seiten des Magnetfeld-Anstiegs bzw. -Abfalls beim Betreten und Verlassen der Spule verschwunden. Letzteres rührt daher, dass nun aufgrund des größeren Abstands der Filamente auf den Stirnseiten das Nahfeld der Wicklungen im Bereich des Strahlvolumens keine Rolle mehr spielt. Da der Abstand zwischen den beiden Teilspulen nun größer ist als bei der Verwendung von flachen Filamenten, wölben sich die Feldlinien an den Stirnflächen der Spule weiter nach außen: In Abbildung 4.23 beginnt  $B_z$  bei größeren Werten von  $|z|$  anzusteigen (siehe dazu auch Abbildung 4.5),

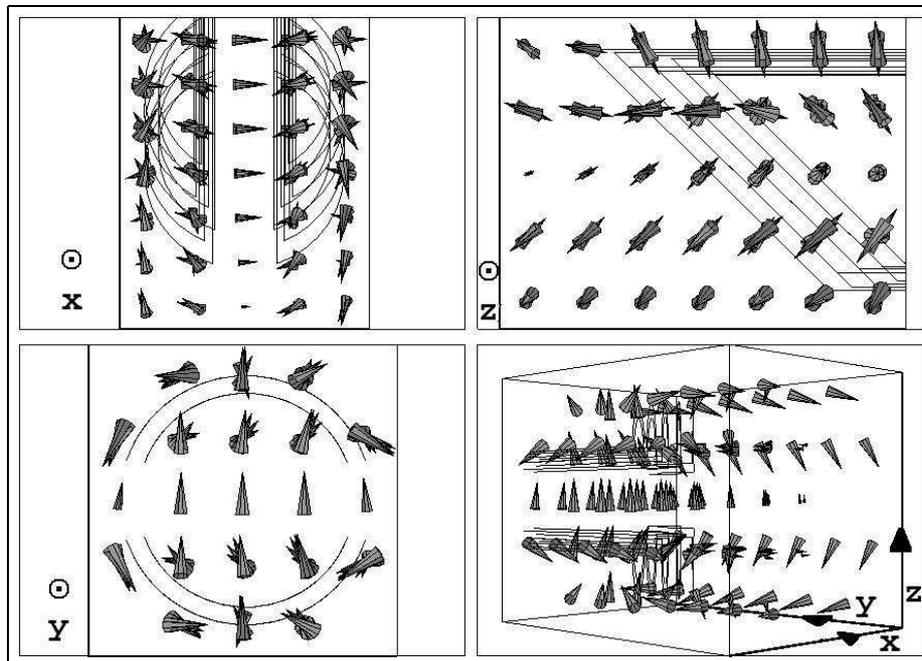


Abbildung 4.21: Magnetfeld-Vektor für eine Spule mit gewölbten Filamenten in zwei Lagen. Dargestellt ist nur der Eintrittsbereich in die Spule in Schnitten jeweils senkrecht zu den angegebenen Koordinatenachsen. Die Ansicht rechts unten zeigt den Blick entlang der Spulen-Stirnfläche. Die Länge der Pfeile wurde auf den längsten normiert und logarithmisch skaliert ( $1 \rightarrow 1$ ,  $0.1 \rightarrow 2/3$ ,  $0.01 \rightarrow 1/2$ ,  $0.001 \rightarrow 0$ ), damit auch noch kleine Vektoren sichtbar werden.

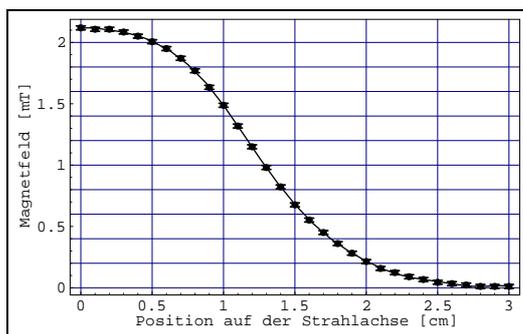


Abbildung 4.22: Gemessener Verlauf des transversalen Magnetfelds  $B_z$  entlang der Strahlachse beim Eintritt in eine transversale Spinecho-Spule mit gewölbten Filamenten.

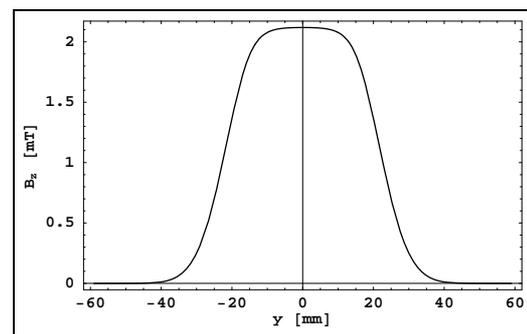


Abbildung 4.23: Simulierter Verlauf der  $z$ -Komponente des Magnetfelds auf der Strahlachse ( $x = z = 0$  mm) bei einem angenommenen Spulenstrom von 1000 mA.

obwohl die Projektion der äußersten Filamente auf die  $x$ - $y$ -Ebene bei allen Geometrien die Strahlachse an der selben Stelle schneidet. Verstärkend kommt noch hinzu, dass aus schon genannten Gründen nicht alle Schalen die gleiche Wicklungszahl aufweisen. Insgesamt führt das zu einem schwächeren Anstieg von  $B_z$  als bei Schalen mit gleicher Wicklungszahl.

Ähnlich wie bei den Magnetfeld-Messungen an der Spule mit flachen Wicklungen ist auch hier der Verlauf der Messwerte etwas steiler als es die Simulation vorhersagt. Dies ist, ähnlich wie schon vorher, darauf zurückzuführen, dass bei der Messung die Hallsonde nicht genau auf der Strahlachse in die Spule hinein bewegt wurde.

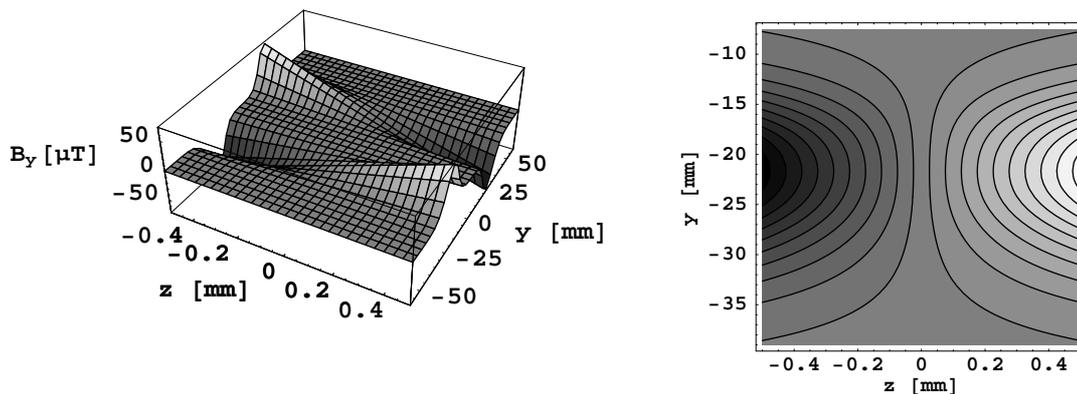


Abbildung 4.24: Verlauf der  $y$ -Komponente des Magnetfelds für  $x = 0$  mm. Die Strahlachse verläuft bei  $z = 0$  mm. Die Bilder zeigen einen Streifen, der in seiner Breite etwa dem maximalen Strahldurchmesser entspricht. Links ist der Verlauf als Höhenprofil für den Durchgang durch die komplette Spule dargestellt. Rechts sind die Höhenlinien gezeigt, wobei sich die Darstellung nur auf den vorderen Teil der Spule beschränkt. Die Farbskala reicht von schwarz ( $-70 \mu\text{T} < B_x < -63 \mu\text{T}$ ) bis weiß ( $+63 \mu\text{T} < B_x < +70 \mu\text{T}$ ). Im grauen H-förmigen Bereich in der Mitte gilt dieses Mal  $-3.5 \mu\text{T} < B_x < +3.5 \mu\text{T}$ .

Abbildung 4.24 zeigt den Verlauf der  $y$ -Komponente des Magnetfelds in der  $y$ - $z$ -Ebene, in dem Bereich, in dem das Strahlvolumen (Durchmesser 1 mm) liegt. Die gezeigte Ebene wird durch die Strahlrichtung und das Magnetfeld vorgegeben. Links ist wieder das Höhenprofil im Bereich des Strahls durch die ganze Spule gezeigt, die Darstellung der Höhenlinien rechts beschränkt sich auf den vorderen Eintrittsbereich der Spule.

Wie auch bei den anderen Geometrien erwartet man für  $z = 0$  auf der gesamten Strahlachse eine verschwindende  $B_y$ -Komponente. Aus beiden Darstellungen geht hervor, dass dies auf der Strahlachse im Bereich von  $\pm 3.5 \mu\text{T}$  auch der Fall ist. Abseits der Strahlachse verhält sich  $B_y$  qualitativ genau so, wie es die Geometrie erwarten lässt: Der Vorzeichenwechsel sowohl beim Flug längs durch die Spule als auch quer dazu sind plausibel (siehe dazu S. 55). Ebenso wie bei  $B_z$  ist auch für die unerwünschte Komponente  $B_y$  der Verlauf weicher als bei Verwendung von flachen Filamenten. In diesem Zusammenhang ist beim Vergleich der  $y$ -Komponente dieser Simulation und den vorangegangenen zu beachten, dass die Skalierung der Plots unterschiedlich ist. Wie der Vergleich von Abbildung 4.24 und 4.25 mit 4.7 und 4.8 zeigt, kann bei Verwendung gewölbter Filamente die Feldkomponente  $B_y$  um fast eine Größenordnung reduziert werden. Wie auch bei den anderen Simulationen verhalten sich  $x$ - und  $y$ -Komponente gleich, weshalb hier auf eine Diskussion von  $B_x$  verzichtet wird.

#### 4.2.2.2 Folgerungen aus der Simulation

Mit dem simulierten Feldverlauf lässt sich nun auch für die Spulen mit gewölbten Filamenten nach Gl. (4.2) die Inhomogenität des Feldintegrals für Trajektorien parallel zur Strahlachse als Funktion des

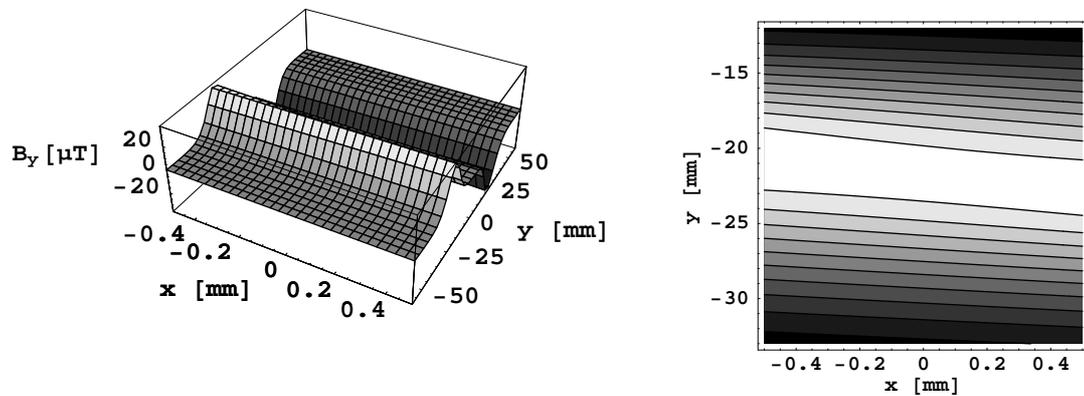


Abbildung 4.25: Verlauf der  $y$ -Komponente des Magnetfelds für  $z = 0.25 \text{ mm}$ , ungefähr einen halben Strahlradius von der Strahlachse entfernt. Beide Bilder zeigen einen Streifen, dessen Breite etwa dem maximalen Strahldurchmesser entspricht. Die Höhenliniendarstellung beschränkt sich auf den vorderen Eintrittsbereich in die Spule, um die Verkippung deutlich zu machen. Die Farbskala reicht von schwarz ( $0 \mu\text{T} < B_y < 2 \mu\text{T}$ ) bis weiß ( $18 \mu\text{T} < B_y < 20 \mu\text{T}$ ).

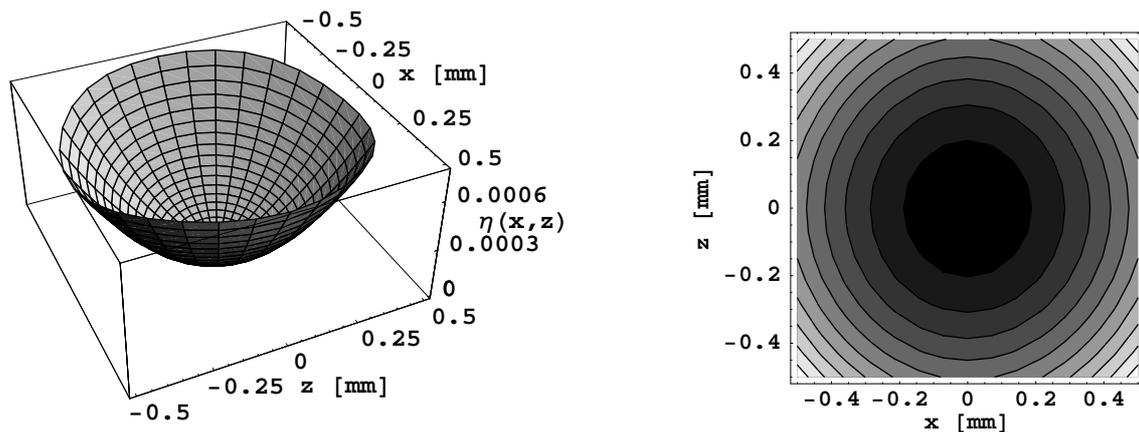


Abbildung 4.26: Inhomogenität des Feldintegrals als Funktion der Position im Strahlquerschnitt für die Geometrie mit gewölbten Filamenten. Links als dreidimensionale Darstellung, rechts als Höhenlinien gezeigt. Große Inhomogenitäten sind durch helle Graustufen dargestellt. Auffällig im Vergleich zu den Spulen mit flachen Filamenten ist, dass die Inhomogenität wieder wesentlich weniger vom Azimutwinkel  $\theta$  abhängt. Gezeigt ist nur der für den Strahldurchmesser von  $1 \text{ mm}$  interessierende Teil.

Durchflugsortes im Strahlquerschnitt berechnen. Aus der Simulation ergibt sich das in Abbildung 4.26 gezeigte Verhalten. Im Vergleich zur Inhomogenität einer Spule mit flachen Filamenten fällt auf, dass nun die Inhomogenität  $\eta$  um fast eine ganze Größenordnung geringer ist. Die wesentlich geringere Abhängigkeit der Inhomogenität vom Azimutwinkel  $\theta$  ist auf den größeren Abstand der Stirnflächenfilamente von der Strahlachse zurückzuführen.

Der durch die Inhomogenität bedingte Polarisationsverlust nach (4.3) beim Durchflug durch zwei identische Spulen ist zusammen mit den Verläufen aus Abschnitt 4.1 und in [8] in Abbildung 4.27 gezeigt. Gut zu erkennen ist, dass die Polarisation bei größer werdender Aufspaltung der Teilwellenpakete wesentlich langsamer abfällt als bei den Spulen mit flachen Filamenten. Demnach beträgt die Polarisation bei einer Aufspaltung von knapp  $700 \lambda$  zwischen den Spinecho-Spulen<sup>13</sup> nach der kohärenten Überlagerung der beiden Teilwellenpakete am Ende der zweiten Spinecho-Spule noch 35%. Der idealisierte Polarisationsverlauf aus [8] (strichpunktiert), bei dem die  $x$ - und  $y$ -Komponenten des Magnetfelds nicht berücksichtigt wurden, sagt bei dieser Aufspaltung noch einen Wert von 60% voraus, erst ab einer Aufspaltung von mehr als  $1000 \lambda$  sollte die Polarisation unter 35% abfallen.

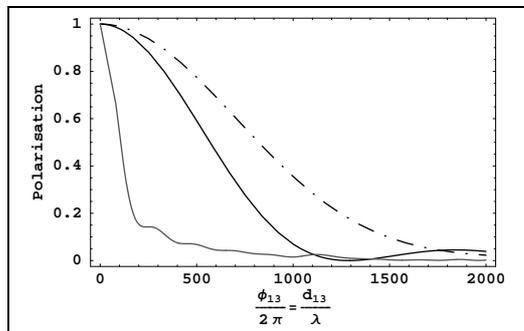


Abbildung 4.27: Verlauf der Polarisation als Funktion der Aufspaltung der Teilwellenpakete im Vergleich mit der flachen Geometrie bzw. mit der Vorhersage aus [8] (strichpunktiert). Die mittlere Kurve zeigt den vorhergesagten Polarisationsverlauf für eine vierlagige Spule mit insgesamt 28 gewölbten Wicklungen.

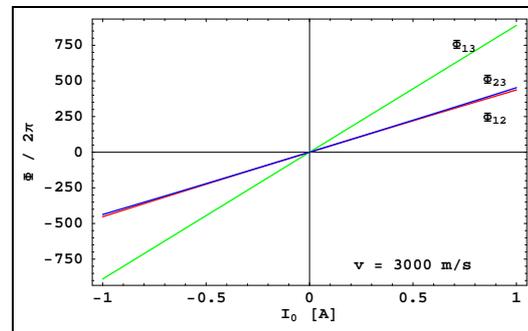


Abbildung 4.28: Präzessionsphasen nach der ersten Spinecho-Spule auf der Strahlachse bei einer Strahlgeschwindigkeit von 3000 m/s. Gezeigt ist die Proportionalität zwischen  $\Phi$  und dem Spulenstrom für eine erodierte Spule aus vier Lagen mit insgesamt 28 Wicklungen.

	vierlagige Spule	zweilagige Spule
$\int B_0 dy$	$95.4 \mu\text{Tm/A}$	$60.9 \mu\text{Tm/A}$
$B_0^{\text{max}}$	$2.12 \text{ mT/A}$	$1.31 \text{ mT/A}$

Tabelle 4.1: Spulen-Konstanten für die drahterodierten Spulen.

Wie auch vorher schon lässt sich anhand der Feldverläufe ein Zusammenhang zwischen Magnetfeld-Integral der Spule und dem Spulenstrom herstellen, woraus sich direkt die Spulen-Konstante sowie die Proportionalitätskonstante zwischen Spulen-Strom und maximaler Feldstärke bestimmen lassen. Die Werte sind in Tabelle 4.1 für eine vierlagige Spule mit insgesamt 28 Wicklungen und für eine zweilagige Spule mit 18 Wicklungen zusammengefasst.

### 4.3 Messungen mit den Spulen

Sowohl mit den gewickelten als auch mit den erodierten Spulen wurden ausführliche Messreihen unternommen. Im Folgenden werden einige dieser Messungen exemplarisch vorgestellt und das Verhalten der Polarisation bei zunehmender Aufspaltung der Teilwellenpakete (die Maschinenfunktion) diskutiert. Der Begriff der Polarisation wird im Weiteren entsprechend den Definitionen in Abschnitt 1.2.3.3 angewandt. Dabei sind die folgenden beiden Extremfälle zu unterscheiden:

- Sind die einzelnen Spinecho-Gruppen vollständig voneinander getrennt, so kann die Definition der „partiellen“ Polarisation für die einzelnen Gruppen angewandt werden.

<sup>13</sup>Das entspricht knapp 700 Präzessionsumdrehungen in jeder Spule.

- Solange die Spinecho-Gruppen noch nicht signifikant voneinander getrennt sind, wird auf die Definition des Kontrastes zurückgegriffen.

Im dazwischen liegenden Bereich kommt es zu komplizierten Überlagerungen und Interferenzen zwischen den einzelnen Spinecho-Gruppen. In diesem Bereich ist keine der beiden Definitionen anwendbar.

### 4.3.1 Die gewickelten Spulen

Wie aus der Diskussion des simulierten Feldverlaufs der gewickelten Spulen in Abschnitt 4.1.2 schon hervorgeht, müssen die Erwartungen an die maximale Aufspaltung der Teilwellenpakete, die mit diesen Spulen möglich ist, gegenüber den in [8] genannten Werten deutlich reduziert werden.

So ist es mit diesen Spulen nicht möglich, Spinecho-Kurven aufzunehmen, die mit der in Abbildung 1.5 zu vergleichen wären. Statt dessen nimmt die Polarisation mit zunehmendem  $B_0$ -Strom, also mit zunehmender Aufspaltung der Teilwellenpakete zwischen den Spulen, so rapide ab, dass die Spinecho-Gruppe, die noch von einer Überlagerung aller drei Eigenzustände herrührt, nicht mehr vom unpolarisierten Untergrund zu unterscheiden ist, noch bevor es überhaupt zu ersten Anzeichen für eine Aufspaltung in die erwarteten drei Spinecho-Gruppen kommt.

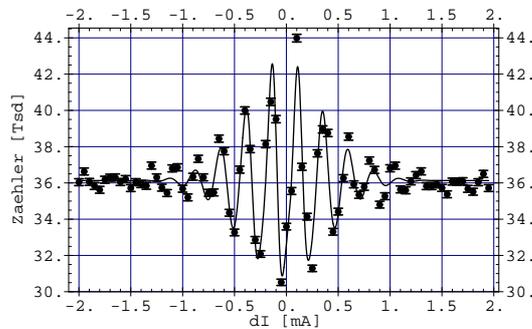


Abbildung 4.29: Gemessene Spinrotation mit Fit an die Daten. Aus den Daten ergibt sich eine Polarisation von  $0.24 \pm 0.01$ .

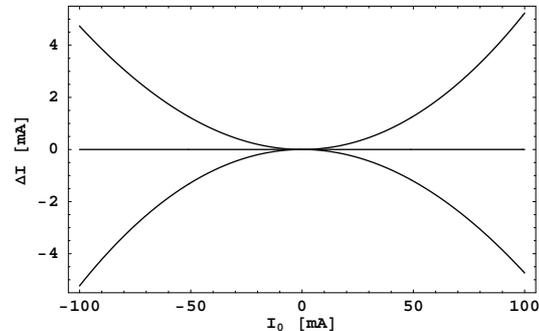


Abbildung 4.30: Vorhersage für die Position der einzelnen Spinecho-Punkte bei einem Spinecho-System, bestehend aus den gewickelten Spulen.

In Abbildung 4.29 ist eine mit den gewickelten Spulen aufgenommene Spinrotations-Kurve gemeinsam mit einem Fit an die Daten zu sehen. Daraus ergibt sich eine Polarisation von  $0.24 \pm 0.01$ , die Halbwertsbreite (FWHM) der Spinrotations-Gruppe beträgt etwa 1 mA. In der nebenstehenden Abbildung 4.30 ist die Lage der Spinecho-Punkte gezeigt, wie sie bei dem in Abschnitt 4.1.2 simulierten Feldverlauf zu erwarten sind. Aus der Kombination der beiden Abbildungen folgt, dass etwa ab einem  $B_0$ -Strom  $I_0$  von 30 mA eine Aufspaltung in drei Spinecho-Gruppen erkennbar sein sollte, da dann die Spinecho-Punkte jeweils etwa 0.5 mA voneinander getrennt sind.

Wie aber der Abbildung 4.31 entnommen werden kann, ist die Polarisation des Strahls schon bei 30 mA fast völlig verschwunden. Die Abbildung zeigt Spinecho-Kurven, die bei  $B_0$ -Strömen von 1 mA bis 30 mA aufgenommen wurden. Die Echogruppe ist bei 27 mA gerade noch zu erkennen, bei einem  $B_0$ -Strom von mehr als 30 mA ist der Strahl völlig unpolarisiert. Auch bei einer weiteren Steigerung des  $B_0$ -Stroms sind keine Spinecho-Gruppen mehr zu erkennen.

Abbildung 4.32 fasst den Verlauf der Polarisation für die gewickelten Spulen zusammen. Der linke Plot zeigt die gemessene Maschinenfunktion, also den Verlauf der Strahlpolarisation, als Funktion des  $B_0$ -Stroms und damit der Aufspaltung der einzelnen Teilwellenpakete. An die Messpunkte wurde ein exponentiell abfallender Fit angepasst, aus dem sich eine Halbwertsbreite von  $(5.6 \pm 1.5)$  mA ergibt. Wie zu erkennen ist, fällt die Polarisation, ausgehend von einem Wert von 0.24, in einem Intervall von 10 mA Breite auf Werte von 0.05 ab, um dann schließlich bei Werten von mehr als 30 mA völlig zu verschwinden. Im rechten Teil der Abbildung 4.32 ist noch einmal der Verlauf der Polarisation gezeigt, wie er sich

aus der Simulation des Feldverlaufs und der so erhaltenen Inhomogenitäten des Magnetfeld-Integrals ergibt, wenn dabei auch die  $B_x$ - und  $B_y$ -Komponenten des Spinecho-Felds berücksichtigt werden. Nach der Simulation wäre die Polarisation nach etwa 35 mA auf die Hälfte abgefallen. Um beide Verläufe miteinander vergleichen zu können, wurde die Abszisse in mA umskaliert. Der gezeigte Verlauf gilt für einen monoenergetischen Strahl mit einer Geschwindigkeit von 3000 m/s. Wie ein Vergleich der beiden Abbildungen zeigt, fällt die gemessene Polarisation wesentlich schneller ab, als es aufgrund der Inhomogenitäten im Feldintegral zu erwarten ist.

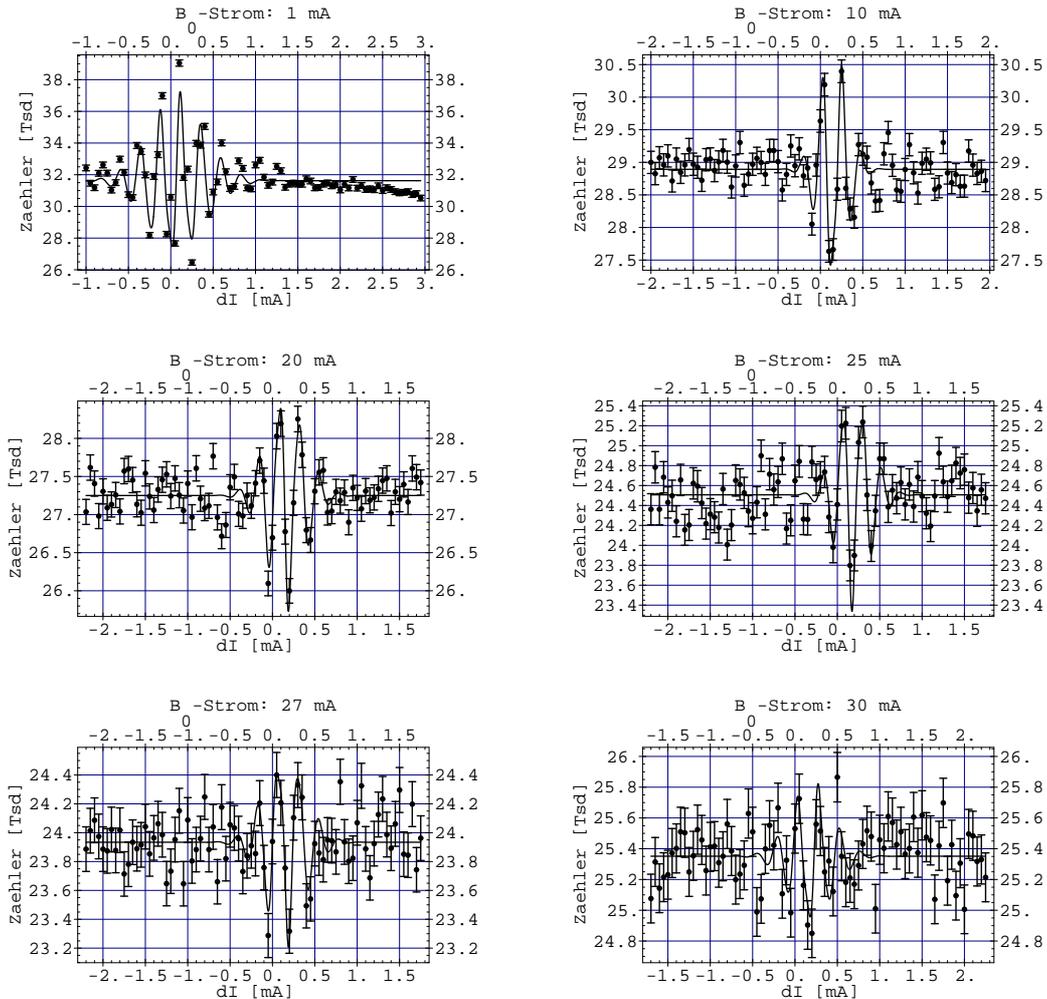


Abbildung 4.31: Spinecho-Kurven mit zunehmendem  $B_0$ -Strom. Je größer die Aufspaltung der Teilwellenpakete wird, um so geringer ist die noch vorhandene Polarisation der Gruppe. Gezeigt sind Kurven für 1 mA, 10 mA, 20 mA, 25 mA, 27 mA und 30 mA  $B_0$ -Strom. Eine sichtbare Trennung der einzelnen Spinecho-Gruppen wird ab etwa 30 mA  $B_0$ -Strom erwartet.

Ursache für den schnelleren Abfall sind wahrscheinlich Ineffizienzen bei den nichtadiabatischen Übergängen von  $\pi/2$ - und  $\pi$ -Flips. Klassisch gesprochen bedeutet das, dass die Spins nicht wie gewünscht in die Präzessionsfelder ein- und ausgekoppelt werden. Dadurch reduziert sich die Projektion der magnetischen Momente auf die Richtung des Magnetfelds, was einer zusätzlichen Reduzierung der Polarisation gleichkommt. Im Bild des Fahrplanmodells machen sich diese Ineffizienzen dadurch bemerkbar, dass sich die Feldgradienten beim Eintritt und beim Verlassen des Präzessionsfeldes unterscheiden. Dadurch können die

Eigenzustände im Feld der zweiten Spinecho-Spule bei zunehmendem  $B_0$ -Strom durch beide Spulen und damit zunehmender Aufspaltung der Eigenzustände immer schlechter kohärent zur Überlagerung gebracht werden. Ab einer gewissen Aufspaltung ist diese Überlagerung schließlich überhaupt nicht mehr möglich, die Polarisation des Strahls ist verschwunden.

Die Feldgradienten beim Eintritt in das Feld einer Spinecho-Spule und beim Verlassen zeigen möglicherweise nicht in die gleiche Richtung, zumindest unterscheiden sie sich betragsmäßig, wie schon aus dem Vergleich der Simulationen in der flachen Geometrie mit und ohne abgerundete Ecken in den Abbildungen 4.14 und 4.15 hervorgeht. Allerdings gehen diese Effekte nicht in die Effizienz der Spulen nach (4.2) und (4.3) ein, was wiederum deutlich macht, dass der in den Abbildung 4.10 und 4.27 gezeigte Verlauf der Polarisation das für den Feldverlauf der gewickelten Spulen bestmögliche Verhalten darstellt.

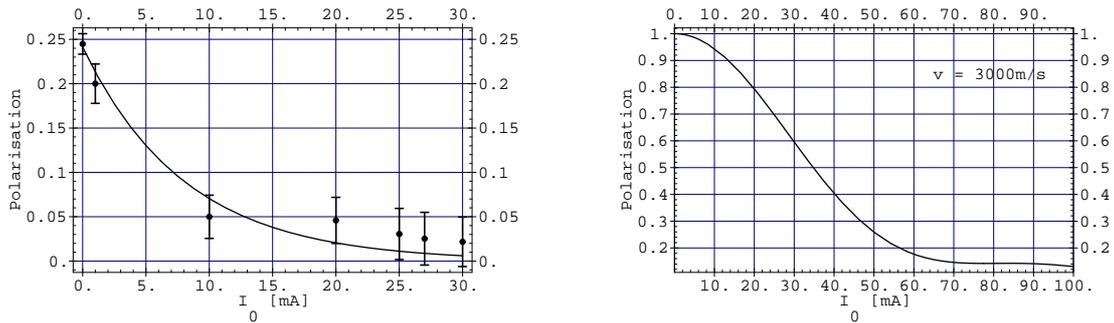


Abbildung 4.32: Vergleich zwischen dem gemessenen Verlauf der Polarisation (links) und dem idealen Verlauf (rechts), wenn die Maschinenfunktion nur durch die Inhomogenitäten im Feldintegral der Spinecho-Spulen bestimmt wird. An die Messpunkte in der linken Darstellung wurde eine exponentiell abfallende Kurve gefittet. Als Halbwertsbreite des gemessenen Polarisationsverlaufs ergibt sich ein Wert von  $(5.6 \pm 1.5)$  mA. Nach der Simulation des Feldverlaufs wäre die Polarisation nach etwa 35 mA auf die Hälfte gefallen.

Die de Broglie-Wellenlänge von atomarem Wasserstoff bei einer Geschwindigkeit von 3000 m/s beträgt etwa  $1.33 \text{ \AA}$ . Nach Abbildung 4.32 konnte bis zu einem Strom von 30 mA durch beide Spinecho-Spulen ein Polarisationssignal gemessen werden. Ausgedrückt durch die Phase  $\Phi_{13}$  entspricht das 374 ganzen Umdrehungen. Da die Aufspaltung der entsprechenden Teilwellenpakete, ausgedrückt in Einheiten der de Broglie-Wellenlänge der Strahlteilchen, durch

$$\frac{d_{13}}{\lambda} = \frac{\Phi_{13}}{2\pi}$$

gegeben ist, ergibt sich daraus eine maximal mögliche Aufspaltung der Zustände  $|1\rangle$  und  $|3\rangle$  von  $497 \text{ \AA}$ . Im Vergleich zu den in [8] erwarteten Aufspaltungen von mehreren 100 nm ist dies ein unbefriedigender Wert. Die gewickelten Spulen sind damit nur bedingt für den Einsatz in einem Wasserstoff-Spinecho-Spektrometer geeignet, da es nicht gelungen ist, zwischen den Spulen eine genügend große Aufspaltung der Teilwellenpakete zu erzeugen, dass die drei Spinecho-Gruppen deutlich voneinander getrennt sind.

### 4.3.2 Die erodierten Spulen mit gewölbten Filamenten

Den Folgerungen des vorangegangenen Abschnitts entsprechend sind die gewickelten Spulen nicht geeignet, um in einem Spinecho-Spektrometer eingesetzt zu werden. Aus diesem Grund wurde das Design der Spulen überarbeitet und schließlich die drahterodierten Spulen hergestellt. Im Folgenden wird das Verhalten dieser Spulen beschrieben.

In Abbildung 4.33 ist eine Spinrotations-Kurve gezeigt, aufgenommen mit einer drahterodierten Spule aus zwei Lagen mit insgesamt 18 Wicklungen. Aus dem ebenfalls gezeigten Fit an die Datenpunkte ergibt sich ein Wert von  $0.24 \pm 0.02$  für die Polarisation. Die Halbwertsbreite (FWHM) der Spinrotation liegt

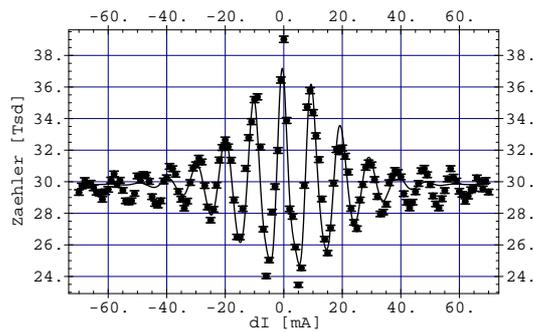


Abbildung 4.33: Gemessene Spinrotation einer zweilagigen, erodierten Spule. Gezeigt ist auch ein Fit an die Daten. Als Polarisation ergibt sich der Wert  $0.24 \pm 0.02$ .

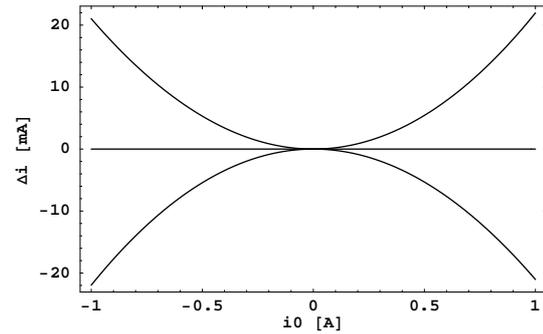


Abbildung 4.34: Vorhersage der Spinecho-Punkte für ein Spinecho-System aus zweilagigen, erodierten Spulen. Wegen der geringeren Spulen-Konstante sind wesentlich höhere Ströme notwendig, um vergleichbare Aufspaltungen wie bei den gewickelten Spulen zu erzeugen.

bei etwa 40 mA. Nach diesem Wert wird in Verbindung mit Abbildung 4.34, die die Lage der Spinecho-Punkte für eine zweilagige, erodierte Spule vorhersagt, ab einem  $B_0$ -Strom von etwa 1 A eine erkennbare Aufspaltung in drei einzelne Spinecho-Gruppen erwartet. Die Schwerpunkte der einzelnen Gruppen (die Spinecho-Punkte) sind dann ungefähr jeweils 20 mA voneinander entfernt. Im Vergleich zu den dafür notwendigen Strömen bei den gewickelten Spulen ist dieser Wert für den  $B_0$ -Strom wegen der deutlich kleineren Spulen-Konstanten wesentlich höher.

Wie allerdings in Abbildung 4.35 zu sehen ist, waren auch schon bei wesentlich geringeren  $B_0$ -Strömen deutlich getrennte Gruppen zu erkennen. Dabei ist die Größe der Aufspaltung zwischen den äußeren Gruppen identisch mit dem  $B_0$ -Strom: Ab etwa 50 mA konnten mehrere Gruppen unterschieden werden. Auffällig ist allerdings die Lage der einzelnen Gruppen. Erwartet würde, dass sich die mittlere Gruppe mit kleiner Amplitude immer bei einem dB-Strom von 0 mA befindet, während die äußeren Gruppen asymmetrisch nach außen wandern. Abgesehen davon, dass die Trennung in drei Gruppen schon bei wesentlich geringeren  $B_0$ -Strömen aufzutreten scheint, stimmt die Lage der Spinecho-Punkte nicht mit dem erwarteten Verhalten überein.

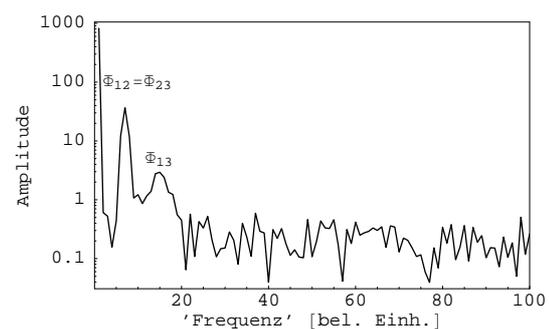
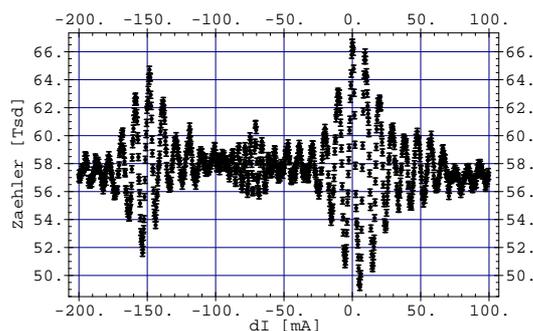


Abbildung 4.35: Links: Aufgenommenes Polarisationssignal bei einem  $B_0$ -Strom von 150 mA durch beide Spulen. Die erste Spule wurde gegenüber der zweiten um den angegebenen dB-Strom  $dI$  verstimmt. Deutlich zu erkennen sind drei Gruppen, wobei die Aufspaltung zwischen linker und rechter Gruppe mit etwa 150 mA genauso groß ist, wie der  $B_0$ -Strom, der beide Spulen treibt.

Rechts: Frequenzanalyse der rechten Gruppe um  $dI = 0$ . Deutlich sind zwei unterschiedliche Frequenzen zu erkennen, die sich um einen Faktor zwei unterscheiden.

Eine Frequenzanalyse der drei Gruppen ergibt folgendes Ergebnis:

- Die linke und mittlere Gruppe weisen jeweils nur eine Frequenz auf. Beide Frequenzen unterscheiden sich etwa um den Faktor zwei.
- Die rechte Gruppe bei  $dI = 0$  weist dagegen zwei Frequenzen auf, die sich um einen Faktor zwei unterscheiden, wie rechts in Abbildung 4.35 zu sehen ist. Die beiden Frequenzen dieser Gruppe stimmen mit den Frequenzen der beiden anderen Gruppen überein.

Die Messung entspricht damit im ersten Punkt den Erwartungen für eine Spinecho-Messung, bei der die drei Gruppen deutlich voneinander getrennt sind. Im letzten Punkt dagegen unterscheidet sich das gemessene Signal von der theoretischen Erwartung: Die rechte Gruppe dürfte nur eine Frequenz tragen, die sich zudem etwas von der Frequenz der linken Gruppe unterscheiden sollte. Dies wird durch folgende Betrachtung deutlich:

Nach (1.38) gehen in die Interferenzterme die Energiedifferenzen  $E_{ij}$  der potenziellen Energien der Zustände  $|i\rangle$  und  $|j\rangle$  im Magnetfeld ein,

$$\begin{aligned} \langle \Psi(x, t) | \mathcal{M} | \Psi(x, t) \rangle = & \quad (4.4) \\ = \frac{3}{8} + \frac{1}{4} \cos\left(\frac{-ml}{\hbar^2 k} (E_{12}^{(1)} + E_{12}^{(2)})\right) + \frac{1}{8} \cos\left(\frac{-ml}{\hbar^2 k} (E_{13}^{(1)} + E_{13}^{(2)})\right) + \frac{1}{4} \cos\left(\frac{-ml}{\hbar^2 k} (E_{23}^{(1)} + E_{23}^{(2)})\right). \end{aligned}$$

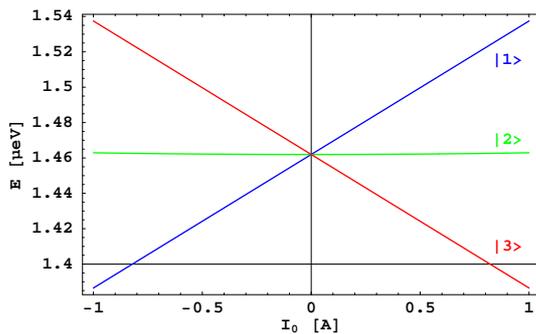


Abbildung 4.36: Breit-Rabi-Diagramm für Wasserstoff  $1S_{1/2}$  im Magnetfeld der zweilagigen, erodierten Spule. Die Abszisse wurde mit der Umrechnungskonstanten für  $B_0^{\max}$  aus Tabelle 4.1 umskaliert.

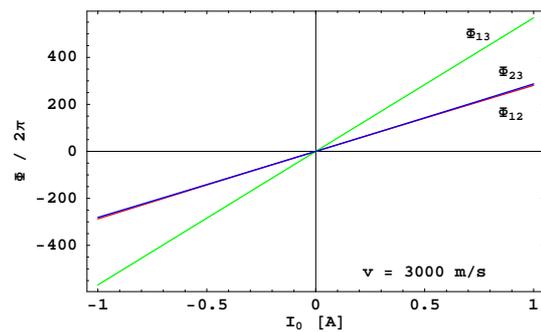


Abbildung 4.37: Präzessionsphasen  $\Phi_{12}$ ,  $\Phi_{23}$  und  $\Phi_{13}$  für die zweilagige erodierte Spule.

Aus dem Breit-Rabi-Diagramm 4.36 ist ersichtlich, dass im Zeeman-Bereich für kleine Magnetfelder die Energieaufspaltung für die Zustände  $|1\rangle$  und  $|2\rangle$ , sowie  $|2\rangle$  und  $|3\rangle$  jeweils etwa halb so groß ist wie diejenige für die Zustände  $|1\rangle$  und  $|3\rangle$ . Erst mit zunehmendem Magnetfeld unterscheiden sich die Energiedifferenzen  $E_{12}$  und  $E_{23}$  so stark, dass drei Frequenzen zu erkennen sind. Aus diesem Grund werden im Zeeman-Bereich im gemessenen Signal zwei Frequenzen erwartet. Erst wenn die Energiedifferenzen zwischen den einzelnen Zuständen so groß sind, dass drei verschiedene Frequenzen auftreten, gibt es in (4.4) keine Einstellung mehr, bei der für alle Kombinationen  $i$  und  $j$  die Energiedifferenzen  $E_{ij}^{(1)}$  in der ersten Spule durch die  $E_{ij}^{(2)}$  in der zweiten Spule kompensiert werden können. Nur in diesem Fall entstehen drei getrennte Spinecho-Gruppen. Diese Betrachtung steht im Widerspruch zu den Messungen: Dort existieren drei getrennte Gruppen, das Signal enthält aber nur zwei Frequenzen. Daraus und aus der Beobachtung, dass die Lage der scheinbaren Spinecho-Punkte nicht mit der Erwartung übereinstimmt, ist die Schlussfolgerung zu ziehen, dass es sich bei den beobachteten drei Gruppen nicht um das gewünschte Spinecho-Signal handelt.

Aus Abbildung 4.37 ist ersichtlich, dass sich die Präzessionsphasen (und damit auch die Frequenzen der einzelnen Interferenzterme in (4.4)) im gezeigten Bereich noch Zeeman-artig verhalten: Die beiden Phasen  $\Phi_{12}$  und  $\Phi_{23}$  sind im gezeigten Bereich für den  $B_0$ -Strom  $I_0$  kaum zu unterscheiden und etwa halb so groß wie die Phase  $\Phi_{13}$ . Erwartet werden deshalb bei  $B_0$ -Strömen unter 500 mA tatsächlich nur zwei Frequenzen im gemessenen Signal und folglich auch keine deutlich sichtbare Aufspaltung der einzelnen Spinecho-Gruppen. Die Existenz von zwei Frequenzen in der rechten Gruppe lässt darauf schließen, dass es sich bei dieser Gruppe um das eigentlich erwartete Signal handelt. Diese Vermutung wird noch von der Tatsache gestützt, dass die rechte Gruppe mit zunehmendem  $B_0$ -Strom breiter wird.

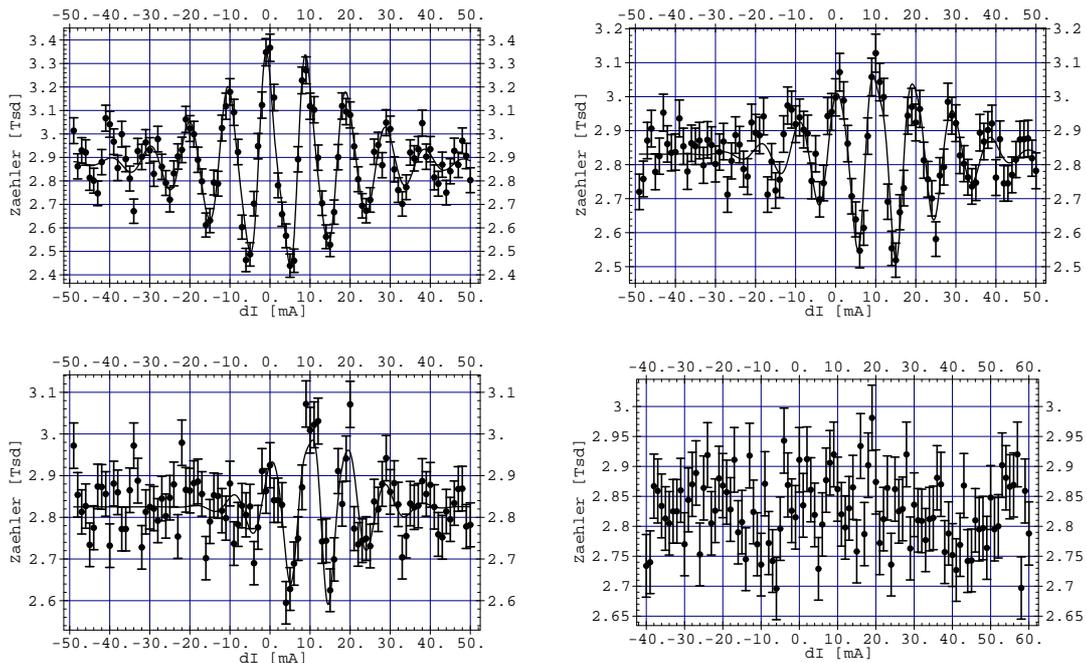


Abbildung 4.38: Darstellung der rechten Echogruppe bei  $B_0$ -Strömen von 100 mA, 300 mA, 400 mA und 500 mA (von oben links nach unten rechts). Bis etwa 100 mA liegt der Schwerpunkt der Gruppe bei  $dI = 0$ , erst danach wandert der partielle Spinecho-Punkt zu positiven  $dI$ -Werten. Bei 500 mA ist die Polarisation völlig verschwunden.

Da die gemessene Kurve weder in der Lage der Spinecho-Punkte, noch bei der Frequenzanalyse dem erwarteten Verhalten für eine Spinecho-Kurve entspricht, beschränkt sich die Betrachtung des Polarisationsverlaufs zunächst auf die im linken Teil der Abbildung 4.35 bei  $dI = 0$  befindliche Gruppe.<sup>14</sup> Abbildung 4.38 zeigt exemplarisch diese Gruppe für  $B_0$ -Ströme von 90 mA bis 500 mA. Wie zu erkennen, wandert die Gruppe bei größeren  $B_0$ -Strömen zu positiven Verstimmungen  $dI$ . Da bei den gezeigten Messungen die erste Spule gegenüber der zweiten verstimmt wurde, kann aus diesem Verhalten geschlossen werden, dass das Magnetfeld-Integral der ersten Spule etwas niedriger ausfällt als das der zweiten. Der partielle Spinecho-Punkt der gezeigten Gruppe wird erst beim zusätzlich notwendigen Verstimmungsstrom  $dI \approx 10$  mA erreicht.

Abbildung 4.39 zeigt die Abnahme der Polarisation bei zunehmendem  $B_0$ -Strom durch beide Spinecho-Spulen. Wegen der unterschiedlichen Spulen-Konstanten von gewickelten und erodierten Spulen ist ein direkter Vergleich des Verlaufs aus Abbildung 4.39 mit dem Verlauf in Abbildung 4.32 nicht möglich. Für den Vergleich beider Spulen-Arten sei auf den anschließenden Abschnitt verwiesen.

Wie sich aus den Messungen ergibt, ist auch bei den drahterodierten Spulen die Polarisation schon längst abgefallen, bevor eine Aufspaltung in die einzelnen Spinecho-Gruppen erwartet wird. Aus dem an die

<sup>14</sup>Eine mögliche Erklärung für die Entstehung der beiden Gruppen für  $dI < 0$  wird später gegeben.

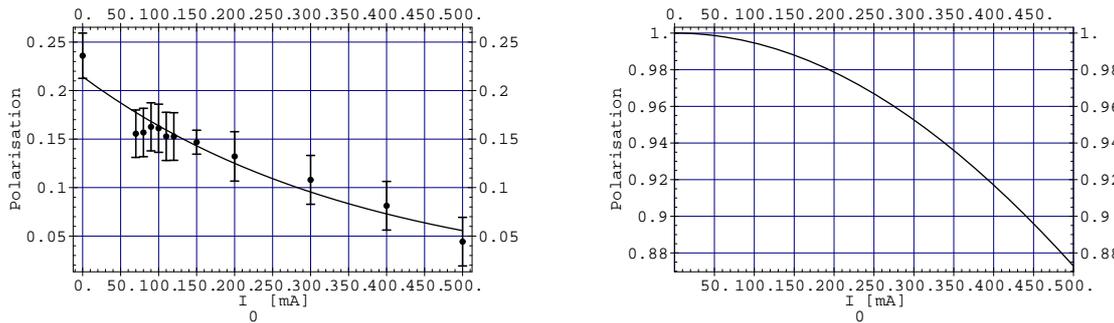


Abbildung 4.39: Aus den Messungen anhand der Gruppe bei  $dI = 0$  ermittelter Verlauf der Polarisation (links). Gezeigt ist auch ein exponentiell abfallender Funktionsverlauf, der an die Daten gefittet wurde. Aus ihm ergibt sich eine Halbwertsbreite von  $(236 \pm 28)$  mA. Die rechte Abbildung zeigt den aufgrund der Simulation des Feldverlaufs erwarteten Abfall der Polarisation.

Daten gefitteten exponentiellen Abfall ergibt sich für die erodierten Spulen eine Halbwertsbreite von  $(236 \pm 28)$  mA. Dem rechten Teil der Abbildung 4.39 dagegen ist zu entnehmen, dass die Polarisation aufgrund der Spulen-Effizienzen im vermessenen Bereich nur auf etwas unter 88% reduziert werden sollte. Erst bei etwa 1.1 A wäre die ursprüngliche Polarisation auf die Hälfte reduziert.

Wie bei den gewickelten Spulen lässt sich aus dem Polarisationsabfall die maximal erreichte Aufspaltung der Teilwellenzustände bestimmen. Mit den erodierten Spulen war es möglich, bei 400 mA bei  $dI \approx 0$  noch eine Spinecho-Gruppe aufzulösen. Nach Abbildung 4.37 entspricht bei einer Geschwindigkeit von 3000 m/s ein Strom von 400 mA etwa 200 Umdrehungen für die Phase  $\Phi_{13}$ . Mit der de Broglie-Wellenlänge von  $1.33 \text{ \AA}$  bei 3000 m/s für atomaren Wasserstoff und der Beziehung

$$\frac{d_{13}}{\lambda} = \frac{\Phi_{13}}{2\pi}$$

beträgt die größte erreichte Aufspaltung der Teilwellenpakete etwa  $306 \text{ \AA}$ . Dieser Wert liegt noch unter der mit gewickelten Spulen erreichten Aufspaltung.

### 4.3.3 Vergleich zwischen gewickelten und erodierten Spulen

Um die Polarisationsverläufe beider Spulen miteinander vergleichen zu können, werden bei den in den vorangegangenen Abschnitten gezeigten Polarisationsverläufen die Abszissen mithilfe der entsprechenden Spulen-Konstanten so umskaliert, dass beide Verläufe als Funktion des Magnetfeld-Integrals gezeigt werden können. Das Ergebnis ist in Abbildung 4.40 zu sehen. An beide Verläufe wurde eine exponentiell abfallende Funktion angepasst.

Gut zu erkennen ist, dass die Strahlpolarisation bei der Aufnahme von Spinrotationen (bei Feldintegral 0) mit den erodierten Spulen bei einem ähnlichen Wert liegt, wie bei Rotationsmessungen mit den gewickelten Spulen. Durch den direkten Vergleich wird offenbar, dass die Halbwertsbreite bei den erodierten Spulen mit  $(14.4 \pm 1.7) \mu\text{Tm}$  nur um einen Faktor zwei über dem Wert liegt, der mit den gewickelten Spulen erreicht wurde. Bei letzteren ergibt sich als Halbwertsbreite ein Wert von  $(7.5 \pm 2.0) \mu\text{Tm}$ . Nach der Simulation der Feldverläufe und den daraus bestimmten Spulen-Effizienzen wird dagegen erwartet, dass die Halbwertsbreite der Strahlpolarisation bei Einsatz der erodierten Spulen beim Fünffachen Wert der Halbwertsbreite bei Verwendung gewickelter Spulen liegt. In beiden Fällen geht die Strahlpolarisation bei größer werdenden Feldintegralen schneller zurück als erwartet, wobei dieser Effekt im Fall der erodierten Spulen besonders deutlich wird.

Wie die Betrachtungen in den Abschnitten 4.1.2 und 4.2.2 zeigten, unterscheiden sich die Feldgeometrien beider Spulen-Arten deutlich voneinander. Für den Polarisationsabfall muss daher neben den Inhomogenitäten der Feldintegrale abseits der Strahlachse noch ein anderer Effekt verantwortlich sein, der sowohl im Aufbau mit den gewickelten Spulen, als auch im Aufbau mit den erodierten Spulen vorhanden ist.

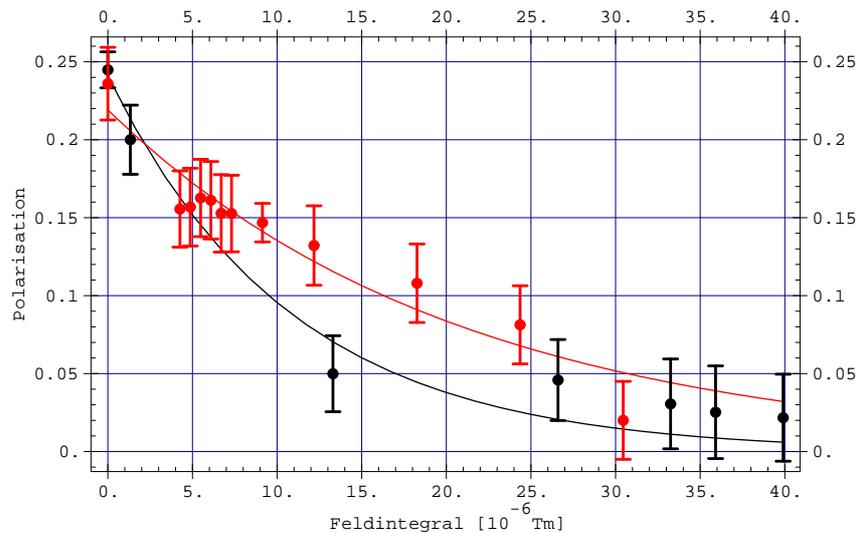


Abbildung 4.40: Vergleich der Polarisationsverläufe bei gewickelten und drahterodierten Spinecho-Spulen. Die schwarzen Datenpunkte zeigen den Verlauf bei gewickelten Spulen, die grauen Werte stammen von den erodierten, zweilagigen Spulen. An beide Verläufe wurden exponentielle Abfälle gefittet und entsprechend den Datenpunkten eingefärbt. Als Halbwertsbreiten ergeben sich  $(7.5 \pm 2.0) \mu\text{Tm}$  für die gewickelten Spulen und  $(14.4 \pm 1.7) \mu\text{Tm}$  bei den drahterodierten, zweilagigen Spulen.

Strahldivergenzen scheiden als Ursache für den schnelleren Polarisationsabfall aus, da durch Blenden entlang des Strahlverlaufs der maximale Öffnungswinkel auf  $0.09^\circ$  begrenzt ist. Durchfliegt ein Teilchen die Spinecho-Anordnung unter dem maximalen Divergenzwinkel zur Strahlachse, so läge die Abweichung von der Phase, die auf Bahnen parallel zur Strahlachse aufgesammelt werden, schlimmstenfalls bei  $6/10$  Umdrehungen pro Spule. Da aber im geraden Strahl gemessen wurde, bedingt ein zu kurzes Magnetfeld-Integral in der ersten Spule auch ein zu kurzes Feldintegral in der zweiten Spule. Am Spinecho-Punkt kompensieren sich beide Effekte. Wie die Geschwindigkeitsverteilung hat auch die Winkelverteilung des Strahls keinen Einfluss auf die Polarisation der Spinecho-Gruppen am jeweiligen Spinecho-Punkt. Lediglich die Einhüllende des Signals ist von der Geschwindigkeits- und Winkelverteilung betroffen: Je breiter die beiden Letztgenannten sind, umso schmaler werden die Spinecho-Gruppen.

Eine mögliche Erklärung für den schnelleren Polarisationsabfall ist in Abbildung 4.41 gezeigt. Dort ist der Blick durch die innere  $\mu$ -Metallabschirmung in Strahlrichtung gezeigt. Die Verbindungen zwischen den einzelnen Halbrohren liegen in einer horizontalen Ebene. Diese Verbindungen stellen einen Schwachpunkt in der magnetischen Abschirmung dar. Um den magnetischen Fluss optimal zurückführen zu können und die Feldlinien zu schließen, müssen die Halbrohre an den Verbindungsstellen fest gegeneinander gepresst werden. Ist dies nicht überall der Fall, so kann die Rückführung des Flusses durch die Verbindungsstelle, die dann eine zu geringe Permeabilität aufweist, behindert werden.

In der Abbildung ist die Richtung eines der Spinecho-Felder und die Rückführung des magnetischen Flusses innerhalb des  $\mu$ -Metalls für zwei verschiedene Anordnungen skizziert. Wie zu sehen ist, muss der Fluss bei der links gewählten Anordnung in jedem Fall über die Verbindungsstellen der Halbrohre geschlossen werden. Dabei kann es durch Spalte zwischen den Halbrohren zu Streufeldern innerhalb der  $\mu$ -Metall-Abschirmung kommen, die die Feldgeometrie in unbekannter Weise verändern. Insbesondere kann es, wenn diese Streufelder im Bereich des nichtadiabatischen Übergangs zwischen den Spulen auftreten, dazu kommen, dass die einzelnen, räumlich getrennten Eigenzustände wie durch das Feld einer schon erwähnten Streuspule zusätzlich gedreht werden. In der Folge stellen sie bezüglich der Quantisierungsachse des zweiten Spinecho-Felds keine Eigenzustände mehr dar, jeder Eigenzustand aus der ersten Spule wird den Vorschriften für ein Spin 1-System entsprechend auf die Eigenzustände der zweiten Spule aufgeteilt. Den Auswirkungen eines Streufelds am Ort des  $\pi$ -Flips ist ein eigener Abschnitt gewidmet, der anschließend

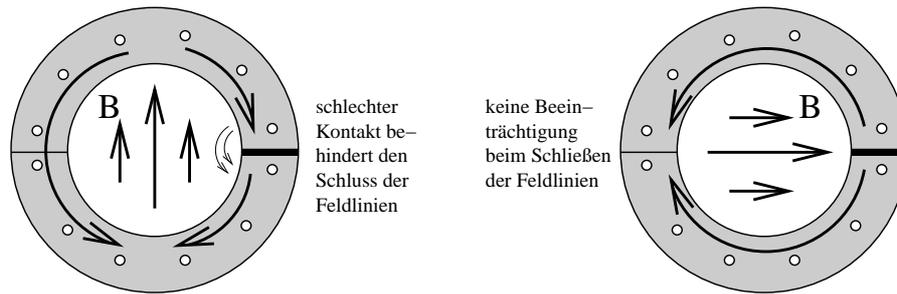


Abbildung 4.41: Blick in Richtung der Strahlachse. Gezeigt sind zwei mögliche Anordnungen der Spinecho-Felder innerhalb der  $\mu$ -Metall-Abschirmung. In beiden Fällen ist die rechte Verbindung zwischen den Halbrohren durch einen Spalt unterbrochen. Beim Schließen des magnetischen Flusses durch die Abschirmung kommt es deshalb in der linken Anordnung zu Streufeldern. Die rechte Anordnung wird dagegen durch den Spalt vergleichsweise wenig gestört.

folgt. Die rechte Anordnung in Abb. 4.41 bietet den Vorteil, dass hier die Rückführung des magnetischen Flusses durch den Spalt zwischen den Halbrohren nicht so stark beeinträchtigt wird, wie im linken Fall. Beim Aufbau der Spinecho-Strecke wurde allerdings die linke Feldanordnung gewählt, weil so die Halbrohre für die notwendigen Aussparungen für die Stromversorgung der Spulen am wenigsten modifiziert werden mussten.

Da bei der Simulation der Spulen-Felder mittels MAFIA mit einem konstanten  $\mu$  für das gesamte Abschirmrohr gerechnet wurde, bleiben Streufelder aufgrund von veränderlichen Permeabilitäten unberücksichtigt, wie sie beispielsweise durch die beschriebenen Verbindungsstellen verursacht werden können. Natürlich stellt sich damit die Frage, inwieweit die reale Situation mit der simulierten übereinstimmt.

Wie der Abbildung 3.6 entnommen werden kann, besteht die  $\mu$ -Metallabschirmung auf der ganzen Länge aus Halbrohren, sodass es durchaus wahrscheinlich erscheint, dass auch in den kritischen Bereichen, in denen die Spins in die Präzessionsfelder der Spulen ein- und ausgekoppelt werden, Streufelder durch unzureichende Verbindung der Halbrohrflansche möglich sind. Wie sich im folgenden Abschnitt zeigen wird, stellt das Auftreten der schon erwähnten zusätzlichen Gruppen im gemessenen Signal einen Hinweis auf die Existenz eines Streufelds im Bereich des  $\pi$ -Flips dar. In Zukunft empfiehlt sich zumindest in den kritischen Bereichen die Verwendung von Abschirmrohren ohne Flansche. Unter Umständen hilft auch schon eine Orientierung der Präzessionsfelder, wie sie im rechten Teil der Abb. 4.41 gezeigt ist.

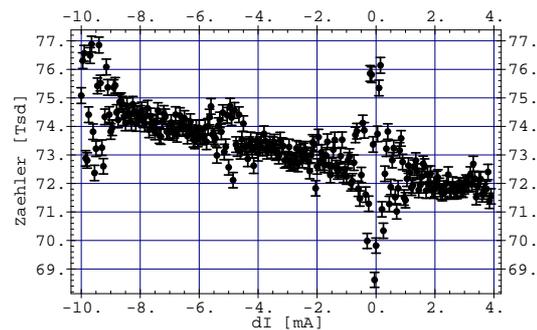


Abbildung 4.42: Spinecho-Messung bei 10 mA  $B_0$ -Strom mit den gewickelten Spulen. Die zweite Spule wurde gegenüber der ersten verstimmt. Der stetige Abfall zu größeren  $dI$ -Strömen hin ist auf die nachlassende Nachweiseffizienz des Detektors zurückzuführen.

#### 4.3.4 Einfluss eines streuspulen-artigen Feldes am Ort des $\pi$ -Flips

Sowohl bei den gewickelten Spulen, als auch bei den drahterodierten Spulen wurden Messungen unter Maschineneinstellungen aufgenommen, bei denen noch keine Aufspaltung des Spinecho-Signals in drei einzeln getrennte Spinecho-Gruppen zu erwarten ist. Wie schon erwähnt, konnte aufgrund des schnellen Polarisationsabfalls in beiden Fällen keine *echte* Aufspaltung der Gruppen erreicht werden. Trotzdem wurden bei mehreren Messungen die Existenz deutlich getrennter Gruppen festgestellt. Abbildung 4.42 zeigt zur Anschauung noch einmal eine solche Messung mit den gewickelten Spulen. Die Kurve wurde bei einem  $B_0$ -Strom von 10 mA durch beide Spulen aufgenommen, indem das Magnetfeld-Integral der zweiten Spule gegenüber dem der ersten verstimmt wurde.

Alle Messungen, bei denen drei getrennte Gruppen zu erkennen sind, weisen charakteristische Gemeinsamkeiten auf, die unabhängig davon sind, ob die Kurven durch Variation des Stroms in der ersten oder in der zweiten Spule entstanden sind:

- Bei allen Messungen erscheint die eigentliche Spinecho-Gruppe, die zwei Frequenzen aufweist, an der Stelle auf, an der sich die Magnetfeld-Integrale beider Spulen gerade kompensieren. Dies wird beim  $dI$ -Strom 0 mA erwartet.
- Eine weitere Gruppe taucht dort auf, wo das Magnetfeld-Integral einer Spule identisch verschwindet.
- Die dritte Gruppe ist bei Strömen zu finden, die etwa in der Mitte zwischen den beiden anderen Punkten zu finden ist. In diesem Fall ist das Feldintegral der einen Spule etwa halb so groß wie das der anderen.

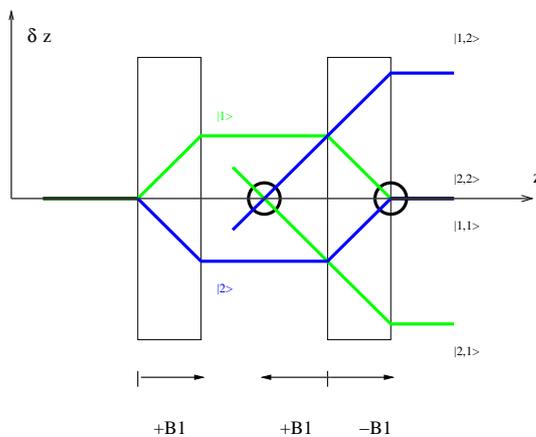


Abbildung 4.43: Fahrplan für Spin  $\frac{1}{2}$ , wenn bei Eintritt in das zweite Spinecho-Feld erneut quantisiert werden muss. Für zwei Feldeinstellungen sind Interferenzen möglich.

Dieser Verlust kann im Fall der Streuung durch die schon erwähnte Streuspule kompensiert werden, indem – klassisch gesprochen – die Präzessionsebene, in der die Spins in der ersten Spule dephasieren, so gedreht wird, dass die Ebene auch nach der Streuung senkrecht zur Strahlachse orientiert ist. Im quantenmechanischen Sinn bildet die Streuspule die Eigenzustände bezüglich der Quantisierungsachse der ersten Spule auf die entsprechenden Eigenzustände der zweiten Spule ab. Ohne diese Abbildung müsste beim Eintritt in das zweite Spinecho-Feld jeder bisherige Eigenzustand neu quantisiert und durch eine Mischung der Eigenzustände in der zweiten Spule dargestellt werden.

Da hier das Auftreten von zusätzlichen Gruppen im Signal bei geradem Strahl erklärt werden soll, wird im Folgenden nur noch der Fall betrachtet, dass zwischen den beiden Spinecho-Spulen die Eigenzustände adiabatisch aus der ursprünglichen Quantisierungsrichtung „herausgedreht“ werden.

Durch die erneute Quantisierung der Eigenzustände im Feld der zweiten Spinecho-Spule gibt es nun mehrere Einstellungen, unter denen Interferenzen einzelner Teilwellenpakete möglich sind. Dadurch kommt es aber eben auch zu einer Umverteilung in der bisherigen Mischung der Eigenzustände. Diese Umverteilung kann nun zur Folge haben, dass sich die Polarisation nicht in der eigentlichen Echogruppe sammelt. Statt dessen wird sie auf die anderen Gruppen verteilt. Dies hat natürlich den schon erwähnten Polarisationsverlust zur Folge. In Abb. 4.43 ist dies für den Fall eines Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchens verdeutlicht. Die Zustände  $|i, j\rangle$  bezeichnen jeweils, in welchem Eigenzustand sich das Teilwellenpaket  $i$  in der ersten Spule befunden hat und in welchem in der zweiten ( $j$ ).

Interferenzen können bei den mit Kreisen markierten Magnetfeld-Einstellungen beobachtet werden. Das anomale Spinecho ist durch die rückwärtslaufenden Zustände in der zweiten Magnetfeld-Region angedeutet. Demnach kann bei einem Spin  $\frac{1}{2}$ -System ein Echo beobachtet werden, wenn die (vorzeichenbehafteten)

Wie sich herausstellen wird, entspringen die beiden letztgenannten Gruppen einem Effekt, der beim  $^3\text{He}$ -Spinecho-Spektrometer für das Auftreten des sogenannten inversen oder anomalen Spinechos verantwortlich ist. Die Position der dadurch erzeugten Gruppen ist beim Wasserstoff-Spinecho darauf zurückzuführen, dass es sich bei dem hier verwendeten System um ein Spin 1-System handelt.

Stimmt die Quantisierungsachse der ersten Spule nicht mit der der zweiten überein, so kann es zu einem Verlust an Polarisation kommen. Eine Veränderung der Quantisierungsachse kann entweder durch die geometrischen Gegebenheiten im Fall der Streuung an einer Probenoberfläche (vergleiche dazu Abschnitt 2.3) verursacht werden oder aber dadurch, dass die magnetischen Momente der Strahlteilchen im Nullfeldbereich zwischen den Spulen adiabatisch aus der bisherigen Orientierung „herausgedreht“ werden.

Magnetfeld-Integrale der beiden Spulen identisch sind (anomales Spinecho) oder wenn sich beide kompensieren (normales Spinecho).

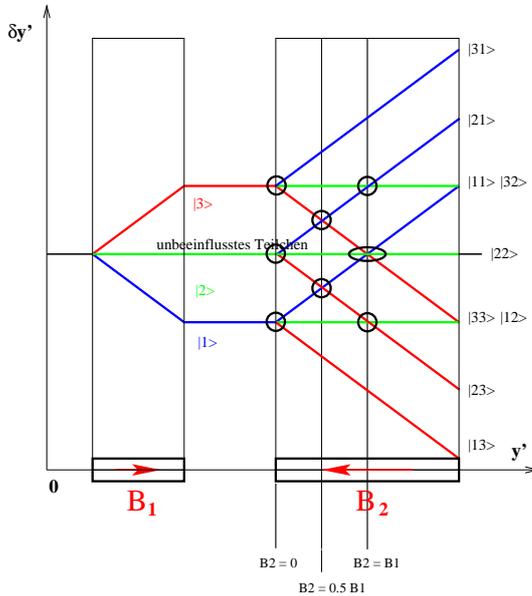


Abbildung 4.44: Fahrplanmodell zur Erklärung der bei den Messungen aufgetretenen Gruppen. Der Zustand  $|2\rangle$  bewegt sich horizontal durch die Feldbereiche, da die Feldstärken noch so gering sind, dass  $|2\rangle$  noch kaum beeinflusst wird. Beim Durchstimmen des zweiten Magnetfeld-Integrals können bei Einstellungen, die den markierten Punkten entsprechen, Interferenzen beobachtet werden. Der durch die Ellipse markierte Trajektorienschnittpunkt bezeichnet die Einstellungen, bei denen das „normale“ Spinecho bei Wasserstoff beobachtet wird.

Wird das Magnetfeld-Integral der zweiten Spule weiter gesteigert, so erhält man zwei weitere Trajektorienschnittpunkte. Diese liegen bei den Einstellungen, bei denen das Feldintegral der zweiten Spule gerade halb so groß ist, wie das der ersten. In Abb. 4.42 ist dies an den Interferenzen bei  $dI = -5$  mA zu erkennen. Schließlich wird das Feldintegral der zweiten Spule vergleichbar mit dem der ersten, es kommt erneut zu Interferenzen. Diese sind in Abb. 4.42 beim Verstimmungstrom  $dI = 0$  zu finden. Aus dem Fahrplanmodell 4.44 geht hervor, dass sich diese Interferenzen zusammensetzen aus dem eigentlich erwünschten Spinecho-Signal, dem „normalen“ Spinecho, und aus zwei weiteren Schnittpunkten, die auf eine Aufspaltung von Eigenzuständen in der ersten Spule und die Existenz des Zustandes  $|2\rangle$  zurückzuführen sind.

Damit lässt sich die Existenz aller in Abb. 4.42 zu sehenden Gruppen sowie ihre Position erklären. Die in Abb. 4.42 gezeigte Messung erlaubt leider keine statistisch signifikante Frequenzanalyse, weil die Schrittweite des Verstimmungstroms zu groß gewählt wurde. Dennoch gibt es Anzeichen dafür, dass die Gruppe bei verschwindendem zweiten Magnetfeld-Integral (bei  $dI = -10$  mA) von einer Frequenz  $\nu_1$  dominiert wird. Bei der Frequenzanalyse der mittleren Gruppe (bei  $dI = -5$  mA) ist findet sich eine Frequenz  $\nu_2$ ,

Mit dem gleichen Ansatz lässt sich auch die Position der beim Wasserstoff-Spinecho beobachteten zusätzlichen Gruppen erklären, wenn angenommen wird, dass die Eigenzustände der ersten Spule durch ein Streufeld zwischen beiden Spinecho-Spulen adiabatisch aus ihrer ursprünglichen Quantisierungsrichtung „herausgedreht“ werden. Beim Eintritt in das Feld der zweiten Spule stellen sie daher eine kohärente Mischung neuer Eigenzustände dar. Da es sich hierbei um ein Spin 1-System handelt, ist das zugrundeliegende Fahrplanmodell aufwändiger und etwas unübersichtlicher. Der Einfachheit halber wird zunächst der Fall diskutiert, in dem die zweite Spule gegenüber der ersten verstimmt wird. Außerdem wird nur der in Abb. 2.3 vertikal gezeigte Teil des modifizierten Fahrplanmodells dargestellt.

Wie schon dem Breit-Rabi-Diagramm 4.36 entnommen werden kann, erfährt der Zustand  $|2\rangle$  unter Verwendung der drahterodierten Spulen selbst bei den höchsten angewendeten Strömen kaum eine Anhebung in seiner potenziellen magnetischen Energie. Gleiches gilt für die gewickelten Spulen. Aus diesem Grund durchläuft der Zustand  $|2\rangle$  die Spinecho-Spulen (fast) wie ein magnetisch unbeeinflusstes Teilchen ohne magnetisches Moment. Im Fahrplanmodell bedeutet dies, dass sich  $|2\rangle$  immer auf Parallelen zur  $y'$ -Achse bewegt.

In Abbildung 4.44 ist die Situation dargestellt, wie sie sich beim Durchstimmen der zweiten Spinecho-Spule ergibt. Zunächst erzeugt die erste Spule mit dem Feld  $B_1$  durch ein konstante Magnetfeld-Integral die im Bereich von  $B_1$  gezeigte Aufspaltung. Wird das zweite

für die gilt:  $\nu_2 \approx 2\nu_1$ . Die Gruppe bei  $dI = 0$  wird wieder von der Frequenz  $\nu_1$  dominiert. Nach dem Fahrplanmodell in Abb. 4.44 werden sowohl für die linke als auch für die rechte Gruppe zwei Frequenzen im Spektrum erwartet, da in beiden Fällen Trajektorien unter zwei verschiedenen Winkeln auseinander laufen. Je steiler die Winkel, unter denen sich die Bahnen kreuzen, umso schneller werden die jeweiligen Teilwellenpakete beim Durchstimmen des Feldintegrals „übereinander geschoben“ und umso schneller oszillieren die Interferenzterme.

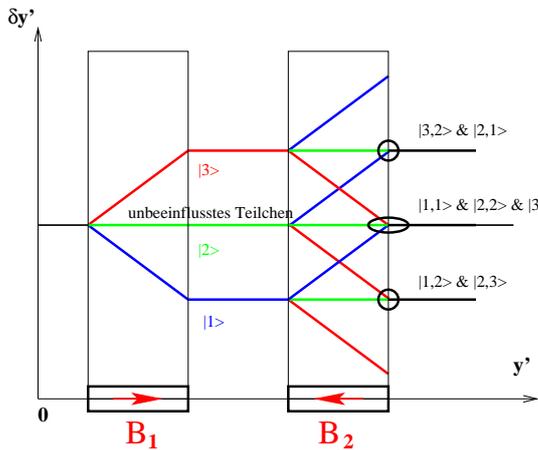


Abbildung 4.45: Fahrplanmodell zur Erklärung des „normalen“ Spinechos bei verschwindender Verstimmung der Feldintegrale. Die Schnittpunkte des „normalen“ Spinechos sind mit der Ellipse markiert, die ebenfalls an gleicher Stelle beitragenden Interferenzen aufgrund der erneuten Quantisierung in der zweiten Spule sind durch Kreise gekennzeichnet. Erklärung im Text.

einer erneuten Aufspaltung der einzelnen Eigenzustände aus der ersten Spule. Dadurch werden die beiden zusätzlichen, durch Kreise markierten Möglichkeiten zur Interferenz erzeugt. An den jeweiligen Interferenzmustern sind die Zustände  $|3, 2\rangle$  und  $|2, 1\rangle$  sowie  $|1, 2\rangle$  und  $|2, 3\rangle$ . Die Notation  $|i, j\rangle$  ist dabei so zu verstehen, dass das entsprechende Teilwellenpaket in der ersten Spule durch den Zustand  $|i\rangle$  dargestellt wird, während es in der zweiten Spule durch den Zustand  $|j\rangle$  beschrieben wird.

Aus Abbildung 4.45 können, wie vorher auch schon, anhand der Winkel, unter denen sich die Trajektorien schneiden, Vorhersagen über die auftretenden Frequenzen abgegeben werden. In den markierten Bereichen treten zwei unterschiedliche Winkel auf, wovon der eine halb so groß ist, wie der andere. Aus dieser Tatsache folgt, dass in der Echogruppe, die bei identischen Magnetfeld-Integralen, also einer Verstimmung der ersten Spule von Null, zwei Frequenzen im Spektrum zu finden sein sollten. Wie der Abbildung 4.35 entnommen werden kann, ist dies auch der Fall.

Im linken Teil der Abbildung 4.46 ist das Fahrplanmodell dargestellt, mit dem eine Erklärung für die Entstehung der Gruppe bei verschwindendem Feldintegral in der ersten Spule ermöglicht wird. Die relevanten Trajektorien sind am Ende des zweiten Feldintegrals durch die Ellipse gekennzeichnet. Obwohl in der gezeigten Situation keine Trajektorienschnittpunkte am Ende des zweiten Feldintegrals existieren, wird die Interferenz durch das Auseinanderlaufen der Zustände  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$  und  $|3\rangle$  in der ersten Spule ermöglicht. Da durch das Streufeld zwischen den Spinecho-Spulen eine erneute Quantisierung der Zustände beim Eintritt in die Feldregion der zweiten Spinecho-Spule notwendig wird, kann das Auseinanderlaufen der Trajektorien der Zustände  $|1, 2\rangle$ ,  $|2, 2\rangle$  und  $|3, 2\rangle$  am Ende des zweiten Feldintegrals beobachtet werden. Mit zunehmender Aufspaltung der Zustände im ersten Feldbereich nimmt auch die Aufspaltung der markierten

Auch im Fall, dass das erste Magnetfeld-Integral durchgestimmt wird, lässt sich mithilfe des Fahrplanmodells eine anschauliche Erklärung für die Existenz der zusätzlichen Gruppen geben. Im Gegensatz zum eben geschilderten Fall ist dies jedoch nicht innerhalb eines einzigen Fahrplans möglich. Dies liegt daran, dass mit zunehmendem Feldintegral in der ersten Spule die Aufspaltung der gezeigten Eigenzustände größer wird. Im Folgenden ist immer zu bedenken, dass für Interferenzen im Allgemeinen Trajektorienschnittpunkte am Ende des zweiten Feldintegrals liegen müssen.<sup>15</sup> Dessen Größe wird konstant gehalten, weshalb Schnittpunkte, die im Innern des zweiten Feldintegrals zu liegen kommen, kein Interferenzsignal im Detektor erzeugen.

Das komplette Fahrplanmodell für den Fall identischer, antiparallel gerichteter Felder in erster und zweiter Spule ist in Abb. 4.45 gezeigt. Der „normale“ Spinecho-Punkt ist durch die Ellipse gekennzeichnet. Die Trajektorien, die sich in diesem Punkt schneiden, stammen von den eigentlich interessierenden Teilwellenpaketen, die sowohl in der ersten als auch in der zweiten Spinecho-Spule im Zustand  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$  oder  $|3\rangle$  waren. Durch die erneute Quantisierung beim Eintritt in das zweite Spinecho-Feld kommt es zu einer

<sup>15</sup>Eine Ausnahme stellt die Rotationsgruppe bei verschwindendem ersten Feldintegral dar.

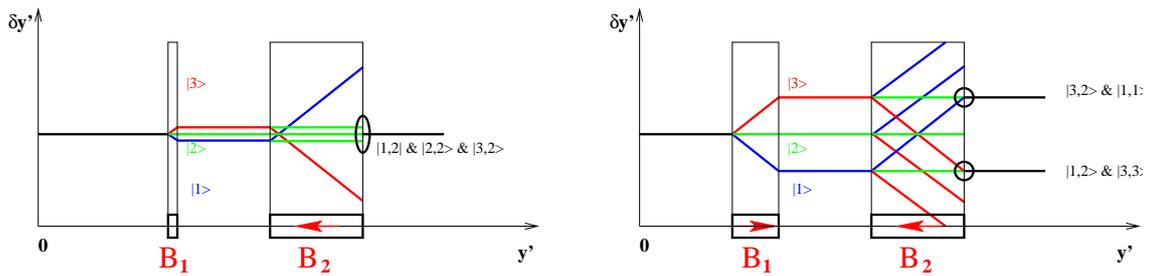


Abbildung 4.46: Fahrplanmodelle zur Erklärung der Interferenzmuster bei verschwindendem Feldintegral der ersten Spule (links) und bei halbem erstem Feldintegral (rechts). Die zur jeweiligen Interferenz beitragenden Trajektorien enden in einer Ellipse (links), wo es möglich ist, sind die Schnittpunkte mit Kreisen markiert. Erklärung im Text.

Trajektorien im zweiten Feldbereich zu, bis schließlich die Teilwellenpakete nicht mehr überlagern. Die so entstehende Interferenz entspricht quasi einer Spinrotation, aufgenommen mit der ersten Spinecho-Spule. Damit diese Interferenz aber am Ende der Spinecho-Strecke beobachtbar ist, muss die Existenz von Zuständen gegeben sein, die das zweite Magnetfeld unbeeinflusst durchqueren können, wie gezeigt. Bei den hier relevanten Feldstärken erfüllt der Zustand  $|2\rangle$  des Spin 1-Tripletts von atomarem Wasserstoff genau diese Bedingungen, wie schon aus dem Breit-Rabi-Diagramm 4.36 hervorgeht. Die Existenz dieser „anormalen“ Spinrotation bei verschwindendem erstem Feldintegral ist demnach eine Eigenheit eines Spin 1-Systems.

Da die Teilwellenpakete im Bereich der ersten Spule wie bei einer „normalen“ Spinrotation voneinander getrennt werden, werden auch für die „anomale“ Spinrotation bei verschwindendem Feldintegral der ersten Spule zwei Frequenzen erwartet, die sich um den Faktor zwei unterscheiden. Wie allerdings schon erwähnt, weist die gerade besprochene Spinrotations-Gruppe nur eine einzige Frequenz auf.

Der rechte Teil der Abbildung 4.46 zeigt das Fahrplanmodell für den Fall, dass das erste Feldintegral halb so groß ist, wie das Feldintegral der zweiten Spule. Auch hier sind die relevanten Schnittpunkte, die die Entstehung der Interferenz am Ende des zweiten Feldintegrals ermöglichen, durch Kreise gekennzeichnet. Nach der Diskussion der „anormalen“ Spinrotation wird auch bei dieser Gruppe sofort klar, dass ihr Entstehen nur durch die Existenz des Zustands  $|2\rangle$  im Feld der zweiten Spule möglich wird. Auch diese Gruppe stellt eine Eigenheit eines Spin 1-Systems dar. Die weiteren Kreuzungspunkte der einzelnen Trajektorien im „Innern“ des zweiten Feldintegrals sind im Detektor nicht beobachtbar, da die betreffenden Zustände beim Verlassen des Feldbereichs keine Überlagerung mehr aufweisen.

Die Frequenzanalyse anhand des Fahrplanmodells legt zunächst den Schluss nahe, dass diese Gruppe mit der niedrigeren der auftretenden Frequenzen oszilliert, da der Winkel zwischen den sich kreuzenden Trajektorien demjenigen entspricht, der bei der Rotation und beim Echo mit Spin 1-Teilchen für die niedrige Frequenz verantwortlich ist. Bei genauerer Betrachtung fällt allerdings auf, dass die hier betrachtete Interferenz nicht dadurch zustande kommt, dass die Teilwellenpakete entlang der im Fahrplan gezeigten Trajektorien laufen und so zur Überlagerung gebracht werden können. Vielmehr ist die im Fahrplanmodell gezeigte Situation als Momentaufnahme zu verstehen, da das Interferenzmuster in diesem Fall noch durch die im ersten Feldintegral größer werdende Aufspaltung der Eigenzustände  $|1\rangle$  und  $|3\rangle$  modifiziert wird.

Die Positionen der Spinecho-Punkte aller gefundenen Gruppen sind zusammenfassend noch einmal in Abbildung 4.47 dargestellt. Wie zu erkennen ist, zeigen alle drei Gruppen das erwartete und mittels der gerade diskutierten Fahrpläne erklärbares Verhalten. Das leichte Driften der eigentlichen Spinecho-Gruppe bei verschwindender Verstimmung könnte als Hinweis für Inhomogenitäten zwischen den Feldverläufen der beiden Spinecho-Spulen untereinander gedeutet werden. Auch diese mögliche maschinelle Unzulänglichkeit könnte einen negativen Einfluss auf den Verlauf der Maschinenfunktion haben.

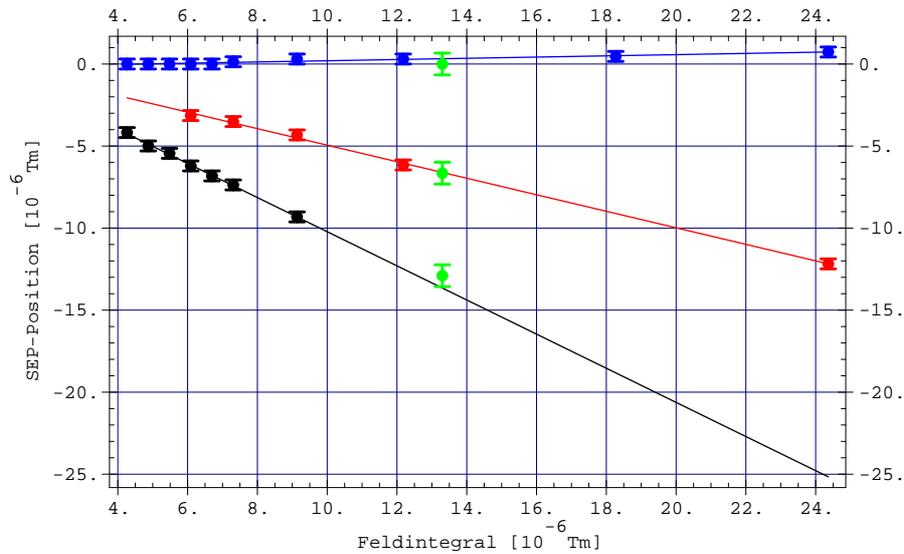


Abbildung 4.47: Position der „Spinecho-Punkte“ der einzelnen Gruppen als Funktion des Feldintegrals. Die eigentliche Spinecho-Gruppen liegen auf der Geraden mit Steigung  $0.037 \pm 0.008$ . Die Steigung der Geraden, die die Position der mittleren Gruppe beschreibt, liegt bei  $-0.50 \pm 0.01$ , die Position der „Spinrotations-Gruppen“ aus der ersten Spule folgen der Geraden mit Steigung  $-1.04 \pm 0.02$ . Die drei hellen Datenpunkte bei einem Magnetfeld-Integral von etwa  $13.3 \mu\text{Tm}$  stammen aus der in Abb. 4.42 gezeigten Messung mit den gewickelten Spulen.

#### 4.4 Zusammenfassung und Ausblick

Wie die Diskussion der zusätzlichen Echo- und Rotationsgruppen ergibt, lassen sich die Positionen der einzelnen Gruppen auf die Existenz eines Streufelds im Bereich des  $\pi$ -Flips zurückführen. Dieses Streufeld bewirkt eine erneute Quantisierung beim Eintritt in die zweite Spinecho-Spule, wodurch es zu einer erneuten Mischung der Eigenzustände kommt. Durch diese Umverteilung lässt sich der bei den beiden Spulen-Arten gemeinsame rasche Abfall der Polarisierung erklären. Um die Ursache des Polarisationsverlustes noch weiter einzugrenzen, werden zur Zeit Messungen mit longitudinalen Führungsfeldern durchgeführt. Anhand der Ergebnisse dieser Messungen wird sich überprüfen lassen, ob tatsächlich im Bereich des  $\pi$ -Flips ein adiabatisches „Herausdrehen“ aus der ursprünglichen Quantisierungsachse erfolgt. Unabhängig vom Ausgang dieser Messungen empfiehlt es sich jedoch, die  $\mu$ -Metallabschirmung zumindest in den kritischen Bereichen der nichtadiabatischen  $\pi/2$ - und  $\pi$ -Flips durch Abschirmungen ohne Flansche zu ersetzen um eine zuverlässige Rückführung des magnetischen Flusses zu gewährleisten.

## **Teil II**

# **Spezielle Quellen für Atom- und Molekülstrahlen**



## Kapitel 5

# Theorie von effusiven und Überschall-Quellen

Einen Strahl aus Atomen oder Molekülen zu erzeugen ist prinzipiell nicht sehr schwierig. Voraussetzung dafür ist allerdings, dass die Teilchen unter den in der Quelle herrschenden Bedingungen in gasförmigem Aggregatzustand vorliegen. Der Strahl wird durch Blenden, die den Raumwinkel einschränken, aus einer divergierenden Wolke von Teilchen geformt, die durch eine Düse ins Vakuum expandiert.

Um Aussagen über die mittlere Geschwindigkeit und die Varianz der Geschwindigkeitsverteilung (Temperatur) der Teilchen im Strahl machen zu können, ist zu beachten, dass es zwei grundsätzlich verschiedene Arten der Expansion ins Vakuum gibt:

- Effusive Quellen weisen eine breite Geschwindigkeitsverteilung auf.
- Überschallquellen erzeugen einen stark vorwärtsgerichteten Strahl mit schmaler Geschwindigkeitsverteilung.

Als Unterscheidungsmerkmal zwischen beiden Arten der Strahlerzeugung wird die Knudsenzahl  $K = \frac{\bar{l}}{d}$  herangezogen. Sie stellt das Verhältnis zwischen der mittleren freien Weglänge  $\bar{l}$  der Strahlteilchen im Reservoir der Düse und dem Durchmesser  $d$  der Düse dar.

Ist die mittlere freie Weglänge im Reservoir viel größer als die Düsenöffnung,  $\bar{l} \gg d \Rightarrow K \gg 1$ , dann besteht der Strahl aus Teilchen, die zufällig die Düsenöffnung treffen und während dem Durchtritt durch die Düse nicht mehr miteinander wechselwirken. Ein solcher effusiver Strahl zeigt ein maxwellverteiltes Geschwindigkeitsspektrum. Diese Art der Expansion wird in Abschnitt 5.2 beschrieben.

Im anderen Grenzfall, für  $K \ll 1$ , strömt das Gas, vom Druckgradienten zwischen Reservoir und Querkammer getrieben, unter Kontinuumsbedingungen aus der Düse und expandiert daraufhin adiabatisch im Vakuum. Genauer dazu findet sich in Abschnitt 5.3.

## 5.1 Grundlegendes

### 5.1.1 Maxwell-Boltzmann-Verteilung

Die Häufigkeitsverteilung der Geschwindigkeiten eines idealen Gases, das im thermischen Gleichgewicht mit dem Behälter ist, in dem es sich befindet, entspricht der Maxwell-Boltzmann-Verteilung. Da keine Richtung ausgezeichnet ist, hat die Wahl des Koordinatensystems keinen Einfluss auf die Richtungsverteilung der Geschwindigkeiten. Durch die Wahl von Kugelkoordinaten lässt sich das Problem am leichtesten

beschreiben, da sie seiner Symmetrie am ehesten gerecht werden. Ausgehend von einem kartesischen Koordinatensystem ergibt sich für die Verteilungsfunktion  $\frac{1}{N} dN = f(\vec{v}) d^3v$ :

$$\begin{aligned} f(v_x, v_y, v_z) dv_x dv_y dv_z &= \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\frac{m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2k_B T}} dv_x dv_y dv_z = \\ &= f(v) dv = 4\pi v^2 \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\frac{m v^2}{2k_B T}} dv = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \frac{v^2}{v_w^3} e^{-(v/v_w)^2} dv. \end{aligned} \quad (5.1)$$

Der Faktor  $4\pi v^2$  ergibt sich aus der Annahme, dass die Verteilung  $f(v)$  richtungsunabhängig ist. Dies beinhaltet sowohl die Transformation von kartesischen Koordinaten in Kugelkoordinaten als auch die Ausführung der Integration über den Raumwinkel  $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$  ( $\phi$  bezeichnet den Azimut-Winkel). Der Faktor  $(m/(2\pi k_B T))^{3/2}$  folgt jeweils aus der Normierung der Verteilungen  $\int f(v_x, v_y, v_z) dv_x dv_y dv_z = 1$  bzw.  $\int f(v) dv = 1$ , wobei die Integration über alle möglichen Geschwindigkeiten läuft.

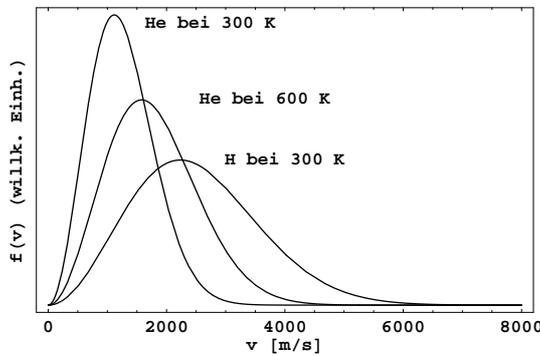


Abbildung 5.1: Auf Eins normierte Maxwell-Boltzmann-Verteilungen für verschiedene Gase und Temperaturen nach Gl. (5.1).

Im Falle von kartesischen Koordinaten ist von  $-\infty$  bis  $\infty$  zu integrieren, bei Verwendung von Kugelkoordinaten geht die Integration von 0 bis  $\infty$ . Abb. 5.1 zeigt die Maxwell-Boltzmann-Verteilung aus Gl. (5.1).

Der wahrscheinlichste Geschwindigkeitsbetrag ergibt sich aus dem Maximum der Verteilung  $f(v)$  zu

$$v_w = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}. \quad (5.2)$$

Damit wird die letzte Umformung in Gl. (5.1) ermöglicht. Durch Einführung einer reduzierten Geschwindigkeit  $x = v/v_w$  lässt sich Gl. (5.1) noch weiter vereinfachen:

$$f(x) dx = \frac{4}{\sqrt{\pi}} x^2 e^{-x^2} dx. \quad (5.3)$$

Da die Verteilung  $f(v)$  auf Eins normiert ist, folgt für die mittlere Geschwindigkeit

$$\bar{v} = \int_0^{\infty} v f(v) dv = \frac{2}{\sqrt{\pi}} v_w = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}}. \quad (5.4)$$

Auf die gleiche Weise lässt sich auch die Effektivgeschwindigkeit als Wurzel aus dem mittleren Geschwindigkeitsquadrat berechnen:

$$v_{\text{eff}}^2 = \overline{v^2} = \int_0^{\infty} v^2 f(v) dv = \frac{3}{2} v_w^2 = \frac{3k_B T}{m}. \quad (5.5)$$

Mit Hilfe des mittleren Geschwindigkeitsquadrats nach Gl. (5.5) kann dann die mittlere kinetische Energie  $E_{\text{kin}} = 1/2 m \overline{v^2}$  bestimmt werden.

### 5.1.2 Zusammenhang zwischen Geschwindigkeits- und Flugzeitverteilung

Bei der Bestimmung der Geschwindigkeitsverteilung gibt es ein prinzipielles Problem: Da es nur schwer möglich ist, die Geschwindigkeit eines einzelnen Strahlteilchens zu bestimmen, wird anstelle der Geschwindigkeitsverteilung die Flugzeitverteilung des gesamten Strahls gemessen. Der Intensitätsverlauf dieses Spektrums beinhaltet noch den Einfluss der sogenannten Öffnungsfunktion des Choppers, worauf aber später eingegangen werden soll.

Das hier zunächst interessierende Problem ist der nichtlineare Zusammenhang zwischen Geschwindigkeit  $v$  und Flugzeit  $t$ . Dies soll am Beispiel der Maxwell-Boltzmann-Verteilung demonstriert werden. Aus Gl. (5.1) wird mithilfe von  $v = s/t$  und  $dv = -s/t^2 dt$

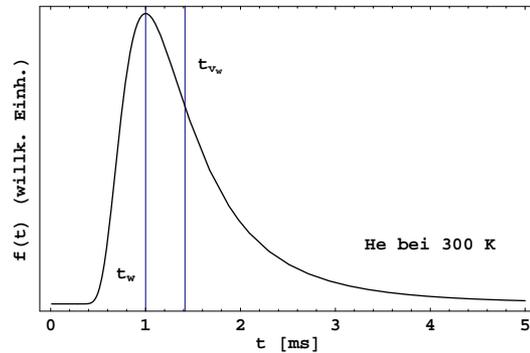


Abbildung 5.2: Flugzeitverteilung für einen effusiven Strahl aus Helium. Die Flugstrecke beträgt 1.58 m, dies entspricht gerade der Flugstrecke bei den Messungen in Abb. 3.3.

$$f(t) dt = -\frac{4s^3}{\sqrt{\pi}v_w^3} \frac{1}{t^4} e^{-(s/(tv_w))^2} dt, \quad (5.6)$$

mit der wahrscheinlichsten Geschwindigkeit  $v_w$  aus Gl. (5.2) und der Flugstrecke  $s$ . Die wahrscheinlichste Flugzeit  $t_w$  ergibt sich aus dem Maximum der Verteilung  $f(t)$ . Damit folgt aus Gl. (5.6) ein direkter Zusammenhang zwischen  $t_w$  und  $v_w$ :

$$t_w = \frac{s}{\sqrt{2}v_w} \neq \frac{s}{v_w} \quad (5.7)$$

Um aus der gemessenen Flugzeitverteilung<sup>1</sup> mit der wahrscheinlichsten Flugzeit die wahrscheinlichste Geschwindigkeit der Maxwell-Boltzmann-Verteilung zu erhalten, ist in diesem Fall der Faktor  $\sqrt{2}$  zu berücksichtigen. Es gilt somit:  $v_{t_w} = \sqrt{2}v_w$ . In Abb. 5.2 ist die Flugzeitverteilung eines 300 K warmen effusiven Strahls aus Heliumatomen zu sehen, dessen Geschwindigkeit Maxwell-Boltzmann-verteilt ist. Die vertikalen Linien markieren die wahrscheinlichste Flugzeit  $t_w$  sowie die Flugzeit  $t_{v_w}$ , die der wahrscheinlichsten Geschwindigkeit  $v_w$  entspricht. Der Zusammenhang zwischen Geschwindigkeits- und Winkelverteilung beim Überschallstrahl wird ab Seite 98 behandelt.

### 5.1.3 Mittlere freie Weglänge

Um einen Eindruck von der Größenordnung der mittleren freien Weglänge zu erhalten, genügt folgende einfache Betrachtung, bei der die Gasteilchen als harte Kugeln interpretiert werden (siehe beispielsweise [29] oder [30]): Nach Gl. (5.4) ist die mittlere Geschwindigkeit der Teilchen eines Gases bekannt. Die mittlere Anzahl von Stößen  $Z$  pro Sekunde ergibt sich dann aus dem Produkt von Anzahldichte  $n$  und dem Volumen, das ein Teilchen mit Durchmesser  $\xi$  und mittlerer Geschwindigkeit  $\bar{v}$  in dieser Zeit überstreicht. Das genannte Volumen hat den doppelten Durchmesser des Teilchens, um dem Modell harter Kugeln gerecht zu werden. Die Stoßrate ergibt sich dann zu

$$Z = \sqrt{2}\bar{v}n\pi\xi^2. \quad (5.8)$$

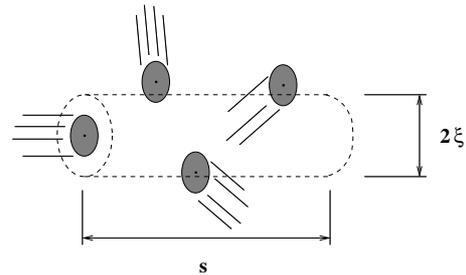


Abbildung 5.3: Einfaches Modell zur Bestimmung der mittleren freien Weglänge. Zu Stößen kommt es dann, wenn die Zentren der anderen Gasteilchen im gezeigten Volumen liegen. Nach [29].

<sup>1</sup>Hier sei angenommen, dass die Einflüsse der Chopperöffnungsfunktion schon beseitigt wurden.

Dabei wurde berücksichtigt, dass sich auch die anderen Gasteilchen bewegen. Dazu wurde eine relative Geschwindigkeit  $v_{\text{rel}} = \sqrt{2} \bar{v}$  eingeführt. Die Zeit zwischen zwei Stößen ergibt sich aus der reziproken Stoßrate  $Z^{-1}$ . Damit gilt für den mittleren Abstand zwischen zwei Stößen, der als mittlere freie Weglänge  $\bar{l}$  bezeichnet wird:

$$\bar{l} = \bar{v} Z^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2} \pi \xi^2 n} = \frac{k_B T}{\sqrt{2} \pi \xi^2 p}. \quad (5.9)$$

Im letzten Schritt wurde das ideale Gasgesetz  $p = n k_B T$  angewandt, um die mittlere freie Weglänge durch die Temperatur und den Druck des Gases beschreiben zu können. Wie aus Gl. (5.9) hervorgeht, ist die mittlere freie Weglänge umgekehrt proportional zum Druck im Vorratsgefäß der Quelle und proportional zur Temperatur des Gases in der Quelle. Damit lässt sich bei fester Quellgeometrie vor allem durch Änderung des Druckes in der Quelle der Charakter des Teilchenstrahls in gewissen Grenzen variieren.

## 5.2 Effusive Quellen

Die Teilchen, die bei einer effusiven Quelle den Strahl formen, stehen mit dem Reservoir in thermischem Gleichgewicht. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die Fläche der Düsenöffnung im Vergleich zur Gesamtfläche des Reservoirs klein ist. Beim Durchgang durch die Düse kommt es zu keinen Wechselwirkungen der Teilchen untereinander. Das bedeutet, dass das thermische Gleichgewicht im Reservoir durch die entweichenden Teilchen nicht gestört wird.

### 5.2.1 Die dünnwandige Düse

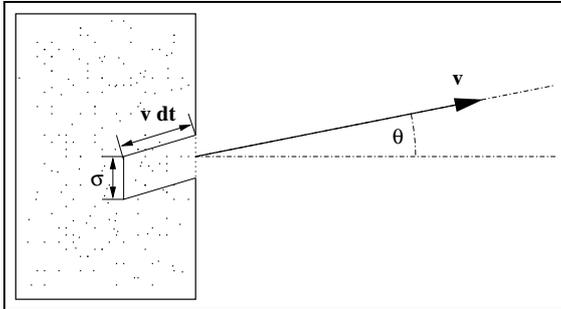


Abbildung 5.4: Zur Effusion durch eine Düse.

Betrachtet man in Abb. 5.4 die Anzahl der Teilchen  $dN$ , die während der Zeit  $dt$  mit Geschwindigkeiten zwischen  $v$  und  $v+dv$  durch ein Flächenelement  $d\sigma$  der Düse in ein Raumwinkelelement  $d\Omega$  expandieren, so findet man

$$dN = n_0 f(v) v dv \frac{d\Omega}{4\pi} \cos \theta d\sigma dt. \quad (5.10)$$

Dabei steht  $n_0$  für die Anzahldichte der Teilchen in der Quelle;  $\theta$  ist der Winkel, den die Achse des Raumwinkelements  $d\Omega$  mit der Normalen der Düsenfläche  $\sigma$  einschließt.  $f(v)$  ist die Verteilung

der Geschwindigkeitsbeträge des Gases in der Düse, es handelt sich dabei um eine Maxwell-Boltzmann-Verteilung nach Gl. (5.1). Allerdings gilt (5.10) in dieser Form nur dann, wenn die Wandstärke der Düse vernachlässigbar ist. Auf Seite 93 wird kurz auf die Auswirkungen einer endlichen Wandstärke eingegangen.

#### 5.2.1.1 Teilchenfluss ins Volumenelement $d\Omega$

Aus den Gln. (5.10) und (5.3) folgt für den Fluss (Teilchen pro Zeit) durch ein Flächenelement  $d\sigma$  der Düse in ein Raumwinkelelement  $d\Omega$ :

$$\frac{dN}{dt} = I(\theta, x) d\Omega = \frac{1}{\pi^{3/2}} n_0 v_w \underbrace{x^3 e^{-x^2} dx}_{\text{Geschwindigkeit}} d\sigma \underbrace{\cos \theta d\Omega}_{\text{Winkel}}, \quad (5.11)$$

dabei wurde die reduzierte Geschwindigkeit  $x = v/v_w$  eingeführt. Nach Gl. (5.11) lautet die normierte Geschwindigkeitsverteilung des Flusses:

$$f_f(x) dx = 2 x^3 e^{-x^2} dx. \quad (5.12)$$

Im Gegensatz zur Geschwindigkeitsverteilung in der Quelle (beschrieben durch Gl. (5.1)) fällt auf, dass die Geschwindigkeitsverteilung des Strahlflusses nicht mit  $v^2$ , sondern mit  $v^3$  skaliert. Die wahrscheinlichste Geschwindigkeit im Strahl ergibt sich aus Gl. (5.12) zu

$$v_{w,f} = \sqrt{\frac{3}{2}} v_w = \sqrt{\frac{3 k_B T}{m}}. \quad (5.13)$$

Der Vergleich mit Gl. (5.5) zeigt, dass die effektive Geschwindigkeit der Maxwell-Boltzmann-Verteilung mit der wahrscheinlichsten Geschwindigkeit eines effusiven Strahls übereinstimmt.

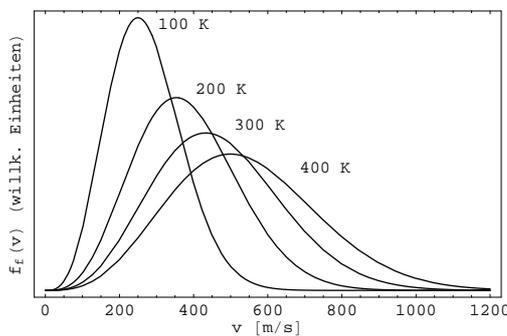


Abbildung 5.5: Auf Eins normierte Geschwindigkeitsverteilung  $f(v)$  des Flusses eines effusiven Argonstrahls bei verschiedenen Temperaturen.

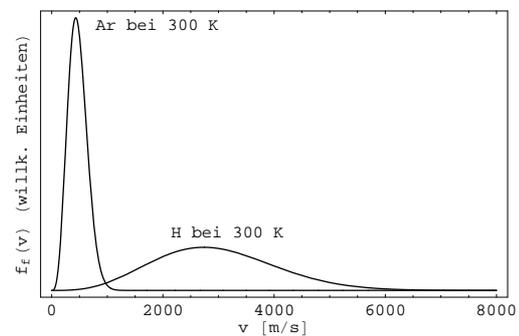


Abbildung 5.6: Auf Eins normierte Geschwindigkeitsverteilung  $f(v)$  des Flusses von effusiven Strahlen aus Argon bzw. atomarem Wasserstoff bei 300 K.

Die große mittlere freie Weglänge der Teilchen führt dazu, dass die Strahlteilchen nicht mehr miteinander stoßen. Aus diesem Grund bleibt die zur Strahlachse parallele Geschwindigkeitskomponente nach dem Verlassen der Düse konstant.

Für die transversale Geschwindigkeitskomponente  $v_{\perp}$  gilt, dass die Verteilung bei zunehmendem Abstand von der Düse immer schmäler wird, wenn der betrachtete Querschnitt gleich bleibt. Das hängt damit zusammen, dass sich Teilchen mit großen  $v_{\perp}$  immer weiter von der Strahlachse entfernen und in der Regel nicht mehr durch strahlabwärts vorhandene Blenden gelangen. Dieser Effekt wird geometrische Kühlung genannt und ist proportional zu  $r^{-2}$ , wobei  $r$  den Abstand von der Düse bezeichnet.

Außerdem erkennt man aus Gl. (5.11), dass die Geschwindigkeits- und Richtungsverteilung des Strahls voneinander unabhängig sind. In den Abb. 5.5 und 5.7 sind die beiden unabhängigen Verteilungen eines effusiven Strahls zu sehen. Abbildung 5.6 zeigt die Geschwindigkeitsverteilung eines effusiven Strahls aus Argon bzw. atomarem Wasserstoff bei gleicher Temperatur. Wie nach Gl. (5.13) zu erwarten, hat der leichtere Wasserstoff eine wesentlich höhere wahrscheinlichste Strahlgeschwindigkeit als das etwa 40 mal schwerere Argon.

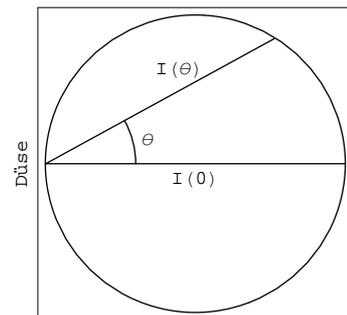


Abbildung 5.7: Polardiagramm der Strahlintensität als Funktion des Winkels  $\theta$  im Falle der dünnwandigen Düse.

Um den Fluss für eine Düse von endlichen Ausmaßen zu bestimmen, muss Gl. (5.11) über die gesamte Düsenfläche integriert werden, was in geschlossener Form nur für bestimmte Geometrien möglich ist. Weit entfernt – verglichen mit den Dimensionen der Düse – lässt sich der gesamte Fluss durch die Düse aber trotzdem mit Gleichung (5.11) beschreiben, indem  $d\sigma$  durch die Düsenfläche  $\sigma$  ersetzt wird.

Wird Gl. (5.11) über alle vorkommenden Geschwindigkeiten integriert, so erhält man den Teilchenfluss in ein Raumwinkelement  $d\Omega$

$$I(\theta) d\Omega = \frac{n_0 \bar{v}}{4} d\sigma \cos \theta \frac{d\Omega}{\pi}, \quad (5.14)$$

$\bar{v}$  beschreibt die in Gl. (5.4) eingeführte mittlere Geschwindigkeit der Teilchen im Quellgas. Integration über den vorderen Halbraum und die Düsenfläche ergibt die totale Flussrate aus der Düse, also die Anzahl von Teilchen, die die Düse pro Zeiteinheit verlassen:

$$I = \frac{n_0 \bar{v} \sigma}{4}. \quad (5.15)$$

Aus Gl. (5.14) lässt sich außerdem durch Integration über die Düsenfläche für  $\theta = 0$  die totale Flussrate der Teilchen bestimmen, die pro Zeiteinheit die Düse in Vorwärtsrichtung verlassen:

$$I(0) = \frac{n_0 \bar{v} \sigma}{4\pi}. \quad (5.16)$$

Um eine hohe Intensität in Strahlrichtung ( $\theta = 0$ ) zu erreichen, kann somit entweder die Düsenfläche  $\sigma$  oder die Anzahldichte der Strahlteilchen im Reservoir  $n_0$  groß gewählt werden. Allerdings ist darauf zu achten, dass  $n_0$  und  $\sigma$  über die Knudsenzahl miteinander verknüpft sind, und dass für eine effusive Quelle  $K = \frac{\bar{l}}{d} \gg 1$  gelten muss: Bei steigender Dichte im Reservoir sinkt die mittlere freie Weglänge  $\bar{l}$ , so dass bei festen Düsenabmessungen die maximal mögliche Dichte im Reservoir limitiert ist. Andererseits muß der Durchmesser  $d$  der Düse unter der mittleren freien Weglänge bleiben, um den effusiven Charakter der Düse nicht zu verändern.

### 5.2.1.2 Anzahldichte

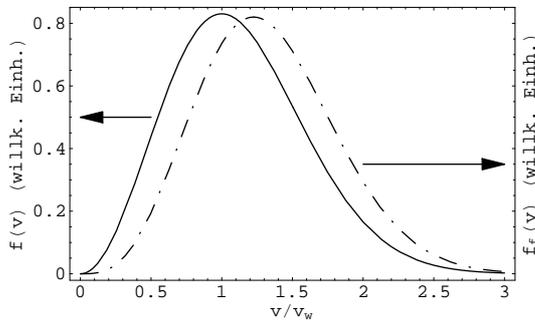


Abbildung 5.8: Vergleich der normierten Geschwindigkeitsverteilungen für Fluss (strichpunktiert) und Anzahldichte (durchgezogen) bei identischen Strahlparametern.

Aus Gl. (5.10) erhält man direkt einen Ausdruck für die Anzahldichte im Strahl:

$$\begin{aligned} n(R, \theta, x) &= \frac{dN}{dV} \\ &= \frac{1}{4\pi R^2} n_0 f(v) dv \cos \theta d\sigma \\ &= \frac{1}{\pi^{3/2} R^2} n_0 x^2 e^{-x^2} dx \cos \theta d\sigma. \end{aligned} \quad (5.17)$$

$R$  bezeichnet den Abstand von der Düse. Die normierte Geschwindigkeitsverteilung der Anzahldichte ist also gerade die Maxwell-Boltzmann-Verteilung aus Gl. (5.3).

Abhängig davon, wie der Strahl nachgewiesen wird, sieht man entweder eine Verteilung nach Gl. (5.12) oder eine Maxwell-Boltzmann-Verteilung der Geschwindigkeiten: Detektoren, die die Zahl der Teilchen messen, die eine gegebene Fläche pro Zeiteinheit treffen, werden eine Geschwindigkeitsverteilung nach Gl. (5.12) sehen. Ist das Signal des Detektors dagegen abhängig von der Anzahldichte der Teilchen im Strahl, so sieht man eine Geschwindigkeitsverteilung nach Maxwell-Boltzmann. Abb. 5.8 zeigt den Unterschied zwischen den beiden Verteilungen, wobei die Geschwindigkeiten auf die wahrscheinlichste Geschwindigkeit nach Gl. (5.2) normiert sind. Der durchgezogene Kurvenverlauf stellt die normierte Geschwindigkeitsverteilung der Anzahldichte dar, der strichpunktierte zeigt die Verteilung für den Fluss. Gut zu sehen ist, dass die wahrscheinlichste Geschwindigkeit für den Fluss zu höheren Werten verschoben ist.

Das in dieser Arbeit verwendete Massenspektrometer weist die Strahlteilchen nach, indem neutrale Atome durch Elektronen-Beschuss ionisiert werden, um danach in einem Quadrupol-Massenspektrometer nach

ihrer Masse sortiert zu werden. Da die Ionisationswahrscheinlichkeit proportional zur Anzahldichte im Ionisationsvolumen ist, gehört dieser Detektor zur zweiten Kategorie; die gemessenen effusiven Geschwindigkeitsspektren sollten also Maxwell-Boltzmann-verteilt sein.

### 5.2.2 Düsen mit kanalförmigen Öffnungen

Aus den Gleichungen (5.15) und (5.16) ergibt sich das Verhältnis aus vorwärts gerichteter Intensität, die ein Detektor mit einer sensitiven Fläche  $\Delta A$  im Abstand  $R$  von der Quelle „sieht“ und der totalen Intensität zu  $\Delta A / (\pi R^2)$ . Typischerweise liegen die Werte für dieses Verhältnis im Bereich von  $10^{-6}$  bis  $10^{-8}$ . Hier soll nun kurz darauf eingegangen werden, wie sich dieses Verhältnis verbessern lässt. Weitere Details sind in [31] zu finden.

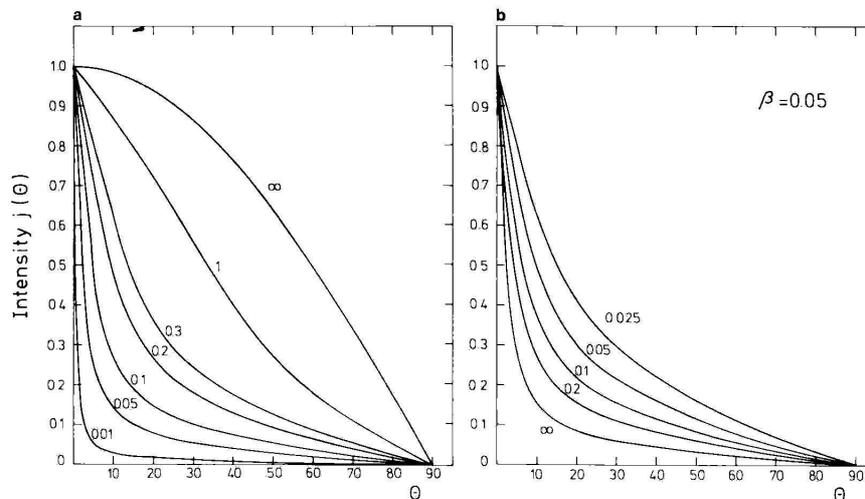


Abbildung 5.9: Strahlintensität als Funktion des Winkels zur Strahlachse (siehe Abb. 5.4).

(a) Intensität für verschiedene Werte von  $\beta = d/L$  bei einer Knudsenzahl von  $K_L \approx \infty$ . Wird die Länge  $L$  des Kanals gegenüber dem Durchmesser  $d$  größer, so reduziert sich die Intensität abseits der Strahlachse. Für  $\beta = \infty$  ergibt sich die kosinusförmige Verteilung der dünnwandigen Düse.

(b) Intensität bei fester Düsengeometrie  $\beta = 0.05$  für verschiedene Knudsenzahlen, normiert auf gleiche Intensität auf der Strahlachse. Mit zunehmender Anzahl von Stößen der Strahlteilchen untereinander wird die Winkelverteilung breiter. Aus [32].

Durch Verwendung eines Kanals anstelle einer dünnwandigen Düse lässt sich dieses Verhältnis zu Gunsten der vorwärts gerichteten Intensität ändern. Allerdings muss auch hier die Bedingung für die Effusivität der Quelle gewährleistet sein. Im Fall eines langen Kanals ist die entscheidende Dimension der Düsengeometrie die Länge  $L$  des Kanals. Diese muss sehr viel kleiner sein als die mittlere freie Weglänge  $\bar{l}$  der Strahlteilchen, damit für die Knudsenzahl  $K_L = \bar{l}/L \gg 1$  gilt. In diesem Fall finden nur Stöße der Strahlteilchen mit den Wänden des Kanals statt, wobei die Winkelverteilung nur durch die Geometrie des Kanals bestimmt wird. Ein Maß für die Geometrie ist das Verhältnis von Querschnittsfläche  $d$  des Kanals zu seiner Länge  $L$ :  $\beta = d/L$ . Die linke Hälfte von Abb. 5.9 beschreibt diesen Fall. Gezeigt ist die Winkelabhängigkeit der Strahlintensität für verschiedene Werte von  $\beta$ . Je länger der Kanal wird, um so geringer wird der Raumwinkel, unter dem das Ende des Kanals vom Reservoir der Quelle zu sehen ist. Dadurch wird die Intensität abseits von der Strahlachse im Vergleich zur Intensitätsverteilung der dünnwandigen Düse stark verringert. Schon für den Fall, dass die Dicke der Düsenwand von der gleichen Größenordnung wie der Düsendurchmesser ist ( $\beta = 1$ ), sind deutliche Abweichungen von der kosinusförmigen Winkelverteilung feststellbar.

Die rechte Hälfte von Abb. 5.9 zeigt für eine feste Geometrie  $\beta = 0.05$  den Einfluss der mittleren freien Weglänge. Ausgehend vom Idealfall  $K_L = \infty$  wird die Winkelverteilung umso breiter, je höher die Anzahldichte der Strahlteilchen (und damit deren mittlere freie Weglänge) wird.

### 5.3 Überschallquellen

Wird die Anzahldichte im Reservoir der Quelle ausgehend von der Situation, wie sie bei einem effusiven Strahl vorliegt, weiter erhöht, gelangt man in den Bereich der schwer zu beschreibenden Knudsenströmung. Bei weiterer Erhöhung wird schließlich die mittlere freie Weglänge so klein, dass  $\bar{l} \ll d$  und damit  $K \ll 1$  gilt. In diesem Bereich werden die Teilchen unter Kontinuumsbedingungen aufgrund des Druckgradienten zwischen Vorratsbehälter und Vakuumkammer durch die Düsenöffnung getrieben und die Strömung lässt sich gasdynamisch beschreiben. Die Strömungsgeschwindigkeit hängt im Wesentlichen vom inversen Expansionsverhältnis  $p_0/p_x$  ab, dem Druckverhältnis zwischen Reservoir und Vakuumkammer.

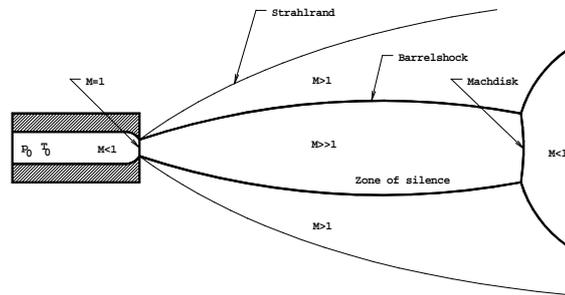


Abbildung 5.10: Überschallexpansion aus einer Düse. Nach [32].

Ab einem kritischen Wert für das inverse Expansionsverhältnis erreicht die Strömungsgeschwindigkeit die Schallgeschwindigkeit. Dieser kritische Wert liegt für alle Gase unter 2.1, wobei sich für ein Edelgas beispielsweise der Wert 2.05 ergibt. Wenn also der Druck vor der Düse etwa doppelt so hoch ist, wie in der Vakuumkammer, dann erreicht das austretende Gas Schallgeschwindigkeit ( $M = 1$ ). Eine solche Situation ist in Abb. 5.10 dargestellt.

In diesem Fall spricht man von einer Überschallexpansion, weil mit enger werdendem Leitungsquerschnitt aufgrund der Kontinuitätsgleichung die Strömungsgeschwindigkeit zunimmt. Dieses Verhalten setzt sich nach Verlassen der Düse weiter fort, da thermische Energie der Strahlteilchen durch Stöße untereinander in gerichtete kinetische Energie umgewandelt wird. Stromabwärts schließt sich also ein Bereich direkt an die Düse an, in dem sich das Gas mit Überschallgeschwindigkeit bewegt, die sog. „Zone of Silence“.

Das Vorliegen von Überschallgeschwindigkeit ist bei der Beschreibung des Expansionsvorgangs von Bedeutung: Im Ruhesystem eines Volumenelements  $dV$  werden aufgrund der hohen Strömungsgeschwindigkeit  $v_D$  die begrenzenden Düsenwände sehr schnell weggenommen. Daraufhin kann das Gas im Volumenelement  $dV$  ungestört in den freien Raum expandieren, da wegen des Überschallcharakters keine Wechselwirkung mit nachfolgenden Volumenelementen oder der Umgebung möglich ist. Im Bereich der „Zone of Silence“ unterliegen die Strömungsverhältnisse auch keinen äußeren Randbedingungen, da sich Informationen über diese auch nur mit Schallgeschwindigkeit fortpflanzen können. Die Expansion wird im bewegten Bezugssystem also isotrop erfolgen. Das Fehlen von Wechselwirkungen mit der Umgebung führt dazu, dass das betrachtete Volumen  $dV$  thermisch von seiner Umgebung isoliert ist. Die Expansion erfolgt damit adiabatisch, es wird auf Kosten der inneren Energie Arbeit geleistet, was die Abkühlung des Gases im bewegten Bezugssystem zur Folge hat.

Obwohl der Teilchenfluss aus der Düse nichts von äußeren Randbedingungen „weiß“, muss sich das austretende Gas doch an die Umgebungsbedingungen anpassen. Dies führt zur Ausbildung von Schockwellen, die durch erhöhten Druck und Temperatur gekennzeichnet sind. In Abb. 5.10 sind das die Bereiche, die mit „Barrel Shock“ und „Mach Disk“ gekennzeichnet sind. Sie entstehen an den Stellen, wo durch die Expansion der Volumenelemente die Teilchendichte so weit reduziert wird, dass die Stoßfrequenz der Teilchen im Volumenelement einen kritischen Wert unterschreitet. Dadurch kommt es zu einem Übergang von der kontinuierlichen Strömung zur molekularen Strömung. Der Abstand der „Mach Disk“ ist von der Gasart unabhängig und hängt nur vom inversen Expansionsverhältnis zwischen Düse ( $p_0$ ) und Quellkammer ( $p$ ) ab [32]. Normiert auf den Düsendurchmesser  $d$  findet sich diese Schockwelle auf der Strahlachse bei

$$\frac{x_M}{d} = 0.67 \left( \frac{p_0}{p} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (5.18)$$

### 5.3.1 Strömungsgeschwindigkeit

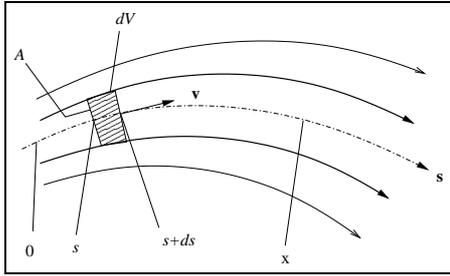


Abbildung 5.11: Strömungsfeld mit Stromfäden. Nach [33].

Im Folgenden wird mit Hilfe der Gasdynamik die Strömungsgeschwindigkeit eines frei expandierenden Volumenelements bestimmt [33]. Dieser Strahlgeschwindigkeit ist noch die isotrope Expansion des Volumenelements überlagert. Aufgrund des isotropen Charakters der Expansion sind die Expansionsgeschwindigkeiten im Ruhesystem des Volumenelements symmetrisch um Null verteilt, weshalb die hier erhaltene Strömungsgeschwindigkeit gleichzeitig sowohl die mittlere als auch die wahrscheinlichste Geschwindigkeit in Strahlrichtung darstellt. Im nächsten Abschnitt wird noch genauer auf die Geschwindigkeits- und Winkelverteilung eines überschallschnellen Strahls eingegangen.

Hier soll nun eine stationäre Strömung in einem Stromfaden betrachtet werden. Durch die Beschränkung auf den stationären Fall werden Anlaufvorgänge der Strömung nicht berücksichtigt. Die Zustandsgrößen und die Geschwindigkeit bleiben an jedem Ort im Strömungsfeld zeitlich konstant. Die Beschränkung auf einen Stromfaden gewährleistet, dass die Zustandsgrößen und die Geschwindigkeit auf der gesamten Querschnittsfläche des Stromfadens konstant sind. Die Bestimmungsgrößen können also als Funktion der Ortskoordinate  $s$  längs der Achse des Stromfadens beschrieben werden. Da die Mantelfläche des Stromfadens durch Stromlinien begrenzt wird, kommt es nicht zum Teilchenaustausch in den Stromfaden hinein oder aus ihm heraus.

Auf die Gasmasse  $dm = \rho dV$  im Volumen  $dV = A ds$  in Abb. 5.11 wirkt von links die Kraft  $p A$  und von rechts die Kraft  $-A(p + (dp/ds) \cdot ds)$ , wenn  $p$  der in der Stromröhre vorherrschende statische Druck ist. Als resultierende Kraft ergibt sich dann – unter Vernachlässigung der Schwerkraft, was bei Gasen erlaubt ist – in Strömungsrichtung  $dF = -A(dp/ds) \cdot ds$ . Nach dem 2. Newtonschen Gesetz wirkt auf die Gasmasse  $dm$  die Kraft  $dF = dm a = dm(dv/dt) = dm v (dv/ds)$ , was zu einer Beschleunigung der Gasmasse führt. Aus dem Gesagten folgt

$$\begin{aligned} -A \frac{dp}{ds} ds &= \rho A ds v \frac{dv}{ds} \\ \Rightarrow -\frac{1}{\rho} dp &= v dv = \frac{1}{2} d(v^2). \end{aligned} \quad (5.19)$$

Bei dieser Gleichung handelt es sich um die Bernoullische Gleichung in differenzieller Form. Integration von der Stelle 0 ( $s_0, v_0, \rho_0, p_0$ ) zur Stelle  $x$  ( $s_x, v_x, \rho_x, p_x$ ) in Abb. 5.11 ergibt

$$\frac{1}{2} (v_x^2 - v_0^2) = - \int_{p_0}^{p_x} \frac{1}{\rho} dp. \quad (5.20)$$

Das Integral in Gl. (5.20) kann ausgewertet werden, wenn der Zusammenhang zwischen  $\rho$  und  $p$  bekannt ist. Aus  $v_0$  lässt sich dann  $v_x$  berechnen. Im Falle adiabatischer Zustandsänderungen, wie sie bei adiabatischer, oder auch isentroper Expansion vorliegen, wird der benötigte Zusammenhang durch die Poisson-Gleichung

$$\left( \frac{p_0}{p_x} \right) = \left( \frac{V_x}{V_0} \right)^\kappa = \left( \frac{T_0}{T_x} \right)^{\frac{\kappa}{\kappa-1}} = \left( \frac{\rho_0}{\rho_x} \right)^\kappa = \left( \frac{n_0}{n_x} \right)^\kappa \quad (5.21)$$

geliefert. Dabei bezeichnet  $p, V, T, \rho$  und  $n$  jeweils den Druck, das Volumen, die Temperatur, die Massendichte und die Teilchenanzahldichte im Zustand 0 bzw.  $x$ . Der Adiabatenexponent  $\kappa$  ist gegeben durch das Verhältnis von spezifischer Wärme bei konstantem Druck  $c_p$  und konstantem Volumen  $c_v$ . Er lässt sich auch ausdrücken durch die Anzahl  $f$  der Freiheitsgrade der Strahlteilchen:

$$\kappa = \frac{c_p}{c_v} = \frac{f+2}{f}. \quad (5.22)$$

Für einatomige Gase, wie beispielsweise die Edelgase oder atomaren Wasserstoff, gilt  $\kappa = 5/3$ . Nach Gleichung (5.21) ist die Temperatur am Ort  $x$  über das Expansionsverhältnis  $p_x/p_0$  mit der Temperatur am Ort 0 verknüpft:

$$T_x = T_0 \left( \frac{p_x}{p_0} \right)^{\frac{\kappa-1}{\kappa}}. \quad (5.23)$$

Aus dieser Gleichung geht hervor, dass für ein bestimmtes Gas die Temperatur am Ort  $x$  entlang des Strahls umso niedriger ist, je geringer das Expansionsverhältnis ist. Um also eine große Temperaturdifferenz zwischen den beiden Orten zu erreichen, ist auch eine große Druckdifferenz nötig. Wird der aus der Poissongleichung (5.21) erhaltene Zusammenhang

$$\frac{1}{\rho} = \frac{p_0^{1/\kappa}}{\rho_0} \frac{1}{p^{1/\kappa}} \quad (5.24)$$

in die Bernoulligleichung (5.20) eingesetzt und von  $p_0$  bis  $p_x$  integriert, so erhält man

$$v = \sqrt{\frac{2\kappa}{\kappa-1} \frac{k_B T_0}{m} \left( 1 - \left( \frac{p}{p_0} \right)^{\frac{\kappa-1}{\kappa}} \right)} = \sqrt{\frac{2\kappa}{\kappa-1} \frac{k_B (T_0 - T)}{m}}. \quad (5.25)$$

Um Gl. (5.25) zu erhalten, wurde vom Ruhezustand in der Quelle ( $v_0 = 0$ ) ausgegangen und nach der Zustandsgleichung für ideale Gase  $p_0/\rho_0$  durch  $\frac{k_B T_0}{m}$  ersetzt. Der Index  $x$ , der eine beliebige Stelle des Strahls beschreibt, wurde weggelassen. Die letzte Identität ergibt sich unter Ausnutzung von Gl. (5.23).

Aus Gl. (5.25) geht hervor, dass die Geschwindigkeit nur durch die Ruhetemperatur  $T_0$  des Gases in der Quelle und durch das Expansionsverhältnis  $p/p_0$  bzw. die Strahltemperatur  $T$  bestimmt ist. Bei größtmöglicher Expansion, wenn  $p \rightarrow 0$ , erhält man als maximal mögliche mittlere Geschwindigkeit bei der Überschallexpansion

$$v_\infty = \sqrt{\frac{2\kappa}{\kappa-1} \frac{k_B T_0}{m}}. \quad (5.26)$$

In Tabelle 5.1 sind Werte für die maximale Strömungsgeschwindigkeit einiger Gase angegeben, die sich aus dieser Gleichung ergeben. Das gleiche Ergebnis erhält man natürlich auch, wenn man die Temperaturdifferenz  $T_0 - T$  maximiert, was nach Gl. (5.23) gleichbedeutend mit dem Grenzübergang  $p \rightarrow 0$  ist. Aus Gl. (5.25) lässt sich mit Hilfe der Poissongleichung (5.21) und der idealen Gasgleichung ein Ausdruck für die Massenstromdichte  $j_m = \rho v$  herleiten. Die Massenstromdichte weist als Funktion des Druckes ein Maximum auf, und zwar an der Stelle, an der der Strahl in der Düse die Schallgeschwindigkeit erreicht. Alle Zustandsgrößen an der Stelle dieses Maximums werden als „kritisch“ bezeichnet und mit einem Stern versehen. So erhält man beispielsweise für das kritische Expansionsverhältnis

$$\frac{p^*}{p_0} = \left( \frac{2}{\kappa+1} \right)^{\frac{\kappa}{\kappa-1}}. \quad (5.27)$$

Mit dieser Gleichung ergibt sich für ein Edelgas mit  $\kappa = 5/3$  der schon früher erwähnte Wert von 2.05 für das Inverse des kritischen Expansionsverhältnisses. Aus Gl. (5.27) lassen sich mit der Poissongleichung (5.21) noch Ausdrücke für weitere kritische Größen bestimmen, wie etwa für das kritische Temperaturverhältnis oder das kritische Dichteverhältnis.

Gas	$v_\infty$
H, atomar	3518 m/s
Helium	1765 m/s
Argon	559 m/s
Krypton	386 m/s
Xenon	308 m/s

Tabelle 5.1: Maximal mögliche mittlere Geschwindigkeiten nach Gl. (5.26) für einige Gase bei  $T_0 = 300$  K.

### 5.3.1.1 Geschwindigkeits- und Winkelverteilung

Um die Geschwindigkeits- und Winkelverteilung eines Überschallstrahls berechnen zu können, ist es notwendig, auch die isotrope Expansion des Volumenelements in seinem Ruhesystem zu berücksichtigen. Gleichung (5.25) liefert ja nur die Schwerpunktschwindigkeit des Volumenelements  $dV$  und lässt dabei dessen Expansion unbeachtet.

Ausgehend vom Ruhesystem des Volumenelements  $dV$  ergibt sich folgendes Bild: Nachdem es die Düse verlassen hat, expandiert es frei im Vakuum, wobei die Geschwindigkeitsverteilung im Volumenelement durch eine Maxwell-Boltzmann-Verteilung beschreibbar ist. In kartesischen Koordinaten  $v_x, v_y, v_z$  ist die Verteilung gaußförmig. Dies entspricht genau der freien Expansion, da aufgrund der Isotropie keine Raumrichtung ausgezeichnet ist:

$$f(v_x, v_y, v_z) dv_x dv_y dv_z = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{v_w^3} e^{-\frac{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}{v_w^2}} dv_x dv_y dv_z, \quad (5.28)$$

wobei  $v_w = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}$  die wahrscheinlichste Geschwindigkeit im Volumenelement in dessen Ruhesystem ist. Die hier genannte Temperatur  $T$  ist die Strahltemperatur des Gases im Volumenelement. Nach Gl. (5.23) gilt für diese  $T = T_0 \left(\frac{p}{p_0}\right)^{\frac{\kappa-1}{\kappa}}$ . Dabei ist  $T_0$  die Temperatur des Gases in der Quelle. Da angenommen wird, dass sich das Gas in der Quelle im thermischen Gleichgewicht mit seiner Umgebung befindet, entspricht  $T_0$  auch der Düsentemperatur. Wird (5.28) in Kugelkoordinaten transformiert, so ergibt sich gerade wieder Gl. (5.1), die ebenfalls von der Isotropie des Raumes ausgeht.

Bei der Transformation aus dem Ruhesystem des Volumenelements in das Ruhesystem der Düse wird der Geschwindigkeitsverteilung aus Gl. (5.28) noch die Strömungsgeschwindigkeit aus Gl. (5.25) überlagert, wobei nun aber angenommen wird, dass durch den Strahl die  $v_z$ -Achse besonders ausgezeichnet ist<sup>2</sup>:

$$f(v_x, v_y, v_z) dv_x dv_y dv_z = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{v_w^3} e^{-\frac{v_x^2 + v_y^2 + (v_z - v_S)^2}{v_w^2}} dv_x dv_y dv_z \quad (5.29)$$

$$\text{mit } v_S = \sqrt{\frac{2\kappa}{\kappa-1} \frac{k_B T_0}{m} \left(1 - \left(\frac{p}{p_0}\right)^{\frac{\kappa-1}{\kappa}}\right)} = \sqrt{\frac{2\kappa}{\kappa-1} \frac{k_B (T_0 - T)}{m}}.$$

$\kappa = \frac{c_p}{c_v} = \frac{f+2}{f}$  ist der Adiabatenexponent (für ein monoatomares Gas gilt  $\kappa = \frac{5}{3}$ ). Wird Gl. (5.29) in Kugelkoordinaten transformiert, so ergibt sich schließlich

$$f(v, \theta) dv = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{v^2}{v_w^3} e^{-\frac{v^2 + v_S^2 - 2v v_S \cos \theta}{v_w^2}} dv, \quad (5.30)$$

wobei  $\theta$  den Winkel zwischen  $v$  und  $v_S$  bezeichnet. In Abb. 5.13 ist die Geschwindigkeits- und Winkelverteilung eines Überschallstrahls aus Argonatomen mit einer Strahltemperatur von 10 K dargestellt, wobei der Strahl aus einer 300 K warmen Quelle stammt. Abb. 5.12 zeigt den Schnitt bei  $\theta = 0$  durch das Profil

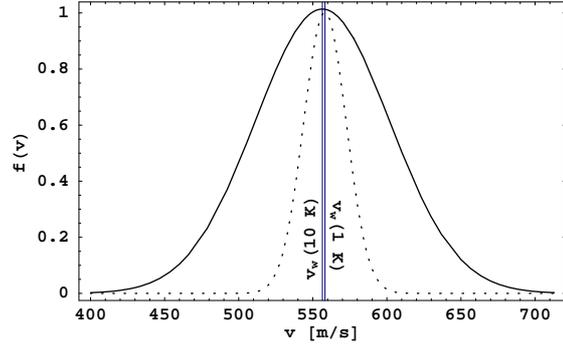


Abbildung 5.12: Die durchgezogene Kurve zeigt den Verlauf der Geschwindigkeitsverteilung für 10 K Strahltemperatur, punktiert ist der Verlauf für 1 K zu sehen. In beiden Fällen beträgt die Düsentemperatur 300 K. Zu Vergleichszwecken wurden die beiden Verteilungen umskaliert. Der für 10 K gezeigte Verlauf entspricht einem Schnitt durch die Verteilung in Abb. 5.13 nach Gl. (5.30) bei  $\theta = 0^\circ$ .

<sup>2</sup>Allerdings wird vereinfachend angenommen, dass die transversale Temperatur  $T_\perp$  im Volumenelement mit der Temperatur  $T_\parallel$  in Strahlrichtung übereinstimmt. Daher taucht in Gl. (5.29) nur eine wahrscheinlichste Geschwindigkeit  $v_w$  auf.

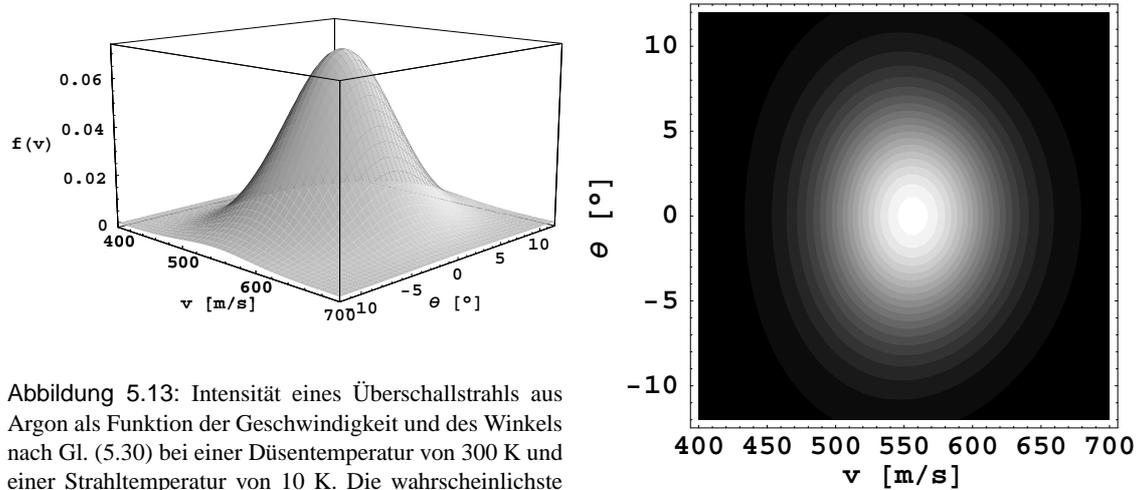


Abbildung 5.13: Intensität eines Überschallstrahls aus Argon als Funktion der Geschwindigkeit und des Winkels nach Gl. (5.30) bei einer Düsentemperatur von 300 K und einer Strahltemperatur von 10 K. Die wahrscheinlichste Geschwindigkeit liegt bei etwa 556 m/s.

der Geschwindigkeits- und Winkelverteilung aus Abb. 5.13, zusätzlich ist dort noch das Profil für einen 1 K kalten Strahl dargestellt. Um die Breite der Verteilungen direkt miteinander vergleichen zu können, wurden beide auf gleiche Höhe skaliert, es wird deutlich, dass mit abnehmender Strahltemperatur die Verteilung schmaler wird.

Die wahrscheinlichste Geschwindigkeit in Vorwärtsrichtung für einen Überschallstrahl ergibt sich aus Gl. (5.30) aus  $\partial f(v)_{\theta=0}/\partial v = 0$  zu

$$v_{w,s} = \frac{1}{2} \left( v_S + \sqrt{v_S^2 + \frac{8 k_B T}{m}} \right), \quad (5.31)$$

dabei wurde  $v_w = \sqrt{\frac{2 k_B T}{m}}$  mit der Strahltemperatur  $T$  eingesetzt,  $v_S$  repräsentiert die Strömungsgeschwindigkeit.

Da die wahrscheinlichste Geschwindigkeit eines Überschallstrahls sowohl von der Temperatur des Strahls selbst als auch über die Strömungsgeschwindigkeit von der Temperatur der Quelle abhängt, bewirkt eine niedrigere Strahltemperatur also nicht nur eine schmalere Verteilung, vielmehr wird auch die ganze Verteilung verschoben. Dies wird in Abb. 5.12 deutlich, in der die wahrscheinlichsten Geschwindigkeiten der beiden Verteilungen durch die vertikalen Linien markiert sind.

### 5.3.1.2 Zusammenhang zwischen Geschwindigkeits- und Flugzeitverteilung

Wie schon bei der Maxwell-Boltzmann-Verteilung, die der Geschwindigkeitsverteilung für die Anzahldichte eines effusiven Strahls zugrunde liegt, ist es auch bei Überschallstrahlen möglich, aus der gemessenen Flugzeitverteilung die wahrscheinlichste Geschwindigkeit der Geschwindigkeitsverteilung zu bestimmen. Analog zum Vorgehen bei einem effusiven Strahl wird aus Gl. (5.30) mit  $v = s/t$  und  $dv = -s/t^2 dt$

$$f(t, \theta) dt = \left( \frac{1}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{s^3}{v_w^3 t^4} e^{-\frac{s^2 + v_S^2 t^2 - 2 v_S s t \cos \theta}{v_w^2 t^2}} dt, \quad (5.32)$$

wobei  $v_w$  nach Gl. (5.2) die wahrscheinlichste Geschwindigkeit der Maxwell-Boltzmann-Verteilung darstellt, die für die isotrope Expansion im Ruhesystem des betrachteten Volumenelements zuständig ist.  $v_S$  ist die Driftgeschwindigkeit des Volumenelements, das – getrieben von der Druckdifferenz zwischen dem

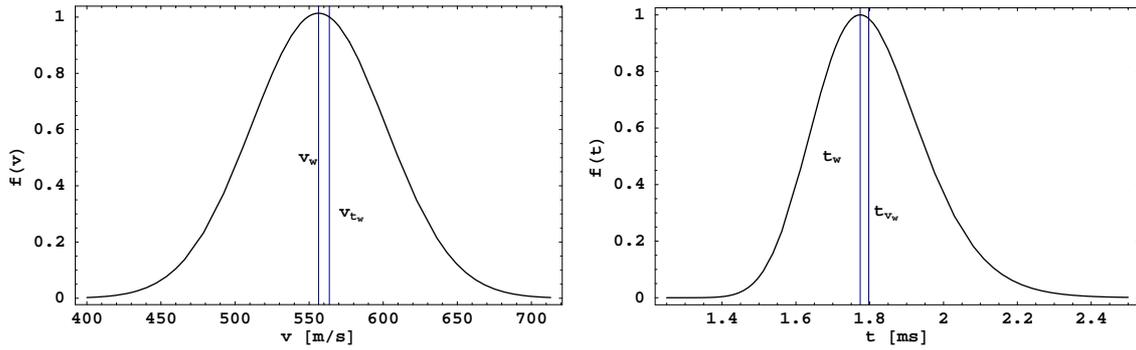


Abbildung 5.14: Vergleich zwischen Geschwindigkeits- und Flugzeitverteilung eines 10 K kalten Argon-Überschallstrahls aus einer 300 K warmen Düse. Links ist die Geschwindigkeitsverteilung gezeigt. Markiert sind die wahrscheinlichste Geschwindigkeit  $v_w$  nach Gl. (5.31) sowie die Geschwindigkeit  $v_{t_w}$ , die sich aus der wahrscheinlichsten Flugzeit nach Gl. (5.34) ergibt. Rechts ist die Flugzeitverteilung desselben Strahls zu sehen, die sich nach einer Flugstrecke von  $s = 1 \text{ m}$  ergibt. Auch hier sind die wahrscheinlichste Flugzeit  $t_w$  sowie die Flugzeit  $t_{v_w}$  markiert, die sich aus der wahrscheinlichsten Geschwindigkeit  $v_w$  der Verteilung links ergibt.

Reservoir und der Quellkammer – die Düse verlässt. Für die Vorwärtsrichtung ( $\theta = 0$ ) wird aus obiger Gleichung

$$f(t)_{\theta=0} dt = \frac{1}{8} \left( \frac{m}{\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{s^3}{t^4} e^{-\frac{m(s^2 + v_S^2 t^2 - 2v_S s t)}{2k_B T t^2}} dt. \quad (5.33)$$

Auch hier wurde  $v_w$  nach Gl. (5.2) ersetzt, wie schon mehrfach geschehen. Aus der wahrscheinlichsten Flugzeit bei  $\partial f(t)_{\theta=0} / \partial t = 0$  lässt sich die dazugehörige Geschwindigkeit  $v_{t_w} = s/t_w$  berechnen:

$$v_{t_w} = \frac{1}{2} \left( v_S + \sqrt{v_S^2 + \frac{16 k_B T}{m}} \right). \quad (5.34)$$

$v_S$  steht wiederum für die Strömungsgeschwindigkeit nach Gl. (5.25). Der Vergleich mit Gl. (5.31) zeigt, dass wie beim Effusivstrahl auch für den Überschallstrahl  $v_{t_w} \neq v_w$  gilt.

In Abb. 5.14 werden die Geschwindigkeits- und die Flugzeitverteilung eines Überschallstrahls aus Argonatomen einander gegenübergestellt. Beide Verteilungen beschreiben einen Strahl mit einer Strahltemperatur von 10 K, der aus einer 300 K warmen Düse stammt. In der Geschwindigkeitsverteilung sind die wahrscheinlichste Geschwindigkeit und die Geschwindigkeit markiert, die aus der wahrscheinlichsten Flugzeit in der Flugzeitverteilung resultiert. Analog wurde bei der rechts gezeigten Flugzeitverteilung verfahren.

### 5.3.1.3 Andere charakteristische Größen

In Abb. 5.15 ist für einige wichtige Größen der Verlauf in Abhängigkeit des Abstands von der Düse für einen überschallschnellen Edelgas-Strahl aufgetragen. Zu beachten ist, dass die Skala für die Strahlgeschwindigkeit linear, für die Größen Strahltemperatur  $T$ , Dichte  $n$  und Stoßfrequenz  $\nu$  dagegen logarithmisch ist.

Während die Strahlgeschwindigkeit  $v$  sehr schnell auf den maximal möglichen Wert  $v_\infty$  aus Gl. 5.26 ansteigt, fallen die anderen Größen kontinuierlich weiter ab. Das kontinuierliche Absinken der Stoßfrequenz führt dazu, dass in einem bestimmten Abstand von der Düse die kontinuierliche Strömung nicht mehr aufrecht erhalten werden kann und der Übergang zur molekularen Strömung beginnt. Ob eine kontinuierliche oder molekulare Strömung vorliegt, kann anhand der Knudsenzahl  $K = l/d$  bestimmt werden: Für  $K > 0.5$  liegt molekulare Strömung vor, für  $K < 0.01$  ist die Strömung kontinuierlich.

Der Übergangsbereich wird oft als „freezing region“ bezeichnet, da aufgrund fehlender Kollisionen die Strahleigenschaften „eingefroren“ werden. Meist befindet sich diese „freezing region“ jenseits der Stelle, an der  $v/v_\infty \approx 0.98$  gilt. Das hat zur Folge, dass die Strahlgeschwindigkeit nur wenig, die Strahltemperatur dagegen signifikant von der Position der „freezing region“ abhängt.

Die „speed ratio“  $S$  beschreibt das Verhältnis zwischen der Strahlgeschwindigkeit und der Breite der Geschwindigkeitsverteilung, die durch  $\sqrt{2 k_B T/m}$  gegeben ist:

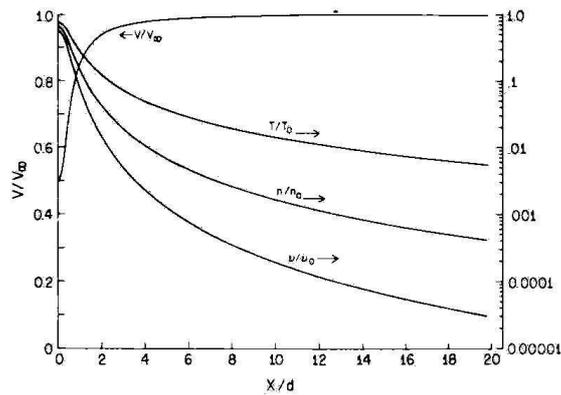


Abbildung 5.15: Einige wichtige Eigenschaften eines Edelgas-Überschallstrahls ( $\kappa = 5/3$ ) auf der Strahlachse als Funktion des Abstands von der Düse. Die Strahlgeschwindigkeit ist normiert auf die Strömungsgeschwindigkeit  $v_\infty$ , die Temperatur  $T$ , Dichte  $n$  und Stoßfrequenz  $\nu$  sind auf die jeweiligen Ausgangsgrößen in der Quelle normiert. Der Abstand von der Düse wird in Düsendurchmessern angegeben. Aus [32].

voraus [34].  $A$  und  $B$  hängen von den Eigenschaften der Strahlteilchen ab, insbesondere von  $\kappa = c_p/c_V$ . Experimentelle Untersuchungen zeigen, dass der Wert von  $B$  zwischen 0.4 und 0.545 liegt [35].

$$S_{\parallel} = \frac{v}{\sqrt{\frac{2 k_B T}{m}}} \quad (5.35)$$

$$S_{\parallel\infty} = \sqrt{\frac{\kappa}{\kappa - 1} \frac{T_0}{T}},$$

in der zweiten Zeile wurde die maximal mögliche mittlere Geschwindigkeit nach Gl. (5.26) eingesetzt,  $S_{\parallel\infty}$  wird als „terminal speed ratio“ bezeichnet. Für einatomige ideale Gase gilt  $\kappa/(\kappa - 1) = 5/2$ .

Die „speed ratio“ ist direkt proportional zur Machzahl  $M$ :

$$S = \sqrt{\frac{\kappa}{2}} M. \quad (5.36)$$

Damit zeigt  $S$  das gleiche Verhalten wie  $M$ , von dem auch die in Abb. 5.15 gezeigten Größen abhängen. Theoretische Arbeiten sagen für die „terminal speed ratio“ eine Abhängigkeit vom Druck im Quellreservoir  $p_0$  und vom Düsendurchmesser  $d$  von der Art

$$S_{\parallel\infty} = A (p_0 d)^B \quad (5.37)$$

## Kapitel 6

# Entwicklung einer neuartigen Quelle für atomaren Wasserstoff und metastabiles Helium

Bei der Durchführung von Spinechoexperimenten mit atomarem Wasserstoff ist man interessiert an der Zahl von Wasserstoffatomen, die in Abhängigkeit von der Feldkonfiguration der Spinechostrecke<sup>1</sup> zum Detektor gelangen. Dabei ergibt sich ein prinzipielles Problem, das mit der Zusammensetzung des Restgases in einer evakuierten Vakuumkammer zusammenhängt: Wasserstoff ist darin mit einem Molekülzahlanteil von 80 – 90% vertreten [36]. Da der bei den Experimenten verwendete Detektor Teilchen durch Elektronenstoß ionisiert, um sie nachzuweisen, besteht die Möglichkeit, dass molekularer Wasserstoff nicht nur ionisiert, sondern auch dissoziiert wird. Gleiches gilt auch bei der Fragmentation von Wassermolekülen, die von den Rezipientenwänden desorbieren. Damit trägt der im Restgas vorhandene molekulare Wasserstoff sowie das von Kammerwandungen desorbierende Wasser deutlich zum unpolarisierten Untergrund bei. Man ist auf eine Strahlquelle angewiesen, die mit hoher zeitlicher Konstanz einen hohen Fluss an atomarem Wasserstoff erzeugt: Je höher die Zahl der Strahlteilchen, umso leichter lässt sich das Signal vom Untergrund trennen. Außerdem wird der relative statistische Fehler bei der Bestimmung der Strahlpolarisation kleiner je besser das Signal-Untergrund-Verhältnis ist. Wünschenswert ist also ein Dissoziator, der in einem möglichst effektiven Prozess die Wasserstoffmoleküle, die der Düse zugeführt werden, in atomarem Wasserstoff  $^1\text{H}$  spaltet.

Um gasförmig vorliegende Wasserstoffmoleküle zu dissoziieren bedarf es einer Energiezufuhr, die mindestens der Bindungsenergie des  $\text{H}_2$ -Moleküls von  $E_B = 4.48 \text{ eV}$  entspricht. Die Zufuhr kann auf verschiedene Weisen erfolgen, bei den am weitesten verbreiteten Methoden handelt es sich um die Folgenden:

- Thermische Dissoziatoren arbeiten meist mit einem Wolframfilament bei Temperaturen von 2500 – 3000 K und Drücken zwischen  $10^{-2}$  und 1 mbar [37]. Durch die niedrigen Betriebsdrücke sind die Teilchendichten im Strahl eher gering, durch die hohe Temperatur des Filaments, an dem die Dissoziation stattfindet, ist die Quelltemperatur entsprechend hoch. Dies führt nach Kapitel 5 zu vergleichsweise hohen Strahlgeschwindigkeiten. Für das Spinechoprinzip bedeuten höhere Geschwindigkeiten nach (1.7) bei gegebener, noch auflösbarer Restphase eine schlechtere absolute Energieauflösung. Aus diesem Grund scheidet thermische Dissoziatoren für die neue Quelle aus.
- Elektronenstoß-Dissoziation bedient sich freier Elektronen, die durch Stöße mit den  $\text{H}_2$ -Molekülen neben anderen Prozessen auch für eine Aufspaltung in zwei  $^1\text{H}$ -Atome sorgt. Die Elektronen stammen entweder aus einer Elektronenquelle, oder aus einer Gasentladung. Im Falle der Gasentladung

---

<sup>1</sup>Dazu gehört die Orientierung der Führungsfelder zueinander sowie die Verstimmung der Magnetfelder von erster und zweiter Spinechospule.

liegt die Quelltemperatur üblicherweise bei einigen hundert Kelvin. Der bisher am Wasserstoff-Spinocho eingesetzte Dissoziator verursacht beispielsweise bei brennender Entladung und Einstrahlung von 81 W Mikrowellenleistung eine Temperaturerhöhung von etwa 250 K, wenn „zimmerwarmes“ Gas zugeführt wird (siehe dazu Abb. 3.3).

Das in diesem Kapitel beschriebene Konzept zur Dissoziation von molekularem Wasserstoff beruht wie der in Abschnitt 3.2.1 beschriebene Dissoziator auf der Fragmentation der Moleküle durch Elektronenstoß in einer Gasentladung. Der wesentliche Unterschied zur bestehenden Quelle liegt darin, dass die zur Aufrechterhaltung der Gasentladung notwendige Energie durch ein elektrisches Gleichfeld zugeführt wird. So kann bei der DC-Quelle auf ein einfaches Netzgerät zurückgegriffen werden. Der apparative Aufwand reduziert sich durch Verzicht auf den Mikrowellengenerator. Im Prinzip verwendet der hier gewählte Ansatz die Energie eines Kondensatorfeldes, da das elektrische Feld an zwei durch einen Isolator getrennte Metallschichten angelegt wird. Die Metall-Isolator-Metall-Anordnung ist mit einem oder mehreren Löchern versehen, durch die das Gas in das Gebiet hohen Feldes zwischen den beiden Elektroden gelangen kann. In diesem Bereich werden Elektronen beschleunigt und können bei genügend großen Feldstärken ausreichend Energie erhalten, um eine elektronenstoß-getragene Entladung aufrecht zu erhalten. Durch kleine Lochdurchmesser und geringe Elektrodenabstände (im Submillimeterbereich) können schon mit verhältnismäßig niedrigen Spannungen (200 – 400 V) Leistungsdichten zwischen den Elektroden eingekoppelt werden, die zur Aufrechterhaltung der Gasentladung genügen. Im Folgenden werden derartige Metall-Isolator-Metall-Anordnungen als *mikrostrukturierte Elektrodensysteme* bezeichnet.

## 6.1 Dissoziation von molekularem Wasserstoff in einer Gasentladung

In diesem Abschnitt soll auf die Dissoziation von molekularem Wasserstoff mittels Elektronenstoß eingegangen werden. Wie schon erwähnt, können diese Elektronen aus einer externen Quelle stammen, oder in einer Gasentladung ohne externe Quelle erzeugt werden. Im Weiteren wird nur der Fall der Gasentladung betrachtet.

Um die Entladung zu zünden, kann in vielen Fällen auf Ladungsträger zurückgegriffen werden, die durch natürliche Radioaktivität oder kosmische Schauer erzeugt werden. In anderen Fällen muss ein künstlicher Funke für die Ladungsträger sorgen.<sup>2</sup> In allen Fällen werden die vorhandenen freien Elektronen durch ein elektromagnetisches Feld beschleunigt, das von außen an das Entladungsvolumen angelegt wird. Dadurch werden bei Stößen mit Molekülen im Entladungsgefäß weitere Elektronen ausgelöst, die Entladung brennt dann ohne externe Elektronenerzeugung weiter. Die dafür notwendige Energie wird dem elektromagnetischen Feld entnommen, weshalb dieses eine ausreichende Leistung in das Entladungsvolumen ein koppeln muss. Die in diesem Kapitel beschriebene Quelle soll sich des Konzepts eines elektrischen Gleichfelds bedienen, wie es beispielsweise schon in der Wood-Röhre benutzt wird [39].

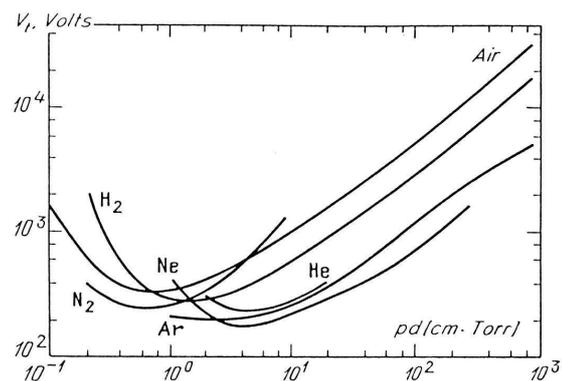


Abbildung 6.1: Zündspannung für verschiedene Gase als Funktion von Druck und Elektrodenabstand. Aus [38].

<sup>2</sup>Bei dem in Abschnitt 3.2.1 beschriebenen Dissoziator ist Letzteres der Fall.

### 6.1.1 Zündspannung

Bei welcher Feldstärke bzw. Spannung die Energie der freien Elektronen ausreicht, bei Stößen mit Molekülen im Entladungsgefäß weitere Elektronen auszulösen, hängt neben der Gasart auch vom Elektrodenabstand und vom Druck im Entladungsgefäß ab. Ist die Spannung hoch genug, so findet schließlich der Übergang von einer unselbstständigen Entladung zu einer selbstständigen statt. Der Übergang ist dadurch gekennzeichnet, dass aufgrund der zusätzlich erzeugten freien Ladungsträger die Leitfähigkeit des Gases sprunghaft ansteigt und der Plasmastrom zunimmt. Mit anderen Worten: Bei der Zündspannung bricht der Widerstand des Gases zusammen, die selbstständige Entladung zündet. Aus diesem Grund wird die Zündspannung auch als „breakdown voltage“ bezeichnet.

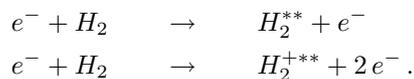
In Abb. 6.1 ist die Abhängigkeit der Zündspannung vom Produkt aus Druck und Elektrodenabstand in Form der sogenannten „Paschenkurven“ für einige Gase gezeigt. Zu beachten ist, dass  $d$  nicht wie in Abschnitt 5.3.1.3 den Düsendurchmesser, sondern hier den Elektrodenabstand bezeichnet. Die Form der „Paschenkurven“ lässt sich wie folgt verstehen:

- Bei niedrigem  $p \cdot d$  (geringer Druck bzw. kleine Elektrodenabstände) ist die freie Weglänge der Elektronen im Gas von der Größenordnung des Elektrodenabstands. Mit weiter abnehmendem Druck oder geringer werdendem Elektrodenabstand wird Stoßionisation im Raum zwischen Kathode und Anode immer unwahrscheinlicher. Nur durch ein hohes Feld kann die zum Betrieb der Entladung notwendige Verstärkung noch erreicht werden.
- Bei hohem  $p \cdot d$  (hoher Druck respektive große Elektrodenabstände) wird die freie Weglänge der Elektronen schließlich so kurz, dass sie zwischen zwei Stößen nicht genügend Energie aufnehmen können, um weitere Elektronen auszulösen. Um hier die notwendige Verstärkung zu erreichen, muss den Elektronen also auf kürzerer Strecke mehr Energie zugeführt werden, was in einer erhöhten Zündspannung resultiert.

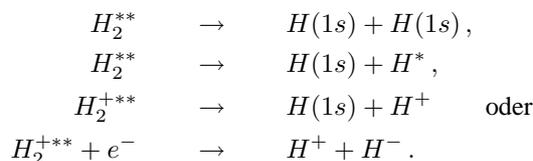
Abhängig von der Gassorte gibt es also im Bereich dazwischen ein Minimum, an dem die Elektronen mit hoher Effizienz ionisieren können.

### 6.1.2 Erzeugung von <sup>1</sup>H

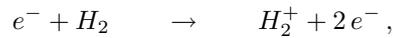
Bei der Erzeugung von atomarem Wasserstoff durch Elektronenstöße in einer Gasentladung gibt es mehrere Möglichkeiten, die alle zum gesamten Wirkungsquerschnitt beitragen und im Wesentlichen zu zwei Gruppen gehören. Die erste Gruppe fasst Prozesse zusammen, bei denen das H<sub>2</sub>-Molekül zunächst aus dem Grundzustand H<sub>2</sub>(X<sup>1</sup>Σ<sub>g</sub><sup>+</sup>) in den repulsiven Triplettzustand H<sub>2</sub><sup>\*\*</sup>(b<sup>3</sup>Σ<sub>u</sub><sup>+</sup>) oder in den repulsiven ionisierten Zustand H<sub>2</sub><sup>+\*\*</sup>(X<sup>2</sup>Σ<sub>u</sub><sup>+</sup>) überführt wird [40, 41, 42]:



Beim Zerfall dieser repulsiven Zustände entsteht dann der atomare Wasserstoff. Bei den effektivsten Prozessen liegt er im Grundzustand H(1s) vor, die Erzeugung von angeregten Zuständen H\* oder Ionen H<sup>+</sup> ist aber ebenfalls möglich:



Die zweite Gruppe bilden Prozesse, bei denen ionisierte Moleküle  $\text{H}_2^+(X^2\Sigma_g^+)$  eine Rolle spielen [41, 43]:



diese ionisierten Moleküle zerfallen nach einem weiteren Elektronenstoß:

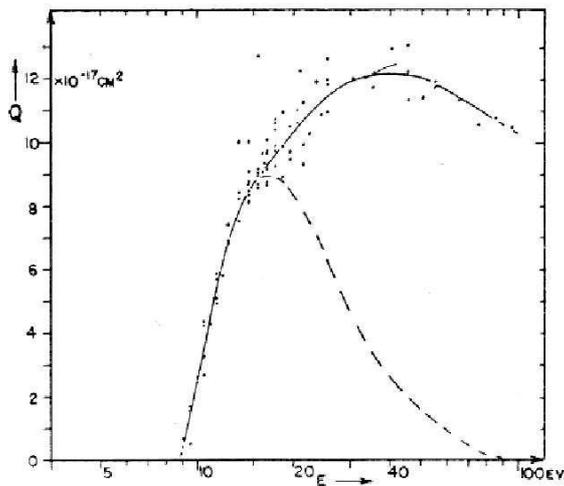
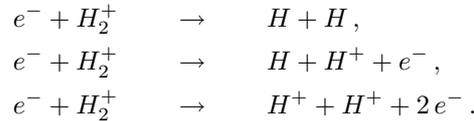


Abbildung 6.2: Gesamter Wirkungsquerschnitt  $Q$  für die Dissoziation von molekularem Wasserstoff, aufgetragen über der Elektronenenergie  $E$ . Die gestrichelte Linie ergibt sich, wenn molekulare Ionisationsprozesse nicht berücksichtigt werden. Messwerte sind als Punkte dargestellt. Aus [40].

Die Schwellenenergien liegen bei 8.8 eV für Fragmentation über den repulsiven Zustand, bei 15.4 eV für Ionisationsprozesse und bei 25 eV bei Anregung des repulsiven ionischen Zustands [44]. Die maximalen Wirkungsquerschnitte sind aber bei deutlich höheren Energien zu finden, nämlich bei 16.5 eV, 80 eV und 100 eV [42, 41, 44]. Das Maximum des Gesamtwirkungsquerschnitts für die Produktion von atomarem Wasserstoff liegt bei Elektronenenergien von 40 – 60 eV, wie Abb. 6.2 entnommen werden kann. Der Grund dafür ist in der Dominanz der Ionisationsquerschnitte zu suchen.

Energetisch gesehen kann ein Elektron mehrere Dissoziationsprozesse auf seinem Weg durch einen Elektrodenkanal auslösen, wenn an ein Mikroelektrodensystem eine Spannung von mehreren hundert Volt angelegt wird. Dabei ist es wünschenswert, dass die Stöße in der Nähe des maximalen Dissoziationsquerschnitts stattfinden, also bei Energien von 20 bis 100 V. Am unteren Ende des genannten Bereichs sind die Prozesse, die atomaren Wasserstoff im Grundzustand erzeugen, besonders effektiv. Zusammenfassend ergibt sich folgendes Bild: Die freie Weglänge der Elek-

tronen sollte bei einigen Zehnteln der Dicke der Elektrodenanordnung liegen, der Gasfluss durch die Düse bzw. der Druck im Düsenbereich sollte nicht zu niedrig gewählt werden.

Der Grad der Dissoziation, der Auskunft gibt über die Effektivität des Dissoziationsprozesses, ist definiert durch

$$\alpha := \frac{n(\text{H})}{n(\text{H}) + 2n(\text{H}_2)}, \quad (6.1)$$

also das Verhältnis der Anzahl an atomarem Wasserstoff zur Gesamtzahl des atomar oder molekular vorhandenen Wasserstoffs. Aus naheliegenden Gründen wird die Zahl der Wasserstoffmoleküle doppelt gewichtet.

## 6.2 Metastabiles Helium in einem Plasma

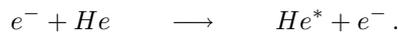
Um den apparativen Aufwand zum Nachweis von atomarem Wasserstoff möglichst gering zu halten,<sup>3</sup> bietet es sich an, am Quellen-Teststand ein Massenspektrometer einzusetzen, wie es schon in Abschnitt 3.6

<sup>3</sup>Zum Nachweis von Alkalimetallen kann man sich eines Langmuir-Taylor-Detektors [45] bedienen. Bei diesem einfach gebauten Detektor werden die Atome durch ein heißes Filament, meist aus Wolfram, ionisiert, anschließend durch ein Gitter gesammelt und

beschrieben wurde. Da ein solches nur zeitweise zur Verfügung stand, wurden viele Experimente zur DC-gespeisten Quelle mit Helium durchgeführt. Dieser Abschnitt widmet sich deshalb der Erzeugung und dem Nachweis von metastabilem Helium. Dieses hat den Vorteil, dass mit ihm untergrundfreie Messungen durchgeführt werden können: In der Gasentladung sollte bei Verwendung von Helium als Strahlgas auch metastabiles  $\text{He}^*$  erzeugt werden. Diese metastabilen Atome können durch Oberflächen-Penning-Ionisation ein Elektron abgeben. Findet der Stoß mit der Oberfläche eines Elektronenmultipliers statt, können die entstehenden Ladungsträger durch Anlegen von Hochspannung beschleunigt und vervielfacht werden.

### 6.2.1 Erzeugung in einer Gasentladung

Zur Erzeugung von metastabilem Helium kommen zwei Prozesse in Frage, bei beiden spielt die Wechselwirkung mit Elektronen eine Rolle. Die erste Möglichkeit, ein Heliumatom in den metastabilen Tripletzustand zu bringen, ist die Anregung durch Elektronenstoß. Die beteiligten Elektronen sammeln im elektrischen Feld, das an den Elektroden des Entladungsvolumens angelegt wird, genügend kinetische Energie, um bei einem Stoß mit Helium dieses aus dem Grundzustand heraus anzuregen:



In Abb. 6.3 ist der Wirkungsquerschnitt für diesen Prozess in Abhängigkeit von der Elektronenenergie gezeigt. Um Helium aus dem  $1^1\text{S}_0(1s^2)$  Grundzustand in den metastabilen  $2^3\text{S}_1(1s2s)$  Zustand anzuregen, muss die Energie von 19.82 eV aufgebracht werden. Die Ionisierungsenergie des metastabilen Zustands beträgt 4.77 eV [48]. Der zweite Prozess, der Heliumatome im Tripletzustand erzeugt, ist der Einfang eines langsamen, freien Elektrons durch ein einfach geladenes Heliumion



allerdings ist der Wirkungsquerschnitt bei Elektroneneinfang um etwa 3 Größenordnungen niedriger als bei Elektronenstoß [49].

Die Anregung von Helium im Grundzustand (einem Singulettzustand) in einen Tripletzustand durch Photonen ist nicht möglich, da der entsprechende Übergang durch Auswahlregeln verboten ist. Darin ist auch die Ursache für die vergleichsweise lange Lebensdauer des metastabilen Zustands von etwa 7900 s begründet.

### 6.2.2 Untergrundfreier Nachweis

Der untergrundfreie Nachweis dieses Zustands von He macht sich die Tatsache zunutze, dass bei der Kollision von metastabilem Helium mit einer Oberfläche die Atome durch Oberflächen-Penning-Ionisation abgeregt werden und in den Grundzustand übergehen. Dies geschieht mit einer Wahrscheinlichkeit von nahezu 100% [50]. Im Folgenden wird beschrieben, wie dadurch metastabiles Helium nachgewiesen werden kann.

Nach Tabelle 5.1 und Gl. (5.26) beträgt die Strömungsgeschwindigkeit eines Strahls aus Heliumatomen, der aus einer Düse bei Zimmertemperatur expandiert, 1759 m/s. Dies entspricht einer kinetischen Energie von etwa 65 meV. Diese Energie reicht sicherlich nicht aus, um Elektronen aus der Oberfläche auszulösen, auf die der Heliumstrahl trifft.

als makroskopischer Strom registriert [46]. Versuche, das Prinzip auch auf atomaren Wasserstoff zu übertragen, führten leider nicht zum Erfolg. Grund dafür könnte die mehr als doppelt so große Ionisationsenergie des Wasserstoffs sein.

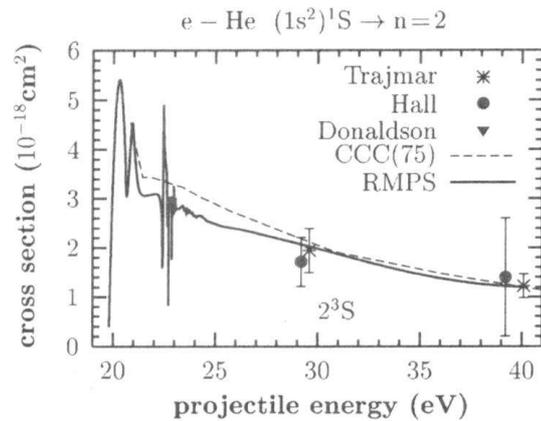


Abbildung 6.3: Wirkungsquerschnitt für Elektronenstoßanregung von Helium in den Zustand  $2^3\text{S}$ . Aus [47].

Kommt dagegen ein Heliumatom im metastabilen Zustand  $2^3\text{S}_1(1s2s)$  in die Nähe einer Metalloberfläche, so können verschiedene Prozesse stattfinden, die in der Emission von Elektronen resultieren. Die Wechselwirkung findet dabei zwischen dem metastabilen  $\text{He}^*$  und der äußersten Oberflächenschicht statt. In Abb. 6.4 sind exemplarisch zwei solche Abregungsmechanismen dargestellt. Der erste ist links gezeigt (a) und besteht eigentlich aus zwei hintereinander folgenden Prozessen: aus Resonanzionisation (RI) und anschließender Augerneutralisation (AN). Der zweite (b) besteht nur aus einem Prozess: der Augerabregung (AD).

Bei Annäherung von metastabilem Helium an die Oberfläche besteht die Möglichkeit, dass das 2s-Elektron in einen unbesetzten Zustand der Metalloberfläche tunnelt. Dieser Vorgang nennt sich Resonanzionisation, in Abb. 6.4 (a) ist der Prozess mit I markiert.

Das durch die Resonanzionisation entstandene Ion wird anschließend durch ein Festkörperelektron neutralisiert. Die Übergangsenergie wird dabei an ein weiteres Festkörperelektron übertragen, das daraufhin emittiert wird. Dieser Prozess wird als Augerneutralisation bezeichnet. Um den Abregungsmechanismus über Resonanzionisation und Augerneutralisation zu ermöglichen, muss die Ionisationsenergie des 2s-Elektrons kleiner sein, als die Austrittsarbeit  $\phi$  von Elektronen aus dem Festkörper. Nur dann kann das 2s-Elektron in einen unbesetzten Zustand im Festkörper tunneln. Die Austrittsarbeit  $\phi$  von Übergangs- und Edelmetallen liegt im Bereich von 4–6 eV, die Ionisationsenergie von metastabilem  $\text{He}^*$  befindet sich mit 4.77 eV auch in diesem Bereich. Da die gerade genannte Bedingung in diesem Fall fast ohne Einschränkung erfüllt ist, existiert eine hohe Wahrscheinlichkeit dafür, dass Resonanzionisation eintritt, wenn sich  $\text{He}^*$  einer Metalloberfläche nähert.

Beim zweiten Abregungsmechanismus, der Augerabregung, tunnelt ein Oberflächenelektron bei Annäherung des  $\text{He}^*$ -Atoms in das unbesetzte 1s-Niveau, worauf durch einen interatomaren Prozess die Energie  $E_B - E_{1s}$  auf das 2s-Elektron übertragen wird. Dieser Energieübertrag führt schließlich zur Emission des 2s-Elektrons.

Bei beiden beschriebenen Abregungsmechanismen entstehen somit freie Elektronen. Bei der Augerabregung, die auch Oberflächen-Penning-Ionisation genannt wird, handelt es sich um ein Elektron des metastabilen Heliums, beim zweistufigen Prozess der Resonanzionisation mit anschließender Augerneutralisation stammt das freie Elektron aus dem Festkörper.

Lässt man die metastabilen Heliumatome beispielsweise auf den Faraday-Cup eines Channeltrons<sup>4</sup> prallen, so können die beim Abregungsprozess emittierten Elektronen vervielfacht und als Strompuls nachgewiesen werden.

Da auf Ionisation durch Elektronenstoß bei der Detektion verzichtet wird, und die in der Detektorkammer vorhandenen Strahl- und Restgasteilchen sämtlich thermische kinetische Energien besitzen, die nicht ausreichen, freie Elektronen zu erzeugen (siehe oben), ist der Nachweis metastabiler Heliumatome quasi untergrundfrei. Ein Prozess, der noch zum Untergrund beitragen kann, ist die Auslösung von Elektronen durch Photoeffekt, ausgelöst durch UV-Photonen, die aus dem Plasma stammen und mit dem Strahl in den Detektor gelangen. Bei den Flugzeitmessungen zum Nachweis von strahlkorrelierten Signalen lässt sich dieser Untergrund jedoch gut vom eigentlich interessierenden Signal trennen.

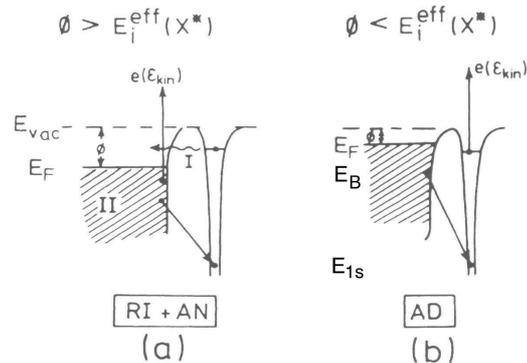


Abbildung 6.4: Abregungsmechanismen metastabiler Edelgasatome  $X^*$  an einer Metalloberfläche.  $\phi$  bezeichnet die Austrittsarbeit,  $E_i^{eff}$  steht für die effektive Ionisationsenergie.

(a) I. Resonanzionisation (RI) und II. Augerneutralisation (AN),

(b) Augerabregung (AD). Nach [48].

<sup>4</sup>Ein Channeltron ist ein Elektronenvervielfacher, bei dem die einzelnen Dynoden durch eine kontinuierliche hochohmige Schicht ersetzt sind.

### 6.3 Gasentladungen an GEM-Folien

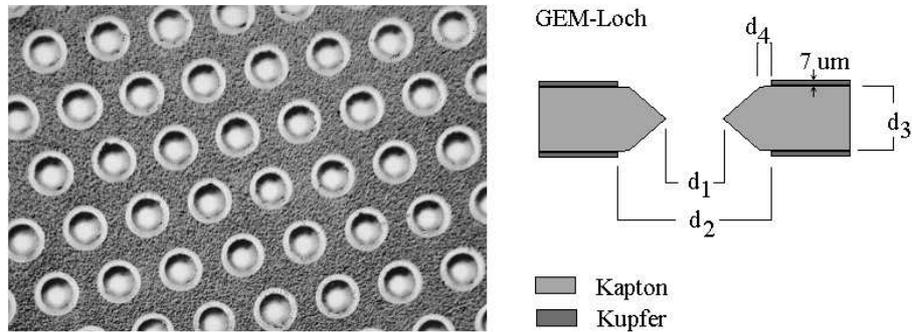


Abbildung 6.5: Mikroskopische Aufsicht auf eine GEM mit  $d_1 = 55 \mu\text{m}$ ,  $d_2 = 95 \mu\text{m}$ ,  $d_3 = 50 \mu\text{m}$  und  $d_4 = 20 \mu\text{m}$  bei einem Lochabstand von  $140 \mu\text{m}$ . Bei den hellen Ringen um die Löcher handelt es sich um konisch vorstehende Ränder der Kaptonfolie, wie auch rechts im Querschnitt zusammen mit der Definition der Maße angedeutet.

Das Konzept der Gas-Elektronen-Verstärker (GEM-Folien) wurde 1997 von F. Sauli am CERN entwickelt [51] und erfuhr binnen kürzester Zeit vor allem in der Hochenergiephysik eine weite Verbreitung. So nutzen beispielsweise der Inner Tracker von HERA-B oder Detektoren für das LHC-B-Experiment GEM-Folien zur Elektronenverstärkung. Mittlerweile existieren auch Neutronendetektoren zum orts aufgelösten Nachweis thermischer Neutronen, die sich das Konzept der GEMs zunutze machen [52]. Die Folien fungieren dabei als ladungstransparente Träger einer festen  $^{10}\text{B}$ -Konverterschicht, in der geladene Teilchen aufgrund von Kernreaktionen der Neutronen mit  $^{10}\text{B}$  entstehen.

GEM-Folien bestehen aus einer beidseitig mit Kupfer beschichteten Polyimidfolie<sup>5</sup>, die mittels eines photolithographischen Nassätzverfahrens mit einer regelmäßigen Lochstruktur versehen ist. Abb. 6.5 zeigt eine mikroskopische Aufnahme einer solchen GEM sowie einen Schnitt durch die Kupfer-Kapton-Kupfer-Sandwichanordnung. Aufgrund des geringen Abstands von beispielsweise  $25 \mu\text{m}$  der beiden Kupferschichten zueinander lassen sich im Bereich der Löcher Feldstärken von über  $4000 \text{ kV/m}$  erzeugen, dazu sind Spannungen von lediglich  $200 \text{ V}$  notwendig [51].

Diese hohen Feldstärken können dazu genutzt werden, um im Bereich der Löcher sogar bei Atmosphärendruck eine Gasentladung brennen zu lassen. Dazu muss an die Kupferschichten lediglich eine Spannung von  $200$  bis  $500 \text{ V}$  angelegt werden. In Abb. 6.6 ist eine Gasentladung an einer solchen GEM gezeigt, die sich in einer Stickstoff-Atmosphäre von  $40 \text{ mbar}$  befindet. Ein in Reihe geschalteter Shuntwiderstand begrenzt den Stromfluss bei gelegentlich auftretender Funkenbildung und verhindert so die vorzeitige Entstehung von Kurzschlüssen zwischen den Elektroden aufgrund von Hitzeeinwirkung. Während des Brennbetriebs einer Gasentladung fließt an einem einzelnen Loch der GEM typischerweise ein Strom im Bereich von  $100 \mu\text{A}$ , das Plasma brennt also selbstständig. Durch den gerade genannten Strom kommt es zu entsprechender Wärmeentwicklung, schon nach wenigen Stunden Betriebsdauer machen sich Effekte eines Alterungsprozesses bemerkbar. Diese Alterung wird jedoch nicht allein durch die Hitzeeinwirkung an den Löchern verursacht, vielmehr tragen auch die UV-Photonen aus der Entladung und die entstehenden Ionen mit dazu bei. Dass vor allem die Ionen deutlich zur Alterung beitragen, lässt sich daraus schließen, dass

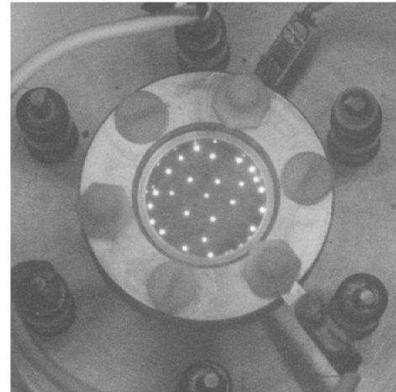


Abbildung 6.6: Brennende  $\text{N}_2$ -Gasentladung an einer GEM, experimentelle Parameter: Shuntwiderstand  $100 \text{ k}\Omega$ ,  $40 \text{ mbar}$   $\text{N}_2$ -Partialdruck, Elektrodenspannung  $280 \text{ V}$ .

<sup>5</sup>Polyimid ist auch als Kapton bekannt, dem Handelsnamen von DuPont.

vor allem die Kathodenschicht einer starken Abnutzung unterworfen ist. Diese Abnutzung lässt sich so verstehen, dass die positiv geladenen Ionen auf die Kathode beschleunigt werden und gerade dort einen erosiven Sputterprozess verursachen, bei dem Kupferatome aus der Schicht herausgeschlagen werden.

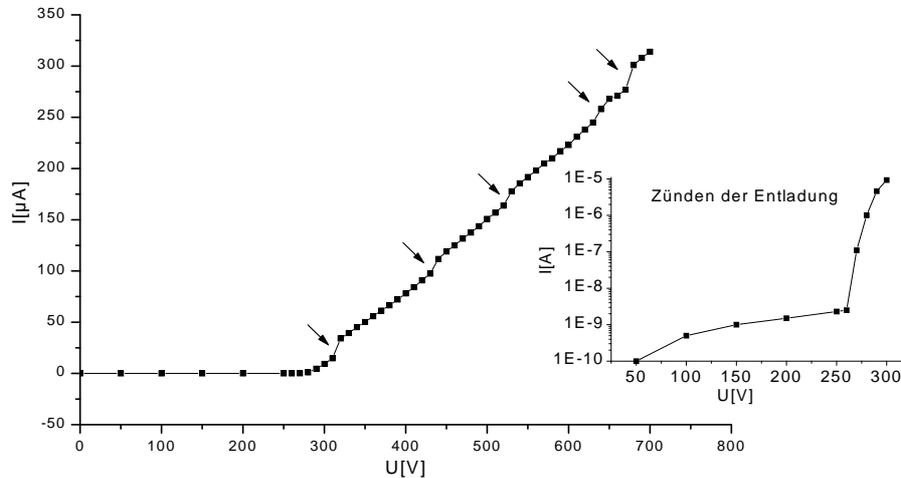


Abbildung 6.7:  $I(U)$ -Kennlinie einer  $\text{N}_2$ -Gasentladung an einer GEM bei einem Stickstoff-Partialdruck von 100 mbar. Pfeile kennzeichnen Stellen, an denen sich die Gasentladung auf weitere GEM-Poren ausdehnt. Rechts ist der Bereich der Zündung logarithmisch aufgetragen.

Die Strom-Spannungskennlinie einer Gasentladung an einer GEM-Folie weist charakteristische Strukturen auf, die in Abb. 6.7 zu sehen sind. Bei einer Zündspannung von etwa 260 V setzt ein Anstieg des Stroms um knapp vier Größenordnungen ein, der das Zünden der Entladung charakterisiert. Mit weiter zunehmender Spannung nimmt der Strom linear zu, unterbrochen von Stellen, an denen die Zahl der Poren, die an der Entladung beteiligt sind, zunimmt. Diese Stellen sind in Abb. 6.7 durch Pfeile markiert. Das Fehlen von Plateaus scheint darauf hinzudeuten, dass sich keine Raumladungen im Bereich der Löcher aufbauen, die das Feld der GEM abschirmen und so die Entladungseffektivität beeinflussen könnten.

Nachdem die Reproduzierbarkeit und Stabilität der Gasentladungen unter Stickstoff-Atmosphären von mehreren 100 mbar überprüft wurden, sollte die Tauglichkeit der GEMs untersucht werden, auch in einem durch die Poren strömendem Gas zuverlässig Entladungen zu zünden. Dazu wurden die Folien wie in Abb. 6.8 gezeigt in einen CF40-Flansch montiert. Durch den Kupferkolben auf der Flanschrückseite wird die GEM-Folie gegen die Düsenöffnung gepresst. Das Anlegen der Spannung geschieht über den Flansch einerseits und den Kupferkolben andererseits. Der Kupferkolben dient außerdem noch als Gaszufuhr. Im gezeigten Aufbau kann also Gas durch die Poren der GEM strömen. Als problematisch erwies sich dabei allerdings, dass die GEM der mechanischen Belastung, die durch die notwendige Druckdifferenz zwischen Zuleitung und Quellkammer verursacht wird, nur teilweise gewachsen war. Es kam zu Deformationen der Folie, die letztlich zu Kurzschlüssen der beiden Kupferelektroden führten.

Bei Versuchen mit den GEM-Düsen im Quellen-Teststand mit Stickstoff als Strahlgas konnte keine Dissoziation von  $\text{N}_2$  nachgewiesen werden, obwohl die Strom-Spannungskennlinien die gleichen Charakteristika zeigen wie in Abb. 6.7 und damit auf die Existenz einer Entladung hinweisen.<sup>6</sup> Das Fehlen von atomarem Stickstoff bei brennender Entladung lässt sich dadurch erklären, dass die Entladung nicht in den offenen Poren brannte, sondern in Poren am Rand, die durch die Auflagefläche des Düsenflansches einseitig verschlossen sind und in denen sich das Gas staut. An diesen Positionen ist eine Entladung im Strahl nicht nachweisbar, da die erzeugten Stickstoffatome nur durch Stöße mit anderen Atomen, Molekülen oder an der Düsenwand in den Strahl gelangen können und so die Rekombinationswahrscheinlichkeit sehr hoch ist. Die Versuche mit GEMs zur Dissoziation von Stickstoff sind in [53] ausführlich beschrieben.

<sup>6</sup>Eine optische Kontrolle der Entladung zum Zeitpunkt der Tests mit den GEMs am Quellen-Teststand war nicht möglich, daher wurden die  $I(U)$ -Kennlinien als Nachweis für die Existenz einer Entladung herangezogen.

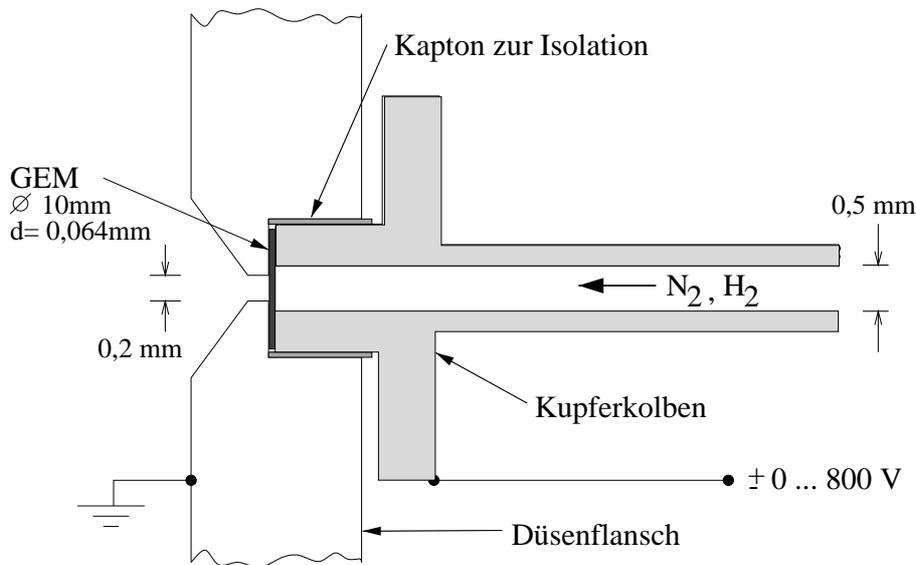


Abbildung 6.8: Schematische Darstellung des Düsenflansches, nicht maßstäblich. Zwischen Düsenflansch und Kupferkolben ist die GEM eingespannt. Der gleiche Flansch wurde in modifizierter Form auch für die Experimente mit selbst gefertigten Mikroelektrodenstrukturen benutzt. Näheres dazu in den Abschnitten 6.4 und 6.5.1.

## 6.4 Speziell angefertigte Mikroelektrodenstrukturen

Als wesentlicher Nachteil bei Verwendung von GEMs als Elektrodenstruktur erwies sich die Unsicherheit, an welchen Löchern die Entladung tatsächlich stattfindet. Ein weiteres Manko stellt der hohe Materialverschleiß dar. Außerdem eignen sich GEMs aufgrund ihrer Struktur nur bedingt für große Druckdifferenzen zwischen beiden Seiten der Struktur, wie sie beispielsweise gerade an Düsenöffnungen zu finden sind. Eine GEM-Folie stellt sicherlich keine optimale Düsenstruktur für die gesuchte Wasserstoffquelle dar. Dies zeigten auch die Deformationen der in der Testquelle eingesetzten GEMs.

Aus diesem Grund empfiehlt es sich, nach Materialien zu suchen, die eine entsprechende Formstabilität und Lebensdauer aufweisen. Des Weiteren ist eine zuverlässige Lokalisierung der Entladung und damit der Wasserstoffdissoziation wünschenswert. Der Einsatz spezieller Mikroelektrodenstrukturen, die als tragendes Element nicht eine dünne Isolatorschicht, sondern ein stabiles metallisches Material verwenden, das gleichzeitig als Elektrode dienen kann, verspricht die Lösung gleich mehrerer Probleme, die durch die genannten Nachteile einer GEM verursacht werden. Auf die stabile Elektrode kann eine wesentlich dünnere Isolatorschicht aufgebracht werden, wodurch niedrigere Spannungen bei gleichbleibender Stärke des elektrischen Feldes möglich werden. Durch die Existenz nur eines einzigen Entladungskanals mit einem Durchmesser von etwa 100 bis 200  $\mu\text{m}$  wird sichergestellt, dass Probleme durch das Umherwandern der Entladung – wie bei den GEMs beobachtet – nicht auftreten können.

Aufgrund der Erfahrungen mit der schnellen Erosion der Kathode bei den Versuchen mit GEM-Folien bietet es sich an, die massive Trägerschicht als Kathode einzusetzen, wodurch sich deren Lebensdauer steigern lässt. Da die Materialkombination Kupfer und Kapton im Falle der GEMs schon erfolgreich eingesetzt wurde, um Gasentladungen zu erzeugen, fiel auch bei den Mikrostrukturen mit nur einem einzigen Entladungskanal die Wahl zunächst auf dieselben Materialien.

Die in dieser Arbeit verwendeten Mikrostrukturen bestehen aus Kupfer-Kapton-Kupfer-Sandwiches mit jeweils 150  $\mu\text{m}$  dicken Kupferschichten als Elektroden und einer 50  $\mu\text{m}$  dicken Kaptonfolie zur Isolation dazwischen. Die Sandwiches erhalten nach dem Verkleben eine zentrierte Bohrung mit 200  $\mu\text{m}$  Durchmesser. Unebenheiten an den Rändern wie beispielsweise die an der Bohrung entstandenen Grate wurden durch Ätzen mit Salpetersäure beseitigt. In Abb. 6.9 ist der schematische Aufbau einer solchen Mikrostruktur dargestellt. Das rechte Foto zeigt den Blick auf die 200  $\mu\text{m}$ -Bohrung der Anordnung.

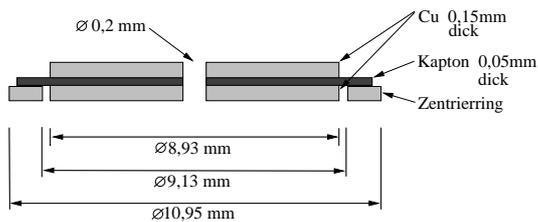
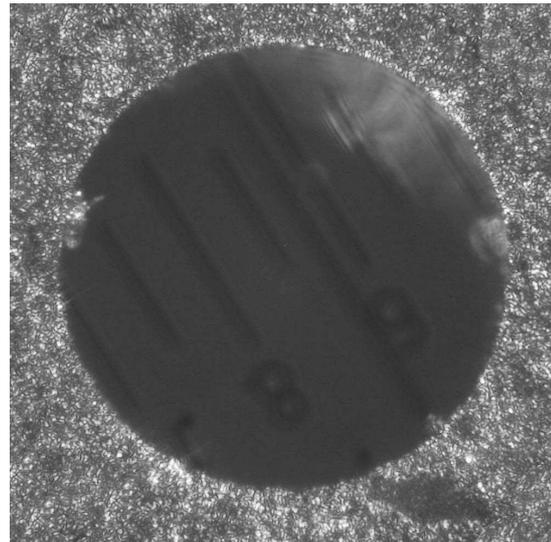


Abbildung 6.9: Schematischer Aufbau einer Mikroelektrodenstruktur aus Kupfer und Kapton (oben). Rechts ist eine Mikroskop-Aufnahme zu sehen, die einen Blick auf den Entladungskanal zeigt. Der Durchmesser des Loches beträgt  $200\ \mu\text{m}$ . Die unscharfe Skala im Bereich des Kanals stammt vom Okular des Mikroskops. Im Gegensatz zu den trichterförmigen Entladungskanälen einer GEM liegt bei der hier gezeigten Struktur ein zylinderförmiger Entladungskanal vor.



Gemeinsam mit dem in Abb. 6.9 auch gezeigten Zentrierring kann die gesamte Anordnung in einen Düsenflansch eingesetzt werden. Gegenüber dem in Abb. 6.8 gezeigten Düsenflansch besitzt der nun verwendete eine Öffnung von  $0.5\ \text{mm}$ . Die eigentliche Düsenöffnung wird nicht mehr vom Flansch selbst gebildet, sondern von der Bohrung in der Cu-Kapton-Cu-Scheibe. Der Zentrierring ermöglicht die Positionierung in der Mitte der Flanschöffnung bis auf  $150\ \mu\text{m}$  genau.

Gleichzeitig mit dem Einsatz der eben beschriebenen Sandwiches wurde versucht, neue Materialkonfigurationen zu testen. Dazu wurden unter anderem Blenden zur Elektronenmikroskopie als Trägerkathode mit unterschiedlichen, isolierenden Beschichtungen versehen, auf die dann eine dünne Anode aus Titan gesputtert wurde [53]. Die Messungen zur Dissoziation von  $\text{H}_2$  und zur Erzeugung von metastabilem  $\text{He}^*$  erfolgten aber alle mit den Cu-Kapton-Cu-Scheiben.

## 6.5 Versuche mit speziellen Mikroelektrodenstrukturen

In diesem Abschnitt werden die Versuche beschrieben, die unternommen wurden, um die Mikroelektrodenstrukturen aus Kupfer-Kapton-Kupfer-Sandwiches auf ihre Eignung zur Erzeugung von Gasentladungen zu testen.

### 6.5.1 Tests der neuen Elektrodenstrukturen

Zunächst wurden die gefertigten Mikrostrukturen in eine kleine Vakuumkammer eingebaut und vor der ersten Benutzung wie die GEM-Folien konditioniert. Die maximale Spannung wurde auf  $250\ \text{V}$  begrenzt, da die selbst gefertigten Strukturen aufgrund des geringeren Abstands der Elektroden empfindlicher sein sollten als die GEMs. Das Anlegen der Spannung erfolgte immer über Schutzwiderstände von  $1$  bis  $10\ \text{M}\Omega$ , die in Reihe mit den Elektroden geschaltet wurden.

Wie sich herausstellte, konnten bei  $\text{N}_2$ -Partialdrücken von  $100\ \text{mbar}$  reproduzierbar Stickstoff-Gasentladungen gezündet werden. Eine solche Entladung ist in Abb. 6.10 zu sehen. Die Entladung brennt im Entladungskanal in der Mitte der links zu sehenden Mikroelektrodenstruktur. Die Zündspannungen lagen bei allen Tests mit  $300$  bis  $400\ \text{V}$  leicht höher als die entsprechenden Spannungen bei den zuvor untersuchten GEMs. Dies ist möglicherweise darauf zurückzuführen, dass der Elektrodenabstand trotz Verwendung einer Kaptonfolie gleicher Dicke größer ist als bei den GEM-Folien, bedingt durch die Verklebung der einzelnen Elemente.

Nach erfolgreichem Test bei 100 mbar  $N_2$ -Partialdruck wurde die selbstgefertigte Mikroelektrodenstruktur so in den modifizierten Düsenflansch eingebracht, mit dem Zentrierring justiert und mit einem Kupferstempel fixiert, wie bei den früheren Versuchen auch schon mit den GEMs verfahren wurde. Die Modifikation des Flansches bestand gegenüber der in Abb. 6.8 gezeigten Situation darin, dass die Bohrung des Flansches auf 0.5 mm aufgeweitet wurde. Dadurch sollte sichergestellt werden, dass der Entladungskanal mit  $200 \mu\text{m}$  im Durchmesser bei der Genauigkeit von  $150 \mu\text{m}$  stets so positioniert ist, dass er nicht durch Flanschteile abgedeckt wird. Bei den hier beschriebenen Versuchen mit Mikrostrukturen bildete also der Entladungskanal selbst die Düsenöffnung. Mit dieser Anordnung kann überprüft werden, ob sich die erzielten Ergebnisse auch auf ein Gas übertragen lassen, das durch eine Druckdifferenz getrieben durch den Entladungskanal strömt. Mit Hilfe eines MKS-Durchflussreglers konnte das Gas mit einem definierten Fluss an die Düse gebracht werden, um durch diese ins Vakuum zu expandieren.

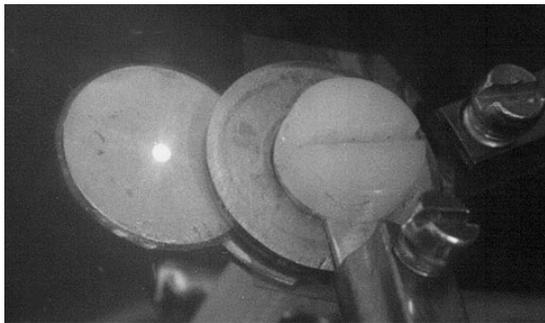


Abbildung 6.10:  $N_2$ -Gasentladung im Entladungskanal (heller Punkt links im Bild) einer Mikroelektrodenstruktur aus Kupfer und Kapton. Experimentelle Parameter:  $p = 100 \text{ mbar}$ ,  $U = 500 \text{ V}$ .

Bei einem Basisdruck von  $3 \cdot 10^{-3} \text{ mbar}$  in der Kammer, erzeugt durch eine Drehschieberpumpe, wurde der Fluss durch die Düse in einem Bereich zwischen 0 und 20 sccm variiert. Bei einem Kammerdruck von beispielsweise  $6 \cdot 10^{-2} \text{ mbar}$ , erzeugt durch eine Drehschieberpumpe, und einem Stickstofffluss von  $q = 7 \text{ sccm}$  zündete die Entladung bei einer Spannung von 350 V, um nach Erhöhen der Spannung auf 600 V bei einem Fluss von mehr als 10 sccm  $N_2$  sehr stabil in einem Volumen vor der Düse zu brennen. Diese Situation ist in Abb. 6.11 zu sehen. Gezeigt ist der Blick entgegen der Strahlrichtung. Der Entladungsstrom von 2.5 mA lässt bei der gegebenen Spannung darauf schließen, dass eine Leistung von 1.5 W in das Entladungsvolumen eingekoppelt werden konnte. Die Größe des Volumens vor der Düse, in dem die Entladung brannte, entspricht ungefähr dem in Abb. 6.8 gezeigten, trichterförmigen Bereich

vor der Düse. Der Durchmesser des dort gezeigten Trichters beträgt an seiner weitesten Stelle 5 mm, die Trichterwände weisen einen Winkel von  $45^\circ$  auf.

### 6.5.2 Entladungen mit Helium als Strahlgas

Auch nach Einbau in die eigentliche Quellkammer des Testaufbaus für Strahlquellen ließen sich Gasentladungen zünden. Der Basisdruck dieser Kammer, an der eine Öldiffusionspumpe arbeitet, lag mit  $4 \cdot 10^{-7} \text{ mbar}$  deutlich niedriger als im Fall der in Abb. 6.11 gezeigten Entladung, die in einer kleinen, durch eine Drehschieberpumpe auf einen Basisdruck von  $8.3 \cdot 10^{-2} \text{ mbar}$  evakuierten Testkammer brannte.

In Abb. 6.13 ist ein seitlicher Schnitt durch den Quellenteststand gezeigt. Die Düse mit der brennenden Gasentladung befindet sich in der Mitte der Quellkammer, die links zu sehen ist. Nach rechts schließt sich die Flugstrecke an. Der Strahl wird durch den Skimmer gebildet, mittels eines Choppers in kleine Strahlpakete „zerhackt“ und gelangt schließlich durch eine Blende mit einem Durchmesser von 7 mm in die Detektorkammer, wo er durch den Detektor nachgewiesen wird. Für den Nachweis von metastabilem Helium besteht dieser einfach aus einem Channeltron, das mit Spannungen von etwa 2 kV betrieben wird. Zur Aufnahme der Flugzeitspektren wird ein Vielkanalzähler verwendet. Dieser erhält zum Start der Messung einen Triggerpuls von der Chopperelektronik und zählt dann für eine jeweils einstellbare Zeit (die dwell time) in einen Kanal. Nach Ablauf der dwell time wird im nächsten Kanal weitergezählt. Dies wird solange fortgesetzt, bis der letzte Kanal erreicht ist. Nach dem nächsten Triggersignal beginnt die Zählung wieder im ersten Kanal. Das Helium gelangt durch ein manuelles Regelventil über eine Gasdurchführung direkt an den in Abb. 6.8 gezeigten Kupferkolben des Düsenflansches. Über eine Hochspannungsdurchführung kann an den Kolben gegenüber dem auf Erde gelegten Flansch auf jede gewünschte Spannung gelegt werden. Über eine lineare Schiebedurchführung kann der Abstand zwischen Düse und Skimmer variiert werden.

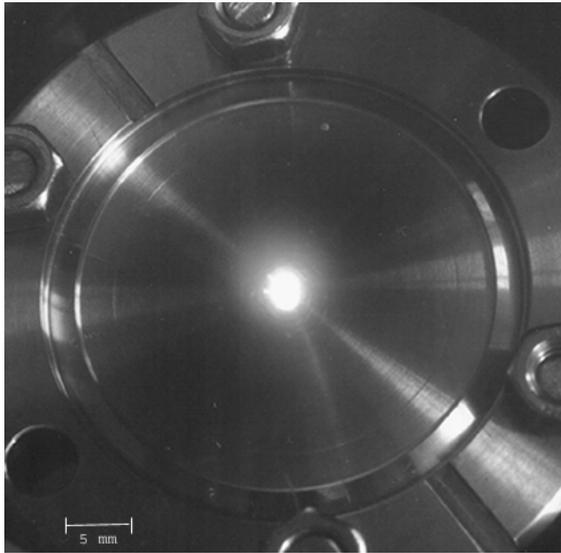


Abbildung 6.11: Blick entgegen der Strahlrichtung auf eine Gasentladung mit  $\text{N}_2$ , das den Entladungskanal durchströmt. Experimentelle Parameter:  
 $q = 10.7 \text{ sccm}$ ,  $p_0 = 8.3 \cdot 10^{-2} \text{ mbar}$ ,  
 $U = 600 \text{ V}$ ,  $I = 2.5 \text{ mA}$ .

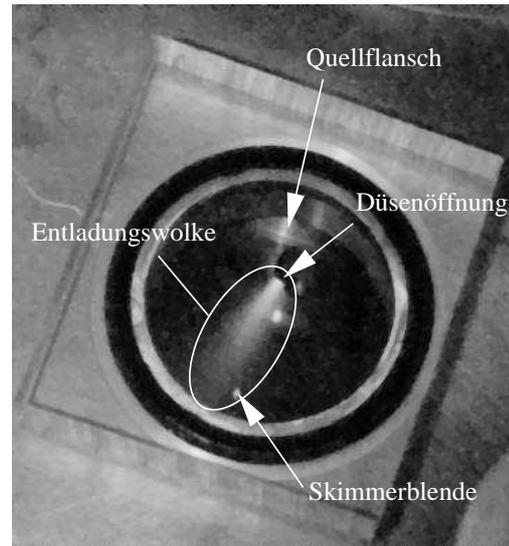


Abbildung 6.12: Blick von oben durch eine Plexiglasabdeckung auf die DC-Quelle beim Betrieb mit Helium. Die Entladungswolke des Strahls ist der Deutlichkeit halber durch die eingezeichnete Ellipse markiert. Erläuterungen im Text.

Mit dieser Konfiguration kann bei Drücken von einigen hundert mbar ein stabil brennendes Plasma in der Düsenöffnung erzeugt werden. Durch die Druckdifferenz zwischen Düsenzuleitung und Quellkammer wird das Gas durch die Düse getrieben. Im Raum vor der Düse bildet sich dann eine Entladungswolke aus. In Abb. 6.12 ist eine solche bei einer Betriebsspannung von 350 V zu sehen. Die einzelnen Bauteile sind entsprechend hervorgehoben. Der Abstand zwischen Düsenöffnung und Skimmerblende beträgt in dieser Aufnahme etwa 3 cm.

Mit Hilfe des Choppers und des Vielkanalzählers können nun Flugzeitspektren bei verschiedenen Düsenbedingungen aufgenommen werden. Dazu wurden verschiedene Messreihen aufgenommen, bei denen der Einlassdruck beziehungsweise der Abstand zwischen Düse und Skimmer verändert wurde.

Abb. 6.14 zeigt exemplarisch ein aufgenommenes Flugzeitspektrum bei 180 mbar Düsendruck. Der Druck in der Quellkammer lag bei etwa  $2.5 \cdot 10^{-5} \text{ mbar}$ . Der linke Peak stammt von Entladungsphotonen aus dem Plasma. Da die Flugstrecke vom Chopper bis zum Detektor etwa 67 cm beträgt, sollten Photonen etwa 2 ns, nachdem sie den Chopper passiert haben, am Detektor ankommen. Dass dies nicht so ist, liegt an einem Offset zwischen der Öffnung des Strahls und dem Erzeugen des Triggerpulses. Damit wird klar, dass dieser Licht-Peak zur Choppereichung verwendet werden kann. Seine Lage legt den Nullpunkt der Zeitachse fest, aus seiner Form kann die Öffnungsfunktion des Choppers bestimmt werden. Wie der Abbildung weiterhin entnommen werden kann, besteht der Untergrund tatsächlich nur aus UV-Photonen, die aus der Entladung stammen.

Nachdem die Nullpunktverschiebung der Daten auf der Zeitachse berücksichtigt wurde, ergibt sich für den Helium-Peak das in Abb. 6.15 gezeigte Bild. An diese Daten kann eine Überschall-Flugzeitverteilung der Form

$$f(t) dt \propto \left( \frac{m}{2k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{s^4}{t^5} e^{-\frac{m(s^2 + v_S^2 t^2 - v_S s t)}{2k_B T t^2}} dt \quad (6.3)$$

mit der Strahltemperatur  $T$  und der Strahlgeschwindigkeit  $v_S$  als Fitparametern angepasst werden. Dabei ist berücksichtigt, dass das Detektorsignal proportional zur Zahl der auf eine Fläche treffenden Strahl-

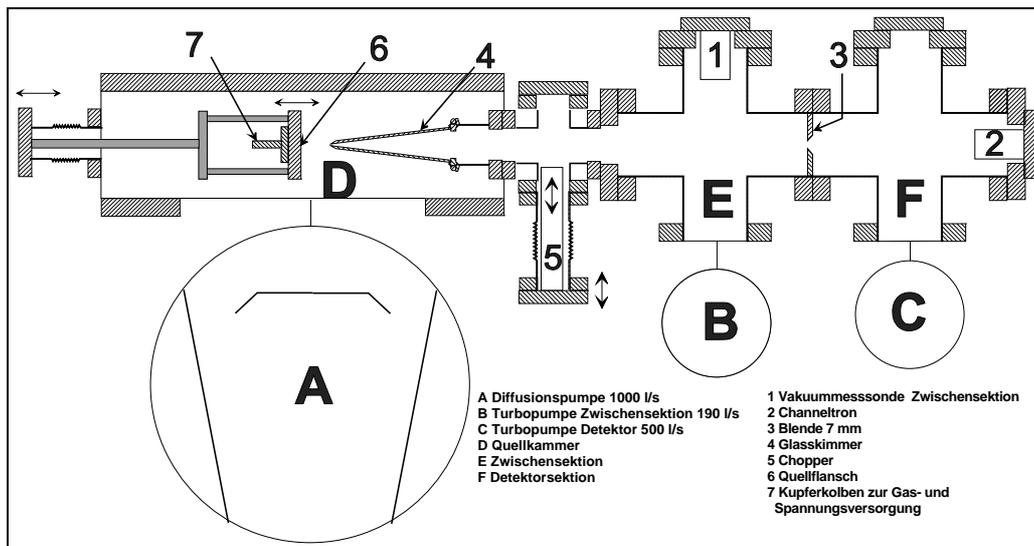


Abbildung 6.13: Seitlicher Schnitt durch den Quellenteststand bei den Messungen mit metastabilem Helium. Das Gas und die Hochspannung gelangen durch separate Vakuumdurchführungen über den mit „7“ bezeichneten Kupferkolben an die Düse. Die Düse befindet sich in der Zeichnung an Position 6, der Strahl verläuft von dort aus nach rechts. Nach dem Skimmer (Position 4) folgt der Chopper (Position 5), der mittels einer Linearverschiebung in den Strahl gefahren werden kann. Der Strahl trifft schließlich in der Detektorsektion auf das Channeltron, welches nur metastabiles Helium und UV-Photonen aus der Entladung nachweist.

teilchen ist. Das Ergebnis dieses Fits ist ebenfalls in Abb. 6.15 zu sehen. Aus dem Fit ergibt sich eine Strahltemperatur von 27.5 K bei einer Strahlgeschwindigkeit von etwa 1660 m/s.

Bei Erhöhung des Düsendrucks ergeben sich Flugzeitspektren für metastabiles Helium wie in Abb. 6.16 gezeigt. Der Vergleich der in den Abbildungen 6.15 und 6.16 gezeigten Spektren ergibt, dass die Verteilung mit steigendem Düsendruck schmaler wird. Der Strahl wird also mit zunehmendem Düsendruck immer kälter. Aus den Fits ergeben sich Strahltemperaturen von 27.5 K, 15.9 K und 12.2 K bei Düsendrücken von 180 mbar, 320 mbar und 540 mbar. Dieses Verhalten entspricht zunächst einmal genau dem erwarteten Verhalten, dass die Strahltemperatur nach (5.23) proportional zum Expansionsverhältnis  $p/p_0$  ist, bei dem  $p$  den Quellkammerdruck und  $p_0$  den Düsendruck bezeichnet. Bemerkenswert ist, dass es sich hierbei um Messungen mit metastabilem Helium handelt. Wenn sich bei einer Überschall-expansion die Strahltemperatur reduziert, so bedeutet dies, dass die Kontinuumsbedingungen, unter denen das Gas aus der Düse strömt, länger aufrecht erhalten werden. Damit ist aber gleichzeitig eine Zunahme der Stöße von Strahlteilchen miteinander unter eben diesen Kontinuumsbedingungen verknüpft. Obwohl also die Strahlteilchen viele Stöße erfahren, ist noch immer ein intensiver Strahl aus metastabilem Helium vorhanden. Dies spricht für eine sehr effiziente Erzeugung von  $\text{He}^*$ .

Bei allen drei Spektren ergibt sich eine ähnliche Strahlgeschwindigkeit, nach der die Düsentemperatur – also die Temperatur des Gases, bevor es die Düse verlässt – etwa bei Zimmertemperatur liegt. Dies lässt sich dadurch erklären, dass das Plasma auf einer vergleichsweise kurzen Strecke von wenigen Millimetern brennt und deshalb das Gas nicht nennenswert erwärmt. Erinnerung sei in diesem Zusammenhang an die Temperaturerhöhung bei der mikrowellengespeisten Entladung des bisherigen Dissoziators am Wasserstoff-Spinocho-Experiment (siehe Abschnitt 3.2.1). Im Unterschied zu den hier verwendeten Mikrostrukturen brennt dort die Entladung auf einer Strecke von mehreren Zentimetern.

Wird der Abstand zwischen Düse und Skimmer variiert, so lässt sich das Signal-Untergrund-Verhältnis in Form der Peakintensitäten von metastabilen Heliumatomen und UV-Photonen verändern. Dazu wurden Flugzeitspektren mit gleichbleibender Anzahl von Durchläufen aufgenommen und die Intensität des Peaks der UV-Photonen sowie des Heliumpeaks ermittelt. Das Ergebnis für die Heliumintensität ist in Abb. 6.17 zu sehen. Es ist ein deutliches Maximum zu erkennen. Der Abfall zu großen Abständen hin lässt sich durch

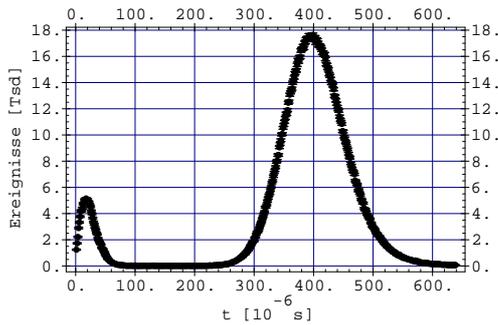


Abbildung 6.14: Rohdaten eines gemessenen Flugzeitspektrums. Beim linken Peak handelt es sich um Photonen aus dem Plasma, der rechte Peak stammt von metastabilem Helium. Zwischen den beiden Peaks tritt quasi kein Untergrund auf.

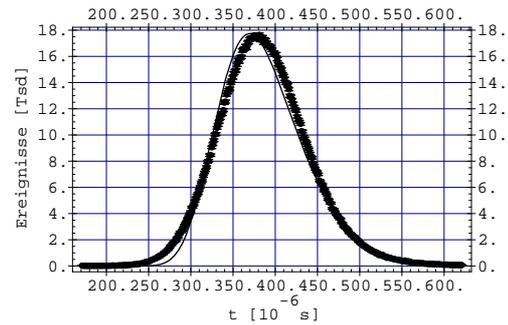


Abbildung 6.15: Korrigierte Flugzeitdaten aus Abb. 6.14. Der Plot zeigt die Daten im Bereich des Heliumpeaks zusammen mit einem Fit an die Daten. Der Düsendruck beträgt 180 mbar.

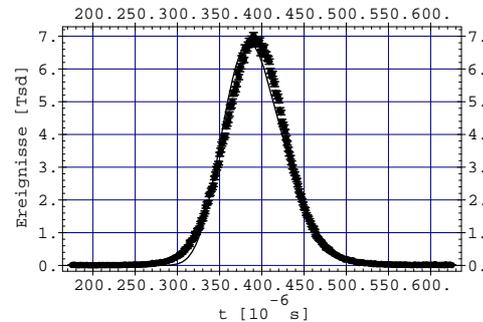
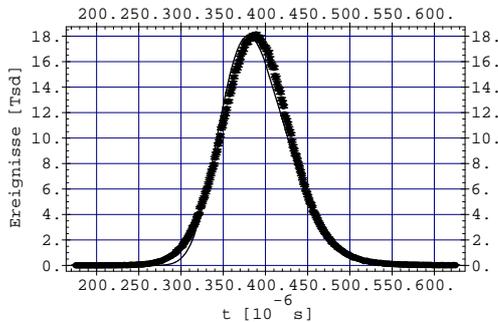


Abbildung 6.16: Flugzeitspektren bei einem Düsendruck von 320 mbar (links) und 540 mbar (rechts). Mit zunehmendem Düsendruck werden die Spektren schmaler, das heißt, die Strahltemperatur reduziert sich. Die Strahlgeschwindigkeit, die von der Düsentemperatur abhängt, bleibt dabei weitgehend unverändert.

den abnehmenden Raumwinkel erklären, unter dem die Skimmeröffnung von der Düse aus erscheint. Der steile Abfall zu kleinen Abständen deutet darauf hin, dass bei diesen Positionen die Strahlbildung durch den Skimmer behindert und unter Umständen sogar vollständig verhindert wird. Abb. 6.18 zeigt die Positionsabhängigkeit des Verhältnisses von Signal zu Untergrund. Gegenüber dem Maximum der Heliumintensität ist das Optimum der sogenannten „signal-noise-ratio“ zu größeren Abständen verschoben, was diese Erklärung bestätigen würde.

### 6.5.3 Wasserstoffgasentladungen

Auch nach Umstellung des Strahlgases auf Wasserstoff lassen sich mit der selbstgebauten Mikroelektrodenstruktur in der Quellkammer Plasmen an der Düse zünden. Wie sich beim Betrieb des Mikrowellendissoziators herausstellte, ermöglicht die Beimischung von Helium zum eigentlichen Strahlgas Wasserstoff eine Reduzierung der Mikrowellenleistung, die zum Aufrechterhalten der Gasentladung nötig ist. Aus diesem Grund wird auch beim Betrieb an der hier untersuchten DC-Entladungsquelle dem molekularen Wasserstoff Helium in geringen Mengen zugegeben.

Bei  $\text{H}_2$ -Flüssen von 30 bis 40 sccm unter Beimischung von 2 bis 4 sccm Helium werden Zündspannungen zwischen 270 und 560 V gemessen. Reduziert man den Wasserstofffluss, so ergeben sich deutlich höhere Zündspannungen, beispielsweise 880 V bei 5 sccm  $\text{H}_2$  ohne Heliumzufuhr. Dieses Verhalten entspricht genau dem der in Abb. 6.1 gezeigten „Paschenkurven“, die wegen der geringeren Wahrscheinlichkeit für Stoßionisation bei kleiner werdendem  $p \cdot d$  höhere Zündspannungen vorhersagen.

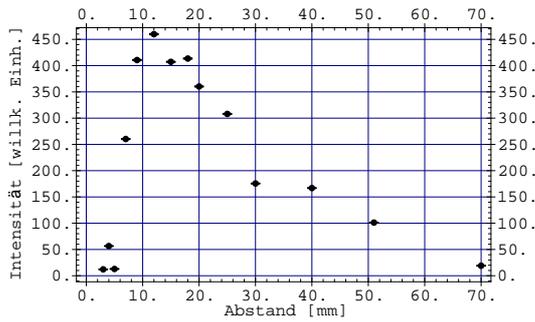


Abbildung 6.17: Positionsabhängigkeit der Intensität des Heliumstrahls bei der verwendeten Kombination aus Düse und Skimmer.

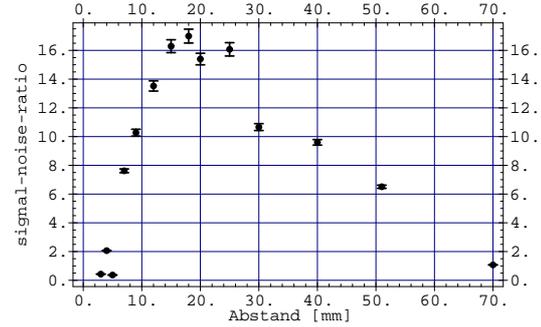


Abbildung 6.18: Positionsabhängigkeit des Verhältnisses von Signal zu Untergrund bei der verwendeten Kombination aus Düse und Skimmer.

Für einen direkten Vergleich mit den in Abb. 6.1 gezeigten „Paschenkurven“ ist die Kenntnis des Düsendrucks notwendig, erst dann ist  $p \cdot d$  bekannt. Mit Hilfe des Querkammerdrucks lässt sich der Düsendruck abschätzen. Dies geschieht am einfachsten über den Zusammenhang [54]

$$W = \frac{1}{L} = \frac{\Delta p}{q_{pV}} = \frac{p_0 - p}{q_{pV}}. \quad (6.4)$$

In Analogie zum elektrischen Strom wird  $W$  als Strömungswiderstand bezeichnet.  $L$  ist der Leitwert der Düsenöffnung. Die  $pV$ -Stromstärke  $q_{pV} = p\dot{V} = \dot{N} k_B T$  ist durch die Verwendung von Durchflussreglern bekannt, das Gleiche gilt, mittels Drucksonden, für den Querkammerdruck  $p$ . Um den Düsendruck  $p_0$  zu bestimmen, ist die Kenntnis des Leitwerts der Düse nötig. Dieser lässt sich aus der Temperatur  $T$  und der molaren Masse  $M_{\text{mol}}$  von  $\text{H}_2$  sowie der Querschnittsfläche  $A$  der Düsenöffnung nach

$$L = \sqrt{\frac{RT}{2\pi M_{\text{mol}}}} A = \sqrt{\frac{kT}{2\pi m}} A \quad (6.5)$$

bestimmen.<sup>7</sup> Wird (6.5) in (6.4) eingesetzt, so ergibt sich für den Düsendruck schließlich

$$p_0 = p + \frac{q}{L} = p + \frac{q_{pV}}{\sqrt{\frac{kT}{2\pi m}} A} = p + \frac{\dot{N}}{A} \sqrt{2\pi m k_B T}. \quad (6.6)$$

Ein Fluss von 5 sccm entspricht etwa  $2.24 \cdot 10^{18}$  Teilchen pro Sekunde. Zusammen mit dem Elektrodenabstand ergibt sich für diesen Fall ein  $p \cdot d$  von etwa 14 Torr-cm. Wie aus Abb. 6.1 zu ersehen ist, sind bei solchen Düsenparametern für Wasserstoff Zündspannungen von etwa 800 V zu erwarten. Dies stimmt gut mit den gemessenen 880 V überein.

Nach Einsetzen der Gasladung zeigen die Strom-Spannungs-Kennlinien den schon bekannten linearen Zusammenhang. Die von den GEMs bekannten Unterbrechungen des linearen Anstiegs (siehe Abb. 6.7) fehlen, da das Plasma nur in einem einzigen Entladungskanal brennen kann. Wie bei den GEMs zeigt sich das Zünden der Entladung am sprunghaften Anstieg des Entladungsstroms. In Abb. 6.19 ist eine solche Kennlinie gezeigt. Der Abbildung kann entnommen werden, dass bei einer Spannung von 600 V in das Volumen  $V \approx \pi \cdot (100 \mu\text{m})^2 \cdot 100 \mu\text{m} = 3.14 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^3$  zwischen den Elektroden eine Leistung von 0.14 W eingekoppelt wird. Das entspricht einer Leistungsdichte von  $L/V = 44.6 \text{ kW/cm}^3$ . Im Vergleich dazu wird beim Mikrowellendissoziator mit einer Leistung von maximal 200 W beim Zünden der Entladung gearbeitet.<sup>8</sup> Diese wird in ein Volumen  $V \approx \pi \cdot (500 \mu\text{m})^2 \cdot 2 \text{ cm} = 15.7 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^3$  eingekoppelt.

<sup>7</sup>Diese Formel gilt streng genommen nur bei molekularen Strömungen, bei denen die freie Weglänge wesentlich größer ist als die geometrische Dimension der Düsenöffnung. Dies ist zumindest vor und direkt nach der Düse nicht unbedingt gegeben, für viele Einströmvorgänge stellt obige Gleichung dennoch eine gute Näherung dar [54].

<sup>8</sup>Dabei handelt es sich um die maximal mögliche Leistungsdichte, die zum Zünden der Entladung mittels eines künstlichen Funkens nötig ist. Nach dem Zünden des Plasmas kann die Leistungsdichte, abhängig vom Fluss durch die Düse, mitunter auf weniger als die Hälfte des angegebenen Wertes reduziert werden. Der Mikrowellendissoziator erzeugt dann noch immer atomaren Wasserstoff.

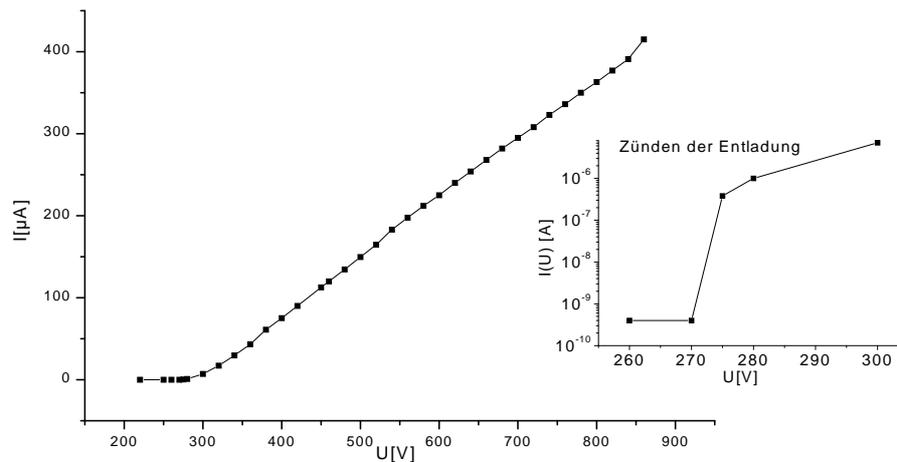


Abbildung 6.19:  $I(U)$ -Diagramm einer Wasserstoffentladung an der Düse einer Mikroelektrodenstruktur. Rechts ist der Bereich der Entladungszündung logarithmisch dargestellt.

Experimentelle Parameter:  $q_{\text{H}_2} = 40$  sccm,  $q_{\text{He}} = 2$  sccm,  $p_0 = 3 \cdot 10^{-4}$  mbar.

Das entspricht einer Leistungsdichte von  $12.7 \text{ kW/cm}^3$ . Obwohl die Leistungsdichte der hier beschriebenen Quelle höher ist als die des Mikrowellendissoziators, zeigen schon die Messungen mit metastabilem Helium, dass auch für Wasserstoff mit einem „zimmerwarmen“ Strahl gerechnet werden kann. Dies ist auf die im Vergleich zur bisher verwendeten Mikrowellenentladung starke räumliche Begrenzung des Plasmas zurückzuführen, wodurch eine zu starke Erhitzung des Strahlgases verhindert wird.

Allerdings konnte bisher noch kein Strahl aus atomarem Wasserstoff im Grundzustand nachgewiesen werden, da das erforderliche Massenspektrometer noch nicht zur Verfügung stand. Es gibt aber erste Anzeichen, dass die Dissoziation von molekularem Wasserstoff schon erfolgreich durchgeführt wurde. So zeigen erste Messungen an metastabilem  $\text{H}^*$  ein strahlkorreliertes Signal, das nicht auf Entladungsphotonen zurückgeführt werden kann.

Außerdem sprechen mehrere Gründe dafür, dass es mit der vorliegenden Quelle möglich sein sollte, auch atomaren Wasserstoff im Grundzustand zu erzeugen:

- Die Leistungsdichte, die über das Gleichspannungsfeld ins Plasma eingekoppelt werden kann, ist mit  $44.6 \text{ kW/cm}^3$  (siehe oben) höher als die Leistungsdichte, die beim Mikrowellendissoziator benötigt wird, um erfolgreich atomaren Wasserstoff zu erzeugen.
- Zur Erzeugung von metastabilem Helium  $2^3\text{S}_1(1s2s)$  ist eine Anregungsenergie von  $19.82 \text{ eV}$  nötig. Die Schwellenenergien, bei denen die Prozesse einsetzen, über die die  $\text{H}_2$ -Dissoziation abläuft, liegen zwischen  $8.8 \text{ eV}$  und  $25 \text{ eV}$  (siehe Abschnitt 6.1). Da die Erzeugung von metastabilem Helium mit dem hier vorgestellten Aufbau einer DC-gespeisten Entladung erfolgreich nachgewiesen werden konnte, kann davon ausgegangen werden, dass die freien Elektronen im Plasma auch genügend Energie aus dem Gleichspannungsfeld aufnehmen können, um zumindest die Fragmentation über repulsive  $\text{H}_2^{**}$ -Zustände und Ionisationsprozesse mit  $\text{H}_2^+$  als Produkt zu ermöglichen.
- Der Wirkungsquerschnitt für die Erzeugung von metastabilem Helium ist um etwa eine Größenordnung niedriger als der Gesamtwirkungsquerschnitt für die Dissoziation von  $\text{H}_2$ . Auch dies lässt in Verbindung mit dem gelungenen Nachweis von metastabilem Helium darauf schließen, dass genügend Prozesse stattfinden müssten, um atomaren Wasserstoff zu erzeugen.

Da mittlerweile das zum Nachweis erforderliche Massenspektrometer zur Verfügung steht, sollten erfolgreiche Messungen mit Wasserstoff nicht mehr lange auf sich warten lassen.

## 6.6 Zusammenfassung und Ausblick

Mit dem vorgestellten Konzept der mikrostrukturierten Elektroden konnten reproduzierbar Plasmen im Bereich der Düsenöffnung erzeugt werden und erfolgreich ein Strahl aus metastabilen Heliumatomen geformt und nachgewiesen werden. Aus der Analyse der Strahlgeschwindigkeiten ergibt sich für das Strahlgas, bevor es die Düse verlässt, eine Temperatur im Bereich von 300 K. Zum Vergleich: Beim Mikrowellendissoziator wird das Gas durch die großräumig brennende Entladung auf über 550 K aufgeheizt.

Der Aufbau der hier beschriebenen Quelle ist außerdem so gestaltet, dass durch den Einsatz einer Kühlung die Temperatur des Gases in der Quelle effektiv gesenkt werden kann: In der Gaszuleitung des Kupferkolbens in Abb. 6.8 haben die Gasteilchen auf einer Länge von mehreren Zentimetern genügend Zeit, zu thermalisieren, bevor sie in die Gasentladung gelangen, die räumlich stark begrenzt ist. Eine Kühlung dieses Kupferkolbens verspricht deshalb eine signifikante Reduzierung der Strahlgeschwindigkeit.

Ähnliche Versuch mit dem Mikrowellendissoziator, bei denen die Düsenöffnung des Quarzröhrchens aus Abb. 3.2 gekühlt wurde, ergaben lediglich einen 10%-igen Effekt in der Geschwindigkeit: Hier brennt das Plasma in einem Quarzröhrchen über eine Länge von mehreren Zentimetern, was dazu führt, dass die Temperatur des Gases in der Entladung steigt, bevor es auf den letzten Millimetern des Quarzröhrchens gekühlt wird.

Da die hier vorgestellte Quelle in der Lage ist, metastabiles Helium ( $2^3S_1(1s2s)$ ) zu erzeugen, ist sie auch für eine Modifikation des  $^3\text{He}$ -Spinecho-Spektrometers von Interesse. Bei diesem besteht zur Zeit das Problem, dass mit dem vorhandenen magnetischen Quadrupol nur dann eine Zustandsselektion (und damit Polarisation des Strahls) erfolgreich durchgeführt werden kann, wenn der  $^3\text{He}$ -Strahl aus einer 4.2 K kalten Düse stammt. Dies limitiert aber den Energiebereich, in dem sich inelastische Prozesse auf einer Probenoberfläche untersuchen lassen, auf sehr kleine Energien. Dieser Bereich ließe sich nach oben erweitern, wenn die Strahlpolarisation nicht über Stern-Gerlach-Magnete erzeugt wird, sondern über ein alternatives Verfahren, bei dem metastabiles  $^3\text{He}$  zum Einsatz kommt.

Der Nachweis eines Strahls aus atomarem Wasserstoff im Grundzustand konnte bislang noch nicht erbracht werden. Jedoch lassen die Ergebnisse, die mit metastabilem Helium erzielt wurden, sowie die Leistungsdichte, die in die Entladung eingekoppelt werden kann, keinen Zweifel daran, dass mit der gleichspannungsgespeisten Quelle prinzipiell die Erzeugung eines  $^1\text{H}$ -Strahls möglich ist. Auch die bei Messungen mit metastabilem  $\text{H}^*$  erhaltenen strahlkorrelierten Signale deuten in die gleiche Richtung. Da mittlerweile auch wieder ein Massenspektrometer zur Verfügung steht, sollte ein solcher Strahl in Kürze gefunden sein.



## Kapitel 7

# Eine rotierende Quelle für einen Strahl aus langsamen und kalten Molekülen

Atome oder Moleküle, die aus einer Düse bei Zimmertemperatur ins Vakuum expandieren, haben je nach Expansionscharakter (siehe Kapitel 5) üblicherweise Geschwindigkeiten von mehreren hundert Metern pro Sekunde. Ihre de Broglie-Wellenlängen liegen in der Größenordnung von weniger als einem Å. Um die Geschwindigkeit des Strahls zu verringern und damit die Wellenlänge der Strahlteilchen zu vergrößern, werden beispielsweise bei Atomstrahl-Spektrometern gekühlte Düsen verwendet. So besteht beim Heidelberger  $^3\text{He}$ -Spinecho-Spektrometer die Quelle zu einem großen Teil aus einem Badkryostaten, der mit flüssigem Helium betrieben wird. Damit erreicht man im Falle des  $^3\text{He}$  Geschwindigkeiten von 232 m/s, was einer de Broglie-Wellenlänge von 5.7 Å entspricht.

Will man einen langsamen und kalten Strahl aus Molekülen erzeugen, um daran in-beam-NMR Experimente durchzuführen und gezielt die magnetischen Momente einzelner Molekülbaugruppen zu manipulieren, so steht man bei der Kühlung mittels flüssigem Helium oder Stickstoff unter Umständen vor prinzipiellen Problemen: Viele der in Frage kommenden Verbindungen liegen dann nicht mehr in gasförmigem Zustand vor. Ziel ist es also, mit einer Düse bei Zimmertemperatur einen kalten und langsamen Strahl zu erzeugen. Deshalb wird in diesem Kapitel das Konzept einer rotierenden Quelle für einen langsamen und kalten Molekülstrahl vorgestellt und erste Messungen damit diskutiert.

### 7.1 Anforderungen an die Quelle

Um wirklich von einem langsamen Strahl reden zu können, ist es erforderlich, die wahrscheinlichste Geschwindigkeit im Strahl auf einige 10 m/s zu reduzieren. Im Fall einer bewegten Quelle bedeutet das, dass sich die Düse mit annähernd dieser Geschwindigkeit entgegengesetzt zur Strahlrichtung bewegen muss. Dann ergibt sich als Geschwindigkeit der Strahlteilchen im Laborsystem  $v_L = v_S - v_D$ .

Bei Vorliegen eines „zimmerwarmen“ Überschallstrahls<sup>1</sup> liegt die wahrscheinlichste Geschwindigkeit im Strahl nach Tabelle 5.1 bei etwa 560 m/s für  $^{40}\text{Ar}$  und bei etwa 1760 m/s für  $^4\text{He}$ .

Der Ansatz, die Düse in ein schwingendes System nach Art einer Stimmgabel zu integrieren, erweist sich als unpraktikabel, wie eine einfache Abschätzung zeigt: Nimmt man eine Sinus-förmige Schwingung  $s(t) = s_0 \sin(\omega t)$  an, so ergibt sich für die Geschwindigkeit  $v(t) = s_0 \omega \cos(\omega t)$ , für die Beschleunigung  $a(t) = -s_0 \omega^2 \sin(\omega t)$ .  $s_0 \omega = v_0$  stellt die maximale Geschwindigkeit der Bewegung,  $s_0 \omega^2 = a_0$  die maximale Beschleunigung dar. Um beispielsweise eine Düsengeschwindigkeit  $v_0$  von 560 m/s mit einer einigermaßen akzeptablen Wiederholungsrate von 1 Hz zu erreichen, wäre eine Schwingungsamplitude von etwa 90 m notwendig. Die dabei auftretenden Beschleunigungen erreichen Werte von bis zu 3520 m/s<sup>2</sup>, also bis zu 350-facher Erdbeschleunigung. Durch Erhöhen der Frequenz lässt sich zwar die notwendige

<sup>1</sup>Nach Gl. (5.26) gilt für ein einatomares ideales Gas  $v_w = \sqrt{\frac{5k_B T}{m}}$ .

Amplitude der Schwingung reduzieren, im Gegenzug nimmt aber die Beschleunigung zu. Die Umsetzung scheitert also entweder an den nötigen Ausmaßen der Vakuumkammer, in der sich die Düse bewegen muss, oder an Materialien, die einer entsprechenden Belastung standhalten.

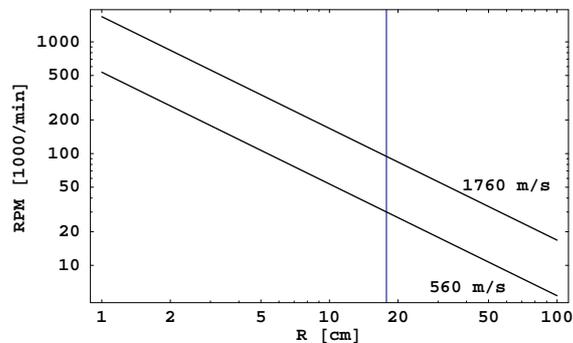


Abbildung 7.1: Notwendige Drehfrequenz des Rotors bei gegebener Bahngeschwindigkeit in Abhängigkeit vom Radius. Die vertikale Linie gibt den im Experiment realisierten Radius an.

derum einen hohen Druck vor der Düse erforderlich macht. Sämtliche Komponenten der Quelle müssen also bei einigen 10000 U/min Drücken von einigen bar standhalten können. Zudem soll die Quelle leicht handhabbar sein und einen Strahl mit reproduzierbaren Eigenschaften (wie wahrscheinlichste Geschwindigkeit, Breite der Verteilung) erzeugen.

Befindet sich die Düse dagegen am Ende eines Rotors, so hängt die realisierbare Pulsfrequenz nur von der Länge  $r$  des Rotors ab, wenn eine bestimmte Düsengeschwindigkeit  $v_D$  erreicht werden soll, da  $v_D = \omega r$ . Die zur Verfügung stehende Quellkammer läßt einen maximalen Radius des Rotors von 178 mm zu. Diese Länge ist in Abb. 7.1 durch die vertikale Linie markiert. Die Abbildung zeigt die Abhängigkeit der notwendigen Umdrehungen pro Minute für zwei Düsengeschwindigkeiten als Funktion des Abstands der Düse vom Drehzentrum. Ihr kann entnommen werden, dass der Rotor mit etwa 30000 Umdrehungen pro Minute betrieben werden muss um einen langsamen Argon-Strahl zu erzeugen; bei Helium wären sogar 94000 U/min notwendig.

Für die adiabatische Kühlung ist man auf einen überschallschnellen Strahl angewiesen, was wie-

## 7.2 Aufbau der rotierenden Quelle

Die hier zum Einsatz kommende Quelle besteht aus einem Kohlefaserrotor, der auf einer Ferrofluidics-Drehdurchführung mit hohlgebohrter Achse montiert ist, um die Gaszuführung zu gewährleisten. Im Vergleich zu schon existierenden Experimenten in Harvard [10, 56] und Bielefeld [57], die beide mit teflondichteten Hohladeln arbeiten, eignet sich die hier verwendete Konstruktion wesentlich besser für hohe Drehgeschwindigkeiten. Die Durchführung schlägt nicht so leicht aus und sie ist auch bei hohen Drehzahlen noch immer hervorragend dicht. Die Verbindung zwischen der Hohlachse der Drehdurchführung und dem Kohlefaserrohr geschieht über eine Aluminium-Hülse, in die das Rohr gasdicht eingeklebt ist.

In Abb. 7.2 ist ein Schnitt durch die Quellkammer des Experiments gezeigt. Unter der Quellkammer befindet sich eine Öldiffusionspumpe mit einem Saugvermögen von 1500 l/s. Die Gaszufuhr erfolgt wahlweise über den KF-Flansch oberhalb des Motors oder über eine Swagelok-Verbindung an der Seite, erkennbar in Abb. 7.3.

Das Kohlefaserrohr des Rotors hat einen Innendurchmesser von etwa 2.5 mm, wobei die Wandstärke variiert. Durch die axiale Ausrichtung der Fasern ergibt sich eine hervorragende Festigkeit in axialer Richtung. Auf radiale Belastungen reagiert das Material allerdings wesentlich empfindlicher.

Bei dem hier eingesetzten symmetrischen Rotor sind beide Enden mit Kaptonfolie zugeklebt, wobei auf einer Seite ein 50  $\mu\text{m}$  dicker Draht zwischen Folie und Rohrende geklebt wurde. Nach dem Aushärten des Klebers wird dieser Draht wieder entfernt, so dass ein radialer Kanal etwa von der Größe des Drahtdurchmessers  $d$  entsteht, der als Düse fungiert. Eine detaillierte Beschreibung zur Herstellung des Rotors findet sich in [58]. Je nach Wandstärke beträgt die Länge  $L$  dieses Kanals einen halben bis einen Millimeter. Dadurch ist  $d \ll L$  sehr gut erfüllt, es kommt bei der so gefertigten Düse im Falle eines Effusiv-Strahls zu Vorwärtsbündelung der Strahlteilchen im Vergleich zu einer dünnwandigen Düse (vgl. 5.2.2).

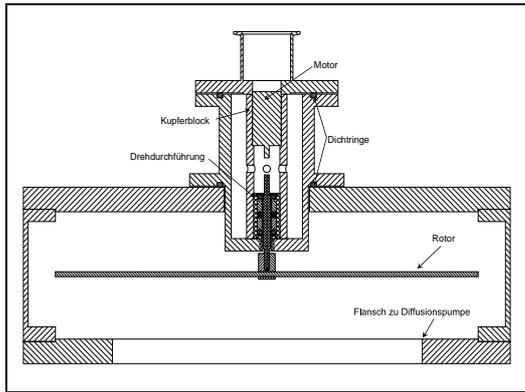


Abbildung 7.2: Seitenansicht der Quellkammer mit Motor und Drehdurchführung. Die Kupplung dazwischen ist nicht eingezeichnet.

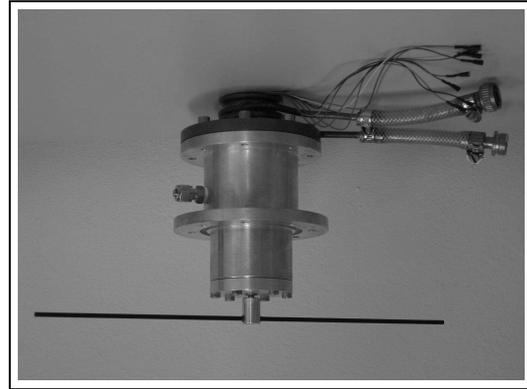


Abbildung 7.3: Der eingesetzte Rotor auf der Drehdurchführung.

Abbildung 7.3 zeigt den Rotor zusammen mit der Halterung für die Drehdurchführung und den Motor. Die Schlauchanschlüsse ermöglichen die Wasserversorgung des kupfernen Kühlkörpers. Über die elektrischen Anschlüsse erfolgt die Ansteuerung des Servomotors und die Auslese der Ist-Drehzahl.

Die nebenstehende Abbildung zeigt den Antrieb des Rotors, bestehend aus einem bürstenlosen Servomotor, der Kupplung und der Drehdurchführung. Wegen der hohen Umdrehungszahlen von beispielsweise 30000 U/min für Argon ist eine effektive Kühlung erforderlich. Aus diesem Grund befindet sich der komplette Antriebsstrang in einem Kupferrohr, das an beiden Enden geschlitzt ist. Eine Schlauchklemme fixiert die Durchführung und verbessert außerdem den thermischen Kontakt zum Rohr. Auf der Motorseite hat das Rohr Verbindung zu einem wassergekühlten Kupferkörper, der als Teil des Vakuumgefäßes ausgelegt ist (erkennbar an den Schlauchanschlüssen in Abb. 7.3). Der Einsatz einer Kupplung ist notwendig, da die Achsen von Motor und Durchführung nie genau aufeinander fluchten, was zu unnötiger Belastung der Lager und damit zu zusätzlichem Wärmeeintrag führen würde. Seitliche Bohrungen im Kupferrohr ermöglichen die Gaszufuhr vom Vorratsbehälter zur Düse über die hohlgebohrte Achse. Das sichtbare Ende der Drehdurchführung stellt die Vakuumseite dar und trägt den Rotor. Die Abdichtung zur Quellkammer erfolgt mit Dichtringen aus Viton.



### 7.3 Minimal mögliche Geschwindigkeit

Ein weiteres Augenmerk ist auf die Position der Düse auf dem Rotor zu richten. Im Folgenden wird der Fall eines symmetrischen Rotors betrachtet, so wie er in dieser Arbeit verwendet wurde. Die Düse beschreibt beim Betrieb des Rotors einen Kreis mit dem Radius  $R_d < R_0$ , wobei  $R_0$  für den Radius des Rotors steht, siehe dazu Abb. 7.4. Zum Strahl beitragen können nur Teilchen, die die Strecke  $s = \sqrt{R_0^2 - R_d^2}$  durchqueren, bevor der Rotor sich um den Winkel  $\pi - \theta$  weitergedreht hat.

Für den Winkel  $\theta$  gilt:  $\cos \theta = \frac{R_d}{R_0}$ . Bei einer Winkelgeschwindigkeit von  $\omega_{\text{rot}}$  vergeht eine Zeitspanne  $t = \frac{\pi - \theta}{\omega_{\text{rot}}} = \frac{\pi - \arccos(\frac{R_d}{R_0})}{\omega_{\text{rot}}}$ , bis der Rotor wieder die direkte Sicht von der Triggerposition entlang der Strahlachse zum Detektor verdeckt. Für die minimal mögliche Geschwindigkeit auf der Strahlachse gilt

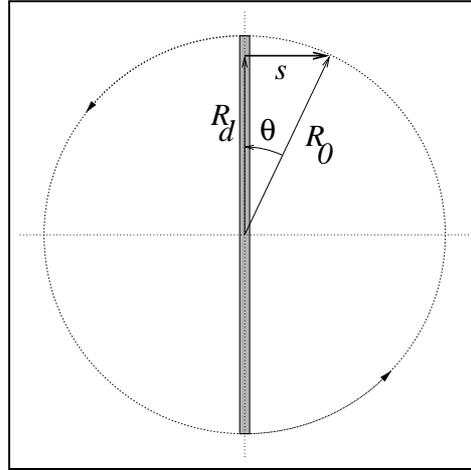


Abbildung 7.4: Begrenzung der minimalen Geschwindigkeit durch Kollision des Rotors mit Teilchen, die zu langsam sind.

also:

$$\begin{aligned}
 v_{\min} &= \frac{\omega_{\text{rot}}}{\pi - \theta} \sqrt{R_0^2 - R_d^2} \\
 &= \frac{v_d}{\pi - \theta} \sqrt{\left(\frac{R_0}{R_d}\right)^2 - 1}.
 \end{aligned} \tag{7.1}$$

Anhand von Formel (7.1) lässt sich die minimal mögliche Geschwindigkeit normiert auf die Düsen- geschwindigkeit  $v_d$  ausdrücken. Um auf die wahrscheinlichste Geschwindigkeit  $v_w$  zu normieren, ist eine kleine Umformung nötig. Es gilt für die minimal mögliche Geschwindigkeit des Strahls im Laborsystem

$$\begin{aligned}
 v_{\min} &= v_w - v_d \\
 \frac{\omega_{\text{rot}} R_d}{\pi - \theta} \sqrt{\left(\frac{R_0}{R_d}\right)^2 - 1} &= v_w - \omega_{\text{rot}} R_d \\
 \Rightarrow \omega_{\text{rot}} &= \frac{v_w}{R_d \left(1 + \frac{\sqrt{\left(\frac{R_0}{R_d}\right)^2 - 1}}{\pi - \theta}\right)} \\
 \Rightarrow v_{\min} = v_w - v_D &= \frac{v_w (1 - (\pi - \theta))}{\pi - \theta + \sqrt{\left(\frac{R_0}{R_d}\right)^2 - 1}}.
 \end{aligned} \tag{7.2}$$

Mit dieser Gleichung lässt sich die minimal messbare Geschwindigkeit ausdrücken, normiert auf die wahr- scheinlichste Geschwindigkeit des Strahls bei stehender Düse. In den Gleichungen (7.1) und (7.2) kann folgende Ersetzung durchgeführt werden:  $\theta \rightarrow \arccos\left(\frac{R_d}{R_0}\right)$ . Bei Verwendung eines asymmetrischen Rotor- s ist in allen Formeln  $\pi$  durch  $2\pi$  zu ersetzen.

Aus Abb. 7.5, die den Verlauf der normierten Minimal-Geschwindigkeit zeigt, lässt sich entnehmen, dass die Düse möglichst nahe am Rotorende platziert werden sollte, um den Abschattungseffekt des Rotors zu minimieren. In der kleinen Grafik ist der gesamte Verlauf von der Drehachse des Rotors bis zur Rotor- spitze gezeigt. Durchgezogen ist der Verlauf nach Gl. (7.2) für den symmetrischen Rotor, der strichpunk- tierte Verlauf zeigt die Situation für einen asymmetrischen Rotor, der gestrichelte Verlauf ergibt sich für den symmetrischen Rotor, wenn der Winkel  $\theta$  aus Abb. 7.4 zu Null angenommen wird. In diesem Fall

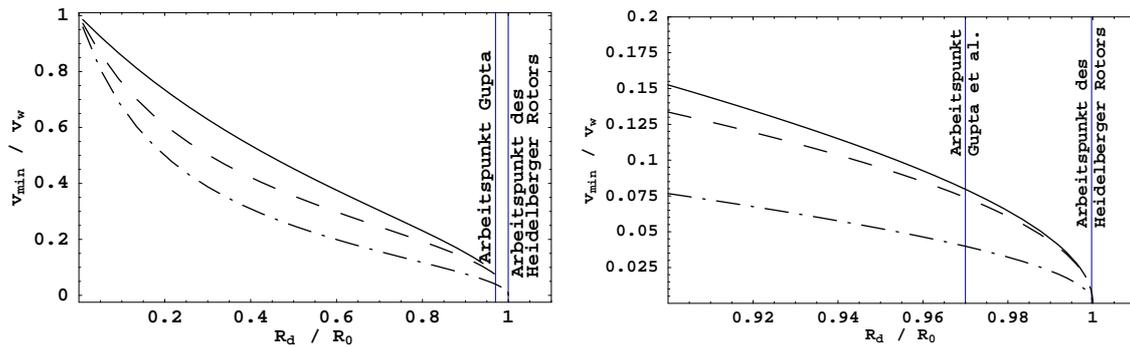


Abbildung 7.5: Minimal messbare Geschwindigkeit in Einheiten der wahrscheinlichsten Geschwindigkeit des Strahls bei stehender Düse. Durchgezogen dargestellt ist die Situation für einen symmetrischen Rotor nach Gl. (7.2), gestrichelt die Näherung für  $\theta \rightarrow 0$  bzw.  $R_d \rightarrow R_0$ . Strichpunktiert ist die Situation für einen asymmetrischen Rotor gezeigt. Die vertikalen Linien zeigen die Arbeitspunkte des hier verwendeten Rotors (nahe 1) und des in [56] verwendeten. Die linke Abbildung zeigt den Verlauf über den gesamten Bereich von Null bis Eins, rechts ist der experimentell relevante Bereich gezeigt.

wird vernachlässigt, dass sich die Strahlteilchen dem Rotor entgegenbewegen. Wie zu erwarten, gilt diese Näherung nur dann, wenn sich die Düse sehr nah am Rotorende befindet. Die vertikale Linie bei 0,97 beschreibt die Situation, wie sie bei Gupta et al. vorliegt [56]; die minimal messbare Geschwindigkeit liegt dort bei ungefähr 3,9% von  $v_w$ . Im Vergleich dazu ist die Düse bei der Rotorquelle am Physikalischen Institut dem Rotorende sehr nahe, was die vertikale Linie nahe eins zum Ausdruck bringt. Theoretisch sollte beim Heidelberger Rotor die minimal messbare Geschwindigkeit bei etwa 0,8% der wahrscheinlichsten Geschwindigkeit des Strahls liegen.

## 7.4 Einfluss der Fliehkraft

Wie schon in Abschnitt 7.1 erwähnt, muss die Düse annähernd mit der wahrscheinlichsten Geschwindigkeit des Strahls bewegt werden, um einen langsamen Strahl zu erzeugen. Dazu sind hohe Umdrehungszahlen notwendig, aufgrund derer die Zentrifugalkraft entscheidenden Einfluss auf den Rotor und das Gas im Rotor ausübt:

- Der Rotor muss derart konstruiert werden, dass er die hohen Drehzahlen schadlos übersteht. Gupta et al. [56] machten einige Versuche mit zylindrischen Rotoren, die auf beiden Seiten mit Endkappen verschlossen wurden. Bei hohen Drehzahlen lösten sich diese angelöteten Endkappen teilweise.
- Die auf die Gasteilchen wirkende Zentrifugalkraft macht sich in einem erhöhten effektiven Druck vor der Düse bemerkbar. Dadurch verändert sich das Expansionsverhältnis  $\frac{p}{p_0}$ .

### 7.4.1 Zerreihsfestigkeit des Rotors

Ein Volumenelement des Rotors mit der Masse  $dm$ , das sich bei einer Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  auf einer Kreisbahn mit dem Radius  $R$  bewegt, erfährt aufgrund der Rotation eine nach außen gerichtete Kraft

$$dF = dm \omega^2 R = \rho \omega^2 A(R) R dR. \quad (7.3)$$

Im letzten Schritt wurde die Masse  $dm$  durch die Dichte  $\rho$  und das Volumenelement  $A(R) dR$  ersetzt, wobei die Dichte als konstant angenommen wird. Integration beider Seiten ergibt die Kraft, die von der

Querschnittsfläche  $A(r)$  des Rotors an der Stelle  $r$  aufgenommen werden muss:

$$F_{\text{cent}}(r, \omega) = \rho \omega^2 \int_{0 \leq r \leq R_0}^{R_0} A(R) R dR. \quad (7.4)$$

Damit lässt sich die Zugbelastung des Rotormaterials durch die Zentrifugalkraft an jeder Stelle des Rotors berechnen:

$$Z(r, \omega) = \frac{F_{\text{cent}}(r, \omega)}{A(r)} = \frac{\rho \omega^2}{A(r)} \int_{0 \leq r \leq R_0}^{R_0} A(R) R dR. \quad (7.5)$$

Das Material hält der Belastung stand, wenn  $Z(r, \omega) \leq S \quad \forall r > 0$  gilt.  $S$  ist die Zugfestigkeit und stellt eine materialabhängige Konstante dar. In Tabelle 7.1 sind Dichte und Zugfestigkeit für einige Materialien angegeben.

Material	$\rho$ [kg/m <sup>3</sup> ]	$S$ [N/mm <sup>2</sup> ]	$S/\rho$ [m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]	$\sqrt{S/\rho}$ [m/s]
Edelstahl 304	7870	514	65311	256
Messing	8400	986	117400	343
Aluminium	2700	167	61851	249
Aluminium 7075	2700	486	180000	424
Titan	4500	940	208888	457
CFK	1550	1400	903226	950

Tabelle 7.1: Zugfestigkeit und Dichte verschiedener Materialien.

Beim Design des Rotors ist zu berücksichtigen, dass der Querschnittsfläche auf der Drehachse des Rotors ( $r = 0$ ) besondere Bedeutung zukommt: Die Masse des Rotors wird im Allgemeinen symmetrisch um die Drehachse verteilt, um keine Unwucht zu erzeugen. Für die Querschnittsfläche  $A(0)$  bedeutet das, dass sie von beiden Seiten mit der gleichen Zentrifugalkraft belastet wird. Also gilt für die Zugbelastung bei  $r = 0$

$$Z(0, \omega) = \frac{2 F_{\text{cent}}(0, \omega)}{A(0)} = \frac{2 \rho \omega^2}{A(0)} \int_0^{R_0} A(R) R dR \stackrel{!}{\leq} S. \quad (7.6)$$

#### 7.4.1.1 Zylindrisches Profil



Bei einem zylindrischen Profil mit Radius  $r_{\text{max}}$  – wie es der oben abgebildete Rotor zeigt – ist die Querschnittsfläche konstant,  $A(R) = \pi r_{\text{max}}^2$ , wodurch sich für Gl. (7.6) Folgendes ergibt:

$$\begin{aligned} Z(0, \omega) &= 2 \rho \omega^2 \int_0^{R_0} R dR = \rho \omega^2 R_0^2 \\ &\Rightarrow v_{\text{tip}} \stackrel{!}{\leq} \sqrt{\frac{S}{\rho}}. \end{aligned} \quad (7.7)$$

Aus Tabelle 7.1 ergibt sich nach der Folgerung von (7.7) direkt die maximal mögliche Geschwindigkeit für die Rotorspitze bei Verwendung eines zylindrischen Rotorprofils. Nur kohlefaserverstärkter Kunststoff (CFK) erfüllt demnach die Anforderungen, um eine Düsegengeschwindigkeit zu ermöglichen, die die wahrscheinlichste Geschwindigkeit von Argon auf wenige zehn m/s reduziert.

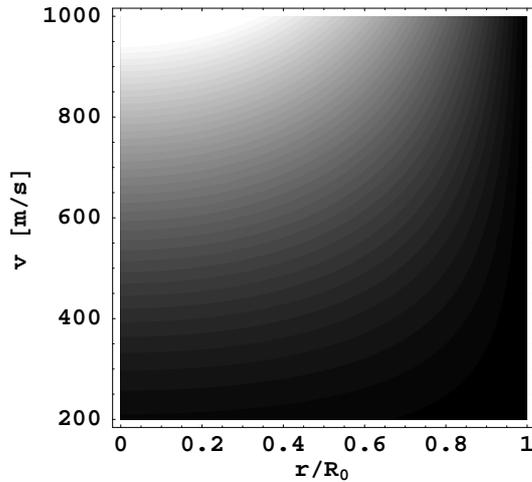


Abbildung 7.6: Zugbelastung bei zylindrischem Profil. Die Zugbelastung nimmt mit der Helligkeit zu.

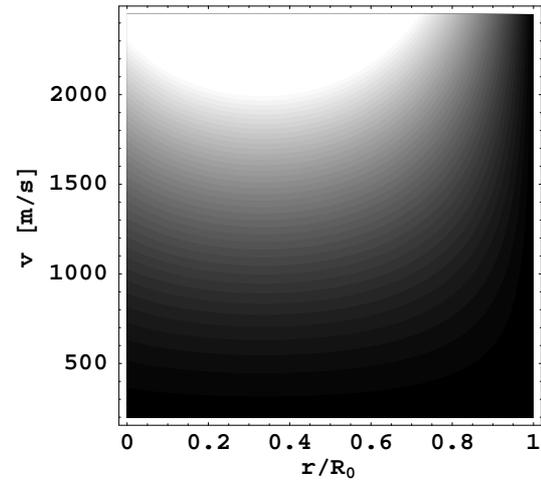


Abbildung 7.7: Zugbelastung bei konischem Profil. Helligkeitsabstufung wie in Abb. 7.6.

In Abb. 7.6 ist die Zugbelastung für CFK nach Gl. (7.5) entlang eines Rotorarms als Funktion der Düsengeschwindigkeit  $v_{\text{tip}}$  und des normierten Abstands  $r/R_0$  vom Drehzentrum dargestellt. Die Drehachse befindet sich bei  $r/R_0 = 0$ , die Rotorspitze bei  $r/R_0 = 1$ . Der doppelten Zugbelastung bei  $r = 0$  wurde dadurch Rechnung getragen, dass nur für Werte kleiner als  $S/2 = 700 \text{ N/mm}^2$  die Isobaren gezeichnet wurden. Geschwindigkeiten von mehr als  $950 \text{ m/s}$  sind für einen CFK-Rotor mit zylindrischem Profil nicht möglich, da bei dieser Geschwindigkeit die  $700 \text{ N/mm}^2$ -Isobare die Linie  $r = 0$  schneidet. Bei dieser Geschwindigkeit muss also die Querschnittsfläche im Drehzentrum des Rotors eine Zugbelastung von  $1400 \text{ N/mm}^2$  aufnehmen. Deutlich zu erkennen ist, dass bei konstanter Bahngeschwindigkeit der Rotorspitze die Zugbelastung im Rotor bei Annäherung an die Rotorspitze monoton abnimmt.

#### 7.4.1.2 Konisches Profil

Bei einem konischen Profil mit Radius  $r_{\text{max}}$  der Querschnittsfläche auf der Drehachse des Rotors lässt sich der Querschnittsradius beschreiben als

$$x(R) = r_{\text{max}} - cR$$

mit  $c = \frac{r_{\text{max}}}{R_0}$ . Die Querschnittsfläche zeigt dann folgende Abhängigkeit vom Abstand  $R$  zur Drehachse:

$$A(R) = \pi (r_{\text{max}}^2 - 2c r_{\text{max}} R + c^2 R^2) .$$

Setzt man dies in Gl. (7.6) ein, so ergibt sich

$$\begin{aligned} Z(0, \omega) &= \frac{2\rho\omega^2}{r_{\text{max}}^2} \int_0^{R_0} r_{\text{max}} \left(1 - \frac{R}{R_0}\right)^2 R dR \\ &= \frac{1}{6} \rho \omega^2 R_0^2 \Rightarrow v_{\text{tip}} \leq \sqrt{\frac{6S}{\rho}} . \end{aligned} \quad (7.8)$$

Aus Gl. (7.8) geht also hervor, dass bei Verwendung eines sich nach außen konisch verjüngenden Rotors die Spitzengeschwindigkeit um den Faktor  $\sqrt{6}$  höher sein kann, als bei einem zylindrischen Rotor aus gleichem

Material. Mit einem solchen Profil ist es dann auch möglich, andere Materialien als CFK zu verwenden und in den erforderlichen Geschwindigkeitsbereich von über 500 m/s zu kommen. Allerdings ist dafür ein höherer fertigungstechnischer Aufwand in Kauf zu nehmen. In Abb. 7.7 sind für einen CFK-Rotor mit konischem Profilverlauf Linien gleicher Zugbelastung als Funktion des normierten Abstands von der Drehachse  $r/R_0$  und  $v$  zu sehen. Wie in Abb. 7.6 wurden nur Linien bis  $700 \text{ N/mm}^2$  geplottet. Die Isobare für  $700 \text{ N/mm}^2$  schneidet die Linie  $r = 0$  bei etwa 2330 m/s. Im Vergleich zum Verlauf der Isobaren beim zylindrischen Profil fällt auf, dass die Zugbelastung längs des Rotors nun nicht mehr monoton abfällt. Die maximale Belastung bei einer festen Düsendeschwindigkeit tritt nicht mehr bei  $r/R_0 = 0$  auf. Im gezeigten Bereich in Abb. 7.7 verläuft allerdings keine Isobare für  $1400 \text{ N/mm}^2$ . Der Bruch des Rotors wird also wie beim zylindrischen Profil bei  $r = 0$  erwartet.

## 7.4.2 Drucküberhöhung an der Düse

Auf die Strahlteilchen im Rotor wirkt aufgrund der Drehung zusätzlich zur Gravitation (die bei Betrachtung der Strahlteilchen als ideales Gas allerdings vernachlässigt werden darf) die Zentrifugalkraft

$$F = -m\omega^2 R. \quad (7.9)$$

Bei konstanter Winkelgeschwindigkeit nimmt diese Kraft linear mit dem Radius zu. Dadurch kommt es mit zunehmendem Abstand von der Rotationsachse zu einer Zunahme des Drucks im Vergleich zum Druck im Drehzentrum.

Aus Gleichung (7.9) lässt sich durch Integration das Potenzial aufgrund der Fliehkraft ermitteln:

$$U = - \int_0^R m\omega^2 \tilde{R} d\tilde{R} \quad (7.10)$$

$$U = -\frac{1}{2}m\omega^2 R^2 + C = -\frac{1}{2}m\omega^2 R^2. \quad (7.11)$$

Im letzten Schritt wurde die Randbedingung  $U(0) = 0$  benutzt, so dass für die Integrationskonstante  $C = 0$  gilt. Weil im Röhrchen Gleichgewicht bezüglich des Teilchenaustauschs herrscht, gilt für das chemische Potenzial

$$\mu(\vec{r}_a) = \mu(\vec{r}_b). \quad (7.12)$$

Das ideale Gas gehorcht der mikrokanonischen Zustandssumme

$$E_r = E_r(V, N, U(\vec{r})) = E_{r,0}(V, N) + NU(\vec{r}). \quad (7.13)$$

so dass sich damit für das chemische Potenzial

$$\mu = \frac{\partial E_r(V, N, U)}{\partial N} = \frac{\partial E_{r,0}(V, N)}{\partial N} + U(\vec{r}) = \mu_0(T(\vec{r}), P(\vec{r})) + U(\vec{r}) \quad (7.14)$$

ergibt. Dabei steht  $V$  für das Volumen,  $N$  für die Teilchenzahl,  $\vec{r}$  für den Ort. Unter der Annahme, dass die Temperatur  $T_0$  im gesamten Volumen des Rotors konstant ist, ergibt sich aus Gln. (7.12) und (7.14)

$$\mu(R) = \mu_0(T_0, P(R)) - \frac{1}{2}m\omega^2 R^2 = \text{const.} \quad (7.15)$$

Ableitung nach dem Radius  $R$  ergibt schließlich

$$\left( \frac{\partial \mu_0}{\partial P} \right)_{T_0} \frac{dP}{dR} - m\omega^2 R = 0. \quad (7.16)$$

Mit Hilfe der Durham-Gibbs-Relation  $d\mu = -\frac{S}{N}dT + \frac{V}{N}dP$  (siehe beispielsweise [59]) läßt sich  $\left(\frac{\partial\mu_0}{\partial P}\right)_{T_0}$  ausdrücken als das „Teilchenvolumen“  $\nu(R) = \frac{V}{N(R)}$ ; gemeinsam mit dem idealen Gasgesetz  $P(R)V = N(R)k_B T_0 \Leftrightarrow \frac{V}{N(R)} = \frac{k_B T_0}{P(R)}$  (für  $N(R) \neq 0$  und  $P(R) \neq 0$ ) sieht Gl. (7.16) so aus:

$$\frac{1}{P(R)} \frac{dP}{dR} = \frac{m\omega^2}{k_B T_0} R. \quad (7.17)$$

Wird auf beiden Seiten integriert und die jeweiligen Grenzen eingesetzt, folgt:

$$\int_{P(0)}^{P(R)} \frac{1}{P'} dP' = \frac{m\omega^2}{k_B T_0} \int_0^R R' dR' \quad (7.18)$$

$$\Rightarrow \ln(P(R)) - \ln(P_0) = \frac{m\omega^2 R^2}{2k_B T_0} \quad (7.19)$$

$$\Rightarrow P(v_D) = P_0 e^{\frac{m}{2k_B T_0} v_D^2}. \quad (7.20)$$

Im letzten Schritt wurde noch die Bahngeschwindigkeit der Düse  $v_D = \omega R$  eingesetzt,  $T_0$  bezeichnet die Temperatur des Rotors.

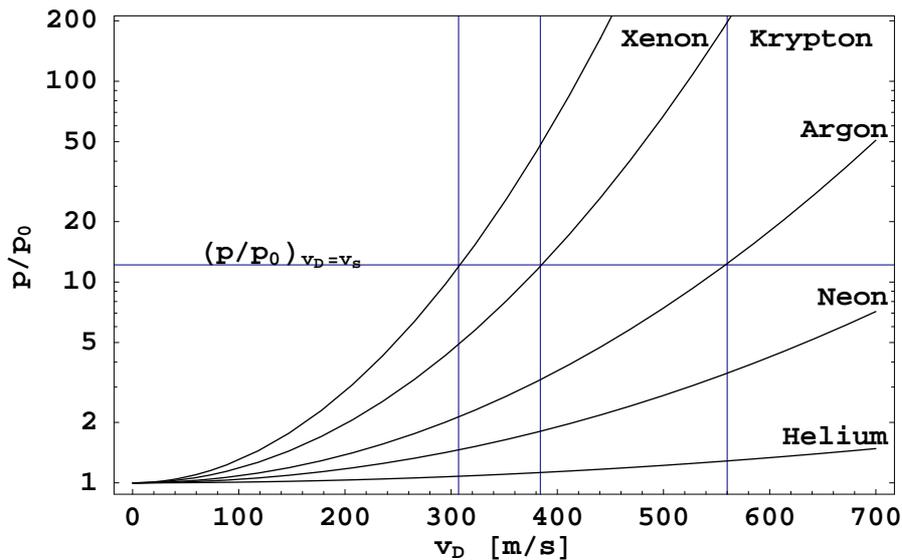


Abbildung 7.8: Drucküberhöhung an der Düse durch die Zentrifugalkraft für verschiedene Edelgase in Abhängigkeit von der Düsen­geschwindigkeit  $v_D$ . Die vertikalen Linien bezeichnen die wahrscheinlichsten Geschwindigkeiten für Xenon, Krypton und Argon bei einem Überschallstrahl nach Tab. 5.1. Die Drucküberhöhung bei den wahrscheinlichsten Geschwindigkeiten liegt jeweils beim 12.2-fachen des Einlassdrucks.

Ideale einatomige Gase haben bei Überschallexpansion eine wahrscheinlichste Geschwindigkeit  $v_S = \sqrt{\frac{5k_B T_0}{m}}$ . Setzt man dies als Düsen­geschwindigkeit  $v_D$  in Gl. (7.20) ein, so ergibt sich  $e^{\frac{m}{2k_B T_0} \frac{5k_B T_0}{m}} = e^{5/2} \approx 12.2$ . Das bedeutet, dass bei den Betriebsbedingungen, die nötig sind, um die expandierende Wolke eines Überschallstrahls zum Stillstand zu bringen, der Druck an der Düse um den Faktor 12.2 größer ist als im Zentrum des Rotors.

Abb. 7.8 zeigt die auf den Einlassdruck  $p_0$  normierte Drucküberhöhung für die Edelgase Helium bis Xenon. Gut zu erkennen ist, wie die Druckverläufe von Argon, Krypton und Xenon die Linie  $p/p_0 = 12.2$  bei den wahrscheinlichsten Geschwindigkeiten des jeweiligen Gases schneiden.

Für Molekülstrahlen kann Gl. (7.20) nur eine grobe Näherung darstellen, weil das ideale Gasgesetz streng genommen dann nicht mehr anwendbar ist. Da die Rotationsfreiheitsgrade der Moleküle bei der Verteilung der thermischen Energie eine Rolle spielen, ergibt sich für Moleküle auch eine andere wahrscheinlichste Geschwindigkeit als beim idealen Gas.

## 7.5 Geschwindigkeits- und Winkelverteilung einer rotierenden Düse

In Kapitel 5.3.1.1 wird ab Seite 97 die ruhende Überschallquelle behandelt. Davon ausgehend lässt sich die Geschwindigkeits- und Winkelverteilung einer bewegten Quelle ermitteln. Gl. (5.30) (= (7.21)) gilt im Ruhesystem der Düse. Für den in Abb. 7.9 gezeigten Fall, dass die Düse entgegen der Strahlrichtung bewegt wird, geschieht der Übergang ins Laborsystem einfach dadurch, dass von der tangential gerichteten Strömungsgeschwindigkeit  $v_S$  die Düsengeschwindigkeit  $v_D$  abgezogen wird. In der Geschwindigkeits- und Winkelverteilung

$$f(v, \theta) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{v^2}{v_w^3} e^{-\frac{v^2 + v_S^2 - 2v_S v \cos \theta}{v_w^2}} \quad (7.21)$$

wird also der Übergang  $\vec{v}_S \rightarrow \vec{v}_S - \vec{v}_D$  vollzogen. Damit ergibt sich die Geschwindigkeits- und Winkelverteilung eines Überschallstrahls aus einer entgegen der Strahlrichtung bewegten Düse schließlich zu

$$f(v, \theta) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{v^2}{v_w^3} e^{-\frac{v^2 + (v_S - v_D)^2 - 2(v_S - v_D)v \cos \theta}{v_w^2}} \quad (7.22)$$

$$\text{mit } v_S = \sqrt{\frac{2\kappa}{\kappa - 1} \frac{k_B T_0}{m} \left(1 - \left(\frac{p}{p_0}\right)^{\frac{\kappa - 1}{\kappa}}\right)} = \sqrt{\frac{2\kappa}{\kappa - 1} \frac{k_B (T_0 - T)}{m}} \quad (7.23)$$

$$\text{und } v_w = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}. \quad (7.24)$$

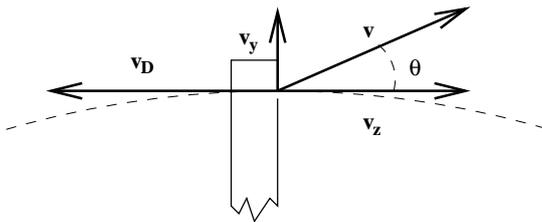


Abbildung 7.9: Zur Transformation vom Ruhesystem der Düse ins Laborsystem. Die  $x$ -Achse ragt in die Blattebene hinein, die  $y$ -Achse zeigt radial nach außen, die  $z$ -Achse weist in Strahlrichtung. Die Düse bewegt sich mit der Geschwindigkeit  $v_D$  entgegen der Strahlrichtung.

Dabei bezeichnen die mit 0 indizierten Größen ( $T_0, p_0$ ) jeweils Eigenschaften in der Quelle, die nicht indizierten Größen ( $T, p$ ) sind Eigenschaften des Strahls.  $\kappa$  ist der Adiabatenexponent aus Gl. (5.22), für einatomige Gase gilt  $\kappa = 5/3$ . Bei Gl. (7.23) ist nun allerdings Vorsicht geboten: Beim Berechnen der Strömungsgeschwindigkeit muss bei  $p_0$  die Drucküberhöhung an der Düse nach Gl. (7.20) berücksichtigt werden. Nach Gl. (7.23) und (5.23) profitiert die Kühlung des Strahls also geradezu von der Drucküberhöhung in der Düse aufgrund der Verwendung einer rotierenden Quelle. Damit sorgt die Rotation nicht nur über die Bahngeschwindigkeit der Düse für einen *langsamen* Strahl, sondern zusätzlich auch durch die Drucküberhöhung für einen *kalten* Strahl.

In Abb. 7.10 ist die Intensität der Geschwindigkeits- und Winkelverteilung eines überschallschnellen Argonstrahls nach Gl. (7.22) für eine Strahltemperatur von 10 K und einer Düsenterperatur von 300 K bei verschiedenen Geschwindigkeiten der Düse gezeigt.

In der linken Spalte beträgt die Düsengeschwindigkeit 549 m/s, was nach Gl. (7.23) gerade der Strömungsgeschwindigkeit des Strahls aus der Düse bei einer Strahltemperatur von 10 K entspricht. Dieser Wert unterscheidet sich von dem in Tabelle 5.1 genannten Wert von 558 m/s, da letzterer streng nur für eine

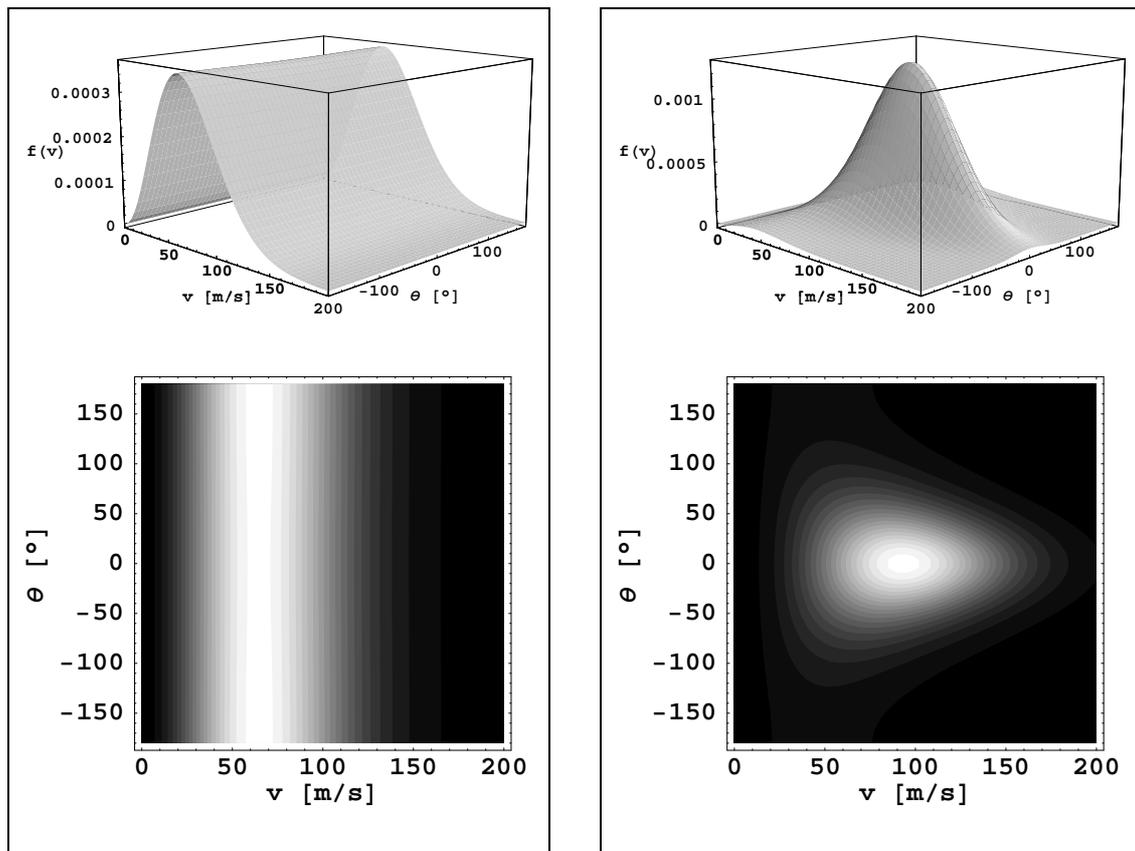


Abbildung 7.10: Intensität der Winkel- und Geschwindigkeitsverteilung für einen Argonstrahl mit Überschallcharakter aus einer bewegten Düse. Links ist die Situation für eine Düsengeschwindigkeit von 549 m/s gezeigt, rechts für eine Geschwindigkeit der Düse von 500 m/s. Die oberen Plots bieten eine dreidimensionale Ansicht, in den unteren ist jeweils der gleiche Verlauf als Kontur-Plot gezeigt. In der Winkelskala bedeutet  $\theta = 0^\circ$  die Vorwärtsrichtung bezüglich des Strahls,  $\pm 180^\circ$  bezeichnet die Rückwärtsrichtung.

Strahltemperatur von 0 K gilt. In diesem Fall wird also die Strömungsgeschwindigkeit gerade von der Düsengeschwindigkeit kompensiert. Für die aus der Düse strömenden Volumenelemente bedeutet das, dass ihr Schwerpunkt im Laborsystem gerade zum Stillstand kommt. Hier expandieren sie also isotrop. Das macht sich dadurch bemerkbar, dass die Intensität nicht mehr winkelabhängig ist.

Die rechte Spalte zeigt die Situation für eine Düsengeschwindigkeit von 500 m/s. Deutlich zu erkennen ist, dass hier noch eine starke Winkelabhängigkeit vorliegt. Je größer die Strömungsgeschwindigkeit des Strahls im Laborsystem ist, um so schmaler wird die Winkelverteilung.

In Abb. 7.11 sind Geschwindigkeitsverteilungen überschallschneller Argonstrahlen in Vorwärtsrichtung bei verschiedenen Düsengeschwindigkeiten und Strahltemperaturen gezeigt. In allen Fällen beträgt die Düsentemperatur 300 K. Um bei dieser Düsentemperatur eine Strahltemperatur von 10 K zu erreichen ist ein Expansionsverhältnis  $p/p_0$  von  $2.0 \cdot 10^{-4}$  erforderlich, für eine Strahltemperatur von 1 K muss das Expansionsverhältnis  $6.4 \cdot 10^{-7}$  betragen. Die Kurven für  $T = 10$  K entsprechen Schnitten in Abb. 7.10 beim Winkel  $\theta = 0^\circ$ .

Die beiden Verteilungen im linken Bild zeigen wie in Abb. 7.10 den Fall, dass für einen 10 K kalten Strahl die Strömungsgeschwindigkeit gerade der Düsengeschwindigkeit entspricht, die aus der Düse strömende Wolke also im Laborsystem in Ruhe ist und isotrop expandiert. Für eine Maxwell-Boltzmann-Verteilung – die für die isotrope Expansion der Volumenelemente verantwortlich ist – beträgt bei einer Temperatur von 10 K die wahrscheinlichste Geschwindigkeit 64 m/s. Tatsächlich liegt in Abb. 7.11 das Maximum der Verteilung für  $T = 10$  K zwischen 60 und 70 m/s, und deren Form sieht Maxwell-Boltzmann-ähnlich aus. Die

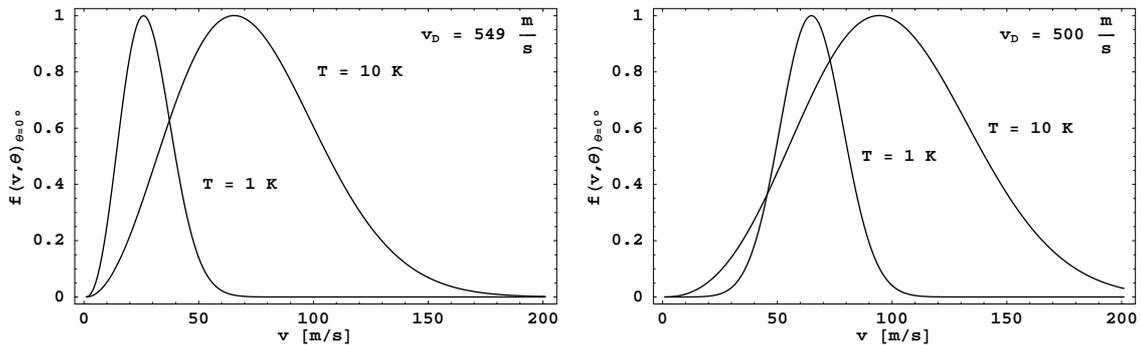


Abbildung 7.11: Geschwindigkeitsverteilungen für einen Argonstrahl mit Überschallcharakter aus einer bewegten Düse in Vorwärtsrichtung ( $\theta = 0^\circ$ ) für Strahltemperaturen von 1 K und 10 K, Düsentemperatur 300 K. Im Gegensatz zu Abb. 7.10 wurden beide Verteilungen so umskaliert, dass die Maxima bei Eins liegen. Dies geschah, um bei den Verteilungen mit verschiedenen Strahltemperaturen die Position und die Breite miteinander vergleichen zu können. Links ist die Situation für eine Düsentemperatur von 549 m/s gezeigt, rechts für eine Geschwindigkeit der Düse von 500 m/s. Die Verteilungen für 10 K entsprechen Schnitten durch die in Abb. 7.10 gezeigten Verteilungen bei  $\theta = 0^\circ$ .

Verteilung für den 1 K kalten Strahl dagegen sieht gaußförmig aus und die wahrscheinlichste Geschwindigkeit entspricht nicht dem Wert von 20 m/s, wie man ihn nach Maxwell-Boltzmann für einen solchen Strahl erwarten würde. Das ist auch nicht verwunderlich, denn beim 1 K kalten Strahl ist die Strömungsgeschwindigkeit 557 m/s. Das bedeutet, dass die Düsentemperatur also noch unter der Strömungsgeschwindigkeit liegt. Damit erfolgt die Expansion im Laborsystem noch nicht völlig isotrop. Weiterhin ist zu erkennen, dass nur bei niedriger Strahltemperatur der Anteil an Intensität bei niedrigen Teilchengeschwindigkeiten im Vergleich zur Gesamtintensität bedeutend wird. Ausreichend langsame Strahlteilchen lassen sich also mit kalten Strahlen erzeugen, die eine gute Überschallcharakteristik aufweisen.

Im rechten Bild ist eine Situation dargestellt, in der die Düsentemperatur  $v_D = 500$  m/s in jedem Fall geringer als die entsprechende Strömungsgeschwindigkeit ist. Beide Verteilungen sind deutlich gaußförmiger als im linken Fall und die wahrscheinlichsten Geschwindigkeiten sind zu höheren Werten hin verschoben.

Die in Abb. 7.11 gezeigten Geschwindigkeitsverteilungen wurden umskaliert, um den direkten Vergleich bezüglich Form, Lage und Breite zu ermöglichen. Die eigentliche Normierung der Verteilungsfunktion ist derart, dass die Integration über den gesamten Raum und Geschwindigkeiten von 0 bis  $\infty$  als Ergebnis gerade Eins liefert. Die Gesamtintensität wird entsprechend umverteilt, wenn an den einzelnen Parametern gedreht wird:

- Wird die Winkelverteilung breiter, so reduziert sich die Intensität pro Raumwinkelelement. Der Vergleich der Skalen von Abb. 5.13 und der beiden dreidimensionalen Darstellungen aus Abb. 7.10 verdeutlicht dies. In Abb. 5.13 deckt die Winkelskala gerade einmal  $24^\circ$  ab, in Abb. 7.10 hingegen sind es  $360^\circ$ .
- Bei breiterer Geschwindigkeitsverteilung wird die Intensität pro Geschwindigkeitsintervall geringer.

## 7.6 Messungen an der rotierenden Quelle

Die Geschwindigkeitsverteilung eines Atom- oder Molekülstrahls kann durch Messung einer Flugzeitverteilung ermittelt werden. In diesem Abschnitt werden diese Messungen vorgestellt und die Weiterverarbeitung der Messdaten exemplarisch an einigen Beispielen geschildert. Abschließend werden die Ergebnisse diskutiert.

In Abb. 7.12 ist ein Schnitt durch die Quellkammer des verwendeten Aufbaus zu sehen. Bei den Messungen dreht sich der Rotor in dieser Ansicht im Gegenuhrzeigersinn, der Strahl verlässt den Rotor entgegengesetzt zu dessen Bahngeschwindigkeit.

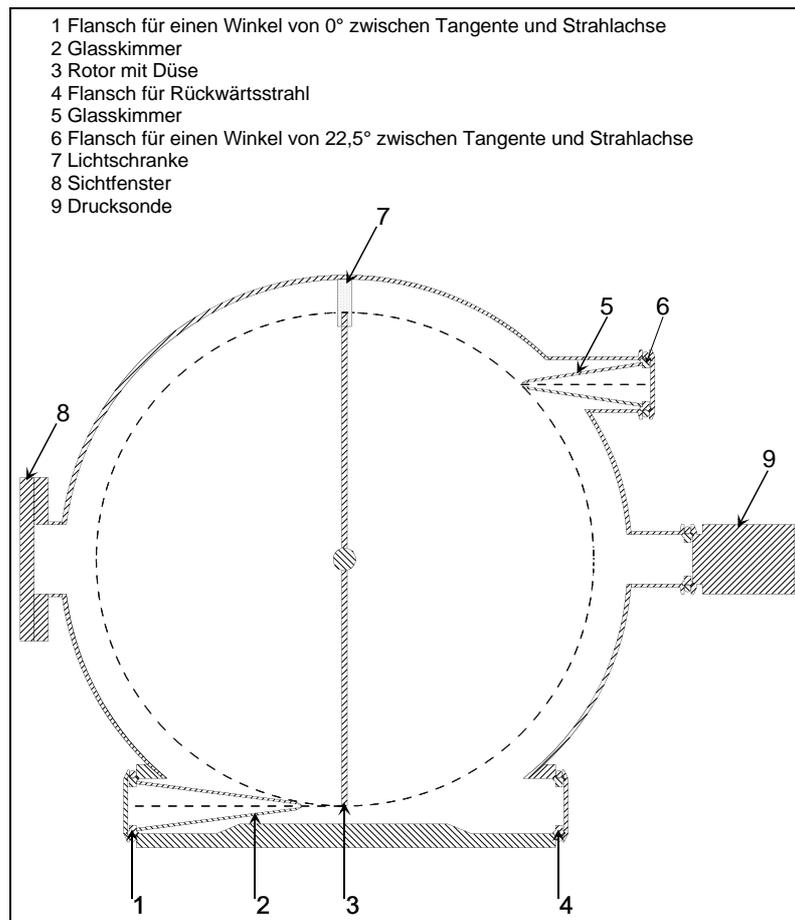


Abbildung 7.12: Schnitt durch die Quellkammer in der Aufsicht.

Der Strahl wird durch den im unteren Teil der Abbildung mit „2“ bezeichneten Glasskimmer geformt. Der Winkel zwischen der Strahlachse und der Tangente an den Kreis, auf dem sich die Düse bewegt (als gestrichelter Kreis markiert), beträgt in diesem Fall  $0^\circ$ . Für die Geschwindigkeits- und Winkelverteilung aus Gl. (7.22) bedeutet das eine Einschränkung auf die Richtung  $\theta = 0^\circ$ .

Bei jeder vollen Umdrehung passiert der Rotor wegen seiner symmetrischen Ausmaße zweimal eine Lichtschranke (in Abb. 7.12 mit „7“ bezeichnet), die einen Trigger-Impuls als Zeitnullpunkt liefert. Die Position der Lichtschranke wurde so gewählt, dass sich zum Zeitpunkt des Pulses die Düse genau vor dem Skimmer befindet. Da der Rotor nur eine Düsenöffnung besitzt, steht die Düse allerdings nur bei jedem zweiten Puls vor dem Skimmer.

Abbildung 7.13 zeigt einen seitlichen Schnitt durch den gesamten Quellenteststand. Der Strahl bewegt sich in der gezeigten Ansicht von links nach rechts. Das Massenspektrometer in der Detektorsektion ist senkrecht zur Strahlrichtung angebracht und ragt mit seinem Ionisationsvolumen in den Strahl hinein. Dadurch wird erreicht, dass im Wesentlichen nur ionisierte Strahlteilchen zum Channeltron gelangen. Am Ende der Detektorkammer befindet sich eine kleine Turbopumpe, die quasi als „beam dump“ fungiert. Diese Pumpe ist in der Abb. mit „D“ bezeichnet. Sie gewährleistet, dass Strahlteilchen, die nicht ionisiert werden, schnell und effektiv abgepumpt werden können.

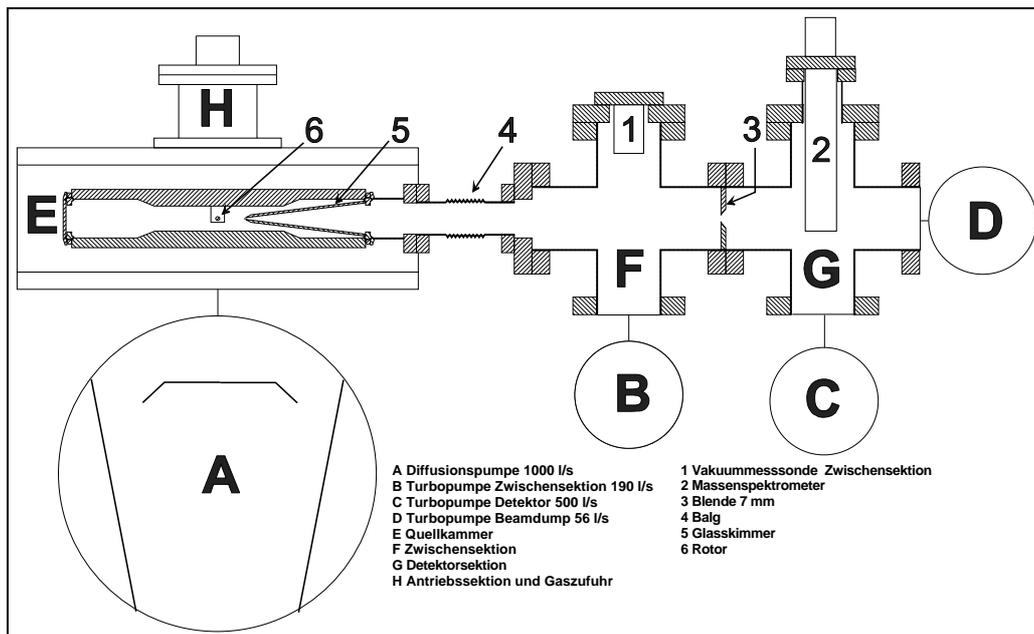


Abbildung 7.13: Seitlicher Schnitt durch den Quellenteststand entlang der Strahlachse bei den Messungen mit der rotierenden Quelle.

### 7.6.1 Aufnahme der Messwerte

Die Aufnahme der Flugzeitspektren geschieht wie bei den Tests der DC-Quelle für atomaren Wasserstoff aus Kapitel 6 mit Hilfe eines Vielkanalzählers.

Die Messungen mit der rotierenden Quelle wurden alle im „break sweep“-Modus durchgeführt. In dieser Betriebsart wird, unabhängig vom Kanal, in den gerade gezählt wird, bei jedem Triggerpuls wieder beim ersten Kanal begonnen. In Abb. 7.14 ist ein solches Flugzeitspektrum von  $^{131}\text{Xe}$  gezeigt, das bei einer Triggerfrequenz von 185 Hz aufgenommen wurde. Da die Triggerpulse also im Abstand von etwa 5.4 ms aufeinander folgen, bricht das Spektrum nach dieser Zeit ab. Die gesamte Messung besteht aus 1024 Kanälen, die „dwell time“ pro Kanal beträgt bei dieser Messung  $6.25 \mu\text{s}$ , die gesamte Messung erstreckt sich damit maximal über 6.4 ms.

Für den vergleichsweise hohen Untergrund<sup>2</sup> von etwa 600 Zählern, auf dem das Signal mit einem Hub von knapp 450 Zählern sitzt, gibt es zwei Gründe:

- Da sich die Düse nur bei jedem zweiten Mess-Durchlauf vor dem Skimmer befindet, wird alternierend der reine Untergrund und Signal plus Untergrund gemessen. Im gezeigten Spektrum ist der Untergrund also doppelt gewichtet.
- Das „Öffnungsverhältnis“ der Düse<sup>3</sup> beträgt beim verwendeten Aufbau etwa 0.9%, wodurch der Untergrund in der Quellkammer beträchtlich erhöht wird. Dieses Untergrundgas kann bis in den Detektor diffundieren und verschlechtert somit zusätzlich das Signal-Untergrund-Verhältnis.

Der Vorteil der „break sweep“-Methode liegt darin, dass sich die Signalintensität in einem einzigen Peak sammelt und dass bei jedem Triggerpuls ein neuer Messdurchgang gestartet wird. Dies erweist sich dann von Vorteil, wenn bei laufendem Rotor justiert werden muss.<sup>4</sup>

<sup>2</sup>In der natürlichen Atmosphäre hat Xenon eine Häufigkeit von 0.05 ppm [20].

<sup>3</sup>Gemeint ist damit das Verhältnis des Winkelbereichs, unter dem die Düse vor dem Skimmer freie Sicht auf den Detektor hat, zu einer ganzen Umdrehung von  $360^\circ$ . Der betreffende Winkelbereich entspricht dem der Öffnungsfunktion.

<sup>4</sup>Bei den in Abschnitt 7.7 genannten Rückwärtsmessungen ist das beispielsweise der Fall.

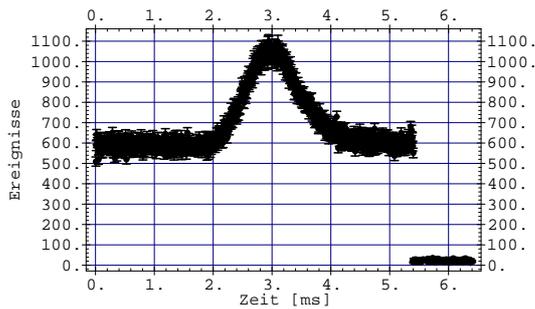


Abbildung 7.14: Rohdaten eines Flugzeitspektrums von  $^{131}\text{Xe}$  bei einer Düsenfrequenz von 92.5 Hz, was einer Düsen­geschwindigkeit von etwa 103 m/s entgegen der Strahlrichtung entspricht. Die Triggerpulse werden mit einer Frequenz von 185 Hz erzeugt, weshalb das Spektrum nach etwa 5.4 ms abbricht.

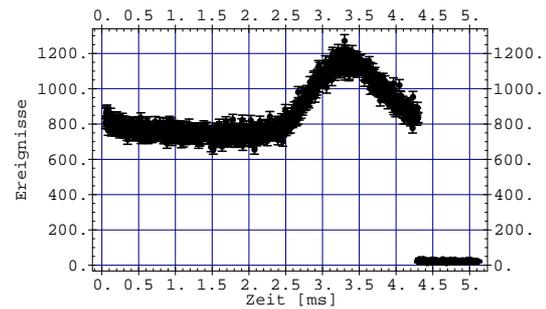


Abbildung 7.15: Flugzeitspektrum von Xenon bei un­gefähr 116 Hz Düsenfrequenz, die entsprechende Düsen­geschwindigkeit liegt bei etwa 130 m/s. Die Trigger­frequenz beträgt etwa 232 Hz, nach 4.3 ms wird wieder bei 0 ms begonnen. Das langsame Ende des Spektrums liegt zeitlich scheinbar vor den schnellen Anteilen.

Da mit zunehmender Rotorfrequenz die Strömungsgeschwindigkeit  $v_S$  des Strahls im Laborsystem abnimmt, wird das in Abb. 7.14 gezeigte Spektrum für höhere Rotorfrequenzen nach rechts wandern. Abb. 7.15 zeigt eine solche Situation für eine Düsen­geschwindigkeit von 130 m/s. Gegenüber Abb. 7.14 ist die wahrscheinlichste Flugzeit von etwa 3 ms nach 3.25 ms verschoben, der Strahl wird also tatsächlich langsamer. Die langsamen Anteile des Spektrums werden rechts abgeschnitten und wandern links bei  $t = 0$  ms wieder ins Bild. Im Extremfall kann dieser sog. „wrap around“-Effekt sogar mehrfach vorkommen. Eine kurze Abschätzung am Beispiel von Argon wird im nächsten Abschnitt gegeben.

Wie außerdem in Abb. 7.15 zu erkennen ist, hat sich das Verhältnis von Signal zu Untergrund weiter verschlechtert. Der Untergrund beträgt nun fast 800 Zähler, das Signal hat noch einen Hub von etwa 450 Zählern. Zu erklären ist dies durch die Drucküberhöhung an der Düse, die nach Gl. (7.20) von der Düsen­geschwindigkeit abhängt. Der erhöhte Druck an der Düse bewirkt schließlich nach Gl. (7.23) eine erhöhte Strömungsgeschwindigkeit des Gases aus der Düse. Damit erhöht sich auch der Teilchenfluss durch die Düse und so kommt es zu einem erhöhten Untergrund in der Quellkammer. Dies führt trotz konstanten Öffnungsverhältnis zu einer Zunahme des Untergrunds in der Detektorkammer. Gleichzeitig wird durch den erhöhten Hintergrundsdruck in der Quellkammer der eigentliche Strahl durch vermehrte Stöße mit Restgas­teilchen abgeschwächt.

Außerdem wird die maximale Länge eines Spektrums umso kürzer, je höher die Winkelgeschwindigkeit des Rotors ist. Auch dies zeigt der Vergleich der beiden Flugzeitspektren in den Abbildungen 7.14 und 7.15. Während das erste Spektrum noch etwa 5.4 ms lang ist, erstreckt sich das zweite Spektrum nur noch über 4.3 ms.<sup>5</sup>

Solange langsame und schnelle Anteile des Flugzeitspektrums nicht vermischt werden, lässt sich die ursprüngliche Form des Spektrums wieder herstellen. Allerdings zeigt sich gerade im Fall von Argon als Strahlgas, bei dem man wegen der hohen Strömungsgeschwindigkeit (siehe Tab. 5.1) auf entsprechend hohe Winkelgeschwindigkeiten angewiesen ist um einen langsamen Strahl zu erzeugen, dass der „break sweep“-Modus Messungen ab einer bestimmten Winkelgeschwindigkeit unmöglich macht. In Zukunft bietet es sich an, statt dessen nach dem Justieren die eigentlichen Messungen im „complete sweep“-Modus durchzuführen. Dadurch wird eine vorzeitige Überlagerung von langsamen und schnellen Anteilen der Flugzeitspektren vermieden, allerdings verzichtet man auf einen Teil der Intensität.

## 7.6.2 Weiterverarbeitung der Daten

Dieser Abschnitt erläutert, welche Schritte angewandt werden müssen, um aus den gemessenen Rohdaten der Flugzeitspektren die Strömungsgeschwindigkeit und die Strahltemperatur zu erhalten.

<sup>5</sup>Die unterschiedliche Maximallänge beider Spektren beruht auf der Verwendung unterschiedlicher „dwell“-Zeiten.

### 7.6.2.1 Die Fitfunktion

Da anstelle von Geschwindigkeitsverteilungen nur Flugzeitverteilungen gemessen werden können, muss die Geschwindigkeits- und Winkelverteilung einer bewegten Düse noch in eine entsprechende Flugzeitverteilung umgerechnet werden, um sie an die Daten fitten zu können.<sup>6</sup> Nach Gl. (7.22) gilt für die Geschwindigkeits- und Winkelverteilung

$$f(v, \theta) dv \propto \frac{v^2}{v_w^3} e^{-\frac{v^2 + (v_S - v_D)^2 - 2(v_S - v_D)v \cos \theta}{v_w^2}} dv.$$

Mit Hilfe von  $v = s/t$  und  $dv = -(s/t^2) dt$  lässt sich diese Proportionalität von Geschwindigkeiten in Flugzeiten umrechnen:

$$f(t, \theta) dt \propto \left(\frac{m}{2k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{s^3}{t^4} e^{-\frac{m}{2k_B T} \left(\frac{s^2}{t^2} + (v_S - v_D)^2 - 2(v_S - v_D) \frac{s}{t} \cos \theta\right)} dt$$

mit  $v_S$  nach Gl. (7.23).  $v_w$  wurde durch  $\sqrt{2k_B T/m}$  ersetzt, wobei  $T$  die Strahltemperatur darstellt. Da nur unter dem Winkel  $\theta = 0^\circ$  gemessen wurde, die Strahlachse also die Tangente an den Kreis darstellt, auf dem sich die Düse bewegt, lässt sich die Fitfunktion noch weiter vereinfachen:

$$f(t) dt \propto \left(\frac{m}{2k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{s^3}{t^4} e^{-\frac{m}{2k_B T} \left(\frac{s}{t} + v_S - v_D\right)^2} dt \quad (7.25)$$

mit  $v_S = \sqrt{\frac{5k_B T_0}{m} \left(1 - \left(\frac{p}{p_0}\right)^{\frac{\kappa-1}{\kappa}}\right)} = \sqrt{\frac{5k_B (T_0 - T)}{m}}$ .

Dabei wurde berücksichtigt, dass nur mit atomaren Strahlteilchen gemessen wurde und daher bei  $v_S$  der Adiabatenexponent  $\kappa = 5/3$  für ideale einatomige Gase eingesetzt werden kann.

Bevor jedoch die Fitfunktion an die gemessenen Daten angepasst werden kann, sind noch einige Dinge zu berücksichtigen. Dazu zählt der schon erwähnte „wrap around“-Effekt aufgrund der „break sweep“-Methode und die Tatsache, dass die von der Quelle ausgehenden Pulse keine Delta-Peaks darstellen.

### 7.6.2.2 Die Öffnungsfunktion

Da Skimmer und Detektor einen Raumwinkel bilden, von dem aus Strahlteilchen von der Quellkammer auf gerader Linie in den Detektor gelangen können, besitzen die Strahlpulse schon bei ihrer Entstehung eine endliche Länge. Aufgrund der Geschwindigkeitsverteilung laufen diese Strahlpulse auf dem Weg zum Detektor dispersiv auseinander. Für das gemessene Flugzeitspektrum bedeutet das, dass es nicht nur Information über die Geschwindigkeitsverteilung der Teilchen im Strahl enthält. Vielmehr stellt das gemessene Signal am Detektor die Faltung der eigentlichen Flugzeitverteilung mit der Öffnungsfunktion der Düse dar:

$$F(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} S(t) f(t - \tau) dt. \quad (7.26)$$

Um die gemessenen Spektren vom Einfluss der Öffnungsfunktion zu befreien, kann man sich den Faltungssatz für die Fouriertransformation zunutze machen [60]:  $\tilde{F} = (\tilde{S} \star \tilde{f})$ , die Fouriertransformierte der Faltung  $F$  ist identisch mit dem Produkt  $\tilde{S} \cdot \tilde{f}$  der Fouriertransformierten von  $S$  und  $f$ . Dazu ist allerdings

<sup>6</sup>Eine Umrechnung der gemessenen Flugzeitspektren in Geschwindigkeitsspektren empfiehlt sich nicht. Wegen des nichtlinearen Zusammenhangs zwischen Flugzeit und Geschwindigkeit wird statistisches Rauschen, das den Messdaten überlagert ist, beim Umrechnen verstärkt.

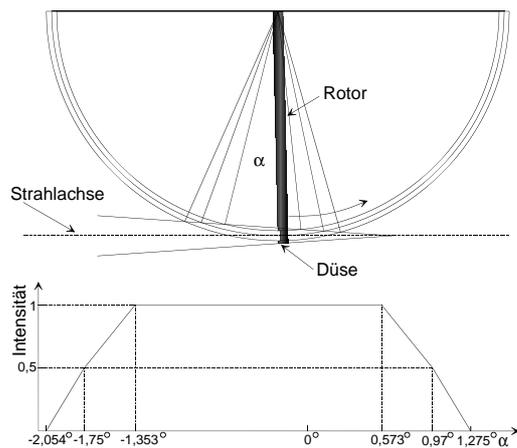


Abbildung 7.16: Die Düse durchfliegt einen Raumwinkel, von dem aus Teilchen von der Düse zum Detektor gelangen können. Dieser Raumwinkel wird durch die Positionen und lateralen Abmessungen von Skimmer und Ionisationsvolumen des Detektors festgelegt. Im oberen Teil ist das Problem schematisch dargestellt für den Fall, dass die Strahlachse auf der Tangenten des Kreises liegt, auf dem sich die Düse bewegt. Der eingezeichnete Öffnungswinkel ergibt sich, wenn statt des Detektor-Ionisationsvolumens die Detektorblende zur Bestimmung des Raumwinkels herangezogen wird. Darunter ist die daraus abgeleitete Rotoröffnungsfunktion zu sehen.

die Kenntnis der Öffnungsfunktion notwendig. Dann lässt sich der Einfluss der Öffnungsfunktion einfach durch eine Division beseitigen, falls die Fouriertransformierte der Öffnungsfunktion nirgends verschwindet:  $\tilde{f} = \frac{\tilde{F}}{\tilde{S}}$ . Das bereinigte Spektrum erhält man dann durch Rücktransformation von  $\tilde{F}/\tilde{S}$ .

Im oberen Teil von Abb. 7.16 ist die Situation zur Abschätzung einer Rotoröffnungsfunktion schematisch gezeigt. Der konisch zulaufende Bereich stellt den durch Skimmer und Detektorblende vorgegebenen Raumwinkel dar. Im unteren Teil ist die daraus abgeschätzte Öffnungsfunktion dargestellt.

Im Falle einer punktförmigen Düse wäre die Öffnungsfunktion gerade ein Rechteckpuls, der bei  $-2,054^\circ$  von Null auf Eins ansteigt, und bei  $1,275^\circ$  wieder auf Null abfällt. Da die Düse aber eine endliche Ausdehnung hat, steigt die Öffnungsfunktion nur allmählich auf Eins an. Ihre Breite und Form hängt empfindlich von der Rotorlänge und der Ausrichtung der Strahlachse auf die Tangente an den Düsenkreis ab. Die im Experiment verwendete Düse hat einen Durchmesser von etwa  $50 \mu\text{m}$ , für eine genügend genaue Bestimmung der Öffnungsfunktion müsste die Rotorlänge mit einer Genauigkeit von  $10^{-6}$  gemessen werden können, also auf etwa  $1 \mu\text{m}$  genau. Der Winkel zwischen Strahlachse und Tangente lässt sich ebenfalls nur grob abschätzen. Aus diesem Grund kann die in der Abb. angegebene Öffnungsfunktion nur eine grobe Näherung an die tatsächlich vorliegende Situation darstellen. Wie sich gleich herausstellen wird, ist die gezeigte Öffnungsfunktion mit ihrer Breite von etwa  $3,3^\circ$  tatsächlich zu schmal.

Abb. 7.17 zeigt den Einfluss der Rotorlänge auf die Öffnungsfunktion und damit auch auf die gemessenen Spektren. In der linken Hälfte der Abbildung sind exemplarisch drei verschiedene Situationen dargestellt. Links ist schematisch die entsprechende Geometrie gezeigt, rechts der zeitliche Verlauf, der sich bei dieser Geometrie ergibt, wenn die Düse über das Raumwinkelelement streicht, von dem aus der Detektor zu sehen ist.

In der obersten Anordnung liegt die Strahlachse genau auf der Tangente zum Düsenkreis, das Spektrum besteht in diesem Fall aus einem einzigen Peak. Die mittlere Anordnung zeigt die Situation, wenn die Strahlachse keinen Berührungspunkt mit dem Kreis hat, auf dem sich die Düse bewegt. Im gezeigten Fall ergibt sich kein Flugzeitspektrum, da die Düse zu keinem Zeitpunkt direkte Sicht auf den Detektor hat. Bis zu einem gewissen Grad kann ein zu kurzer Rotor bei der Strahljustage noch ausgeglichen werden. In der untersten Anordnung schneidet die Strahlachse den Düsenkreis an zwei Punkten, wobei die Düsenfläche sich während der Öffnungsphase nur teilweise vollständig im Raumwinkelelement von Skimmer und Detektor befindet. Dadurch entsteht eine Doppelhöckerstruktur im gemessenen Flugzeitspektrum. Auch diese Situation lässt sich in gewissem Rahmen durch entsprechende Justage der Strahlachse noch bereinigen.

Die Messkurve in der rechten Hälfte der Abb. 7.17 verdeutlicht den Einfluss der Rotorlänge auf das Strahlensignal. Es ist tatsächlich eine Doppelhöckerstruktur zu erkennen, wie man sie für den Fall erwartet, wenn die Strahlachse eine Sekante an den Düsenkreis bildet. Das Spektrum wurde bei einer Triggerfrequenz von  $7,4 \text{ Hz}$  aufgenommen, das entspricht einer Düsengeschwindigkeit von etwa  $4 \text{ m/s}$ .

Da der Quellkammerdruck bei der Aufnahme des gezeigten Spektrums  $1,5 \cdot 10^{-4} \text{ mbar}$  betrug, während der Düsendruck bei  $270 \text{ mbar}$  lag, lässt sich mit Hilfe von Gl. (5.23) und der Raumtemperatur  $T_0 = 300 \text{ K}$  die

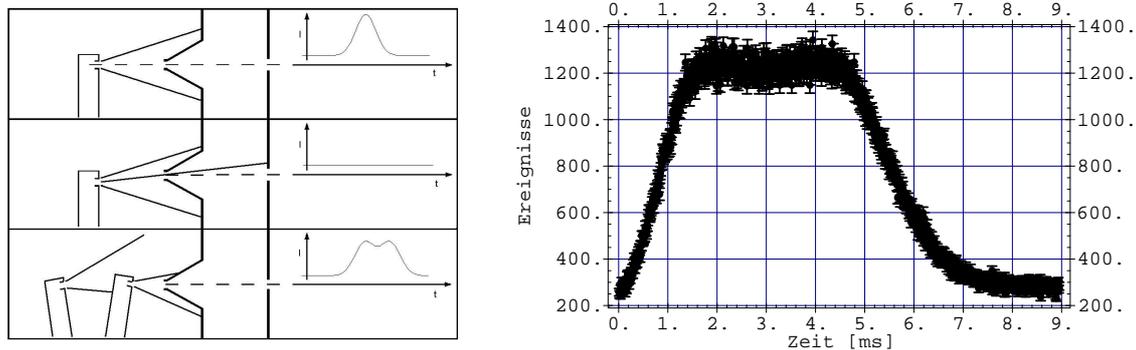


Abbildung 7.17: Einfluss der Rotorlänge auf die gemessenen Flugzeitspektren. Links sind schematisch die Situationen bei passender Rotorlänge (oben), bei zu kurzem (Mitte) und zu langem Rotor (unten) zu sehen. Rechts sind die Rohdaten eines gemessenen Flugzeitspektrums bei einer Triggerfrequenz von 7.4 Hz gezeigt. Der Verlauf zeigt deutlich eine Doppelhückerstruktur, woraus zu schließen ist, dass die Strahlachse den Kreis, auf dem sich die Düse bewegt, nicht tangiert, sondern schneidet. Anhand solcher Spektren wurde die Justage der Maschine überprüft und gegebenenfalls korrigiert.

Strahltemperatur zu etwa 1 K abschätzen. Unter diesen Umständen beträgt die Breite der Flugzeitverteilung des Strahls etwa 2.7% der Breite der hier gemessenen Verteilung. Bei der vorliegenden Düsenfrequenz von 3.7 Hz hätte die Öffnungsfunktion nach Abb. 7.16 eine Breite von etwa 2.5 ms. Nach Abb. 7.17 wurde eine mehr als doppelt so breite Verteilung gemessen. Diese Diskrepanz lässt sich nicht durch den Einfluss der reinen Flugzeitverteilung erklären<sup>7</sup>, deren Breite vom Expansionsverhältnis abhängt. Die Ursache für die zu schmal angenommene Öffnungsfunktion ist in der Tatsache zu suchen, dass unter den gegebenen Umständen<sup>8</sup> der Raumwinkel nicht durch Skimmer und Detektorblende, sondern vielmehr durch Skimmer und Ionisationsvolumen des Detektors bestimmt wird.

Bei niedrigen Rotordrehzahlen wird der Raumwinkel, unter dem der Detektor von der Quellkammer aus zu sehen ist, von der Düse langsam durchquert. Die Öffnungsfunktion ist in der Zeitdomäne dann sehr breit und ihr Einfluss auf die gemessenen Spektren sehr dominant. Mit zunehmender Drehzahl wird sie immer schmaler, um bei hohen Drehzahlen der Idealform eines Delta-Peaks sehr nahe zu kommen. Je höher die Drehzahl des Rotors, um so geringer wird der Einfluss der Öffnungsfunktion. Die gemessenen Spektren werden nun von der Flugzeitverteilung dominiert.

Die in Abb. 7.17 gezeigte Verteilung ist also sicherlich von der Öffnungsfunktion dominiert. Es bietet sich daher an, die Öffnungsfunktion entsprechend zu korrigieren.

### 7.6.2.3 Einfluss der „break sweep“-Methode auf die Spektren

Da alle Messungen mit der rotierenden Quelle im „break sweep“-Modus aufgenommen wurden, muss bei der Auswertung der im vorigen Abschnitt genannte „wrap around“-Effekt entsprechend berücksichtigt werden. Da die Triggerfrequenz bekannt ist, lässt sich daraus die Länge des eigentlichen Spektrums berechnen, die Triggerperiode. Anhand der Düsen Geschwindigkeit, die von der Triggerfrequenz abhängt, kann die Strömungsgeschwindigkeit im Laborsystem abgeschätzt und so eine erwartete Flugzeit bestimmt werden. Der ganzzahlige Quotient aus erwarteter Flugzeit und Triggerperiode gibt gerade die Anzahl von Triggerperioden an, um die das Flugzeitspektrum zu größeren Zeiten hin verschoben werden muss. Langsame Anteile des Spektrums, die sich nach dieser Verschiebung eventuell noch vor der wahrscheinlichsten Flugzeit befinden, werden um eine weitere Triggerperiode verschoben. Erst danach liegt das Spektrum in einer Form vor, an die eine Fitfunktion nach Gl. (7.25) angepasst werden kann.

<sup>7</sup>Selbst bei einer Strahltemperatur von 30 K macht die Breite der Flugzeitverteilung nur etwa 13% der hier gemessenen Breite aus.

<sup>8</sup>Hier spielen vor allem der kurze Abstand zwischen Detektor und Quelle sowie der große Durchmesser der Detektorblende eine entscheidende Rolle.

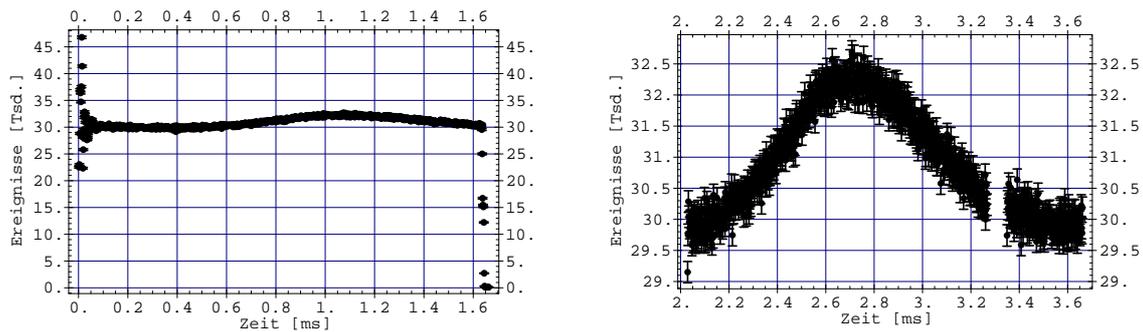


Abbildung 7.18: Die linke Abbildung zeigt die Rohdaten einer Messung mit Argon bei einer Triggerfrequenz von 612 Hz. Die Pulse am Anfang der Messung stammen von der Triggerelektronik. Sie haben mit dem eigentlichen Strahlsignal nichts zu tun und tauchen nur bei sehr hohen Drehzahlen des Rotors auf. Die Rohdaten verdeutlichen noch einmal die Verschlechterung des Signal-Rausch-Verhältnisses bei hohen Drehzahlen. Rechts ist das gleiche Flugzeitspektrum zu sehen, nachdem der „wrap around“-Effekt bereinigt wurde, wie im Text beschrieben.

In Abb. 7.18 ist eine solche Situation gezeigt. Bei einer Triggerfrequenz von beispielsweise 612 Hz haben die Spektren eine Länge von 1.63 ms. Die Düsendeschwindigkeit beträgt dann etwa 342 m/s. Nimmt man die Strömungsgeschwindigkeit aus der Düse nach Tab. 5.1 zu 558 m/s an, so beträgt die Strahlgeschwindigkeit im Laborsystem noch etwa 216 m/s. Bei einer mittleren Flugstrecke von 0.6 m dauert es ungefähr 2.8 ms, bis das Strahlpaket im Detektor ankommt. In diesem Fall beträgt die Flugzeit das 1.7-fache der Spektrumlänge. Der „wrap around“-Effekt tritt also einmal komplett auf. Die wahrscheinlichste Geschwindigkeit scheint bei 1.1 ms zu liegen. Zusätzlich befinden sich am linken Rand des Spektrums noch langsame Anteile des Flugzeitspektrums.

Bei hohen Rotordrehzahlen weisen die Rohspektren in den ersten Kanälen deutliche Pulse auf, die, wie sich herausstellte, von der Triggerelektronik erzeugt werden. Diese Pulse haben mit den eigentlichen Flugzeitspektren nichts zu tun und wurden deshalb bei der Anpassung der Fitfunktion nach Gl. (7.25) nicht berücksichtigt. In Abb. 7.18 zeigen die Rohdaten links am Beginn des Spektrums solche Pulse. Rechts sind die aus den Rohdaten unter Berücksichtigung des „wrap around“-Effekts gewonnenen Daten zu sehen, an die die Flugzeitverteilung (7.25) gefittet wurde. Zu beachten ist die veränderte Zeitskala gegenüber den Rohdaten. Die Lücke im langsamen Teil des Spektrums kennzeichnet die Position der nicht berücksichtigten Pulse am Anfang des Rohdatenspektrums links. Hier wurde also nach dem Verschieben des gesamten Spektrums der langsame Anteil des Spektrums, der am Beginn des Rohdatenspektrums zu finden ist, noch um eine weitere komplette Triggerperiode verschoben.

### 7.6.3 Ergebnisse

Mit dem Rotor wurden Flugzeitspektren unter Verwendung von Argon, Krypton und Xenon aufgenommen. Die Rotorgeschwindigkeit variierte dabei über einen weiten Bereich: Es wurden einerseits Messungen mit sehr langsamem Rotor durchgeführt (siehe beispielsweise Abb. 7.17), um die Richtigkeit der Abschätzung für die Rotoröffnungsfunktion zu überprüfen; andererseits wurde die Rotorgeschwindigkeit so lange gesteigert, bis schließlich über dem Untergrund kein Flugzeitspektrum mehr erkennbar war. Die größte Düsendeschwindigkeit, bei der noch ein Flugzeitspektrum zu erkennen war, lag bei etwa 393 m/s, bei Verwendung von Argon als Strahlgas.

Nach Vorbereitung der Messdaten, dem vorangegangenen Abschnitt entsprechend, kann die Fitfunktion nach Gl. (7.25) angepasst werden. Dabei sind die Flugstrecke  $s$ , die Düsentemperatur  $T_0$ , der Druck in der Quellkammer  $p$  und der Düsendruck  $P(v_D)$  vorgegeben. Zu beachten ist außerdem, dass sich der Düsendruck wegen der fliehkraftbedingten Drucküberhöhung gemäß Gl. (7.20) vom gemessenen Einlassdruck  $P_0$  unterscheidet.

Unter diesen Voraussetzungen lässt sich die Strahltemperatur  $T$  als Fitparameter bestimmen. Die niedrigste erreichte Strahltemperatur ergab sich aus den Flugzeitspektren zu etwa 4 K. In Abb. 7.19 ist das

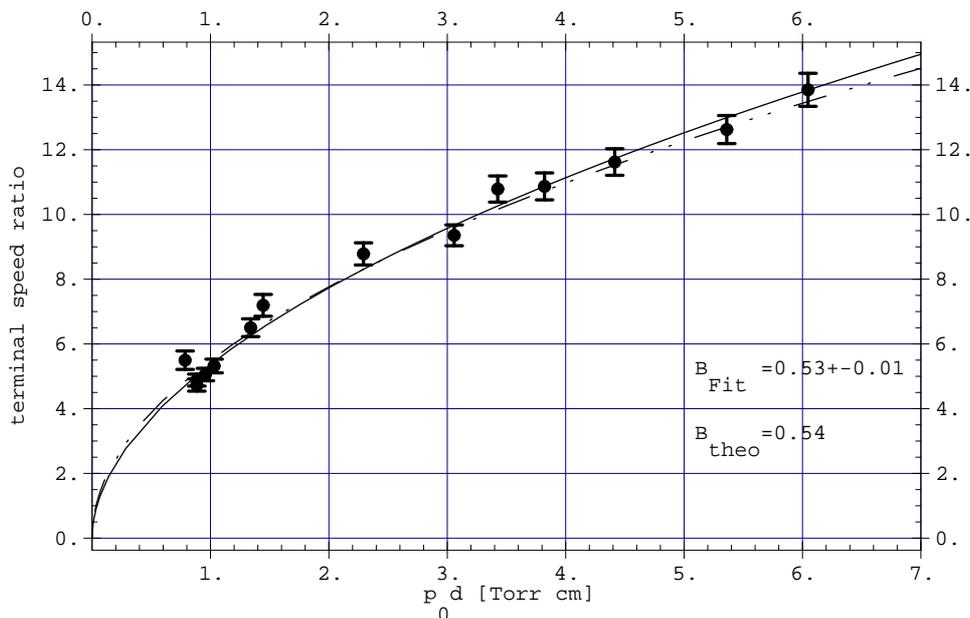


Abbildung 7.19: Terminal speed -ratio als Funktion des Produkts aus Düsendruck und -durchmesser bei Verwendung von Argon als Strahlgas. Die durchgezogene Kurve stellt einen Least-Square-Fit von Gl. (5.37) an die Punkte dar. Der strichpunktierte Verlauf ergibt sich, wenn auch die Werte von Krypton und Xenon (nicht eingezeichnet) im Fit berücksichtigt werden.

ermittelte Verhältnis von Düsentemperatur zu Strahltemperatur in Form der „terminal speed ratio“  $S_{\parallel\infty}$  nach Gl. (5.35) bei Verwendung von Argon als Strahlgas zusammengefasst. Erfolgt die Auftragung von  $S_{\parallel\infty}$  über dem Produkt aus Düsendruck und Düsendurchmesser<sup>9</sup>  $P(v_D) \cdot d$ , so sollte  $S_{\parallel\infty}$  einem Verlauf gemäß Gl. (5.37) folgen. Die durchgezogene Kurve zeigt einen Least Square Fit dieser Funktion an die ermittelten Werte von  $S_{\parallel\infty}$ . Aus dem Fit ergibt sich ein Wert von  $0.53 \pm 0.01$  für den Exponenten  $B$ . Nach dem „thermal conduction modell“ [61] erwartet man bei Verwendung von monoatomaren Gasen als Strahlteilchen für den Exponenten einen Wert von 0.54.

Trotz dieser guten Übereinstimmung sind die bestimmten Werte der Strahltemperatur und damit auch die jeweiligen Werte für die „terminal speed ratio“ aus folgendem Grund noch mit Vorsicht zu genießen: Da die Messungen, wie schon erwähnt, im „break sweep“-Modus durchgeführt wurden, kommt es vor allem bei hohen Rotordrehzahlen zur Überlagerung von langsamen und schnellen Spektrumsanteilen, was bei der vorbereitenden Bearbeitung der Messdaten nicht berücksichtigt wurde. Dies führt dazu, dass die Spektren scheinbar breiter werden, was beim Fitten systematisch zu höheren Strahltemperaturen führt. Den gleichen Effekt haben zu hoch angenommene Düsendrücke. Im verwendeten Aufbau kann nur der Druck in der Gaszuleitung, nicht aber direkt an der Düsenöffnung, gemessen werden. Der Düsendruck wurde mit Hilfe von (7.20) abgeschätzt, um dann direkt in die Fitfunktion (7.25) eingesetzt zu werden. Gerade bei hohen Drehgeschwindigkeiten wird aber der Druck an der Düse niedriger sein als angenommen, da der Gasfluss durch die Düse bei steigendem Druck zunimmt, was in Gl. (7.20) nicht berücksichtigt ist. Nach Gl. (5.23) führt aber ein niedrigerer Düsendruck zu höheren Strahltemperaturen.

Für Krypton und Xenon erstrecken sich die Messwerte für die Strahltemperatur nur über einen kleinen Teil des Bereichs, der mit Argon abgedeckt wurde. Das liegt zum einen daran, dass der Einlassdruck nicht so stark variiert wurde wie bei Argon. Zum anderen sind beide Gase wesentlich schwerer und daher bei gleicher Temperatur langsamer als Argon, weshalb die Düsendurchgeschwindigkeiten nicht so hoch sein müssen, um den Strahl deutlich abzubremesen. In Abb. 7.19 wären die entsprechenden Werte für die „terminal speed

<sup>9</sup>Diese Größe ist proportional zur inversen Knudsenzahl  $K^{-1} = d/\bar{l}$ , da nach Gl. (5.9) die mittlere freie Weglänge  $\bar{l}$  umgekehrt proportional zum Düsendruck ist.

ratio“ von Krypton und Xenon im Bereich der Werte für Argon bei  $0.5 \text{ Torr cm} < P(v_D) < 2.0 \text{ Torr cm}$  zu finden. Der Übersichtlichkeit wegen wurde aber darauf verzichtet, diese einzuzichnen. Werden die Werte von Krypton und Xenon beim Fit von Gl. (5.37) berücksichtigt, ergibt sich der strichpunktierte Verlauf. Für  $B$  ergibt sich dann der Wert  $0.50 \pm 0.03$ .

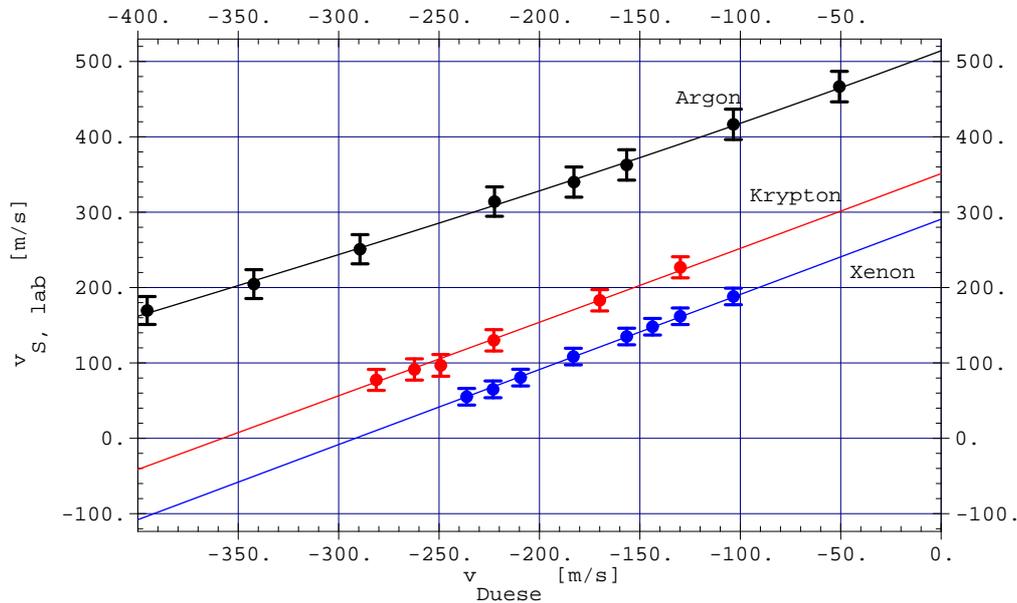


Abbildung 7.20: Strömungsgeschwindigkeit im Laborsystem als Funktion der Düsengeschwindigkeit. Negative Düsengeschwindigkeiten bedeuten, dass sich die Düse entgegen der Strahlrichtung bewegt. Negative Werte für die Strömungsgeschwindigkeit bedeuten, dass sich der Strahl in Rückwärtsrichtung bewegt. Da die Messungen nur in Vorwärtsrichtung erfolgten, liegen für  $v_{S,lab} < 0$  keine Datenpunkte vor.

Schließlich wurden die Strahlgeschwindigkeiten nach Gl. (7.25) mit Kenntnis der Strahltemperaturen aus den Fits bestimmt. Dabei wurde die rotationsbedingte Drucküberhöhung an der Düse berücksichtigt.

In Abb. 7.20 sind die erreichten Strahlgeschwindigkeiten im Laborsystem  $v_{S,lab} = v_S - v_D$  als Funktion der Düsengeschwindigkeit aufgetragen. Negative Düsengeschwindigkeiten bedeuten, dass sich die Düse der Strahlrichtung entgegen bewegt, der Strahl wird abgebremst. Negative Strahlgeschwindigkeiten im Laborsystem bedeuten, dass sich der Strahl in Rückwärtsrichtung bewegt. Da die Quelle nur dazu benutzt wurde, den jeweiligen Atomstrahl abzubremesen, liegen keine Messwerte für  $v_D > 0$  vor. Durch den Verzicht auf einen Strahlchopper existieren außerdem keine Messungen für  $v_D = 0$ .

Die durchgezogenen Kurven stellen den Verlauf der Strahlgeschwindigkeit dar, wie er sich aus den Messungen ergibt. Die Drucküberhöhung an der Düse aufgrund von Fliehkräften bewirkt eine leichte Nichtlinearität, die am ehesten bei Argon zu bemerken ist. Auffällig ist, dass für alle drei verwendeten Strahlgase die Extrapolation zu  $v_D = 0$  zu Strömungsgeschwindigkeiten führt, die generell niedriger liegen als in Tabelle 5.1 angegeben. Dies könnte einerseits darauf hindeuten, dass das Expansionsverhältnis bei den vorliegenden Messungen zu groß und damit zu schlecht war. So überschätzt das einfache Modell für die Drucküberhöhung aufgrund der Fliehkräfte sicherlich den tatsächlich vorliegenden Düsendruck, da dort nicht berücksichtigt ist, dass erhöhter Düsendruck auch zu erhöhtem Fluss durch die Düse führt.

Im Fall von Argon liegt die niedrigste erreichte Geschwindigkeit bei etwa 170 m/s, die Strahltemperatur beträgt dabei ungefähr 4 K. Bei stehender Düse ergäbe sich eine Strahlgeschwindigkeit von 514 m/s. Bei Krypton (351 m/s bei stehender Düse) wurde als niedrigste Strömungsgeschwindigkeit 77 m/s erreicht, die Strahltemperatur lag bei 16 K. Mit Xenon (290 m/s für  $v_D = 0$ ) wurde eine Strömungsgeschwindigkeit von 55 m/s bei 15.5 K Strahltemperatur gemessen. Die vergleichsweise hohe Strahltemperatur bei Krypton und

Xenon lässt sich dadurch erklären, dass das Expansionsverhältnis  $p/p_0$  von Quellkammer- zu Düsendruck nicht klein genug war. Außerdem wurde der Einlassdruck bei beiden Gasen nicht in dem Maße variiert wie bei Argon.

Prinzipbedingt werden schwerere Gase von Öldiffusionspumpen nicht so gut gepumpt wie leichte, aber durch eine Pumpe mit höherer Saugleistung ließe sich das Expansionsverhältnis auch für schwerere Gase sicher noch verbessern.

## 7.7 Zusammenfassung und Ausblick

Das vorliegende Konzept eines symmetrischen Rotors auf CFK-Basis ermöglicht es mit vergleichsweise einfachen Mitteln, Düsengeschwindigkeiten von 800 m/s bei Drücken von 2.5 bar zu erreichen. Am Beispiel der Edelgase Argon, Krypton und Xenon konnte gezeigt werden, dass mit dem vorliegenden Rotorkonzept langsame und kalte Atom- und Molekülstrahlen erzeugt werden können, die aus einer „zimmerwarmen“ Düse stammen. Einschränkend ist zu erwähnen, dass sich mit dem vorliegenden Konzept nur Atom- und Molekülstrahlen von Substanzen mit genügend hohem Dampfdruck erzeugen lassen. Außer dem Einsatz bei „in-beam“-NMR-Experimenten wäre auch denkbar, mit den erzeugten langsamen und kalten Strahlen magnetische Fallen zu laden und so beispielsweise kalte Gase aus Molekülen in Temperaturbereichen zu erzeugen, die bisher nur mit Atomen unter Verwendung quantenoptischer Methoden zugänglich waren.

Beim vorliegenden Aufbau besteht allerdings das prinzipielle Problem, dass langsame *und* kalte Strahlen ein schlechtes Signal-Rausch-Verhältnis haben. Dies liegt daran, dass sowohl hohe Düsengeschwindigkeiten als auch hohe Düsendrücke notwendig sind, um beides zu realisieren. Beides zusammen bewirkt einen hohen Hintergrunddruck in der Quellkammer, der den Strahl abschwächt. Hier könnte durch Verwendung einer leistungsfähigeren Pumpe an der Quellkammer Abhilfe geschaffen werden.

Die Verwendung von Düsenöffnungen an beiden Rotorenden empfiehlt sich aufgrund des Produktionsprozesses nicht: Der Alu-Block zur Aufnahme des Rotors kann nur mit entsprechendem Aufwand genau genug gefertigt werden, damit der Winkel zwischen Rotorarmen und Drehachse des Rotors exakt  $90^\circ$  beträgt. Abweichungen vom rechten Winkel führen dazu, dass sich die Rotorarme zunächst auf unterschiedlichen Ebenen bewegen. Die Fliehkraft zwingt bei hohen Drehzahlen zwar beide Rotorarme auf die gleiche Ebene, aber selbst dann ist aufgrund der ungenauen Positionierung der Düse bei der Herstellung des Rotors noch nicht sichergestellt, dass beide Düsen die gleiche Position zum Skimmer aufweisen.

Nach Gl. (7.22) sollte es auch möglich sein, die Düse mit höheren Geschwindigkeiten als der Strömungsgeschwindigkeit des Strahls zu bewegen. Für das aus der Düse strömende Gas würde das bedeuten, dass es sich im Laborsystem *rückwärts* bewegt.

In Abb. 7.21 ist das theoretische Ergebnis einer solchen Situation gezeigt. Die Strahltemperatur liegt wie in den anderen Plots zur Geschwindigkeits- und Winkelverteilung bei 10 K, die Düsentemperatur beträgt 300 K, die Düse selbst bewegt sich mit 600 m/s, sodass die Differenz aus Strömungs- und Düsengeschwindigkeit bei etwa -50 m/s liegt. Die Breite der Intensitätsverteilung ist direkt mit der rechten Hälfte von Abb. 7.10 zu vergleichen, dort beträgt die Differenz aus Strömungs- und Düsengeschwindigkeit 50 m/s. Deutlich zu erkennen ist, dass sich nun die Intensität bei Winkeln von  $\pm 180^\circ$  sammelt, was gerade der Rückwärtsrichtung des Strahls entspricht.

Messungen in dieser Konstellation wurden mit dem Heidelberger Rotor nicht durchgeführt, da dies erst durch einen Umbau der Apparatur und eine erneute Justage der Strahlachse möglich gewesen wäre. Vor allem letzteres stellt im derzeitigen Aufbau eine entscheidende Hürde dar, da die Suche nach einem Strahl in Rückwärtsrichtung nur bei Betrieb des Rotors möglich wäre. Aufgrund der rotationsbedingten Drucküberhöhung an der Düse wird es dann aber zu einem erhöhten Fluss aus der Düse kommen. Wie schon erwähnt, kommt es aufgrund der momentan zur Verfügung stehenden, für hohe Rotationsfrequenzen nicht ausreichenden Saugleistung der Öldiffusionspumpe zu einem stark erhöhten Hintergrunddruck in der Quellkammer. Das dadurch bedingte schlechte Signal-Rausch-Verhältnis macht die Suche nach einem solchen Strahl fast unmöglich.

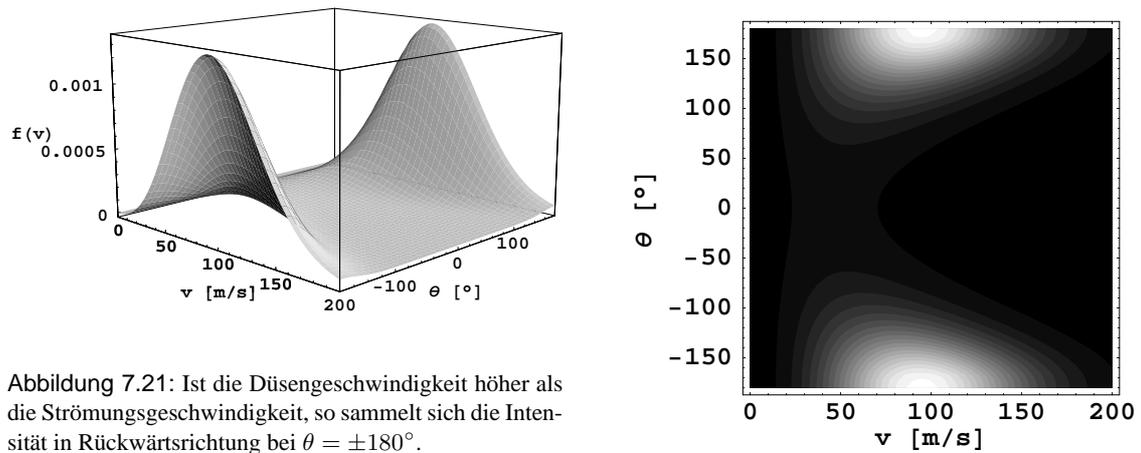


Abbildung 7.21: Ist die Düsengeschwindigkeit höher als die Strömungsgeschwindigkeit, so sammelt sich die Intensität in Rückwärtsrichtung bei  $\theta = \pm 180^\circ$ .

Es existieren allerdings Messungen der Gruppe in Harvard, die die Existenz solcher rückwärtsgerichteter Strahlen experimentell belegen [56]. Die Untersuchung dieser Strahlen könnte sich auch mit dem Heidelberger Rotor lohnen, gerade im Hinblick auf eine hohe Intensität langsamer Strahlteilchen. Wie gesehen, hängt deren relative Intensität stark von der Qualität der Überschallexpansion ab. Da die Drucküberhöhung bei den rückwärts gerichteten Strahlen naturgemäß höher ist als bei den vorwärtsgerichteten, besteht die Möglichkeit, bei kalten rückwärtsgerichteten Strahlen einen Intensitätsgewinn im Vergleich zu vorwärtsgerichteten Strahlen zu erzielen. Allerdings ist dafür der Einsatz einer leistungsfähigeren Öldiffusionspumpe für die Quellkammer nötig, was sich auch für die Erzeugung langsamer Strahlteilchen in Vorwärtsrichtung empfiehlt.



## Kapitel 8

# Zusammenfassung und Ausblick

Der erste Teil dieser Arbeit beschäftigte sich mit der Weiterentwicklung der Wasserstoff-Atomstrahl-Spinecho-Anlage, um auch mit transversal aufgespaltenen Teilwellenpaketen Atominterferometrie durchführen zu können. Auf theoretischer Seite wurde dazu die Strahl-Spinecho-Theorie für atomaren Wasserstoff im Grundzustand modifiziert, sodass die Entstehung eines transversalen Versatzes zwischen den Teilwellenfunktionen eines einzigen Strahlteilchens durch Spulen, die gegenüber der Strahlachse verkippt sind, beschrieben werden kann. Durch Adaption bestehender Streutheorien für transversales Spinecho mit Neutronen zur Beschreibung der Oberflächenstreuung von Atomen konnte gezeigt werden, dass zweidimensionale Potenzial-Potenzial-Korrelationsfunktionen gemessen werden können.

Im Rahmen der theoretischen Überlegungen wurden zwei mögliche Streugeometrien behandelt. Dabei stellte sich heraus, dass nur eine der beiden Geometrien eine direkte Messung der oben genannten Korrelationsfunktionen ermöglicht, weil dort die physikalisch relevanten Informationen von den Phasenschüben entkoppelt sind, die lediglich durch apparative Gegebenheiten hervorgerufen werden. Aus dieser Erkenntnis ergibt sich, wie die Transversal-Spinecho-Spulen in ein Spektrometer integriert werden müssen, das sich transversaler Aufspaltungen bedient.

Auf experimenteller Seite wurden die in [8] vorgeschlagenen Spulen auf ihre Tauglichkeit für transversales Spinecho hin untersucht. Dabei musste die dort geäußerte Erwartung bezüglich der maximal erreichbaren Aufspaltung von einigen 100 nm auf einige 100 Å deutlich reduziert werden. Die durch eingehende Simulation der Spulengeometrie gewonnenen Erkenntnisse wurden genutzt, um das Design der Spulen zu überarbeiten. Dadurch konnten die Inhomogenitäten der Magnetfeldintegrale im Bereich des Strahlquerschnitts deutlich reduziert werden, wie Simulationen des neuen Designs zeigten.

Erste Messungen mit den neuen Spulen ergaben jedoch, dass auch hier die Polarisation bei größer werdenden Aufspaltungen der Teilwellenpakete schneller abfällt, als erwartet. Aufgrund der Analyse zusätzlich auftretender Spinecho- und Spinrotationsgruppen konnte die Vermutung geäußert werden, dass der Polarisationsabfall bei der vorliegenden Geometrie durch eine unzureichende Magnetfeldabschirmung und dadurch auftretende Streufelder in den kritischen Bereichen der Spinechokonfiguration hervorgerufen wird. Um die Ursache des Polarisationsverlustes weiter einzugrenzen, werden zur Zeit Messungen mit longitudinalen Führungsfeldern vorbereitet, deren Messergebnisse in Kürze vorliegen sollten. Die Ergebnisse der Simulation der neuen Spulengeometrie lassen jedoch erwarten, dass nun Spulen zur Verfügung stehen, mit denen ausreichend große Transversalaufspaltungen erzeugt werden können. Einem Umbau der Wasserstoff-Strahl-Spinecho-Anlage zum Spektrometer sollte damit nichts mehr im Wege stehen.

Der zweite Teil dieser Arbeit widmete sich dem Entwurf und Tests spezieller Quellen für Atom- und Molekülstrahlen.

Zum einen wurde, motiviert durch schlechte Erfahrungen mit dem zur Zeit noch an der Wasserstoff-Atomstrahl-Spinecho-Apparatur eingesetzten Mikrowellendissoziator, die Entwicklung einer gleichspannungsgespeisten Quelle für atomaren Wasserstoff und metastabiles Helium vorangetrieben.

Die Ergebnisse der bisherigen Messungen an der neu entwickelten Quelle mit metastabilem Helium deuten darauf hin, dass nun endlich eine intensive Quelle zur Verfügung steht, die mit hoher Effizienz und großer

zeitlicher Konstanz einen atomaren Überschall-Wasserstoff-Strahl erzeugt, dessen mittlere Geschwindigkeit etwa Zimmertemperatur entspricht. Die Erzeugung eines intensiven Strahls aus metastabilem Helium konnte eindrucksvoll unter Beweis gestellt werden, wie Messungen zur Strahltemperatur zeigen: Die Breite der Geschwindigkeitsverteilung konnte durch Erhöhung der Stoßrate deutlich reduziert werden, wobei trotz der damit größeren Abregungswahrscheinlichkeit für metastabiles Helium noch immer ein intensiver Strahl vorlag. Da das zum verlässlichen Nachweis von atomarem Wasserstoff in nicht angeregter Form notwendige Massenspektrometer mittlerweile zur Verfügung steht, sollte auch dieser Strahl in Kürze nachgewiesen sein.

Aufgrund des Aufbaus der Quelle ist außerdem zu erwarten, dass nun auch eine effektive Kühlung der Düse möglich ist. Dadurch lässt sich auch die mittlere Geschwindigkeit des Strahls signifikant reduzieren. Dies ist insbesondere im Hinblick auf das Spinecho-Prinzip interessant, da bei geringeren Strahlgeschwindigkeiten mit ansonsten gleichbleibenden Maschinenparametern größere Aufspaltungen der einzelnen Teilwellenpakete erreicht werden können.

Zum anderen wurde eine rotierende Quelle entwickelt und getestet, mit der es möglich ist, langsame und kalte Atom- und Molekülstrahlen bei einer Düsentemperatur zu erzeugen, die Zimmertemperatur entspricht. So kann auf aufwändige Kryostate zur Kühlung der Düse verzichtet werden, die sonst für die Erzeugung von langsamen Strahlen notwendig wären.

Das Prinzip der rotierenden Quelle beruht darauf, dass sich die Düsengeschwindigkeit zur Strahlgeschwindigkeit addiert. Durch die fliehkraftbedingte Drucküberhöhung im Bereich der Düse wird effizient das Expansionsverhältnis zwischen Querkammerdruck und Druck im Bereich der Strahldüse reduziert, sodass auch geringere Varianzen in der Strahlgeschwindigkeit möglich sind, was einer geringeren Strahltemperatur entspricht. Mit der entwickelten Quelle ist es beispielsweise möglich, einen Überschallstrahl aus Argon zu erzeugen, der eine mittlere Geschwindigkeit von 170 m/s und eine Strahltemperatur von 4 K aufweist.

**Teil III**

**Anhang**



## Anhang A

# Anmerkungen zur Theorie des transversalen Spinechos

In diesem Kapitel werden die Schritte ergänzend dargelegt, die für das Verständnis von Kapitel 2 nicht zwingend notwendig sind, die aber die Entscheidung für das sogenannte „Raytracing-Modell“ verdeutlichen.

### A.1 Versatz und Phasendifferenz einer gekippten Spule

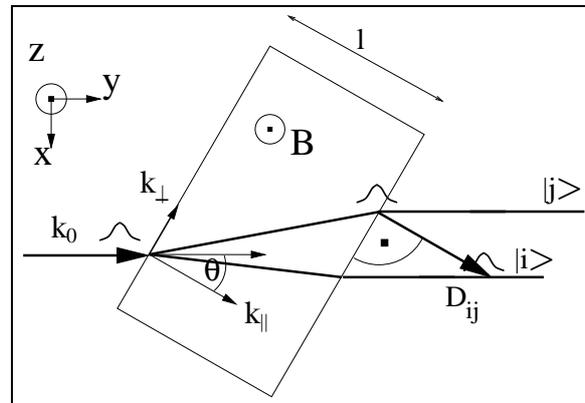


Abbildung A.1: Gekippte Rechteck-Spule zur Erzeugung eines longitudinalen und transversalen Versatzes zwischen den Teilwellenpaketen.  $z$ -Achse und Magnetfeld zeigen aus der Blattebene heraus. Das verwendete Koordinatensystem ist, anders als in [18], rechtshändig.

Ausgehend von Gl. (2.3) für die Komponente des Wellenvektors parallel zum Feldgradienten  $\vec{\nabla}B$ :

$$k_{\parallel}^{(i)} \simeq k_{\parallel} \left( 1 - \frac{1}{2 \cos^2 \theta} \frac{E_i}{E} \right) \quad \text{mit} \quad k_{\parallel} = k_0 \cos \theta \quad (\text{A.1})$$

lässt sich die Zeit berechnen, die der Zustand  $|i\rangle$  mit Impuls  $k_{\parallel}^{(i)}$  benötigt, um den Magnetfeldbereich der Länge  $l$  zu durchqueren (siehe dazu auch Abb. A.1). In erster Näherung gilt, wieder unter der Voraussetzung, dass  $E_i \ll E$  erfüllt ist:

$$t_i = \frac{l}{v_{\parallel}} = \frac{l m}{\hbar k_{\parallel}} \simeq \frac{l m}{\hbar k_0 \cos \theta} \left( 1 + \frac{1}{2 \cos^2 \theta} \frac{E_i}{E} \right). \quad (\text{A.2})$$

In dieser Zeit  $t_i$  legt der Zustand  $|i\rangle$  senkrecht zur Gradientenrichtung den Weg  $l_{i\perp}$  zurück:

$$l_{i\perp} = \frac{\hbar k_{\perp}}{m} t_i = \frac{\hbar k_0 \sin \theta}{m} t_i = l \tan \theta \left( 1 + \frac{1}{2 \cos^2 \theta} \frac{E_i}{E} \right). \quad (\text{A.3})$$

Betrachtet man nun zwei Zustände  $|i\rangle$  und  $|j\rangle$  mit unterschiedlichen potenziellen Energien  $E_i < E_j$  im Magnetfeld, so erkennt man, dass diese nach Durchqueren des Magnetfeldbereichs einen Versatz senkrecht zum Feldgradienten aufweisen:

$$\vec{\delta}_{ij} = (l_{i\perp} - l_{j\perp}) \cdot \vec{e}_{\perp} = \frac{l \tan \theta}{2 \cos^2 \theta} \frac{E_{ij}}{E} \cdot \vec{e}_{\perp} \quad E_{ij} = E_i - E_j, \quad (\text{A.4})$$

wobei der Rand des Feldbereichs zu unterschiedlichen Zeiten passiert wird. In Gl. (A.4) ist zu beachten, dass  $E_{ij} = E_i - E_j < 0$ , wegen der Wahl der potenziellen Energien im Magnetfeld. Die Zeitdifferenz  $t_{ji}$  zwischen dem jeweiligen Passieren der Feldbegrenzung von  $|i\rangle$  bzw.  $|j\rangle$  ergibt sich zu

$$t_{ji} = t_j - t_i = \frac{l m}{2 \hbar k_0 \cos^3 \theta} \frac{E_{ji}}{E}, \quad (\text{A.5})$$

wobei  $E_{ji} = -E_{ij} = E_j - E_i$  gilt. Da sich  $|j\rangle$  im Magnetfeld langsamer bewegt als  $|i\rangle$  ( $E_i < E_j$ ), hat  $|i\rangle$  nach Verlassen des Feldbereichs in der Zeit  $t_{ji}$  den Weg

$$\vec{l}_i = \frac{\hbar t_{ji}}{m} \cdot \vec{k}_0 = \frac{l}{2 \cos^3 \theta} \frac{E_{ji}}{E} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

zurückgelegt. Dies geschieht wieder mit dem ursprünglichen Wellenvektor  $\vec{k}_0$ . Die Summe aus  $\vec{\delta}_{ij}$  und  $\vec{l}_i$  ergibt dann den Versatz zwischen den beiden Zuständen  $|i\rangle$  und  $|j\rangle$ :

$$\vec{D}_{ij} = \vec{r}_{out}^{(i)} - \vec{r}_{out}^{(j)} = \frac{l}{2 \cos^2 \theta} \frac{E_{ji}}{E} \cdot \vec{e}_{\parallel} = \frac{l}{2 \cos^2 \theta} \frac{E_{ji}}{E} \cdot \begin{pmatrix} \sin \theta \\ \cos \theta \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.7})$$

Aus Gl. (A.7) geht deutlich hervor, dass der Versatz zwischen den beiden Zuständen parallel zum Gradienten des Magnetfeldbetrags ist (siehe dazu auch Gl. (2.2)). Die Orte  $\vec{r}_{out}^{(i,j)}$  wurden so definiert, dass sie zum gleichen Zeitpunkt erreicht werden (siehe S. 23), es reicht zur Bestimmung der Phasendifferenz  $\Phi_{ij}$  also aus, nur geometrische Phasenschübe der Form

$$\vec{k} \cdot \vec{l} = k_{\parallel} l + k_{\perp} l_{\perp} \quad (\text{A.8})$$

zu berechnen. Damit gilt für die Phasendifferenz  $\Phi_{ij}$  bei Erreichen des Versatzes  $\vec{D}_{ij}$  folgender Ausdruck

$$\begin{aligned} \Phi_{ij} &= \underbrace{\left( \vec{k}_0 \cdot \vec{l}_i + k_{\parallel}^{(i)} l + k_{\perp} l_{i\perp} \right)}_{\text{geom. Phase von } |i\rangle} - \underbrace{\left( k_{\parallel}^{(j)} l + k_{\perp} l_{j\perp} \right)}_{\text{von } |j\rangle} \\ &= -\frac{k_0 l}{\cos \theta} \frac{E_{ij}}{E}. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Die letzte Identität in Gl. (A.9) ergibt sich mit Hilfe von Gln. (A.1), (A.3) und (A.6), sowie  $k_{\perp} = k_0 \sin \theta$  nach einigen Umformungen.

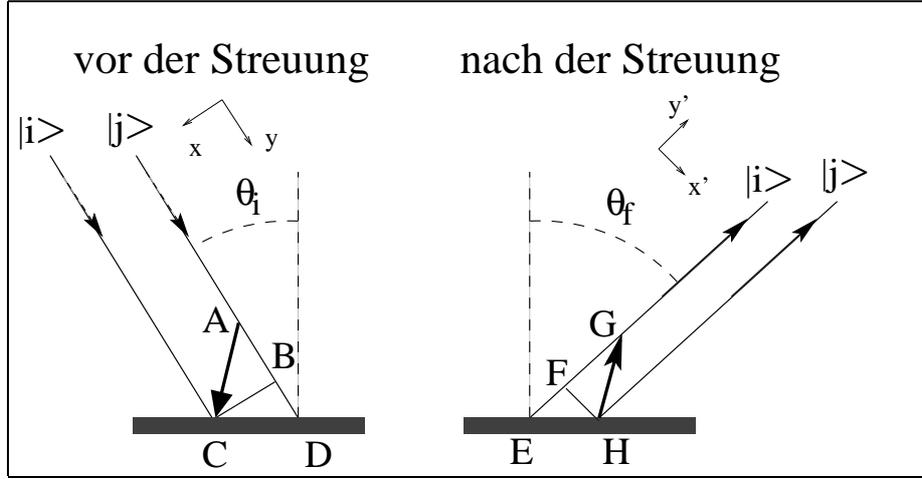


Abbildung A.2: Zur Veränderung des Versatzes der beiden Wellenpakete  $\vec{D}_{ij}^{(1)}$  vor der Streuung zu  $\vec{D}_{ij}^{(sc)}$  nach der Streuung. Links die Situation vor der Streuung: Der Vektor längs der Strecke  $\overline{AC}$  bezeichnet den Versatz  $\vec{D}_{ij}^{(1)}$ . Nachdem  $|i\rangle$  zum Zeitpunkt  $t_i$  an der Oberfläche gestreut wurde, muß  $|j\rangle$  noch den Weg  $\overline{AB} + \overline{BD}$  zurücklegen.  $\overline{AB}$  wird durch die  $y$ -Komponente des Versatzes vor der Streuung bestimmt,  $\overline{BD}$  durch den Einfallswinkel  $\theta_i$ . Rechts die Situation nach der Streuung: Zum Zeitpunkt  $t_j$ , zu dem  $|j\rangle$  an der Oberfläche streut, hat  $|i\rangle$  schon den Weg  $\overline{EF} + \overline{FG}$  zurückgelegt. Der Versatz  $\vec{D}_{ij}^{(sc)}$  setzt sich zusammen aus der  $y'$ -Komponente  $\overline{FG}$  und der  $x'$ -Komponente  $\overline{FH}$ . Der Ort  $E$  rechts entspricht dem Punkt  $C$  links. Gleiches gilt für  $H$  und  $D$ .

## A.2 $\vec{D}_{ij}^{(sc)}$ bei paralleler Streu- und Aufspaltungsebene

Unter Verwendung von (A.7) lassen sich die einzelnen Komponenten von  $\vec{D}_{ij}^{(1)}$  im ungestrichenen Koordinatensystem in Abb. A.2 beschreiben:

$$\begin{aligned}\overline{BC} &= D_{ij,x}^{(1)} = \frac{l \tan \theta}{2} \frac{E_{ji}}{E} \\ \overline{AB} &= D_{ij,y}^{(1)} = \frac{l}{2} \frac{1}{\cos \theta} \frac{E_{ji}}{E}.\end{aligned}\quad (\text{A.10})$$

Für das Wegstück  $\overline{BD}$  gilt folglich:

$$\overline{BD} = \tan \theta_i D_{ij,x}^{(1)} = \tan \theta_i \frac{l \tan \theta}{2} \frac{E_{ji}}{E}.\quad (\text{A.11})$$

An dieser Stelle ergibt sich übrigens gegenüber [18] der erste Vorzeichenunterschied aufgrund der Wahl des Koordinatensystems. Mit den beiden letztgenannten Gleichungen lässt sich die Zeitdifferenz zwischen den beiden Streuvorgängen von  $|i\rangle$  und  $|j\rangle$  an der Oberfläche bestimmen. Dies ist gerade die Zeit, die  $|j\rangle$  braucht, um die Strecke  $\overline{AD}$  zurückzulegen:

$$t_j - t_i = \frac{m}{\hbar k} (\overline{AB} + \overline{BD}) = \frac{m}{\hbar k} \frac{1}{\cos \theta} \frac{l E_{ji}}{2 E} (1 + \tan \theta \tan \theta_i).\quad (\text{A.12})$$

Die räumliche Differenz zwischen den beiden Streuorten  $C$  und  $D$  bzw.  $E$  und  $H$  lässt sich mit Hilfe der  $x$ -Komponente von  $\vec{D}_{ij}^{(1)}$  bestimmen<sup>1</sup>:

$$\vec{r}_j - \vec{r}_i = \overline{CD} = \overline{EH} = \frac{\overline{CB}}{\cos \theta_i} = -\frac{\vec{D}_{ij,x}^{(1)}}{\cos \theta_i} = -\frac{l E_{ji}}{2 E} \frac{\tan \theta}{\cos \theta \cos \theta_i}.\quad (\text{A.13})$$

<sup>1</sup>Auch hier wieder gegenüber [18] verändertes Vorzeichen.

In der rechten Hälfte von Abb. A.2 gelten folgende Zusammenhänge:

$$\begin{aligned}\overline{EF} &= \sin \theta_f \overline{EH} = \frac{l E_{ji}}{2 E} \frac{1}{\cos^2 \theta} \sin \theta \frac{\sin \theta_f}{\cos \theta_i} \\ \overline{HF} &= \cos \theta_f \overline{EH} = -\frac{l E_{ji}}{2 E} \frac{1}{\cos^2 \theta} \sin \theta \frac{\cos \theta_f}{\cos \theta_i} = \vec{D}_{ij, x'}^{(sc)}.\end{aligned}\quad (\text{A.14})$$

Bei der letzten Gleichung handelt es sich um die  $x'$ -Komponente von  $\vec{D}_{ij}^{(sc)}$ , wie der rechten Seite von Abb. A.2 entnommen werden kann. Die Wahl der Vorzeichen in (A.14) erfolgte konform zur Definition des gestrichenen Koordinatensystems. Die  $y'$ -Komponente von  $\vec{D}_{ij}^{(sc)}$  lässt sich auch bestimmen:

$$\begin{aligned}\vec{D}_{ij, y'}^{(sc)} &= \overline{FG} = \overline{EG} - \overline{EF} \\ &= \frac{\hbar k'}{m} (t_j - t_i) - \overline{EF} \\ &= \frac{1}{\cos^2 \theta} \frac{l E_{ji}}{2 E} \left( \frac{k'}{k} (\cos \theta + \sin \theta \tan \theta_i) - \sin \theta \frac{\sin \theta_f}{\cos \theta_i} \right).\end{aligned}\quad (\text{A.15})$$

Mit (A.14) und (A.15) sind alle relevanten Komponenten von  $\vec{D}_{ij}^{(sc)}$  bestimmt, da die Aufspaltung in der  $xy$  bzw.  $x'y'$ -Ebene erfolgt.

### A.3 Impulsübertrag bei paralleler Streu- und Aufspaltungsebene

Für die parallel zur Oberfläche stehenden Komponenten der Wellenvektoren gilt die Erhaltungsgleichung

$$\vec{k}_{f\parallel} = \vec{k}_{i\parallel} + \vec{q}_{\parallel}, \quad (\text{A.16})$$

wobei mit  $\vec{k}_{f,i}$  die Wellenvektoren der gestreuten und einlaufenden Teilchen gemeint sind.  $\vec{q}$  stellt den Impulsübertrag dar. Für den Fall, dass nur elastische Prozesse betrachtet werden, gilt wegen  $|\vec{k}'| \equiv |\vec{k}|$  und  $\alpha \ll \theta_i$

$$\begin{aligned}\sin \theta_f k &= \sin \theta_i k + q_{\parallel} \\ \Rightarrow (\sin \theta_i + \alpha \cos \theta_i) k &= \sin \theta_i k + q_{\parallel} \\ \Rightarrow \alpha \cos \theta_i k &= q_{\parallel}.\end{aligned}\quad (\text{A.17})$$

Wird außerdem  $\delta\alpha$  berücksichtigt, nimmt die Erhaltungsgleichung folgende Form an:

$$\begin{aligned}\sin(\theta_f + \delta\alpha) k &= \sin \theta_i k + q_{\parallel} + \delta q_{\parallel} \\ \Rightarrow (\sin \theta_f + \delta\alpha \cos \theta_f) k &= \sin \theta_i k + q_{\parallel} + \delta q_{\parallel} \\ \Rightarrow \delta\alpha \cos \theta_f k &= \delta q_{\parallel} \\ \Rightarrow \delta\alpha (\cos \theta_i - \alpha \sin \theta_i) k &\simeq \delta\alpha \cos \theta_i k = \delta q_{\parallel},\end{aligned}\quad (\text{A.18})$$

wobei  $\alpha \ll \theta_i$  benutzt wurde. Für den Zusammenhang zwischen  $\delta q_{\parallel}$  und  $\delta\alpha$  gilt also in erster Näherung:

$$\delta\alpha = \frac{\delta q_{\parallel}}{k \cos \theta_i}. \quad (\text{A.19})$$

## A.4 Entwicklung von $\Phi_{ij}$ und $\vec{k} \vec{D}_{ij}$ bei parallelen Streu- und Aufspaltungsebenen

Für die Phasendifferenzen der zweiten Spinechospule gilt zunächst

$$\begin{aligned}\Phi_{ij}^{(2)} &= -\frac{l |\vec{k}'|}{\cos \theta^{(2)}} \frac{E_{ij}^{(2)}}{E} \\ \vec{k}' \vec{D}_{ij}^{(2)} &= \frac{l |\vec{k}'|}{2 \cos \theta^{(2)}} \frac{E_{ji}^{(2)}}{E}.\end{aligned}\tag{A.20}$$

Durch Einführung der Modifikationen

$$\begin{aligned}|\vec{k}'| = k' &\longrightarrow k \left(1 + \frac{\hbar \omega}{2E}\right) \\ \frac{1}{\cos \theta^{(2)}} &\longrightarrow \frac{1}{\cos \theta^{(2)}} \left(1 + \tan \theta^{(2)} \frac{\delta q}{k \cos \theta_i}\right)\end{aligned}\tag{A.21}$$

ergibt sich aus (A.20) schließlich

$$\begin{aligned}\Phi_{ij}^{(2)} &= -\frac{k l}{\cos \theta^{(2)}} \frac{E_{ij}^{(2)}}{E} \left(1 + \frac{\hbar \omega}{2E}\right) \left(1 + \tan \theta^{(2)} \frac{\delta q}{k \cos \theta_i}\right) \\ \vec{k}' \vec{D}_{ij}^{(2)} &= \frac{k l}{2 \cos \theta^{(2)}} \frac{E_{ji}^{(2)}}{E} \left(1 + \frac{\hbar \omega}{2E}\right) \left(1 + \tan \theta^{(2)} \frac{\delta q}{k \cos \theta_i}\right).\end{aligned}\tag{A.22}$$

Die erste Gleichung der Spinechobedingung (2.24) macht daraus

$$\begin{aligned}\Phi_{ij}^{(2)} &= \frac{k l}{\cos \theta^{(1)}} \frac{E_{ij}^{(1)}}{E} \left(1 + \frac{\hbar \omega}{2E}\right) \left(1 + \tan \theta^{(2)} \frac{\delta q}{k \cos \theta_i}\right) (1 - \alpha \tan \theta^{(1)}) \\ \vec{k}' \vec{D}_{ij}^{(2)} &= -\frac{k l}{2 \cos \theta^{(1)}} \frac{E_{ji}^{(1)}}{E} \left(1 + \frac{\hbar \omega}{2E}\right) \left(1 + \tan \theta^{(2)} \frac{\delta q}{k \cos \theta_i}\right) (1 - \alpha \tan \theta^{(1)}).\end{aligned}\tag{A.23}$$

Der Term  $\tan \theta^{(2)}$  kann noch mit Hilfe der zweiten Gleichung aus (2.24) ersetzt werden. Unter Beachtung der Tatsache, dass alle Gleichungen nur in erster Ordnung gültig sind, ergibt sich schließlich durch Ausmultiplizieren:

$$\begin{aligned}\Phi_{ij}^{(2)} &= -\Phi_{ij}^{(1)} + \frac{k l}{\cos \theta^{(1)}} \frac{E_{ij}^{(1)}}{E} \left(\frac{\hbar \omega}{2E} - \alpha \tan \theta^{(1)} - \frac{\delta q}{k \cos \theta_i} \tan \theta^{(1)}\right), \\ \vec{k}' \vec{D}_{ij}^{(2)} &= -\vec{k} \vec{D}_{ij}^{(1)} + \frac{k l}{2 \cos \theta^{(1)}} \frac{E_{ij}^{(1)}}{E} \left(\frac{\hbar \omega}{2E} - \alpha \tan \theta^{(1)} - \frac{\delta q}{k \cos \theta_i} \tan \theta^{(1)}\right).\end{aligned}\tag{A.24}$$

## A.5 Entwicklung von $\Phi_{ij}$ und $\vec{D}_{ij}^{(sc)}$ bei normalen Streu- und Aufspaltungsebenen

Wie im Fall der parallelen Anordnung von Streu- und Aufspaltungsebene wird zunächst ausgegangen von

$$\begin{aligned}\Phi_{ij}^{(2)} &= -\frac{|\vec{k}'|l}{\cos\theta^{(2)}} \frac{E_{ij}^{(2)}}{E} \\ \vec{k}' \vec{D}_{ij}^{(2)} &= \frac{|\vec{k}'|l}{2 \cos\theta^{(2)}}.\end{aligned}\tag{A.25}$$

In diese Gleichungen fließen die folgenden Modifikationen ein, um die realen Eigenschaften des Detektors zu berücksichtigen:

$$\begin{aligned}|\vec{k}'| = k' &\longrightarrow k \left(1 + \frac{\hbar\omega}{2E}\right) \\ \frac{1}{\cos\theta^{(2)}} &\longrightarrow \frac{1}{\cos\theta^{(2)}} \left(1 + \tan\theta^{(2)} \frac{\delta q}{k}\right).\end{aligned}\tag{A.26}$$

Dabei geht auch der im Vergleich zu (A.19) veränderte Zusammenhang (2.41) zwischen  $\delta q$  und  $\delta\alpha$  mit ein. Mit Hilfe obiger Modifikationen wird aus (A.25) schließlich

$$\begin{aligned}\Phi_{ij}^{(2)} &= -\frac{kl}{\cos\theta^{(2)}} \frac{E_{ij}^{(2)}}{E} \left(1 + \frac{\hbar\omega}{2E}\right) \left(1 + \tan\theta^{(2)} \frac{\delta q}{k}\right) \\ \vec{k}' \vec{D}_{ij}^{(2)} &= \frac{kl}{2 \cos\theta^{(2)}} \frac{E_{ji}^{(2)}}{E} \left(1 + \frac{\hbar\omega}{2E}\right) \left(1 + \tan\theta^{(2)} \frac{\delta q}{k}\right).\end{aligned}\tag{A.27}$$

Die Spinechobedingung (2.38) macht daraus

$$\begin{aligned}\Phi_{ij}^{(2)} &= \frac{kl}{\cos\theta^{(1)}} \frac{E_{ij}^{(1)}}{E} \left(1 + \frac{\hbar\omega}{2E}\right) \left(1 + \tan\theta^{(1)} \frac{\delta q}{k}\right) \\ \vec{k}' \vec{D}_{ij}^{(2)} &= -\frac{kl}{2 \cos\theta^{(1)}} \frac{E_{ji}^{(1)}}{E} \left(1 + \frac{\hbar\omega}{2E}\right) \left(1 + \tan\theta^{(1)} \frac{\delta q}{k}\right).\end{aligned}\tag{A.28}$$

Nach dem Ausmultiplizieren erhält man dann

$$\begin{aligned}\Phi_{ij}^{(2)} &= -\Phi_{ij}^{(1)} + \frac{kl}{\cos\theta^{(1)}} \frac{E_{ij}^{(1)}}{E} \left(\frac{\delta q}{k} \tan\theta^{(1)} + \frac{\hbar\omega}{2E}\right), \\ \vec{k}' \vec{D}_{ij}^{(2)} &= -\vec{k} \vec{D}_{ij}^{(1)} + \frac{kl}{2 \cos\theta^{(1)}} \frac{E_{ij}^{(1)}}{E} \left(\frac{\delta q}{k} \tan\theta^{(1)} + \frac{\hbar\omega}{2E}\right),\end{aligned}\tag{A.29}$$

wobei wieder nur Terme erster Ordnung in  $\delta q$  und  $\omega$  berücksichtigt werden.

## Anhang B

# Herstellung der drahterodierten Spinecho-Spulen

Die Fertigung der Spulen mit gewölbten Filamenten geschieht in mehreren Abschnitten:

- Zunächst werden aus einem massiven Kupferblock auf der Drahterodiermaschine mit einem Draht vom Durchmesser 0.25 mm die Rohlinge für die Schalen mit halbkreisförmigem Profil herausgeschnitten, wobei die Länge des Rohlings größer ist, als für die Schale benötigt. Dadurch kann der Rohling im weiteren Bearbeitungsprozess auf eine spezielle Vorrichtung gespannt werden. Die Innen- und Außendurchmesser der Schalen sind so dimensioniert, dass sie später konzentrisch ineinander passen. Die Schnittbreite des verwendeten Drahtes liegt bei etwa 0.30 bis 0.35 mm. Das Außenmaß des äußersten Rohlings ist so gewählt, dass zwischen die  $\mu$ -Metall-Abschirmung und die Schale gerade noch eine isolierende Lage aus Kapton-Folie passt.
- Die aus dem Vollen erodierten Rohlinge werden mit den nötigen Bohrungen versehen. Dazu zählen die Passbohrungen an den Enden zum Ausrichten der einzelnen Schalen untereinander sowie der beiden Teilspulen zueinander, die notwendige Aussparung für die Stromzuführung zur innersten Schale aber auch Bohrungen zum Befestigen der Rohlinge während des Schneidens der Filamente.
- Die eingespannten Rohlinge werden nun mit den Filamenten versehen. Dies geschieht ebenfalls mit der Drahterodiermaschine. Damit ergibt sich ein Abstand von maximal 0.35 mm zwischen den Wicklungen eines Filamentes.
- Anschließend werden die Schalen auf die richtige Länge gekürzt.
- Im nächsten Arbeitsgang werden jeweils die Filamente der beiden inneren und der beiden äußeren Schalen miteinander kontaktiert. Dies geschieht an den in Abb. 4.18 mit Kreisen markierten Stellen mittels Hartlot, um eine ausreichende Temperaturstabilität der Verbindung zu gewährleisten. Danach werden im Fall der vierlagigen Spule die äußeren und inneren Schalenpaare miteinander verbunden, auch dies geschieht mit Hartlot. Während dieses Vorgangs dient Fühlerlehrenband als Abstandshalter bzw. zum Ausrichten der Filamente zueinander.
- Die äußerste und die innerste Schale werden mit den Anschlussdrähten versehen (ebenfalls hartgelötet). Diese haben einen Leitungsquerschnitt von etwa 1 mm<sup>2</sup>.
- Erst danach werden die Schichten aus isolierender Kaptonfolie zwischen die einzelnen Schalen gebracht – was in Abb. B.1 zu sehen ist<sup>1</sup> – und alle Filamente in ihrer endgültigen Position fixiert. Hierbei ist besonders darauf zu achten, dass keine Kurzschlüsse zwischen den einzelnen Lagen und zwischen den Wicklungen einer Lage selbst entstehen.

---

<sup>1</sup>In der genannten Abb. ist allerdings nur eine zweilagige Ausführung der Spule gezeigt.

- Im letzten Arbeitsschritt werden die beiden Teilspulen ausgerichtet (siehe dazu Abb. B.2<sup>1</sup>) und die verbleibenden Hohlräume (bis auf die Aussparung für den Strahl) mit Araldite 2020 A/B<sup>2</sup> ausgegossen. Um ein späteres Ausgasen des Kunstharzes in der Spinecho-Anordnung zu verhindern, sind die beiden Komponenten sehr sorgfältig zu verrühren und anschließend unter Vorvakuumbedingungen von eingerührten Lufteinschlüssen zu befreien. Nach dem Aushärten ist die Spule in ihrer endgültigen Form und bereit zum Einbau in die Spinechoanordnung.

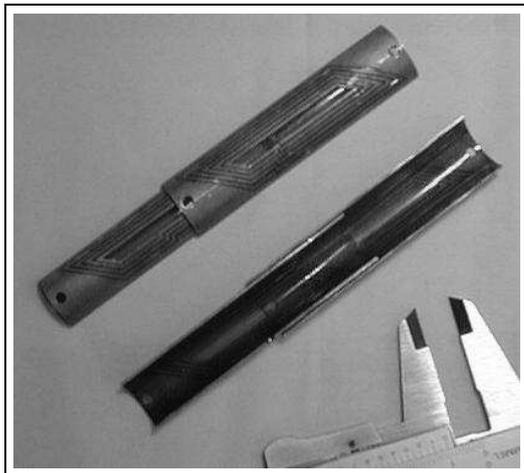


Abbildung B.1: Die beiden äußeren Schalen der beiden Teilspulen für eine Spinecho-Spule vor dem Kontaktieren. Gut zu erkennen ist, wie die einzelnen Schalen ineinander passen. Auch die Isolierung dazwischen ist zu sehen. Die ebenfalls abgebildete Schieblehre zeigt ein Maß von 1 cm an.

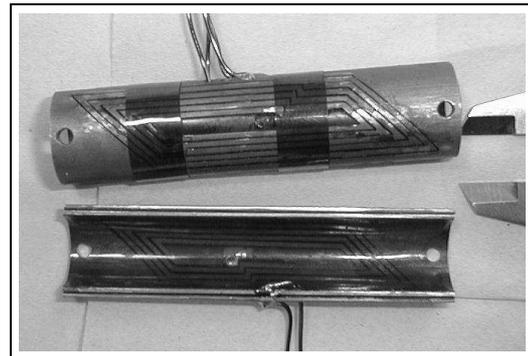


Abbildung B.2: Die obere Spule ist fertig kontaktiert. Sie besteht aus Teilspulen mit jeweils nur zwei Schalen, die im nächsten Arbeitsschritt noch aufeinander ausgerichtet werden müssen. Unten ist eine Teilspule der anderen Spinecho-Spule zu sehen. Hier ist die Kontaktierung für die Stromversorgung zu erkennen. Die Schieblehre zeigt wieder 1 cm an.

<sup>2</sup>Araldite ist ein farbloser, transparenter Zweikomponentenklebstoff auf Epoxidharzbasis der Firma CIBA, das während der Verarbeitung eine Viskosität ähnlich der von Wasser besitzt. Es eignet sich daher besonders gut, um enge Zwischenräume aufgrund ihrer Kapillarwirkung auszufüllen. Schon bei der Herstellung der longitudinalen Spinecho-Spulen [62] wurden gute Erfahrungen damit gemacht.

# Abbildungsverzeichnis

1.1	Spinecho-Experiment schematisch . . . . .	3
1.2	Spinrotation für ein Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen . . . . .	5
1.3	Zeeman-Diagramm und Fahrplanmodell . . . . .	9
1.4	Breit-Rabi-Diagramm und Fahrplanmodell . . . . .	12
1.5	Spinecho-Kurve für Wasserstoff . . . . .	15
1.6	Zur Bestimmung der Polarisierung . . . . .	17
1.7	Interferenzen bei $\Delta I = 0$ durch Trennung der SE-Gruppen bei zunehmendem $B_0$ -Strom . . . . .	18
1.8	Trennung der einzelnen Spinecho-Gruppen . . . . .	20
2.1	Vergleich von longitudinalem und transversalem Spinecho-Feld . . . . .	21
2.2	Gekippte Rechteck-Spule . . . . .	23
2.3	Modifiziertes Fahrplanmodell . . . . .	25
2.4	Zusammenhang zwischen $S(\vec{q}, \omega)$ , $I(\vec{q}, t)$ und $G(\vec{r}, t)$ . . . . .	26
2.5	Schematische Darstellung einer Spinecho-Streugeometrie . . . . .	28
2.6	Parameter bei der Streuung an einer Oberfläche . . . . .	29
2.7	Streugeometrie bei Versatz in der Streuebene . . . . .	30
2.8	Veränderung des Versatzes durch Streuung . . . . .	31
2.9	Streugeometrie mit Aufspaltungsebene normal zur Streuebene . . . . .	35
3.1	Schematischer Aufbau der Atomstrahl-Spinecho-Maschine . . . . .	42
3.2	RF-Quelle für atomaren Wasserstoff . . . . .	43
3.3	Flugzeitmessungen an einem He-Strahl . . . . .	44
3.4	Feldvektoren eines idealen Sextupolmagneten . . . . .	44
3.5	Verlauf der magnetischen Momente der Hyperfeinzustände von Wasserstoff . . . . .	45
3.6	Die verwendete $\mu$ -Metall-Abschirmung . . . . .	46
3.7	Schema eines Quadrupol-Massenspektrometers . . . . .	47
3.8	Schematischer Aufbau des Vakuumsystems . . . . .	48
4.1	Erste Version der Transversalspulen . . . . .	51
4.2	Blick auf die fertige Spule . . . . .	52
4.3	Realisierung der Parallelogramm-Geometrie für die Simulation . . . . .	53
4.4	Gemessener Verlauf des transversalen Magnetfelds der gewickelten Spule . . . . .	54
4.5	Simulierter Verlauf des transversalen Magnetfelds der gewickelten Spule . . . . .	54
4.6	Simulierter Feldverlauf auf der Strahlachse außerhalb der Spule . . . . .	54

4.7	Gewickelte Spule: Verlauf der $y$ -Komponente des Magnetfelds für $x = 0$ . . . . .	55
4.8	Gewickelte Spule: Verlauf der $y$ -Komponente des Magnetfelds für $z = 0.25$ mm . . . . .	56
4.9	Gewickelte Spule: Inhomogenitäten des Feldintegrals . . . . .	57
4.10	Gewickelte Spule: Polarisationsverlust durch Inhomogenitäten der Feldintegrale . . . . .	58
4.11	Gewickelte Spule: Präzessionsphase nach der ersten Spinecho-Spule auf der Strahlachse . . . . .	58
4.12	Realisierung der Parallelogramm-Geometrie mit abgerundeten Ecken für die Simulation . . . . .	59
4.13	Vergleich der $B_z$ -Komponente beider Geometrien auf der Strahlachse . . . . .	60
4.14	Vergleich der $B_z$ -Komponenten beider Geometrien abseits der Strahlachse . . . . .	60
4.15	Unterschiede bei $B_x$ und $B_y$ zwischen den Geometrien mit und ohne abgerundete Ecken . . . . .	61
4.16	Gewickelte Spule: Inhomogenität des Feldintegrals bei abgerundeten Ecken . . . . .	62
4.17	Erster Entwurf für das Filament einer drahterodierten Spule . . . . .	63
4.18	Schnitt durch eine Spinecho-Spule mit gewölbten Filamenten . . . . .	64
4.19	Die fertig kontaktierten Teilsulen . . . . .	65
4.20	Weiterer Schnitt durch die erodierte Spinecho-Spule . . . . .	66
4.21	Magnetfeld-Vektor für eine Spule mit gewölbten Filamenten in zwei Lagen . . . . .	67
4.22	Gemessener Verlauf des transversalen Magnetfelds $B_z$ der erodierten Spule . . . . .	67
4.23	Simulierter Verlauf der $z$ -Komponente des Magnetfelds der erodierten Spule . . . . .	67
4.24	Erodierte Spule: Verlauf der $y$ -Komponente des Magnetfelds für $x = 0$ . . . . .	68
4.25	Erodierte Spule: Verlauf der $y$ -Komponente des Magnetfelds für $z = 0.25$ mm . . . . .	69
4.26	Erodierte Spule: Inhomogenität des Feldintegrals . . . . .	69
4.27	Erodierte Spule: Verlauf der Polarisation . . . . .	70
4.28	Erodierte Spule: Präzessionsphasen nach der ersten Spinecho-Spule auf der Strahlachse . . . . .	70
4.29	Gewickelte Spule: Gemessene Spinrotation . . . . .	71
4.30	Gewickelte Spule: Vorhersage für die Position der einzelnen Spinecho-Punkte . . . . .	71
4.31	Gewickelte Spule: Gemessene Spinecho-Kurven . . . . .	72
4.32	Gewickelte Spule: Vergleich zwischen gemessenem und idealem Verlauf der Polarisation . . . . .	73
4.33	Erodierte Spule: Gemessene Spinrotation . . . . .	74
4.34	Erodierte Spule: Vorhersage der Spinecho-Punkte . . . . .	74
4.35	Erodierte Spule: Gemessenes Spinecho . . . . .	74
4.36	Breit-Rabi-Diagramm für Wasserstoff im Magnetfeld der zweilagigen, erodierten Spule . . . . .	75
4.37	Erodierte Spule: Präzessionsphasen nach der ersten Spinecho-Spule auf der Strahlachse . . . . .	75
4.38	Erodierte Spule: Gemessene Kurven der eigentlichen SE-Gruppe . . . . .	76
4.39	Erodierte Spule: Vergleich zwischen gemessenem und idealem Polarisationsverlauf . . . . .	77
4.40	Vergleich der Polarisationsverläufe bei gewickelten und drahterodierten Spinecho-Sulen . . . . .	78
4.41	Zur Vermeidung von Streufeldern . . . . .	79
4.42	Gewickelte Spule: Spinecho-Messung mit drei Gruppen . . . . .	79
4.43	Fahrplan für Spin $\frac{1}{2}$ mit erneuter Quantisierung in 2. SE-Spule . . . . .	80
4.44	Fahrplan für Spin 1, erneute Quantisierung in 2. SE-Spule, 2. SE-Spule durchgestimmt . . . . .	81
4.45	Fahrplan für Spin 1, erneute Quantisierung in 2. SE-Spule, 1. SE-Spule volles Feldintegral . . . . .	82
4.46	Fahrplan für Spin 1, ern. Quant. in 2. SE-Spule, verschwindendes und halbes Feldintegral . . . . .	83
4.47	Position der Spinecho-Punkte aller gefundenen Gruppen (inkl. Streufeld-Gruppen) . . . . .	84
5.1	Maxwell-Boltzmann-Verteilung . . . . .	88

5.2	Flugzeitverteilung für einen effusiven Strahl aus Helium . . . . .	89
5.3	Zur mittleren freien Weglänge . . . . .	89
5.4	Effusion durch eine Düse . . . . .	90
5.5	Effusive Geschwindigkeitsverteilung bei verschiedenen Temperaturen . . . . .	91
5.6	Effusive Geschwindigkeitsverteilung bei verschiedenen Strahlteilchen . . . . .	91
5.7	Winkelverteilung der Strahlintensität bei dünnwandiger Düse . . . . .	91
5.8	Geschwindigkeitsverteilung für Fluss und Anzahldichte . . . . .	92
5.9	Winkelverteilung der Strahlintensität bei kanalförmiger Düse . . . . .	93
5.10	Überschallexpansion aus einer Düse . . . . .	94
5.11	Strömungsfeld mit Stromfaden . . . . .	95
5.12	Geschwindigkeitsverteilung eines Überschallstrahls bei verschiedenen Strahltemperaturen . . . . .	97
5.13	Geschwindigkeits- und Winkelverteilung eines überschallschnellen Argonstrahls . . . . .	98
5.14	Vergleich zwischen Geschwindigkeits- und Flugzeitverteilung . . . . .	99
5.15	Wichtige Eigenschaften eines Edelgas-Überschallstrahls . . . . .	100
6.1	Zündspannung für verschiedene Gase . . . . .	102
6.2	Wirkungsquerschnitt $Q$ für die Dissoziation von molekularem Wasserstoff . . . . .	104
6.3	Wirkungsquerschnitt für Elektronenstoßanregung von Helium . . . . .	105
6.4	Abregungsmechanismen metastabiler Edelgasatome $X^*$ an einer Metall-Oberfläche . . . . .	106
6.5	Mikroskopische Aufsicht auf eine GEM . . . . .	107
6.6	Brennende $N_2$ -Gasentladung an einer GEM . . . . .	107
6.7	$I(U)$ -Kennlinie einer $N_2$ -Gasentladung an einer GEM . . . . .	108
6.8	Schematische Darstellung des Düsenflansches der DC-Quelle . . . . .	109
6.9	Aufbau einer Mikroelektrodenstruktur . . . . .	110
6.10	$N_2$ -Gasentladung im Entladungskanal . . . . .	111
6.11	Blick entgegen der Strahlrichtung auf eine Gasentladung mit $N_2$ . . . . .	112
6.12	Blick von oben auf die DC-Quelle beim Betrieb mit Helium . . . . .	112
6.13	Seitlicher Schnitt durch den Quellenteststand bei den Messungen mit metastabilem Helium . . . . .	113
6.14	Rohdaten eines gemessenen Flugzeitspektrums . . . . .	114
6.15	Flugzeitspektrum aus Abb. 6.14 bei einem Düsendruck von 180 mbar . . . . .	114
6.16	Flugzeitspektren bei einem Düsendruck von 320 mbar und 540 mbar . . . . .	114
6.17	Positionsabhängigkeit der Intensität des Heliumstrahls . . . . .	115
6.18	Positionsabhängigkeit des Verhältnisses von Signal zu Untergrund . . . . .	115
6.19	$I(U)$ -Diagramm einer Wasserstoffentladung an der Düse einer Mikroelektrodenstruktur . . . . .	116
7.1	Notwendige Drehfrequenz des Rotors bei gegebener Bahngeschwindigkeit . . . . .	120
7.2	Seitenansicht der Quellschleife mit Motor und Drehdurchführung . . . . .	121
7.3	Der eingesetzte Rotor auf der Drehdurchführung . . . . .	121
7.4	Zur Begrenzung der minimalen Geschwindigkeit . . . . .	122
7.5	Minimal messbare Geschwindigkeit . . . . .	123
7.6	Zugbelastung bei zylindrischem Profil . . . . .	125
7.7	Zugbelastung bei konischem Profil . . . . .	125
7.8	Drucküberhöhung an der Düse durch die Zentrifugalkraft für verschiedene Edelgase . . . . .	127

7.9	Zur Transformation vom Ruhesystem der Düse ins Laborsystem . . . . .	128
7.10	Winkel- und Geschwindigkeitsverteilung für einen Argonstrahl aus einer bewegten Düse . . . . .	129
7.11	Geschwindigkeitsverteilungen für einen Argonstrahl in Vorwärtsrichtung . . . . .	130
7.12	Schnitt durch die Quellkammer in der Aufsicht . . . . .	131
7.13	Seitlicher Schnitt durch den Quellenteststand bei den Messungen mit der rotierenden Quelle . . . . .	132
7.14	Rohdaten eines Flugzeitspektrums von $^{131}\text{Xe}$ bei einer Düsenfrequenz von 92.5 Hz . . . . .	133
7.15	Flugzeitspektrum von Xenon bei ungefähr 116 Hz Düsenfrequenz . . . . .	133
7.16	Zur Rotoröffnungsfunktion . . . . .	135
7.17	Einfluss der Rotorlänge auf die gemessenen Flugzeitspektren . . . . .	136
7.18	Rohdaten einer Messung mit Argon und korrigiertes Spektrum . . . . .	137
7.19	Aus den Messungen bestimmte Terminal speed ratio bei Verwendung von Argon . . . . .	138
7.20	Gemessene Strömungsgeschwindigkeit im Laborsystem . . . . .	139
7.21	Zum rückwärts gerichteten Strömungsgeschwindigkeit . . . . .	141
A.1	Gekippte Rechteck-Spule zur Erzeugung eines longitudinalen und transversalen Versatzes . . . . .	147
A.2	Veränderung des Versatzes durch Streuung . . . . .	149
B.1	Die beiden äußeren Schalen der Teilspulen für eine Spinecho-Spule . . . . .	154
B.2	Die fertig kontaktierten Teilspulen . . . . .	154

# Tabellenverzeichnis

1.1	$g$ -Faktoren, magnetische und gyromagnetische Momente einiger Nukleonen und Atome. . . . .	4
4.1	Spulen-Konstanten für die drahterodierten Spulen . . . . .	70
5.1	Maximal mögliche mittlere Geschwindigkeiten für einige Gase . . . . .	96
7.1	Zugfestigkeit und Dichte verschiedener Materialien . . . . .	124



# Literaturverzeichnis

- [1] I. Estermann und O. Stern. *Z. Phys.*, 73: S. 384 (1931). i
- [2] F. Mezei. *Neutron Spin Echo: A New Concept in Polarized Thermal Neutron Techniques*. *Z. Phys.*, 255: S. 146–160 (1972). i, 3, 26
- [3] E. L. Hahn. *Spin Echos*. *Phys. Rev.*, 80: S. 580 (1950). i
- [4] M. DeKieviet, D. Dubbers, C. Schmidt, D. Scholz und U. Spinola. *<sup>3</sup>He Spin Echo: A New Atomic Beam Technique for Probing Phenomena in the nev Range*. *Phys. Rev. Lett.*, 75: S. 1919–1922 (1995). i, 3
- [5] M. DeKieviet, D. Dubbers, M. Klein, C. Schmidt und M. Skrzypczyk. *Surface Science using Molecular Beam Spin Echo*. *Surf. Sci.* (1997). i
- [6] S. Hafner. *Messung dynamischer Systeme mit dem <sup>3</sup>He-Atomstrahl-Spinecho-Spektrometer*. Doktorarbeit, Physikalisches Institut der Universität Heidelberg (1999). i, 10, 26, 30, 36
- [7] M. Zielonkowski, J. Steiger, U. Schünemann, M. DeKieviet und R. Grimm. *Optically induced spin precession and echo in an atomic beam*. *Phys. Rev.*, 58: S. 3993–3998 (1998). i
- [8] A. Reiner. *Aufbau und Test einer Wasserstoff- und Deuteriumstrahlspinechomaschine*. Doktorarbeit, Physikalisches Institut der Universität Heidelberg (1998). i, ii, 16, 17, 22, 24, 29, 43, 44, 47, 51, 53, 54, 58, 59, 70, 71, 73, 143
- [9] S. Heinze, M. Bode, A. Kubetzka, O. Pietzsch, X. Nie, S. Blügel und R. Wiesendanger. *Real-Space Imaging of Two-Dimensional Antiferromagnetism on the Atomic Scale*. *Science*, 288: S. 1805–1808 (2000). i
- [10] M. Gupta und D. Herschbach. *A Mechanical Means to Produce Intense Beams of Slow Molecules*. *J. Phys. Chem.*, 103: S. 10670–10673 (1999). ii, 120
- [11] R. Gähler, R. Golub, K. Habicht, T. Keller und J. Felber. *Space-time description of neutron spin echo spectrometry*. *Physica B*, 229: S. 1–17 (1996). 4, 22, 23, 26, 39
- [12] J. J. Sakurai. *Modern quantum mechanics*. Addison-Wesley Publishing Company (1995). 8, 12
- [13] R. Shankar. *Principles of Quantum Mechanics*. Plenum Press (1980). 13, 27
- [14] R. P. Feynman und A. R. Hibbs. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. McGraw-Hill (1965). 13
- [15] K. Blum. *Density Matrix Theory and Applications*. Plenum Press (1981). 17
- [16] L. van Hove. *Correlations in Space and Time and Born Approximation Scattering in Systems of Interacting Particles*. *Phys. Rev.*, 95, Nr. 1: S. 249–262 (1954). 26, 39
- [17] C. J. Schmidt. *Entwicklung, Aufbau und Erprobung eines <sup>3</sup>Helium-Atomstrahl-Spinecho-Spektrometers für die Untersuchung des dynamischen Verhaltens zweidimensionaler Systeme*. Doktorarbeit, Physikalisches Institut der Universität Heidelberg (1996). 26, 29, 48, 53

- [18] P. Spoden. *Konzeption eines H-Atomstrahl-Spinechospektrometers und theoretische Grundlagen zur direkten Bestimmung dynamischer 2D-Korrelationsfunktionen*. Diplomarbeit, Physikalisches Institut der Universität Heidelberg (1999). 22, 23, 29, 35, 38, 147, 149
- [19] P. M. Chaikin und T. C. Lubensky. *Principles of condensed matter physics*. Cambridge University Press (1995). 39
- [20] R. C. Weast, Hg. *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. CRC Press (1988). 42, 132
- [21] E. Cavanna, A. Gussoni, L. Mattera, S. Terreni, F. Tommasini und U. Valbusa. *Molecular beam apparatus for gas surface studies*. J. Vac. Sci. Techn., 19: S. 161–166 (1981). 42
- [22] A. Reiner. *Entwicklung und Bau von Komponenten für das Wasserstoff-Spin-Echo-Experiment*. Diplomarbeit, Physikalisches Institut der Universität Heidelberg (1995). 45
- [23] N. Haverkamp. *Entwicklung von Detektoren für einen Wasserstoff-Atomstrahl und für ultra-kalte Neutronen*. Diplomarbeit, Physikalisches Institut der Universität Heidelberg (2000). 47, 48
- [24] M. W. Rößler. Private Mitteilung (1998). 52, 54
- [25] J. Hayter und R. Pynn. *On the Production of Homogeneous Field Integrals for Neutron Spin Echo*. Technischer Bericht, Institut Laue-Langevin (1981). 57
- [26] W. G. Bouwman, M. van Oossanen, O. Uca, W. H. Kraan und M. T. Rekveldt. *Development of spin-echo small-angle neutron scattering*. J. Appl. Cryst., 33: S. 767–770 (2000). 63
- [27] W. Häußler. *Weiterentwicklung, Aufbau und Test eines Resonanzspinecho-Spektrometers zum Einsatz eines Multidetektors*. Doktorarbeit, Physikalisches Institut der Universität Heidelberg (1998). 64
- [28] R. Simon. *Neutronenmetalloptik und anomale Larmorpräzession*. Doktorarbeit, Physikalisches Institut der Universität Heidelberg (1998). 64
- [29] J. H. Moore, C. C. Davis und M. A. Coplan. *Building scientific apparatus: a practical guide to design and construction*. Addison-Wesley Publishing Company, 11. Auflage (1997). 89
- [30] G. M. Barrow. *Physical Chemistry*. McGraw-Hill Inc., 4. Auflage (1979). 89
- [31] H. Pauly. *Atomic and Molecular Beam Methods*, G. Scoles, Hg., Band 1, Kapitel Other Low-Energy Beam Sources, S. 83–123. Oxford University Press (1988). 93
- [32] D. R. Miller. *Atomic and Molecular Beam Methods*, G. Scoles, Hg., Band 1, Kapitel Free Jet Sources, S. 14–53. Oxford University Press (1988). 93, 94, 100
- [33] H. G. Nöller. *Theorie und Praxis der Vakuumtechnik*, W. Walcher und H. Adam, Hg., Kapitel Gasdynamik. Friedr. Vieweg & Sohn (1982). 95
- [34] J. B. Anderson und J. B. Fenn. *Velocity Distributions in Molecular Beams from Nozzle Sources*. Phys. Fluids, 8, Nr. 5: S. 780–787 (1965). 100
- [35] J. P. Toennies und K. Winkelmann. *Theoretical studies of highly expanded free jets: Influence of quantum effects and a realistic intermolecular potential*. J. Chem. Phys., 66, Nr. 9: S. 3965–3979 (1977). 100
- [36] R. Frank. *Theorie und Praxis der Vakuumtechnik*, W. Walcher und H. Adam, Hg., Kapitel Molekularpumpen. Friedr. Vieweg & Sohn (1982). 101
- [37] K. G. Tschersich. *Intensity of a source of atomic hydrogen based on a hot capillary*. J. Appl. Phys., 87: S. 2565–2573 (2000). 101
- [38] Y. P. Raizer. *Gas Discharge Physics*. Springer Verlag (1997). 102

- [39] R. W. Wood. *An Extension of the Balmer Series of Hydrogen and Spectroscopic Phenomena of very long Vacuum Tubes*. Proc. Roy. Soc., 97: S. 455–472 (1920). 102
- [40] S. J. B. Corrigan. *Dissociation of Molecular Hydrogen by Electron Impact*. J. Chem. Phys., 43, Nr. 12: S. 4381–4386 (1965). 103, 104
- [41] K. Sawada und T. Fujimoto. *Effective ionisation and dissociation rate coefficients of molecular hydrogen in plasma*. J. Appl. Phys., 78: S. 2913–2924 (1995). 103, 104
- [42] G. A. Khayrallah. *Electron impact dissociation of molecular hydrogen and deuterium: production of atomic hydrogen and deuterium  $\alpha$ ,  $\beta$ , and  $\gamma$  Balmer lines*. Phys. Rev. A, 13: S. 1989–2003 (1976). 103, 104
- [43] A. Crowe und J. W. McConkey. *Dissociative ionization by electron impact. I. Protons from  $H_2$* . J. Phys. B, 6: S. 2088–2107 (1973). 104
- [44] N. Koch. *Bau und Optimierung eines Dissoziators für Wasserstoff und Deuterium*. Diplomarbeit, Physikalisches Institut der Universität Nürnberg (1995). 104
- [45] J. B. Taylor und I. Langmuir. *The Evaporation of Atoms, Ions and Electrons from Cesium Films on Tungsten*. Phys. Rev., S. 423–458 (1933). 104
- [46] S. Datz und E. H. Taylor. *Ionization on Platinum and Tungsten Surfaces. I. The Alkali Metals*. J. Chem. Phys., 25: S. 389–397 (1956). 105
- [47] K. Bartschat. *Electron-impact excitation of helium from the  $1^1S$  and  $2^3S$  states*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys, 31: S. L469–L476 (1998). 105
- [48] W. Sesselmann, B. Woratschek, J. Küppers und G. Ertl. *Interaction of metastable noble-gas atoms with transition-metal surfaces: Resonance ionization and Auger neutralization*. Phys. Rev. B, 35: S. 1547–1559 (1987). 105, 106
- [49] J.-G. Wang, T. Kato und I. Murakami. *Dielectronic recombination rate coefficients for excited states of He from  $He^+$* . Phys. Rev. A, 60: S. 3750–3755 (1999). 105
- [50] H. Conrad, G. Doyen, G. Ertl, J. Küppers und W. Sesselmann. *Reflection of metastable He Atoms from solid Surfaces*. Chem. Phys. Lett., 88: S. 281–285 (1982). 105
- [51] F. Sauli. *GEM: A new concept for electron amplification in gas detectors*. Nucl. Instr. and Meth. A, 386: S. 531–534 (1997). 107
- [52] M. O. Klein. *Experimente zur Quantenmechanik mit ultrakalten Neutronen und Entwicklung eines neuen Detektors zum ortsaufgelösten Nachweis von thermischen Neutronen auf großen Flächen*. Doktorarbeit, Physikalisches Institut der Universität Heidelberg (2000). 107
- [53] M. Theis. *Aufbau und erste Tests des Wasserstoff-Spinocho-Spektrometers*. Diplomarbeit, Physikalisches Institut der Universität Heidelberg (2000). 108, 110
- [54] E. Wanetzky. *Theorie und Praxis der Vakuumtechnik*, Kapitel Strömungsvorgänge. Friedr. Vieweg & Sohn (1982). 115
- [55] P. B. Moon, C. T. Rettner und J. P. Simons. *Rotor accelerated molecular beams*. J. Chem. Soc. Faraday Trans. II, 74: S. 630–643 (1978).
- [56] M. Gupta und D. Herschbach. *Slowing and Speeding Molecular Beams by Means of a Rapidly Rotating Source*. J. Phys. Chem. A, 105, Nr. 9: S. 1626–1637 (2001). 120, 123, 141
- [57] H. J. Loesch. *A Fast Rotating Supersonic Nozzle as Source for Ultra-cold Molecules* (2002). <http://www.physik.uni-bielefeld.de/experi/d2/loesch/pdf/rot.pdf>. 120

- [58] K. Zrost. *Entwicklung und Aufbau einer Quelle für langsame und kalte Atom- und Molekülstrahlen*. Diplomarbeit, Physikalisches Institut der Universität Heidelberg (2002). 120
- [59] T. Fließbach. *Statistische Physik*. Spektrum Akademischer Verlag (1995). 127
- [60] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling und B. P. Flannery. *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 2. Auflage (1992). 134
- [61] C. E. Klots. *Rotational relaxation in sonic nozzle expansions*. J. Chem. Phys., 72, Nr. 1: S. 192–197 (1980). 138
- [62] S. Hafner. *Weiterführung des Aufbaus eines H-Spincho-Experiments und erste Tests*. Diplomarbeit, Physikalisches Institut der Universität Heidelberg (1996). 154

# Dankeschön

An dieser Stelle sei allen, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben, für die Zusammenarbeit und Unterstützung gedankt.

An erster Stelle möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. Dirk Dubbers für die Aufnahme als Doktorand in seiner Arbeitsgruppe bedanken.

Maarten DeKieviet möchte ich für sein offenes Ohr danken, ebenso für seine Ideen, die oft den Ausweg brachten, wenn die Situation mal wieder aussichtslos erschien.

Auch Ulrich Schmidt gebührt mein Dank dafür, dass er so manches meiner Probleme zu seinem eigenen gemacht hat.

Bei den Diplomanden Peter Spoden, Mario Rößler, Matthias Theis, Frank Eisele, und Karl Zrost möchte ich mich ebenfalls bedanken. Durch ihr Interesse und Engagement haben sie die Experimente entscheidend mitgeprägt und vorangebracht. Den Diplomanden Sascha Epp und Martin Dürr danke ich für die tatkräftige Mithilfe bei den Experimenten während der Phase des Zusammenschreibens. Ich hoffe, dass sie die Experimente erfolgreich weiterführen, sodass diese für ihre eigenen Arbeiten Früchte tragen werden.

Ein herzliches Dankeschön geht an die Korrekturleser Barbara Böhm, meine Schwester Barbara, Kerstin Schindler, Holger Teichert und Viola Droujinina. Vielen Dank auch den anderen Mitgliedern der Arbeitsgruppe für das nette Arbeitsklima, in dem sich physikalische und nicht-physikalische Probleme besprechen ließen.

Bedanken möchte ich mich ebenfalls bei den mechanischen und elektronischen Werkstätten hier im Hause, die bei den verschiedensten Problemen immer helfend zur Seite standen. Bernhard Haaf und Stefan Hetzel von der Drahterodiermaschine sei in diesem Zusammenhang besonders für ihren Einsatz bei der doch recht komplizierten Herstellung der Einzelteile für die Transversalspulen gedankt.

Zu guter Letzt möchte ich mich noch bei meinen Eltern bedanken für ihre finanzielle und ideelle Unterstützung, die sie mir immerfort zukommen ließen. Leider durfte meine Mutter die Fertigstellung dieser Arbeit nicht mehr erleben, ich hätte es ihr so sehr gegönnt.