Fakultät für Physik und Astronomie

Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg

Diplomarbeit

Im Studiengang Physik

vorgelegt von

Henry Lauro López Carrera

geboren in Quito, Ecuador

2012

Prüfmethoden für den

nicht-depolarisierenden Neutronenleiter

von PERC

Die Diplomarbeit wurde von Henry Lauro López Carrera

ausgeführt am

Physikalischen Institut der Universität Heidelberg

unter der Betreuung von

Herrn Priv.-Doz. Dr. Ulrich Schmidt

Prüfmethoden für den nicht-depolarisierenden Neutronenleiter von PERC:

Das Instrument PERC wird zurzeit von einer internationalen Kollaboration an der Forschungs-Neutronenquelle Heinz Maier-Leibnitz (FRM II) aufgebaut. Die Ziele von PERC sind um eine Größenordnung verbesserte Messungen von Winkelkorrelationen und Energiespektren im Beta-Zerfall des Neutrons. Präzisionsmessungen dieses durch die schwache Wechselwirkung verursachten Prozesses dienen der Suche nach Physik jenseits des Standardmodells. Eine wesentliche Komponente von PERC ist ein nicht-depolarisierender, mit Superspiegeln beschichteter Neutronenleiter. Dieser erhält die hohe Neutronendichte, indem er die Strahldivergenz vermeidet und somit eine zuvor nicht erreichte hohe Rate an Neutronenzerfallsereignissen zur Verfügung stellt. Im Physikalischen Institut der Universität Heidelberg werden dazu mittels einer Sputtermaschine Superspiegel-Proben hergestellt, welche in der hier vorgestellten Diplomarbeit auf ihre Schichtdicke und ihre Depolarisationseigenschaften untersucht wurden. Für die Schichtdickenbestimmung dieser Proben wurde die leicht zugängliche Methode der Spektralphotometrie gewählt. Das bisher benutzte theoretische Modell wurde um die Dichteabhängigkeit des Brechungsindex erweitert. Mehrere technische Verbesserungen wurden am Photometer vorgenommen, um ein genaueres und effizienteres Messverfahren zu erreichen. Mit dem Ziel, die Depolarisationseffekte der Superspiegel-Proben an einem polarisierten Neutronenstrahl zu testen, wurde im Rahmen dieser Arbeit ein Neutronenreflektometer entwickelt und gebaut. Mit diesem Aufbau können erstmalig Superspiegel-Proben in einem Magnetfeld von bis zu 2 T auf ihre Depolarisationseigenschaften mit einer Genauigkeit von 10^{-4} untersucht werden.

A test bench for the non-depolarising neutron guide of PERC:

The instrument PERC is currently being constructed by an international cooperation at the research reactor FRM II. The aim of PERC is an improvement on the accuracy of angular correlation coefficients and energy spectra in the beta decay of free neutrons by one order of magnitude. These precision measurements on this semi-leptonic weak decay process are used for searches for physics beyond the standard model.

An essential part of PERC is a non-depolarizing, supermirror coated neutron guide. This guide conserves the high neutron density by avoiding the beam's divergence and thus delivers an unprecedented high rate of neutron decay products. At the Physikalisches Institut (Universität Heidelberg) supermirror samples are produced with the help of a sputter machine. Within this thesis, these samples were analyzed with respect to the thickness of the layers, as well as their depolarization properties. Thicknesses were measured using spectrophotometry. The theoretical model was extended to account for the density dependence of the refractive index. Technical improvements to the photometer were implemented to improve the efficiency of the measurements.

A neutron reflectometer was designed and constructed to test depolarization effects of the supermirror samples. With this setup, supermirror samples in a magnetic field of up to $2 \,\mathrm{T}$ can be analyzed with an accuracy of 10^{-4} for the first time.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Der Beta-Zerfall des Neutrons	5
3	PERC: Proton and Electron Radiation Channel 3.1Aufbau von PERC3.2Nicht-depolarisierender Neutronenleiter für PERC	9 9 11
4	Schichtdickenbestimmung: Spektralphotometrie 4.1 Theoretischer Hintergrund	 14 14 19 22 23 25 27 30 35
5	Depolarisationsmessung: Neutronenreflektometrie5.1Reflektometer5.2Polarisator/Analysator5.3Spin Flipper5.3.1Theoretischer Hintergrund5.3.2Spinflipper Design5.4Supraleitender Magnet: Perkino5.5CASCADE Detektor5.6Gesamt-Magnetfeldkonfiguration des Reflektometers	41 43 44 44 50 55 55 57
6	Zusammenfassung	59
Α	Abbildungsverzeichnis	61
В	Literaturverzeichnis	62

1 Einleitung

Bereits ca. 500 Jahre v. Chr. behaupteten die hinduistischen Philosophieschulen in den Nyaya und Vaisheshika und die griechischen Philosophen Demokrit und Leukippos im antiken Griechenland, dass Materie aus kleinen, unteilbaren Teilchen bestehe. Obwohl diese Vorstellung sich im Laufe der Geschichte immer wieder verändert und entwickelt hat, ist sie heutzutage in der modernen Wissenschaft noch immer präsent: Nach dem Standardmodell der Teilchenphysik sind die sogenannten Elementarteilchen die kleinsten bekannten Bausteine der Materie.

Bis ins 19. Jahrhundert hinein wurden die heute als Atome bekannten Teilchen als unteilbar interpretiert. Erst Rutherford erkannte 1909, dass der größte Teil der Masse eines Atoms in seiner Mitte konzentriert und positiv geladen ist. Mit Hilfe der damals entwickelten Massenspektrometrie postulierte er 1920 den Aufbau der Atomkerne aus zwei verschiedenen Teilchen, dem Proton und dem Neutron. Erst 1932 gelang es James Chadwick [13], einem Schüler Rutherfords, das Neutron als freies Teilchen nachzuweisen, als er ein Experiment des Ehepaares Curie wiederholte: Die Strahlung, die entsteht, wenn Beryllium mit Alphastrahlung beschossen wird, war in der Lage, aus Paraffin Teilchen mit hoher Energie herauszuschlagen. Es handelte sich dabei um eine Strahlung aus Teilchen, die ungefähr die Masse von Protonen besitzen, jedoch elektrisch neutral sind. Er nannte diese Teilchen im Einklang mit der Theorie von Rutherford "Neutronen". Kurz danach wurde die Wellennatur dieses Teilchens überprüft und bestätigt. Nicht lange danach erkannte man, dass das Neutron wiederrum aus kleineren Teilchen besteht: 1960 entwarfen Gell-Mann und Zweig unabhängig voneinander das Konzept der Quarks. Dies sind die Teilchen, aus denen alle Hadronen, und somit auch das Neutron, bestehen.

Das Neutron ist in verschiedenen Gebieten der Physik sowie in ihrer technischen Anwendung von zentraler Bedeutung: Wegen seiner Ladungsneutralität kann es leicht in Materie eindringen, weshalb es als Sonde für die Erforschung von Festkörpern eingesetzt wird. Neutronen können auch von Materie eingefangen werden, was zur Neutronenaktivierung führt und diese wiederum häufig zur Radioaktivität. Letztere hat eine entscheidende Rolle in der Entwicklung von Kernreaktoren und Atomwaffen. Die Neutronenaktivierungsanalyse ist die empfindlichste Methode (um fünf Größenordnungen genauer als jede chemische Methode) zum Nachweis hochgiftiger Elemente wie z. B. Cadmium, welches aus dem Boden in Lebensmittel wie Salat oder Spinat aufgenommen wird. Das Neutron wird ebenfalls wegen seines magnetischen Moments und seiner Wellennatur in strukturellen und dynamischen Studien der magnetischen Eigenschaften der Materie zum Einsatz gebracht. Dubbers und Scherm fassen die Bedeutung von Neutronen treffend zusammen: "Neutronen erzählen uns, wo die Atome sind und was die Atome tun" [17]. Großes Interesse weckt in der aktuellen Forschung auch die Tatsache, dass Neutronen als freie Teilchen nicht stabil sind. Sie zerfallen nach ungefähr 15 Minuten in ein Proton, ein Elektron und ein Antineutrino. Die bei diesem Zerfall messbaren Parameter werden verwendet, um präzise Tests für neue Modelle jenseits des Standardmodells der Teilchenphysik durchzuführen [18].

Um Korrelationskoeffizienten im Neutronzerfall um eine Größenordnung genauer als bisher zu messen, wird zur Zeit im Rahmen einer internationalen Kollaboration ein neuartiges Instrument mit dem Namen PERC (Proton and Electron Radiation Chanel) entwickelt. Daran beteiligt sind das Physikalische Institut der Universität Heidelberg, das Atominstitut der Technischen Universität Wien, das Physik-Department E18 der Technischen Universität München, die Universität Mainz, das Institut Laue Langevin (ILL) in Grenoble, Frankreich und die Forschungs-Neutronenquelle Heinz Maier-Leibniz (FRM II) in München. Ein wichtiger Bestandteil von PERC ist ein sogenannter nicht-depolarisierender Neutronenleiter, welcher gleichzeitig für eine hohe Neutronendichte und eine starke Reduzierung der Strahldivergenz sorgt und folglich eine zuvor nicht erreichte hohe Statistik an Neutronenzerfallsteilchen erzeugt. Diese Art von Neutronenleitern wird im Physikalischen Institut der Universität Heidelberg entwickelt und erforscht.

Neutronenleiter werden dazu verwendet, Neutronen aus dem Reaktor über Strecken von bis zu 100 Meter zu den verschiedenen Forschungsinstrumenten zu transportieren. Sie bestehen aus sogenannten Superspiegeln, die aus mehreren nichtperiodischen Metallschichten mit einer Dicke von einigen Nanometern zusammengesetzt sind. Einerseits ist es für den Herstellungsprozess solcher Neutronenleiter wichtig, dass die Schichtdicke der daraus bestehenden Superspiegel fortlaufend überprüft wird. Andererseits ist es für PERC wichtig, dass die Superspiegel auf polarisierte Neutronen (das sind Neutronen, deren magnetischen Moment entlang einer bestimmten Raumrichtung orientiert sind) nicht depolarisierend wirken, d. h. dass sich die Orientierung der magnetischen Momenten bezüglich eines externen Magnetfeldes bei Reflektion der Neutronen nicht ändert.

Diese Diplomarbeit beschäftigt sich mit der Charakterisierung der im Physikalischen Institut für PERC entwickelten Superspiegel. Zwei Parameter werden dabei behandelt: Schichtdicke und Depolarisationseffekte. Eine Methode zur Bestimmung dünner Schichtdicken ist die Spektralphotometrie. Diese Methode wurde im Rahmen dieser Diplomarbeit ausgewählt, da sie leicht zugänglich ist und eine ausreichende Genauigkeit besitzt. Um andererseits experimentell zu überprüfen, ob die entwickelten Neutronenleiter nicht-depolarisierend sind, wird die Standardmethode der Neutronenreflektometrie benutzt. Im Rahmen dieser Diplomarbeit wurde ein Reflektometer für diese Zwecke entwickelt und gebaut.

Die Diplomarbeit ist in 6 Kapitel aufgeteilt. Nach dieser Einleitung folgt in Kapitel 2 eine kurze Charakterisierung des Neutrons und seines Zerfalls. Die dabei zugänglichen Parameter werden erklärt. Darauf folgt in Kapitel 3 eine kurze Darstellung von PERC, seiner Funktionsweise und seines Aufbaus, worauf eine nähere Erklärung des dafür benötigten nicht-depolarisierenden Neutronenleiter geliefert wird. Kapitel 4 behandelt die Spektralphotometrie als Methode zur Schichtdickenbestimmung. Das bis jetzt benutzte theoretische Modell zur Dickenbestimmung wird erweitert und anhand der Messergebnisse überprüft. Die durchgeführten technischen Verbesserungen am Photometer werden behandelt. In Kapitel 5 wird das im Rahmen dieser Diplomarbeit gebaute Neutronenreflektometer zur Messung der Depolarisationseffekte an nicht-depolarisierenden Superspiegeln erklärt. Die Arbeit schließt in Kapitel 6 mit einer Zusammenfassung der Ergebnisse und einem Ausblick auf mögliche zukünftige Aufgaben.

2 Der Beta-Zerfall des Neutrons

Das Neutron ist ein elektrisch neutrales Teilchen. Es ist ein Hadron und besteht aus einem Up- und zwei Down-Quarks. Es reagiert als solches auf alle bekannten Wechselwirkungen - Gravitation und Elektromagnetismus sowie starke und schwache Wechselwirkungen.

Das Neutron hat einen Spin 1/2 und gehört somit der Familie der Fermionen an. Sein magnetisches Moment beträgt $\mu_N = -1.91\mu_N$, wobei das Kernmagneton μ_N als

$$\mu_{\rm N} = \frac{e}{2m_{\rm p}}\hbar,\tag{2.1}$$

definiert ist. Dabei bezeichnet *e* die elektrische Elementarladung, $m_{\rm p}$ die Protonmasse und \hbar das reduzierte Plancksche Wirkungsquantum. Der aktuelle Wert für das magnetische Moment des Neutrons beträgt $\mu_{\rm N} = -9.649\,178\,3 \times 10^{-27}\,{\rm JT}^{-1}$ [19].

Anhand dieser Parameter wird das gyromagnetische Verhältnis γ definiert. Es ist der Proportionalitätsfaktor zwischen dem Spin \vec{S} des Neutrons und dem dazugehörigen magnetischen Moment $\vec{\mu}_N$:

$$\gamma_N = \frac{|\vec{S}|}{|\vec{\mu}_N|},\tag{2.2}$$

und beträgt nach [1] $1.83247179 \times 10^8 \,\mathrm{s}^{-1}\mathrm{T}^{-1}$.

In der Natur ist das Neutron meistens im Atomkern fest gebunden, aber als freies Teilchen zerfällt es mit einer Lebensdauer von ungefähr 881 Sekunden (≈ 15 Minuten) [29] in ein Elektron, ein Proton und ein Antineutrino:

$$\mathbf{n} \to \mathbf{p} + \mathbf{e}^- + \bar{\nu}_e. \tag{2.3}$$

Dies ist der sogenannte β -Zerfall des Neutrons, welcher durch das Standardmodell der Elementarteilchenphysik theoretisch sehr gut beschrieben wird. Der Name " β -Zerfall" hat eine historische Bedeutung: Rutherford bezeichnete die 1900 drei bekannten Strahlungsarten in der Reihenfolge zunehmender Fähigkeit, Materie zu durchdringen, mit Alpha-, Beta- und Gammastrahlung.

Es gibt zwei Hauptgründe für das große Interesse an sehr präzisen Neutronenzerfallsdaten [18]. Erstens müssen die meisten in der Natur vorkommenden semileptonischen Prozesse mit Hilfe von gemessenen Neutronenzerfalls-Parametern berechnet werden. Als semileptonischem Prozess wird hierbei ein durch die schwache



Abbildung 2.1: Schematische Darstellung des Neutron- β -Zerfalls [2]. a, A, B, C und D sind dabei die Winkel-Korrelationskoeffizienten, $\vec{p_i}$ die jeweiligen Impulse der Zerfallsteilchen.

Wechselwirkung verursachter Prozess genannt, bei dem sowohl Quarks und als auch Leptonen beteiligt sind [43].

Diese Neutronenzerfalls-Parameter werden in verschiedenen Gebieten der Physik benötigt, wie in der Kosmologie z. B. zum besseren Verständnis der Entstehung der leichten Elemente in der frühen Phase des Universums, in der Teilchenphysik und in der Technik für die Entwicklung von Neutrino-Detektoren [18].

Zweitens ermöglicht der Neutron-Beta-Zerfall präzise Kontrollen von Modellen jenseits des Standardmodells. Dieser Zerfall wird, wie oben schon erwähnt, durch das Standardmodell der Physik anhand von nur zwei freien Parameter beschrieben: Durch das Element V_{ud} der Cabibbo-Kobayashi-Maskawa (CKM) - Mischungsmatrix und das Verhältnis λ zwischen der Axial-Vektor- g_A und der Vektor- Kopplungskonstanten g_V :

$$\lambda = \frac{g_A}{g_V}.\tag{2.4}$$

Die Fermikopplungskonstante G_F , die ebenfalls zur Beschreibung der Wechselwirkung benötigt wird, ist bereits äußerst präzise aus dem Zerfall des Muons bekannt.

Allerdings ist eine deutlich größere Anzahl (mindestens 20) messbarer Größen beim Neutronenzerfall experimentell zugänglich. Für eine genaue Beschreibung dieser Größen siehe z. B. [18]. In Abbildung 2.1 sind einige dieser Größen schematisch gezeigt. Dabei sind:

$$a = \frac{1 - |\lambda|^2}{1 + 3|\lambda|^2}; \ A = -2\frac{|\lambda|^2 + \lambda}{1 + 3|\lambda|^2}; \ B = 2\frac{|\lambda|^2 - \lambda}{1 + 3|\lambda|^2}; \ C = x_C \frac{4\lambda}{1 + 3|\lambda|^2}$$
(2.5)

die Winkel-Korrelationskoeffizienten des Neutron- β -Zerfalls. Hierbei bezeichnet a den Elektron-Antineutrino Koeffizient und beschreibt die Winkelkorrelation zwischen den Impulsen $\vec{p_e}$ des Elektrons und $\vec{p_{\nu}}$ des Antineutrinos. A bezeichnet den β -Asymmetrieparameter und ist der Korrelationskoeffizient zwischen dem Neutron-Spin $\vec{\sigma_n}$ und dem Impuls $\vec{p_e}$ des Elektrons. B ist der sogenannte Antineutrino Asymmetrieparameter und ist der Korrelationskoeffizient zwischen dem Neutron-Spin $\vec{\sigma_n}$ und dem Impuls $\vec{p_{\nu}}$ des Antineutrinos. Der Proton-Asymmetrieparameter C beschreibt die Korrelation zwischen dem Neutron-Spin $\vec{\sigma_n}$ und dem Impuls $\vec{p_{\nu}}$ des Antineutrinos. Der Proton-Asymmetrieparameter C beschreibt die Korrelation zwischen dem Neutron-Spin $\vec{\sigma_n}$ und dem Impuls $\vec{p_{\nu}}$ des Protons.

Mit der großen Anzahl an messbaren Größen ist das Problem des Neutronenzerfalls überbestimmt. Diese Tatsache ermöglicht es, genaue Tests für Modelle jenseits des Standardmodells durchzuführen.

Ein weiterer wichtiger Test des Standardmodells ist die Unitarität der CKM-Matrix. Die Neutronenlebensdauer τ_n ist umgekehrt proportional zu $|V_{ud}|^2 \cdot (1 + 3 |\lambda|^2)$. Durch unabhängige Messungen von τ_n und einer auf λ empfindlichen Größe kann also das Element $|V_{ud}|$ der CKM-Matrix bestimmt werden. Die Unitarität dieser Matrix kann getestet werden, wenn die Elemente V_{us} und V_{ub} aus der Messung von Zerfällen von K-Mesonen und B-Mesonen genommen werden. Für eine ausführlichere Erklärung dazu siehe z. B. [14].

Ein Überblick über diese Experimente und eine ausführliche Diskussion aller messbaren Parameter findet sich in [18]. Die aktuellen Werte für die Parameter λ und $|V_{ud}|$ können hierfür als Beispiel dienen. Diese betragen nach [29]:

$$\lambda = -1,2734 \pm 0,0019; \ |V_{ud}| = 0,9747 \pm 0,0015$$
(2.6)

Der Wert von λ kann aus mehreren Observablen des Neutronenzerfalls bestimmt werden, jeweils mit unterschiedlicher Empfindlichkeit auf Modelle jenseits des Standardmodells. Der Vergleich der verschiedenen Werte von λ ist ebenfalls ein wichtiger Test auf die Gültigkeit des Standard-Modells. Die genaueste Methode zur Bestimmung von λ ist die Messung der β -Asymmetrie A. Mit PERKEO III wurde die Genauigkeit von A über einen Faktor von 5 gegenüber dem PDG-Weltmittelwert (siehe Gleichung (2.6)) verbessert [38].

3 PERC: Proton and Electron Radiation Channel

Die in Kapitel 2 beschriebene Korrelationskoeffizienten des Neutron- β -Zerfalls sollen mit Hilfe des neuartigen Instruments PERC um eine Größenordnung genauer als bisher gemessen werden. PERC steht für "Proton and Electron Radiation Channel" und wird zurzeit im Rahmen einer internationalen Kollaboration gebaut. Dabei sind das Physikalisches Institut der Universität Heidelberg, das Atominstitut der Technischen Universität Wien, das Physik-Department E18 der Technischen Universität München, die Universität Mainz, das Institut Laue Langevin (ILL) in Grenoble, Frankreich und die Forschungs-Neutronenquelle Heinz Maier-Leibniz (FRM II) in München beteiligt. Für eine ausführliche Erklärung dieses Instruments siehe [24].

Das Besondere an diesem Instrument ist die innovative Idee, das Innere eines Neutronenleiters als aktives Zerfallsvolumen zu nutzen (siehe Abbildung 3.1). In einem typischen kalten Neutronenstrahl zerfallen die Neutronen dabei mit einer Rate von 10^6 Zerfällen pro Meter. Unter genau bekannten Bedingungen liefert PERC an seinem Ende einen Strahl von Elektronen und Protonen, wo sie entweder detektiert oder in einem Spektrometer weiter untersucht werden. Die Funktionsweise von PERC wird im Folgenden kurz erklärt und es werden einige zu betrachtende systematische Fehler beschrieben.

3.1 Aufbau von PERC

Eine schematische Darstellung von PERC ist in Abbildung 3.1 zu sehen. Vor dem Leiter (in Abbildung 3.1 nicht gezeigt) können verschiedene Geräte z. B. Polarisatoren, Chopper oder Spinflipper platziert werden, sodass mit polarisierten oder unpolarisierten Neutronen, sowie einem gepulsten oder kontinuierlichen Neutronenstrahl, gearbeitet werden kann.

Die kalten Neutronen werden nun durch einen 8 Meter langen Neutronenleiter mit einem Querschnitt von 6×6 cm² geleitet, wo etwa 10⁶ Neutronen pro Sekunde und pro Meter zerfallen. Der Neutronenleiter sorgt gleichzeitig für eine hohe Neutronendichte und die Vermeidung der Strahldivergenz. Folglich kann eine zuvor nicht erreichte hohe Statistik an Neutronenzerfallsteilchen erzeugt werden. Der Neutronenleiter ist von einem System von supraleitenden Magneten umgeben ($B_0 = 1.5$ T). Die geladenen Zerfallsprodukte (Elektronen und Protonen) werden durch das longitudinale Magnetfeld in Richtung des Detektionssystems geführt.



Abbildung 3.1: Schematische Darstellung von PERC. In grün sind der Neutronenstrahl und in rot seine Zerfallsteilchen e^- und p^+ dargestellt. Diese werden mit Hilfe eines durch supraleitende Spulen erzeugten Magnetfeldes zum Detektor transportiert [31].

Am Ende des Leiters werden die Neutronen-Zerfallsprodukte mit Hilfe des Magnetfeldes getrennt. Bevor sie den Detektor (bei z. B. $B_2 = 0.5 \text{ T}$) erreichen, durchlaufen die Zerfallsprodukte im (e/p)-Selektor einen Hochfeldbereich mit $B_1 = 3 - 6 \text{ T}$, d. h. $B_1 > B_0$ (siehe Abbildung 3.1). Dieses Feld wirkt als magnetischer Spiegel und nur ein Teil

$$\frac{1 - \cos\theta_C}{2} \approx \frac{B_0}{4B_1}; \ B_0 < B_1 \tag{3.1}$$

aller Zerfallsprodukte überwindet diese Barriere. Es ist diejenige, die stromaufwärts unter den Winkeln

$$\theta_0 \le \theta_C = \arcsin\sqrt{\frac{B_0}{B_1}} \tag{3.2}$$

relativ zur z-Achse emittiert wurde [24], [31].

Mit diesem Aufbau wird eine hohe Phasenraumdichte der detektierten Zerfallsprodukte erreicht. Die Fläche des Detektors kann entsprechend klein ausfallen. Die durch Statistik limitierte Neutronen-Zerfall Experimente können somit verbessert und einige bisher unzugängliche n-Zerfall Observablen zum ersten Mal gemessen werden.

Ein solches Gerät scheint zunächst viele systematische Fehlerquellen zu haben, wie z. B. die Homogenität des B-Feldes oder den Doppler-Effekt wegen der Bewegung der Neutronen, aber man kann zeigen [24], wie diese Fehler durch relativ einfache Mittel umgangen werden können.

Wir betrachten folgende Fehlerquelle: Wenn mit polarisierten Neutronen gearbeitet wird, gibt es eine gewisse Wahrscheinlichkeit, dass eine Depolarisation der Neutronen durch Spiegelung der Neutronen am Neutronenleiter stattfindet. Aus diesem Grund müssen für PERC sogenannte nicht-depolarisierende Neutronenleiter benutzt werden. Wie ein solcher Leiter funktioniert, wird in Kapitel 3.2 näher erklärt.

3.2 Nicht-depolarisierender Neutronenleiter für PERC

Neutronenleiter sind evakuierte Glasrohre mit meist rechteckigem Querschnitt. Ein typischer Neutronenleiter ist in Abbildung 3.2a zu sehen. Niederenergetische Neutronen können durch Reflexion an den Innenwänden des Leiters über Strecken von mehr als 100 m vom Reaktor weggeführt werden. Im Inneren sind sie mit sogenannten Superspiegeln beschichtet.





(a) Bild eines typischen Neutronenleiters [4].

(b) Schematische Darstellung eines Superspiegels [7].

Abbildung 3.2: Die Neutronen fallen unter einem Winkel θ und erfahren dabei Bragg-Reflektion. Mit gelb ist das Substrat und darauf die Schichten unterschiedlicher Dicke und Metalle dargestellt.

Ein Superspiegel besteht aus mehreren Schichten unterschiedlicher Dicke und unterschiedlicher Metalle (meist Titan und das ferromagnetische Metall Nickel), die auf sehr glatte und ebene Glasplatten aufgebracht werden, wie in Abbildung 3.2b zu sehen ist. Für eine ausführliche Erklärung des Funktionsprinzips solcher Instrumente siehe z. B. [22] oder [48].

Ein Neutron kann quantenmechanisch als Materiewelle beschrieben werden kann. Eine solche Welle erfährt beim Durchgang durch Materie eine Reflektion, wie man das von sichtbarem Licht z. B. in Wasser kennt. Bei den Neutronen passiert dies in einer dünnen Schicht von Nickelmetall. Fällt die Strahlung unter sehr flachem Winkel auf die Metalloberfläche, so kann eine Totalreflexion auftreten.

Das Phänomen der Welleninterferenz spielt dabei eine wichtige Rolle. Vielfachschichten wie in Abbildung 3.2b stellen ein künstliches eindimensionales Gitter dar und Braggreflexion tritt bei geeignetem Impulsübertrag auf, ähnlich wie bei der Braggreflexion an den Gitterebenen eines Kristalls. Neutronen-Superspiegel nutzen diese Eigenschaft aus und "kontinuierliche" Bragg-Reflexion tritt wegen der abgestuften Mehrfachschichten auf (siehe Abbildung 3.3).

Der Winkel, bis zu dem Neutronen reflektiert werden, nennt man den kritischen Winkel θ_c^{SM} (Abbildung 3.3). Superspiegel werden über den Parameter m, dem Verhältnis von $\theta_c^{SM} = m \theta_c^{Ni}$ zum kritischen Winkel von natürlichem Nickel θ_c^{Ni} , charakterisiert. Nickel weist den größten kritischen Winkel von allen natürlich vorkommenden Elementen auf [22].



Abbildung 3.3: Theoretische Reflektivität von Superspiegeln [7]. Aufgetragen ist dabei der Reflektionsgrad über den m-Wert des Superspiegels. Die "kontinuierliche" Bragg-Reflexion des Neutronenstrahls ist mit blau gekennzeichnet.

Superspiegel bestehen meist aus ferromagnetischen Materialen, die in Anwesenheit externer B-Felder starke magnetische Streufelder besitzen und somit den Neutronenstrahl bei der Spiegelung depolarisieren können. Aus diesem Grund wird für PERC ein sogenannter nicht-depolarisierender Neutronenleiter benötigt.

Im Rahmen des PERC-Projekts werden nicht-depolarisierende Neutronenleiter im Physikalischen Institut entwickelt [44]. Dabei wird z. B. Kupfer statt Nickel benutzt. Für den Herstellungsprozess (DC-Magnetron-Sputtering, siehe [11] oder [39]) ist die Schichtdicke des Superspiegels offensichtlich ein wichtiger Parameter. In Kapitel 4 wird ein Verfahren zur Bestimmung dünner Metallschichtdicken vorgestellt. Um die Depolarisationseffekte solcher Superspiegel zu untersuchen, wurde im Rahmen dieser Diplomarbeit ein Neutronenreflektometer entwickelt, welches näher in Kapitel 5 vorgestellt wird.

4 Schichtdickenbestimmung: Spektralphotometrie

Einer der wichtigsten Parameter für den Herstellungsprozess von Neutronenleitern ist ihre Schichtdicke, welche fortlaufend überprüft werden muss (siehe Kapitel 3.2). Für die Herstellung wird die Methode des DC-Magnetron-Sputters verwendet (Siehe z. B. [35] oder [39]).

Es gibt zahlreiche Methoden, um die Dicke dünner, metallischer Schichten zu bestimmen, wie z. B. die Wirbelstromprüfung, die Röntgendiffraktometrie, Flatscan-Messungen und viele andere. Allerdings sind diese Methoden nicht immer verfügbar oder nicht genau genug.

Diese Diplomarbeit beschäftigt sich jedoch lediglich mit einer diesen Methoden, nämlich die Spektralphotometrie. Dieses Verfahren stellt eine Methode dar, die sehr schnell und leicht anwendbar ist. Außerdem können mit dieser Methode Schichtdicken auf einige Nanometer genau gemessen werden, was für unsere Zwecke eine ausreichende Genauigkeit entspricht.

Die Spektralphotometrie ist ein Messverfahren, welches elektromagnetische Strahlung im ultravioletten, sichtbaren und inflaroten Wellenlängenbereich ausnutzt, um verschiedene Eigenschaften von Objekten zu vermessen. Man kann damit z. B. die Dicke, die Konzentration oder die Extinktion einer Probe bestimmen, oder diese qualitativ identifizieren.

In der Neutronenphysik findet die Spektralphotometrie Anwendung, um die Dicke der hergestellten Neutronenleiter annähernd zu überprüfen. Dafür steht im Physikalischen Institut für das Projekt PERC ein Zweistrahl-Spektralphotometer der Firma Hitachi (Model 100-60) zur Verfügung, welcher für die quantitative und qualitative Analyse von flüssigen Proben über einen Wellenlängenbereich von 190 nm bis 870 nm entwickelt wurde [47]. Allerdings lassen sich auch Feststoffe darin platzieren und analysieren.

Das theoretische Modell für die Datenanalyse zur Dickenbestimmung, das Funktionsprinzip und die Kalibrierung des Photometers sowie die im Rahmen dieser Diplomarbeit erreichte technische Verbesserungen am Apparat werden im Folgenden vorgestellt. Ein Versuch zur Digitalisierung der Photometerdaten wurde vorgenommen und wird ebenso im Folgenden erläutert. Anschließend wird das Auswertungsverfahren sowie die Dickenbestimmung einiger Proben beschrieben.

4.1 Theoretischer Hintergrund

In der Spektralphotometrie wird elektromagnetische Strahlung im sichtbaren Wellenlängenbereich ausgenutzt, um die Dicke der Superspiegel-Proben zu bestimmen.

Im Folgenden wird ein klassisches Modell vorgestellt, das erklärt, wie Licht mit leitenden Substanzen wechselwirkt. Anschließend wird das analoge quantenmechanische Modell vorgestellt und anhand dieses die Abhängigkeit des optischen Potentials von der Dichte des Mediums hergeleitet.

4.1.1 Klassische Optik

Um die Ausbreitung von Licht in leitenden Medien zu beschreiben, werden die Maxwell-Gleichungen als Ausgangspunkt genommen:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}; \ \nabla \cdot \mathbf{B} = 0; \ \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}; \ \nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mu_r \mathbf{j} + \frac{1}{u^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}.$$
 (4.1)

Dabei bezeichnet ∇ den Nabla-Operator, **E** die elektrische Feldstärke, ρ die Ladungsdichte, ε_0 die Permitivität des Vakuums, ε_r die relative Permittivität des Mediums, **B** die magnetische Flussdichte, μ_0 die Permeabilität des Vakuums, μ_r die relative Permeabilität des Mediums, **j** die Leitungsstromdichte mit **j** = σ **E**, σ die elektrische Leitfähigkeit und u die Lichtgeschwindigkeit im Medium mit

$$u = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \varepsilon_r \mu_0 \mu_r}} = \frac{c}{\sqrt{\varepsilon_r \mu_r}} = \frac{c}{n},\tag{4.2}$$

wobei c die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum und $n = \sqrt{\varepsilon_r \mu_r}$ der Brechungsindex des betrachteten Mediums ist.

Für ein anfänglich ungeladenen Leiter $\rho(\mathbf{r}, t = 0) = 0$ vereinfacht sich die erste Maxwellsche Gleichung (4.1) zu

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0, \tag{4.3}$$

und es ist leicht zu zeigen (siehe dafür z. B. [41]), dass der Leiter für alle Zeiten während der Wechselwirkung ungeladen bleibt.

Die vier Gleichungen (4.1) sind also ein gekoppeltes System von linearen, partiellen, homogenen Differenzialgleichungen erster Ordnung in **E** und **B**, welches sich folgendermaßen entkoppeln lässt.

Durch Anwendung des Rotation-Operators auf die dritte Gleichung in (4.1) und Verziehen des Zeitdifferentials auf der rechten Seite der Gleichung ergibt sich:

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = -\frac{\partial}{\partial t} \left(\nabla \times \mathbf{B} \right)$$
(4.4)

Anschließend wird auf der linken Seite der Gleichung (4.4) die Vektor-Operation

$$\operatorname{rot}\operatorname{rot}\mathbf{E} = \operatorname{grad}\left(\operatorname{div}\mathbf{E}\right) - \nabla^{2}\mathbf{E} \tag{4.5}$$

angewendet und die Beziehung $\nabla \mathbf{E} = 0$ (Gleichung (4.3)) ausgenutzt. Dabei bezeichnet $\nabla^2 = \Delta$ den Laplace-Operator. Daraufhin wird die vierte Maxwell-Gleichung

(4.1) auf der rechten Seite der Gleichung (4.4) eingesetzt, woraus

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\nabla \times \mathbf{B} \right) = \mu_0 \mu_r \sigma \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E} + \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{E}.$$
(4.6)

folgt. Nun werden alle Glieder dieser Gleichung auf die linke Seite umsortiert und E als gemeinsamen Teiler genommen, wodurch sich die sogenannte Telegraphengleichung

$$\left[\left(\Delta - \frac{1}{u^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) - \mu_0\mu_r\sigma\frac{\partial}{\partial t}\right]\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = 0$$
(4.7)

ergibt. Auf analogem Wege findet man die Telegraphengleichung der magnetischen Induktion $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$:

$$\left[\left(\Delta - \frac{1}{u^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) - \mu_0\mu_r\sigma\frac{\partial}{\partial t}\right]\mathbf{B}(\mathbf{r},t) = 0$$
(4.8)

Die beide Gleichungen (4.7) und (4.8) beschreiben allgemein die Ausbreitung einer Lichtwelle in elektrischen Leitern. Zur Lösung dieser Gleichungen führt man nun eine komplexwertige relative Permittivität ein

$$\bar{\epsilon_r} = \epsilon_r + i \frac{\sigma}{\epsilon_0 \omega},\tag{4.9}$$

wodurch die Wellengeschwindigkeit somit ebenfalls komplexwertig wird:

$$\bar{u} = \frac{1}{\sqrt{\bar{\epsilon_r}\epsilon_0\mu_r\mu_0}} = \frac{c}{\sqrt{\bar{\epsilon_r}\mu_r}}.$$
(4.10)

Ein möglicher Lösungsansatz für die Gleichung (4.7) lautet dann:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(\bar{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \tag{4.11}$$

 mit

$$\bar{\mathbf{k}} = \frac{\omega}{\bar{u}}\kappa; \ \kappa = \frac{\bar{\mathbf{k}}}{|\bar{\mathbf{k}}|}.$$
(4.12)

Man sieht, dass nun der Wellenvektor $\bar{\mathbf{k}}$ wegen (4.10) auch komplexwertig ist:

$$\mathbf{k} = k_0 + ik'. \tag{4.13}$$

Setzt man nun den Ansatz (4.11) in (4.7) ein, so erhält man

$$-\left(\bar{\mathbf{k}}_x^2 + \bar{\mathbf{k}}_y^2 + \bar{\mathbf{k}}_z^2\right) + \frac{\omega^2}{\bar{u}^2} + i\omega\mu_0\mu_r\sigma = 0, \qquad (4.14)$$

was die Einführung eines komplexwertigen, verallgemeinerten Brechungsindex notwendig macht. Somit definiert man

$$n = \sqrt{\mu_r \bar{\epsilon_r}} \equiv n(1 + i\chi). \tag{4.15}$$

Es sei an dieser Stelle erwähnt, dass man in der Literatur viele unterschiedliche Darstellungen für den komplexen Brechungsindex findet. Am üblichsten ist die Gestaltung des Brechungsindex als Summe (siehe z. B. [41], [33] oder als Differenz z. B. in citedemtroeder2, [30]) von Realteil und Imaginärteil einer komplexen Zahl

$$n = n' + i\gamma \tag{4.16}$$

dabei nennt man $\gamma = n\chi$ Absorptions- bzw. Extinktionskoeffizient (die Begrifflichkeit ergibt sich im weiteren Textverlauf). All diese Darstellungen sind gleichwertig, weshalb Vorsicht bei einem Vergleich der Literaturwerte für χ bzw γ geboten ist. Es wird hier die Darstellung (4.15) gewählt, weil diese mit dem Auswertungsprogramm für die Schichtdickenbestimmung in Mathematica konsistent ist (siehe Kapitel 4.6).

Die Telegraphengleichung (4.7) ist exakt mit (4.11) gelöst. Um die physikalische Bedeutung von $\gamma = n\chi$ zu gewinnen, werden die Beziehungen (4.12) und (4.10) in diese Lösung der Telegraphengleichung eingesetzt:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \mathbf{E}_0 e^{-n\chi\left(\frac{\omega}{c}\right)(\kappa \cdot \mathbf{r})} e^{i\left[\left(\frac{\omega}{c}\right)n(\kappa \cdot \mathbf{r}-\omega t)\right]}.$$
(4.17)

Betrachtet man den eindimensionalen Fall einer Lichtwelle mit einer Ausbreitungsrichtung entlang der z-Achse, d.h. $\kappa = \hat{e}_z$, so ergibt sich

$$\mathbf{E}(\mathbf{z},t) = \mathbf{E}_0 e^{-n\chi\left(\frac{\omega}{c}\right)z} e^{i\omega\left[\left(\frac{n}{c}z-t\right)\right]}.$$
(4.18)

Setzt man darin (4.13) und

$$k_0 = \frac{\omega}{c}n; \ k' = \frac{\omega}{c}n\chi \tag{4.19}$$

ein, so lautet die Lösung der Telegraphengleichung (4.7)

$$\mathbf{E}(\mathbf{z},t) = \mathbf{E}_0 \cdot \underbrace{e^{-k'z}}_{D\ddot{a}mpfungsterm} \cdot e^{i(k_0 z - \omega t)}.$$
(4.20)

Nun wird klar, warum $n\chi$ als Absorptionskoeffizient bezeichnet wird: Die Lösung hat die Gestalt einer gedämpften ebenen Welle mit dem Abklingkoeffizient k'.

Gemessen wird aber nicht die Amplitude, sondern die Intensität der Lichtwelle bzw. eine dazu proportionale Große. Der sogenannte Poynting-Vektor

$$\mathbf{S} = \frac{1}{\mu_0 \mu_r} (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) \tag{4.21}$$

verknüpft die Intensität einer elektromagnetischen Welle mit ihrer Amplitude. Die Intensität ist gegeben durch die zeitliche Mittlung von \mathbf{E} , also

$$I = \langle |\mathbf{S}| \rangle_t \propto |\mathbf{E}|^2 = \mathbf{E}\tilde{\mathbf{E}}$$
(4.22)

wobei $\tilde{\mathbf{E}}$ die komplex konjugierte Größe der Welle ist. Setzt man (4.20) in diese Gleichung ein, so erhält man für die Intensität

$$I \propto \mathbf{E}_0^2 e^{-2k'z}.\tag{4.23}$$

Betrachten wir nun ein anderes physikalisches Bild dieses Problems. Dringt Licht bestimmter Intensität I in ein absorbierendes, homogenes Material in z-Richtung ein, so kann angenommen werden, dass die Wahrscheinlichkeit dP = -dI/I für die Absorption von Licht pro Wegeinheit dz in jeder Eindrigtiefe gleich ist:

$$-\frac{dI}{Idz} = \mu_l. \tag{4.24}$$

Eine Integration von (4.24) liefert das sogenannte Lambertsche Absorptionsgesetz

$$I(z) = I_0 e^{-\mu_L z}.$$
 (4.25)

Vergleicht man die Abschwächungskoeffizienten in (4.23) und (4.25)

$$\mu_L = 2k' = 2\frac{\omega}{c}n\chi,\tag{4.26}$$

so erhält man eine Beziehung zwischen dem Lambertschen Dämpfungskoeffizienten und dem Imaginärteil der Wellenzahl k'. Da $k_0 = \frac{\omega}{c}$ gilt und die Wellenlänge per Definition durch $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ gegeben ist, wird der Lambertsche Koeffizient zu

$$\mu_L = \frac{4\pi n\chi}{\lambda_0}.\tag{4.27}$$

Die Koeffizienten n und χ sind stark wellenlängenabhängig und natürlich materialspezifisch. Andere Faktoren wie Temperatur, Druck, Dichte oder Rauheit der Oberfläche spielen dabei auch eine Rolle. Aus dem Grund sind verlässliche Literaturwerte des komplexwertigen Brechungsindex für viele Metalle, die für den Herstellungsprozess von Neutronenleitern wichtig sind, nur sehr schwer zu finden. Die Literaturwerte verschiedener Autoren weichen stark voneinander ab. Siehe dazu Kapitel 4.6. Das Lambertsche Absorptionsgesetz ist zwar eine gute Näherung, es vernachlässigt aber andere optische Effekte, wie z. B. Reflexion oder Interferenz innerhalb dünner Schichten.

Die Reflektion einer ebenen, elektromagnetischen Welle an einer ebenen metallischen Grenzfläche wird durch die sogenannten Fresnelschen Formeln beschrieben, welche ebenfalls aus den Maxwellschen Gleichungen (4.1) hergeleitet werden können (siehe z. B. [41] oder [12]). Für den Spezialfall, bei dem das aus dem Vakuum kommendes Licht senkrecht auf die Metalloberfläche einfällt, erhält man

$$R = \frac{I_R}{I_0} = \left|\frac{\mathbf{n} - 1}{\mathbf{n} + 1}\right|^2 \tag{4.28}$$

wobei **n** in Gleichung (4.15) definiert wurde. R bezeichnet dabei den Reflexionsgrad, also das Intensitätsverhältnis der reflektierten zu der einfallenden Welle. Da **n** von der Wellenlänge λ der einfallenden Strahlung abhängt, wird auch $R(\lambda)$ wellenlängenabhängig.

Bis jetzt haben wir nur das Verhalten elektromagnetischer Wellen an leitenden Medien betrachtet, aber da die dünnen Metallschichten auf einer Glassplatte aufgebracht werden (siehe Kapitel 3.2), muss nun ein weiterer Effekt berücksichtigt werden, nämlich die Interferenz von Lichtwellen an einer planparallelen Platte, wie in Abbildung 4.1 schematisch zu sehen ist.



Abbildung 4.1: Vielstrahlinterferenz an zwei planparallelen Grenzschichten [15]. Licht fällt unter einem Winkel α relativ zur Flächennormale ein und wird mehrfach reflektiert.

Dazu wird eine ebene Lichtwelle mit der Amplitude A_0 betrachtet. Eine planparallele Platte wirkt wie ein Fabry-Perot-Interferometer bzw. wie ein Spektralfilter. Fällt der Lichtstrahl mit einem Einfallswinkel α relativ zur Flächennormale ein, so wird der Lichtstrahl gemäß den Fresnel-Formeln an jeder optischen Grenzfläche teilweise reflektiert (A_1 , C_1 , A_2 , C_2 ,...), gebrochen (B_1 , B_2 ,...) und transmitiert (D_1 , D_2 ,...). Die Teilwellen A_i , die durch die obere Grenzfläche herausgehen, treten alle parallel zueinander auf und überlagern sich. Das gleiche gilt für die transmitierte Teilwellen D_i

Dieses Mehrfachreflektionsverhalten wird durch die sogenannten Airy-Formeln beschrieben (siehe Herleitung in [15]), wobei für den Transmissionsgrad

$$\frac{I_T}{I_0} = \frac{1}{1 + \underbrace{\frac{4R}{(1-R)^2}}_{\equiv F} \sin^2\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right)}$$
(4.29)

gilt. Dabei bezeichnet R den Reflektionsgrad (Gleichung (4.28)) des Mediums mit dem Brechungsindex **n**. $\Delta \varphi$ ist dabei der Phasenunterschied zwischen den Teilwellen, welcher sich wegen des bei Reflektion auftretenden Phasensprungs und des Gangunterschieds dieser Teilwellen ergibt. Man kann zeigen [15], dass für die Phasendifferenz $\Delta \varphi$

$$\Delta \varphi = \frac{2\pi}{\lambda_0} \cdot 2d \left(\sqrt{n^2 - \sin^2 \alpha} \right) \tag{4.30}$$

gilt. Damit ergibt sich für den senkrechten Einfall ($\alpha = 0$)

$$\frac{I_T}{I_0} = \frac{1}{1 + F \sin^2\left(\frac{2\pi dn}{\lambda_0}\right)} \tag{4.31}$$

wobei d die Dicke der Glasplatte, λ_0 die Wellenlänge in Vakuum und n den Brechungsindex des Mediums bezeichnet.

4.1.2 Vergleich zur quantenmechanischen Neutronenoptik

Die bisherige Betrachtungen zeigen die Ergebnisse der klassischen Theorie der elektromagnetischen Wellen und ihre Wechselwirkung mit Materie. Dieselben Ergebnisse lassen sich jedoch mit Hilfe der Quantenmechanik herleiten. Es wird im Folgenden anhand des Phänomens der Absorption in der Neutronenoptik als Beispiel gezeigt, wie beide Formalismen aufeinander abgebildet werden können.

Das Neutron hat als Materieteilchen eine de Broglie Wellenlänge $\lambda = h/p$, wobei h das Plancksche Wirkungsquantum und p = mv den Impuls des Teilchens mit Masse m und Geschwindigkeit v bezeichnet. Der Zustand eines solchen Teilchens kann mit Hilfe der Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r},t)\right)\psi(\mathbf{r},t) = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t)$$
(4.32)

beschrieben werden, wobei $\psi(\mathbf{r}, t)$ die Wellenfunktion des Neutrons darstellt. Ein Vergleich der Wellengleichungen (4.32) und (4.7) lässt schon die Analogie der Quantenmechanik zur klassischen Optik erkennen.

Das Quadrat der Wellenfunktion wird in der Quantenmechanik als die Wahrscheinlichkeit $p = |\psi|^2$ interpretiert, das Teilchen im betreffenden Ort und Zeit vorzufinden. Zur Lösung dieser Gleichung kann der Ansatz

$$\psi(\mathbf{r},t) = \psi(\mathbf{r})e^{i\omega t} \tag{4.33}$$

angenommen werden. Hängt das Potential nicht von der Zeit ab, so ergibt sich die sogenannte zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}) = E_n\psi(\mathbf{r}), \qquad (4.34)$$

wobei E_n die Gesamtenergie des Teilchens bezeichnet.

Der Brechungsindex (in der Neutronenoptik auch als Brechzahl bezeichnet) ist auch hier als Verhältnis der Geschwindigkeiten innerhalb eines Mediums zur Geschwindigkeit in Vakuum definiert [25] (siehe Gleichung 4.10). Für ebene Wellen der Form

$$\psi(\mathbf{r}) \propto e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \tag{4.35}$$

erhält man

$$n \equiv \frac{v}{v_0} = \frac{k}{k_0} = \sqrt{1 - \frac{V}{E}}$$
(4.36)

wobei $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ die kinetische Energie des Teilchens darstellt. k bezeichnet dabei die Wellenzahl des Teilchens im Medium und k_0 die im Vakuum.

Betrachtet man die Streuung von Neutronen an Atomkernen, so wird das sogenannte Fermi-Pseudopotential V_F

$$V_F(\mathbf{r}) = 4\pi \sum_i b_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$$
(4.37)

benutzt, um die Lösung für die zugehörige Schrödinger-Gleichung zu erhalten [32]. Dieses Potential beschreibt annähernd die starke Wechselwirkung zwischen punktförmigen Teilchen. b_i bezeichnet dabei die sogenannte Neutronenstreulänge, welche durch die Phasenverschiebung $\Delta \varphi$ gegeben ist, die sich ergibt, wenn ein Neutron an einem Einzelkern gestreut wird (siehe dazu [25]). **r** und **r**_i bezeichnen den Ortsvektor des einfallenden Neutrons und des i-ten Kerns. $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ ist dabei die Dirac'sche Deltafunktion.

Da optische Phänomene durch die gleichzeitige Wechselwirkung zwischen einfallenden Teilchen und vielen Streuzentren gegeben ist, kann dabei die mittlere Phasenverschiebung $\langle \varphi \rangle$ angenommen werden. Daraus wird die sogenannte kohärente Streulänge b_c definiert. Somit kann das Potential (4.37) über das Volumen gemittelt werden, was

$$V = \frac{\hbar^2}{2m} 4\pi N b_c \tag{4.38}$$

zur Folge hat. N bezeichnet die Teilchendichte. Die Brechzahl (4.36) wird somit zu

$$n^2 = 1 - \frac{\lambda^2 N b_c}{\pi}.\tag{4.39}$$

Die beobachteten Beugungs- und Absorptionsphänomene von Neutronen (siehe ausführliche Diskussion dazu in [32]) legen die Einführung eines komplexen Potentials nahe, genauso wie in der klassischen Optik (Gleichung (4.10)). Dieses Potential wird auf die komplexe Streulänge für das Medium bezogen, das die reflektierende Oberfläche bildet. Dies hat zur Folge, dass b_c auf der rechten Seite der Gleichungen (4.39) und (4.38) durch die komplexen Streulänge b [48]

$$b_c \to b = b' - ib'' \tag{4.40}$$

ersetzt werden muss, wobei

$$b' = b_c - \left(\frac{\sigma_a}{2\lambda}\right)^2; \ b'' = \frac{\sigma_a}{2\lambda}; \tag{4.41}$$

 σ_a bezeichnet dabei die Absorptionswirkungsquerschnitt für die einfallenden Neutronen. Mit (4.39), (4.40) und die Definition der Wellenlänge $\lambda_0 = 2\pi/k_0$ ergibt sich

$$n^{2} = 1 - \frac{4\pi}{k_{0}^{2}} N \left(b' - ib'' \right), \qquad (4.42)$$

somit kann nun die Wellenzahl im Medium $k = nk_0$ gewonnen werden

$$k = \sqrt{k_0^2 - 4\pi N \left(b' - ib'' \right)}.$$
(4.43)

Das Phänomen der Absorption kann beschrieben werden, indem eine in ein komplexes Potential in x-Richtung einfallende ebene Welle betrachtet wird:

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} = \psi_0 e^{iRe(\mathbf{k})x} \cdot e^{-Im(\mathbf{k})x}, \qquad (4.44)$$

wobei $Re(\mathbf{k})$ und $Im(\mathbf{k})$ den Real- bzw. den Imaginärteil von (4.43) bezeichnet. Betrachtet man nun die Teilchendichte $|\psi(\mathbf{r})|^2$ in solch einem Potential, so verschwindet den Realteil und dann bleibt:

$$|\psi(\mathbf{r})|^2 = \psi(\mathbf{r}) \cdot \psi^*(\mathbf{r}) = (\psi_0)^2 e^{-2 \cdot Im(k)x}.$$
(4.45)

Dies entspricht denau dem, was sich in der klassischen Optik anhand des Lambertschen Gesetzes ergeben hat. Der Absorptionskoeffizient in der Neutronenoptik kann also durch

$$\mu = 2Im(k) = \frac{4\pi N b''}{k} = \frac{4\pi N \sigma_a}{2\lambda k}$$

$$\tag{4.46}$$

definiert werden. Für weitere Diskusionen über Neutronenabsorption siehe spezielle Literatur wie [48] oder [25]. Hier soll nur anhand der Absorption als Beispiel gezeigt werden, dass beide Formalismen (klassische Optik und quantenmechanische Neutronenoptik) exakt aufeinander abgebildet werden können. Mit diesem Modell kann die klassische Optik quantenmechanisch ausgerechnet werden und umgekehrt.

4.1.3 Dichteabhängigkeit des Brechungsindex

In den meisten Publikationen zur Messung des Brechungsindex von Metallen wurden dünnen Metallfilmen durch Aufdampfen hergestellt (siehe z. B. [36], [34]). Es ist zu vermuten, dass bei der Sputter-Methode zur Herstellung dünner Schichten eine größere Dichte an Metall erreicht wird, als bei der zuvor erwähnte Methode. Dies hat zur Folge, dass sich die Koeffizienten der Brechungsindex ändern. Anhand der in Kapitel 4.1.2 erlangte Erkenntnisse kann dies berücksichtigt werden, was im Folgenden erklärt wird.

In der klassischen Optik ist der Wellenvektor k_1 in einem Medium als $k_1 = n \cdot k_0$ definiert, wobei k_0 die Wellenzahl im Vakuum bezeichnet. Für den Brechungsindex wird im Folgenden die Konvention $n = n (1 - i\chi)$ gewählt. Somit wird in der klassischen Optik die Wellenzahl im Medium als

$$k_1 = k_0 \cdot n \, (1 - i\chi) \tag{4.47}$$

dargestellt. In der Neutronenoptik wird die Wellenzahl im Medium als

$$k_1 = \sqrt{k_0^2 - 4\pi N \left(b' - ib'' \right)}.$$
(4.48)

definiert (siehe Gleichung (4.43))

Da es sich in Gleichung (4.47) und (4.48) um die gleiche physikalische Beschreibung handelt, können diese gleichgesetzt werden und es bleibt:

$$k_0 \cdot n \left(1 - i\chi\right) = \sqrt{k_0^2 - 4\pi N \left(b' - ib''\right)}.$$
(4.49)

Durch Quadrieren und Umformen der Gleichung (4.49) ergibt sich:

$$n^{2} (1 - i\chi)^{2} = 1 - \frac{4\pi}{k_{0}^{2}} N (b' - ib'').$$
(4.50)

Die Gleichung (4.50) muss unabhängig für den Real- und Imaginärteil erfühlt werden, es bleibt also ein Gleichungsystem der Form

$$n^{2} \left(1 - \chi^{2}\right) = 1 - \frac{4\pi}{k_{0}^{2}} Nb',$$

$$-2n^{2} i \chi = \frac{4\pi}{k_{0}^{2}} (-i) Nb''.$$
 (4.51)

Das Gleichungssystem 4.51 kann nach n und χ gelöst werden. Nb' und Nb'' werden dabei mit einem Faktor ρ multipliziert, der die prozentuale Anderung in der Teilchendichte N des Materials beschreibt. Es ergeben sich vier Lösungen, jedoch nur eine davon ist physikalisch sinnvoll. Somit erhält man mit $k_0 = 2\pi/\lambda$ den Brechungsindex in Abhängigkeit der Änderung der Materialdichte und der Wellenlänge:

$$n(\rho,\lambda_{0}) = \left(\frac{1}{2} \cdot \left(1 - \rho + n^{2}(\lambda_{0}) \cdot \rho - \chi^{2}(\lambda_{0}) \cdot n^{2}(\lambda_{0}) \cdot \rho + \chi^{2}(\lambda_{0}) \cdot n^{2}(\lambda_{0}) \cdot \rho^{2} + (-1 + \rho - n^{2}(\lambda_{0}) \cdot \rho + \chi^{2}(\lambda_{0}) \cdot n^{2}(\lambda_{0}) \cdot \rho^{2}\right)\right)^{(1/2)}$$

$$\chi(\rho,\lambda_{0}) = \frac{1}{2 \cdot \chi(\lambda_{0}) \cdot n^{2}(\lambda_{0}) \cdot \lambda_{0}} \cdot \left(-1 + \rho - n^{2}(\lambda_{0}) \cdot \rho + \chi^{2}(\lambda_{0}) \cdot \rho + \chi^{2}(\lambda_{0}) \cdot \rho^{2} + (-1 + \rho - n^{2}(\lambda_{0}) \cdot \rho + \chi^{2}(\lambda_{0}) \cdot n^{2}(\lambda_{0}) \cdot \rho^{2}\right)$$

$$(4.53)$$

4.2 Aufbau des Zwei-Strahlen Spektrographphotometers

Der Aufbau des im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Photometers ist in Abbildung 4.2 schematisch dargestellt. Als Strahlungsquelle dienen je nach Bedarf eine Wolfram- bzw. eine Deuterium-Lampe. Möchte man den sichtbaren Bereich des elektromagnetischen Spektrums ausnutzen, so bedient man sich der Wolframlampe, deren kontinuierliches Spektrum des eines Plankschen Strahlers entspricht, während die Deuteriumlampe wegen des molekularen Kontinuums ihres Spektrums für den UV-Bereich benutzt wird. Außerdem kann sie wegen des Peaks bei 656.1 nm in ihrem Spektrum (siehe Abbildung 4.8) für die Kalibrierung des Photometers genutzt werden.

Das aus der Quelle kommende Licht wird mit einer Linse kollimiert und passiert durch einen Farbfilter, um den Einfluss von Streulicht zu unterdücken. Mit Hilfe eines Reflektionsgitters in seine spektralen Anteile zerlegt. Es handelt sich dabei um ein geblaztes Gitter(siehe Abbildung 4.3), das mittels einer mechanischen Konstruktion durch ein Einstellrad um seine Achse rotiert werden kann.

Das Licht fällt unter dem Winkel θ_i relativ zur Normalen in das Gitter (siehe Abbildung 4.3) und wird unter dem Winkel θ_0 reflektiert. Dabei bezeichnet α den sogenannten Blaze-Winkel und Λ die Blaze-Periode, wobei folgende Beziehung gelten muss:

$$\Lambda\left(\sin\theta_i + \sin\theta_o\right) = n \cdot \lambda. \tag{4.54}$$

Die Reflexion, die die meiste Energie enthält, wird durch die spezielle geometrische Form des Gitters zu höheren Ordnungen verschoben [49]. Mit dieser Art von Gittern erreicht man somit einen hohen Beugungswirkungsgrad ($\approx 100\%$) und ein hohes Auflösungsvermögen.



Abbildung 4.2: Schematische Darstellung eines Zweistrahl-Spektralphotometers. Das aus der Quelle kommende Licht wird monochromatisiert, in zwei Strahlen geteil und am Photomultiplier detektiert.

Die Rotation des Gitters, d. h. Variieren des Winkels θ , erlaubt aufgrund der Bragg-Bedingung folgende Wellenlängeneinstellung:

$$\lambda = \frac{g \cdot \sin(\psi_n)}{n},\tag{4.55}$$

wobei λ die gewünschte Wellenlänge, g die Gitterkonstante, ψ der Winkel relativ zur Flächennormale und n die n-te Ordnung der Interferenz ist. Für eine ausführlichere Erklärung eines Blaze-Gitters siehe [49].

Das nun monochromatische Licht wird durch einen speziell geformten Strahlteiler in zwei Strahlen aufgespalten. Der Strahlteiler ist eine Scheibe, die aus Löchern und Spiegeln besteht (siehe Abbildung 4.4). Die Scheibe rotiert um ihre Achse, sodass der Lichtstrahl abwechselnd auf zwei Strahlengänge geht. In dem einen werden die zu messenden Proben gelegt (Probenstrahl) und in den anderen die Referenzproben (Referenzstrahl), sodass die Intensitätsverhältnisse zwischen beiden Strahlen direkt gemessen werden können, ausgedrückt durch den sogenannten Transmissionsgrad $\tau = I/I_0$.

Nachdem das Licht die Proben passiert hat, werden die Strahlen durch zwei halbdurchlässige Spiegel in einem Photoelektronenvervielfacher detektiert. Beide Strahlengänge durchlaufen in diesem Aufbau die gleiche optische Weglänge, sodass Verluste durch das Durchqueren der Spiegel, die Abhängigkeit der Intensität der Quelle von der Wellenlänge und andere Störungen (z. B. durch Luftfeuchtigkeit) für beide Strahlengänge kompensiert werden.

Das Signal des Photomultipliers wird intern durch Analogelektronik verarbeitet. Das Photometer kann durch Auswählen des gewünschten Modus Extinktions-,



Abbildung 4.3: Geblaztes Gitter. Links: Rasterkraftmikroskop-Aufnahme; Rechts: Funktionsweise [49]. Das Licht fällt unter dem Winkel θ_i relativ zur Flächennormale auf das Gitter und wird unter dem Winkel θ_0 monochromatisch reflektiert.

Konzentrations- und Transmissionsmessungen durchführen. Für die Schichtdickenbestimmung ist nur letzteres von Interesse, wobei der Transmissionsgrad entweder direkt auf dem Digitalanzeiger oder am Computer mittels eines AD-Wandlers abgelesen werden kann.

Um die Spektralmessung zu automatisieren, wurde im Rahmen eines im Physikalischen Institut absolvierten Praktikums die Software "PSchrittmotor" entwickelt, welches einen an das Wellenlängen-Einstellrad angebauten Schrittmotor steuert und die Daten aus dem Analogausgang des Photometers mittels eines AD-Wandlers der Firma Meilhaus ausliest. Zur weiteren Auswertung liefert das Programm ein Textdokument mit tabellierten Daten, die für jede Wellenlänge den zugehörigen Transmissionsgrad enthalten.

4.3 Technische Verbesserungen

Im Rahmen dieser Diplomarbeit wurden mehrere technische Verbesserungen am Photometer realiziert, die in diesem Abschnitt beschrieben werden.

Die alte Mechanik, die für das Einstellrad und den Schrittmotor als Schnittstelle dient, war sehr instabil und teilweise defekt. Das Einstellrad konnte mit dem Schrittmotor nicht wie gewünscht gedreht werden, was zur falschen Einstellung der Wellenlänge geführt hat. Diese Mechanik wurde neu gebaut und die Einstellung der Wellenlänge somit stabilisiert.

Auch die mechanische Anzeige der Wellenlänge am Photometer musste repariert werden. Während einer Kalibrierung (siehe Abschnitt 4.4) des Photometers hat sich herausgestellt, dass diese Anzeige falsche Werte anzeigte, was zu Verwirrungen in



Abbildung 4.4: Schematische Darstellung des Strahlteilers am Zweistrahlen-Photometer. Die Scheibe rotiert um ihre Achse, sodass der Lichtstrahl abwechselnd zwei Strahlengänge geht.

der Datenauswertung geführt hat. Das Problem lag darin, dass eines der Zahnräder an der Anzeigemechanik durch ein falsches Zahnrad ausgetauscht worden war. Das passende Zahnrad wurde daraufhin eingebaut. Die Anzeige liefert nun die richtigen Wellenlängen (richtige Kalibrierung vorausgesetzt).

Einige veraltete Bauteile der Analogelektronik des Photometers wurden ausgetauscht. Die veralteten Bauteile hatten dazu geführt, dass ein Gleichrichter in der Analogelektronik immer wieder kapput gegangen ist. Der Gleichrichter wurde ebenfalls ausgetauscht.

Die Software für die Datenaufnahme wurde benutzerfreundlicher gestalltet.



Abbildung 4.5: Schaltplan des selbstgebauten Transistorschalters. Dabei sind $R_1 = 2.2$ kOhm und $R_2 = 2$ kOhm, T1 Transistor modell BC 337, D1 eine Schutzdiode. Bearbeitet nach [6].



Abbildung 4.6: Transmissionsspektrum des 405 nm-Filters. Die Punkte entsprechen den aufgenommenen Daten. Die durchgezogene Kurve ist der dazu passende Gaußfit.

Die Nullmessung (siehe Abschnitt 4.6) kann nun computergesteuert werden, ohne die Probenbox öffnen zu müssen. Am Probenstrahl wurde eine Blende eingebaut, die durch einen elektronischen Schalter mit Hilfe eines mechanischen Relais aufund zugeklappt werden kann. Dieser Schalter (siehe Abbildung 4.5) funktioniert im Prinzip als eine Kollektor-Emitter-Schaltung des Transistors T1. Wird eine Signalspanung angelegt, so lässt den Transistor einen genügend starken Strom über die Versorgungsspanung fließen, damit der Relais angeschaltet werden kann.

4.4 Wellenlängen-Eichung

Um die Reproduzierbarkeit der Ergebnisse zu gewährleisten, ist es wichtig, dass das Photometer richtig geeicht ist. Da die Wellenlängeanzeige des Photometers nicht mit der Wellenlängeanzeige an der Recheneinheit übereinstimmt, wurde eine erneute Eichung des Photometers vorgenommen.

Es gibt zwei Möglichkeiten, das Photometer zu eichen. Die erste besteht darin, Absorptions- bzw. Transmissionsfilter mit mehreren scharfen und bekannten Absorptions- bzw. Transmisionsbanden zu benutzen. Ein bekanntes Beispiel für einen Absorptionsfilter ist Holmiumoxidglas [47]. Leider stand im Physikalischen Institut solch ein Filter nicht zur Verfügung.

Wir haben aus diesem Grund zwei Transmissionsfilter benutzt, was für unsere Zwecke ausreichend war. Einer der Filter (Modell Nr. 02004 der Firma UniSkan) lässt einen scharfen Peak bei 405 nm durch und hat eine Halbwertsbreite von 4,32 nm. Wird das mit dem Photometer aufgenommene Spektrum mit einer Normalverteilung



Abbildung 4.7: Transmissionsspektrum des 780 nm-Bandpassfilters. Die Punkte entsprechen der aufgenommenen Daten und die durchgezogene Linie entspricht der Interpolation der Daten.

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2}$$
(4.56)

in Mathematica gefittet, so kann das Maximum der Funktion anhand des Parameters μ abgelesen werden. Ein extremes Beispiel dazu ist in Abbildung 4.6 gezeigt. Auf der x-Achse ist die Wellenlänge aufgetragen, die mit dem Rechner aufgenommen wurde. Das Maximum der Transmissionsfunktion sollte bei 405 nm liegen, man liest aber das Maximum bei 419.8 nm ab. Dies bedeutet, dass das aufgenommene Spektrum um 419.8 nm-405 nm = 14.8 nm im Quellcode des Auswertungsprogramms in Mathematica verschoben werden muss.

Um sicher zu stellen, dass die Daten auch bei größeren Wellenlängen richtig geeicht sind, wurde ein zweiter Filter benutzt. Es handelte sich dabei um einen Bandpass Interferenz-Filter der Firma Melles Griot (Modellnummer 03 FIL 056), der aus der Quantenoptik-Gruppe des Physikalischen Instituts ausgeliehen wurde. Laut Angabe des Herstellers ist der Peak des Filters bei $\lambda = 780$ nm und besitzt eine Halbwertsbreite von 20 nm (Siehe Abbildung 4.7). Durch Interpolation des aufgenommen Spektrums konnte überprüft werden, dass die aufgenommen Daten mit den Angaben des Herstellers übereinstimmen, und somit die Eichung der Wellenlänge verifiziert werden.

Die zweite Möglichkeit zur Eichung ist, die am Photometer angebaute Deuterium-Lampe auszunutzen. Dies hat den Vorteil, dass diese Methode viel genauer ist und dass die Probenbox nicht geöffnet werden muss, um die Filter zu platzieren. Allerdings muss die Lampe zunächst ungefähr 15 Minuten lang aufgewärmt werden.

Deuterium hat im sichtbaren Bereich in seinem Spektrum einen scharfen Peak bei 656.1 nm und einen bei 486 nm (siehe Abbildung 4.8). Es handelt sich dabei
um zwei Übergänge der Balmer-Serie. Diese ergeben sich durch den Übergang eines Elektrons vom dritten $(n_2 = 3)$ bzw. vierten $(n_2 = 4)$ zum zweittiefsten atomaren Energieniveau $(n_1 = 2)$, wobei ein Photon der Wellenlänge

$$\frac{1}{\lambda} = R_{Ry} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$
(4.57)

emmitiert wird.

Nach [1] beträgt die Rydberg-Konstante $R_{Ry} = 10\,973\,731.568\,\mathrm{m}^{-1}$. Die zwei Übergänge sind deutlich auf den Spektrum 4.8 zu sehen. Es sei an dieser Stelle erwähnt, dass der Sprung bei 375 nm durch den Farbfilter verursacht wurde.

Zur Eichung anhand der Deuteriumlampe wird folgendermaßen vorgegangen: Das Photometer wird auf % T-Modus, der Wählhebel für die Lichtquelle auf UV (D_2 -Lampe sollte aufgewärmt sein) und die Wellenlänge auf ungefähr 656 nm gestellt. Der λ -Check Schalter wird im Uhrzeigersinn mit einem kleinen Schraubenzieher gedreht, bis auf der Anzeige ca. 50 % abgelesen wird. Danach fährt man mit dem Einstellrad aus längeren Wellenlängen herunter, bis ein maximaler Energiepunkt erreicht ist. Dieser Peak sollte dann laut Angabe des Herstellers bei (656.1 ± 0, 4) nm sein, was deutlich genauer ist als die Wellenlängeneinstellung mit Hilfe des Bandpassfilters in Abbildung 4.6.



Abbildung 4.8: Mit dem Photometer aufgenommenes Spektrum der Deuterium Spektrallampe. Dabei sind deutlich zwei Übergänge der Balmer-Serie bei 486 nm und 656.1 nm zu sehen.

Zeigt die mechanische Anzeige diesen Wert nicht an, dann muss das Gehäuse des Photometers entfernt und die Anzeigemechanik manuell auf genau 656.1 nm gestellt werden. Dabei muss sichergestellt werden, dass das Einstellrad währenddessen nicht bewegt wird. Auf diese Weise zeigt das Photometer die richtige Wellenlänge. Der Peak bei 486 nm kann als Überprüfung der Eichung genutzt werden. Es sei an dieser Stellen erwähnt, dass der λ -Check Knopf die interne Berechnung der Verhältnisse beider Strahlen deaktiviert. Wenn das Photometer auf %-T Modus gestellt und der λ -Check Knopf aktiv ist, kann auf der digitalen Anzeige eine zur Intensität proportionale Größe abgelesen werden. Auf diese Weise können absolute Spektren aus dem Analogausgang mit Hilfe des AD-Wandlers aufgenommen werden, allerdings ohne Korrektur auf die wellenlängenabhängige Empfindlichkeit des Photomultipliers. Ein Beispiel für ist das aufgenommene Spektrum der Deuterium Spektrallampe in Abbildung 4.8.

Da Deuterium natürlich nur in gebundener Form vorkommt (im einfachsten Fall verbinden sich zwei Deuterium-Atome zu einem Deuterium-Molekül D_2), ergeben sich im Spektrum auch Molekularbänder. In Abbildung 4.8 sind im Bereich von 550 bis 625 nm die sogenannten Fulcher-Molekularbänder ($1s\sigma \cdot 3p\pi^3\Pi \rightarrow 1s\sigma \cdot 2s\sigma^3\Sigma$ Übergänge) [16] deutlich zu erkennen und unterhalb 400 nm ist das molekulare quasi-Kontinuum in UV-Bereich zu sehen, welcher für die Messungen in diesem elektromagnetischen Bereich ausgenutzt werden kann.

4.5 Digitalisierung der Daten

Das Signal des Photomultipliers wird intern durch Analogelektronik verarbeitet. Dazu sind zwei Lichtschranken an den Strahlteiler des Photometers angebaut, wie in Abbildung 4.4 schematisch zu sehen ist. Diese Lichtschranken liefern die nötige Information an die Analogelektronik, um das Signal des Photomultipliers mit dem der Lichtschranken zu modulieren, und damit den Transmissionsgrad zu berechnen.

Ist der Strahlteiler in der Stellung, bei der das Licht durch den Probenkanal hindurchkommt, so erzeugt gleichzeitig eine der Lichtschranken ein Signal, welches an die Analogelektronik weitergeleitet und dort mit dem des Photomultipliers korreliert wird. Dieses Signal wird dann von der Analogelektronik als die transmitierte Intensität I_T interpretiert.

Rotiert der Strahlteiler weiter, so erzeugt die andere Lichtschranke ein Signal, das an die Analogelektronik ebenso weitergeleitet wird. Das Signal des Photomultipliers wird folglich als I_0 angenommen und im Quadrantenmultiplizierer der Analogelektronik mit I_T verrechnet. Anschließend liefert das Photometer ein Analogsignal, welches die Information des von der Analogelektronik ausgerechneten Transmissionsgrad $\tau = I_T/I_0$ enthält.

Wie die Signale der Lichtschranken und die Rohdaten des Photometers aussehen, ist in Abbildung 4.9 zu sehen. Dabei ist CH0 die erste Lichtschranke und CH1 die zweite. In Grün (CH2) ist das Rohsignal vom Photomultiplier zu sehen.

Für die Auswertung der Daten wäre es wünschenswert, nicht direkt den ausgerechneten Transmissionsgrad, sondern die Intensitäten beider Kanäle zur Verfügung zu haben, sodass vom Benutzer bestimmt werden kann, wie lange bzw. über wie viele Rotationsperioden der Strahlteiler das Signal vom Photomultiplier integriert



Abbildung 4.9: Beispiel der Signale des Photomultipliers (Grün) und der Lichtschranken (Rot bzw Gelb).

wird. Somit könnte die Dauer das Messverfahren um ungefähr eine Größenordnung reduziert werden.

Da man es in der Metalloptik mit sehr kleinen Intensitäten zu tun hat, wäre ein anderer Vorteil, dass im Prinzip der Transmissionsgrad empfindlicher gemessen werden könnte, denn die transmitierte Intensität I_T könnte nicht nur gegen die 100% eintretende Intensität I_0 , sondern auch mit Hilfe der angebauten Blende gegen das Rauschen vom Photomultiplier (0% eintretende Intensität) gemessen werden.

Um die Intensitäten beider Kanäle zu erlangen, benötigt man also einerseits das Rohsignal des Photomultipliers und andererseits das Signal der Lichtschranken, damit beide miteinander korreliert werden können.

Im Rahmen dieser Diplomarbeit wurde dazu die Elektronik des Photomultipliers mit Hilfe eines Oszilloskops untersucht. Dabei wurden die Signale der Lichtschranken und die des Photomultipliers systematisch gesucht und gefunden.

Der AD-Wandler der Firma Meilhaus (Model **), mit dem die Daten aus dem Analogausgang des Photometers an den Rechner weitergeleitet werden, kann auch als digitales Oszilloskop mit Hilfe der Software "TracerDAQ" von RedLab benutzt werden (Abbildung 4.9). Das Programm liefert zur weiteren Auswertung eine Textdatei mit tabellierten Daten, die die ausgelesenen Signale als Funktion der Zeit enthalten. Nachdem die nötigen Signale gefunden wurden, wurden diese mit Hilfe des AD-Wandlers digitalisiert und es wurde systematisch untersucht, wie sich das Signal des Photomultipliers verhält. Dies wird im Folgenden anhand der Abbildung 4.10 erklärt, wobei die Signale in einem Intervall von 0,5 Millisekunden ausgelesen wurden. Die Zahl 100 auf der x-Achse entspricht also 50 Millisekunden.



Abbildung 4.10: Rohdaten des Photomultipliers (Grün) mit dem Signal aus der Lichtschranke (Rot bzw. Blau).

In Abbildung 4.10 sind die rot bzw. blau-markierten Signale direkt aus der Lichtschranke entnommen. Dabei fällt zunächst auf, dass eine Rotationsperiode der Lichtschranke 40 ms dauert. Der Strahlteiler rotiert also mit einer Frequenz von 25 Hz.

In Grün sind dabei die Rohdaten des Photomultipliers (PM) zu sehen. Das blaue Signal entspricht der Position des Strahlteilers, bei der das Licht durch den Probenstrahl geht und das rote Signal entspricht der Position des Strahlteilers, bei der das Licht durch den Referenzstrahl geht. Die Öffnung der Scheibe für die Erzeugung des Lichtschrankensignals entspricht dabei nur der Hälfte der Strahlteileröffnung. Somit ist sichergestellt, dass nur die volle Intensität des Lichtes für die Berechnung des Transmissionsgrades benutzt wird.

In Abbildung 4.10a ist das PM-Signal für den Fall dargestellt, dass beide Wege offen sind, d.h. ohne Proben. Die volle Intensität der Strahlen generiert ein PM-Signal mit einer Spannung von $\approx -2 V$. In Abbildung 4.10b ist das Signal zu sehen,



Abbildung 4.11: Rohdaten des Photomultipliers

bei dem beide Wege geschlossen sind, d.h. Schattenproben sind jeweils in beide Wege gestellt und kein Licht sollte das PM erreichen. Wie erwartet, wird nur das Rauschen des Photomultipliers erkannt.

Wird nun der Referenzstrahl offen und der Probenstrahl gesperrt, so ist in Abbildung 4.10c erwartungsgemäß zu erkennen, dass der Photomultiplier ein Signal von exakt 0V erzeugt, wenn das Licht durch den Probenweg geht und ein Signal von $\approx -2V$, wenn das Licht durch den Referenzweg geht.

Wenn der Referenzstrahl jedoch geschlossen bleibt und 100% der Lichtintensität durch den Probenweg geht, so wird der Photomultiplier gesättigt. Im folgenden wird erklärt, warum der Photomultiplier ein solches Verhalten zeigt.

In Abbildung 4.11 ist nur das Rohsignal des Photomultipliers zu sehen. Für die folgenden Betrachtungen wird das Signal der Lichtschranke nicht mehr benötigt. Zum besseren Vergleich werden die Signale in der gleichen Abbildung dargestellt.

In Abbildung 4.11a bis 4.11c ist auf dem Probenweg eine Shutterprobe gestellt, sodass kein Licht aus diesem Weg den Photomultiplier erreicht. Wenn nun die Intensität auf den Referenzstrahl mittels eines Schwächungsfilters variiert, so ergibt sich folgendes Verhalten der Signale: In Abbildung 4.11a ist keine Probe in den Referenzweg gestellt, in 4.11b ist der Schwächungfilter auf 50% der Intensität gestellt und in Abbildung 4.11c wurde der Schwächungfilter auf nur 5% gestellt. In der Form des Signals ist keine Änderung zu sehen.

Dies kommt dadurch zustande, dass der Photomultiplier differenziell darauf reagiert, welche Intensität der Referenzstrahl besitzt. Die Beschleunigungsspannung für die Sekundärelektronen wird also von der internen Elektronik des Photometers so eingestellt, dass das erzeugte Signal für die Referenzstrahl unabhängig von der Intensität auf dem gleichen Niveau liegt, nämlich ≈ -2 V. Dies geschieht nicht mehr, wenn der Referenzweg komplett geschlossen ist, wie in Abbildung 4.10b und 4.10d zu sehen ist.

In Abbildung 4.11d bis 4.11f ist nun der Referenzweg auf 100% gestellt und die Intensität des Probenstrahls variiert. Dies ist im Prinzip das Verfahren, das bisher benutzt wurde, um die Schichtdicke der Superspiegel-Proben zu bestimmen. So lässt sich überprüfen, wie lange die Signale integriert werden müssen, um auf das selben Ergebniss wie auf der Digitalanzeige zu kommen. Dies wurde mit Hilfe eines kleinen Programms in Mathematica gemacht. Dieselben Ergebnisse für den Transmissionsgrad in der Digitalanzeige und an der Recheneinheit werden mit einer Sekunde Wartungszeit für das Einpendeln des Photometersignals und mit einer Integrationsszeit der Signale von 100 ms erreicht.

In Abbildung 4.11g wird das Signal dargestellt, bei dem der Probenstrahl auf 100% und der Referenzstrahl auf 50% gestellt wurde. Solch eine Konfiguration wird von der Digitalanzeige des Photometers als Fehler angezeigt. Wird der Transmissionsgrad jedoch mit dem Programm in Mathematica berechnet, so ergibt sich erwartungsgemäß ein Transmissionsgrad von 200%. In Abbildung 4.11h ist das Signal zu sehen, bei dem die Intensität des Referenzstrahls auf 5% gestellt wird. Mit dem Probenstrahl auf 100% wird der Photomultiplier also gesättigt.

Wie zuvor erwähnt, war die Idee, den Transmissionsgrad nicht gegen die volle einfallende Intensität, sondern gegen Null zu messen, um auf diese Weise das Rauschen zu unterdrücken. Dazu wurde eine per Computer steuerbare Blende in den Probenstrahl gebaut und die Proben hätten auf den Referenzweg platziert werden müssen, um mit Hilfe der digitalisierten Rohdaten des Photomultipliers den Transmissionsgrad messen zu können. Da aber der Photomultiplier differenziell darauf reagiert, welche Intensität durch den Referenzweg an den Photomultiplier ankommt, ist dies nicht gelungen.

Dies könnte allerdings immer noch erreicht werden, indem der Photometer auf den λ -Check Modus gestellt wird (siehe Kapitel 4.4), denn in diesem Modus wird die interne Berechung ausgeschaltet und absolute Spektren können aufgenommen werden. Aus Zeitgründen wurde dies im Rahmen dieser Diplomarbeit nicht mehr durchgeführt.

4.6 Auswertung der Daten

Um die mit dem Photometer aufgenommenen Spektren zu analysieren, müssen die Daten zunächst sowohl auf Untergrund, als auch auf Vollmessung korrigiert werden. Mit Untergrund (=Nullmessung) ist die Messung gemeint, bei der kein Licht durch den Probenweg geht. Dazu klappt man entweder mithilfe des Programms die am Probengang eingebaute Blende zu oder man stellt in den Weg eine Schattenprobe und lässt das Photometer durch das gewünschte Spektrum laufen.

Wird das gewünschte Spektrum ohne Probe (=Vollmessung) gemessen, so kann festgestellt werden, dass es eine gewisse Wellenlängenabhängigkeit gibt, die durch relative Empfindlichkeit des Photomultipliers und durch Verschmutzung der Spiegel am Strahlengang bzw. am Gitter gegeben ist. Wir kennen zwar die genaue relative Empfindlichkeit des Geräts nicht, da aber lediglich das Verhältnis zwischen den beiden Strahlen gemessen wird, kann dies folgendermaßen korrigiert werden:

$$Y_{korr}(\lambda) = \frac{Y_{gem}(\lambda) - Y_0(\lambda)}{Y_{voll}(\lambda) - Y_0(\lambda)},$$
(4.58)

wobei $Y_{korr}(\lambda)$ das korrigierte Spektrum, Y_{gem} das direkt gemessene Spektrum, $Y_0(\lambda)$ die Nullmessung und $Y_{voll}(\lambda)$ die Vollmessung bezeichnet.

Wie in Kapitel 4.1 erwähnt, sind gute, einheitliche Literaturwerte für den komplexen Brechungsindex für Metalle nicht verfügbar. Betrachten wir das Übergangsmetall Kupfer. Für Kupfer gibt es z. B. in [37] nur 2 Punkte für n und k' im für uns interessanten sichtbaren Bereich und in [36], [34] oder [42] findet man starke Unterschiede, vor allem im realen Teil des Brechungsindex (siehe Abbildung 4.12a und 4.12b).



(a) Realer Teil n des Brechungsindex (b) Imaginärteil k' des Brechungsindex

Abbildung 4.12: Komplexer Brechungsindex von Kupfer nach [36], [34] und [42]

Im Physikalischen Institut stehen Kupferschichtproben zur Verfügung, die mit der Methode der Röntgendiffraktometrie bereits vermessen wurden, wobei die Schichtdicke der Proben zu 5, 20, und 40 nm bestimmt wurde. Im folgenden Beispiel konzentrieren wir uns auf die 40 nm-Probe.

In Abbildung 4.13 sind die aus dem Photometer mit Hilfe des Softwares "PSchrittmotor" aufgenommene Daten einer Kupferschichtprobe dargestellt. Auf der y-Achse ist der Transmisionsgrad $\tau = I/I_0$ und auf der x-Achse die Wellenläge λ in Nanometer aufgetragen.

Um als Beispiel zu zeigen, dass es sich beim Lambertschen Gesetz nur um eine Näherung handelt, wie in Kapitel 4.1 ausführlich diskutiert wurde, wird unter Zuhilfenahme von Gleichung (4.25) und Einsetzen der Beziehung (4.27) die Transmissionsfunktion berechnet. Die Literaturwerte von μ_L wurden dabei aus [42] entnommen und mit Hilfe einer Interpolationsfunktion in Mathematica für das ganze Spektrum berechnet.

Die Transmissionsfunktion kann an den gemessenen Daten mit der Schichtdicke als einzige Parameter angepasst werden. Als Ergebniss erhält man eine Dicke von d = 36.77 nm, was in Abbildung 4.13 zu sehen ist. Zum Vergleich ist in dieser Abbildung ebenfalls die Transmissionsfunktion für eine Dicke von 40 nm eingetragen. Allerdings müssen andere Effekte wie Reflexion und Interferenz berücksichtigt werden (siehe theoretische Diskusion in Kapitel 4.1).

Um diese Effekte in das Modell für die Schichtdickenbestimmung einzubeziehen, steht ein Mathematica-Paket zur Verfügung, welches ursprünglich für die Datenanalyse in der Neutronenoptik entwickelt wurde. Anhand der in Kapitel 4.1 beschriebenen Analogie zwischen der quantenmechanischen und der klassischen Wellentheorie wurde das Packet für die Datenanalyse für elektromagnetische Wellen angepasst.



Abbildung 4.13: Transmissionsspektrum von Kupfer nach dem Lambertschen Gesetzt. Die blaue Punkte stellen die gemessene Daten und die durchgezogenen Linien die Transmissionsfunktion dar.

Zunächst wird eine Silizium-Probe betrachtet. In Abbildung 4.14 ist das Transmissionsspektrum von Silizium zu sehen. Dabei ergibt sich eine Schichtdicke von 33.1 nm und die Fitqualität ist sehr zufridenstellend.



Abbildung 4.14: Transmissionsspektrum von Silizium. (Punkten) Gemessene und (durchgezogene Linie) berechnete Transmissionsfunktion.

In Abbildung 4.15 ist das Transmissionsspektrum von Kupfer gezeigt, wobei die Punkte die gemessenen Daten darstellen. Die durchgezogene Kurve ist dabei die gefittete Transmissionsfunktion mit der Schichtdicke als einzigen Fittparameter.

Als Ergebnis ergibt sich in Abbildung 4.15a eine Schichtdicke von 40.6 nm. Im Vergleich zur Abbildung 4.13 zeigt sich, dass das Fitten der Transmissionsfunktion besser erreicht wurde, allerdings sind die Ergebnisse für Kupfer immer noch nicht zufriedenstellend. Dies kann mehrere Gründe haben. Zunächsteinmal wurde es im Model nicht berücksichtigt, dass eine feine Schicht Titan auf die Probenoberfläche gesputtert wurde. Die Titanschicht soll die Oxidation im Kupfer vermeiden. Bei Raumtemperatur entsteht hauptsächlich Cu_2O , dessen Brechungsindex stark von reinem Kupfer abweicht ([42]) und hat somit Veränderungen in der Koeffizienten des Brechungsindex der Probe zur Folge. Trotz der Titanschicht können jedoch kleine Oxidationseffekte nicht ausgeschlossen werden.



Abbildung 4.15: Transmissionsspektrum von Kupfer

Andererseits sind die Koeffizienten des komplexwertigen Brechungsindex für Kupfer, wie zuvor erwähnt, in der Literatur nicht einheitlich genug zu finden. Im Folgenden wird die Vermutung betrachtet, dass bei der Sputter-Methode zur Herstellung dünner Schichten eine größere Dichte an Metall erreicht wird als bei der Verdampfungsmethode. Die Dichteabhängigkeit des Brechungsidex wurde in Kapitel 4.1.3 hergeleitet.

Die Koeffizienten des Brechungsindex werden im Auswertungsprogramm unter Zuhilfenahme der Gleichungen (4.52) und (4.53) ersetzt und die Transmisionsfunktion berechnet. Das Ergebniss ist in Abbildung 4.15b dargestellt. Es zeigt zwar eine bessere Fitqualität, das Ergebniss ist jedoch mit einem Korrektursfaktor der Dichte $\rho = 1.42$ und eine Schichtdicke von 30.5 nm nicht zufridenstellend.

Empirisch findet man ebenso eine bessere Fitqualität, wenn das berechnete Spektrum um 6.1 nm verschoben wird. Das Ergebniss für die Schichtdicke wird allerdings dadurch nicht verändert. Der Grund dafür kann nicht in der Eichung des Photometers liegen (siehe Kapitel 4.4). Die Vermutung, dass die Qualität der aus der Literatur genommenen Koeffizienten des Brechungsindex nicht ausreichend ist, wird dadurch bestätigt.

5 Depolarisationsmessung: Neutronenreflektometrie

Wie in Kapitel 3 erklärt, ist ein nicht-depolarisierender, mit Superspiegeln beschichteter Neutronenleiter, ein wesentliches Element von PERC. Die maximal zulässige Depolarisation durch Reflexion des Neutronenstrahls am Leiter muss unter 10^{-4} liegen, damit kein signifikanter systematischer Fehler zum Fehler-Budget der Neutronen-Beta-Zerfall-Parameter entsteht [24].

Da der PERC-Neutronenleiter sich in einem homogenen Magnetfeld einer Stärke von 1,5 Tesla befindet (Siehe Abbildung 3.1), musste zusätzlich untersucht werden, ob dieses Magnetfeld die Depolarisationseigenschaften des Neutronenleiters beeinflusst.

Die erste Depolarisationsmessung dieser Art wurde ohne Magnetfeld im Rahmen einer Dissertation 2006 durchgeführt [40]. Eine weitere Messung wurde 2011 am ILL (Institute Laue Langevin) in Grenoble durchgeführt, wo allerdings ein Magnetfeld mit einer maximalen magnetischen Flussdichte von 0,8 Tesla an den Superspiegel-Proben angelegt wurde. Mit einem Fehler von $4 \cdot 10^{-5}$ wurde in dieser Messung, wie erwartet, kein Depolarisationseffekt beobachtet. Zu diesem Zeitpunkt gab es jedoch keine Garantie dafür, dass die Depolarisation auch auf diesem Fehlerniveau liegt, wenn ein stärkeres Magnetfeld angelegt wird.

Im Rahmen dieser Diplomarbeit wurde ein speziell für diese Zwecke entwickeltes Neutronen-Reflektometer gebaut, um experimentell nachweisen zu können, dass die Depolarisationseffekte durch Reflexion tatsächlich unter 10^{-4} liegen, wenn ein Magnetfeld von 1,8 Tesla angelegt wird.

Die im Folgenden beschriebene Messung und wird voraussichtlich im November 2012 am Forschungsreaktor FRM II in München am Strahlplatz "Mephisto" [3] durchgeführt. Leider konnte die Messung während dieser Diplomarbeit wegen technischen Problemen am Reaktor FRM II nicht durchgeführt werden.

5.1 Reflektometer

Im Folgenden wird zunächst das Messprinzip erklärt. Danach wird genauer auf die einzelnen Komponenten des Reflektometers eingegangen.

Der gesamte experimentelle Aufbau ist in Abbildung 5.1 schematisch dargestellt. Die Messung der Strahlpolarisation erfolgt mit folgendem Standardaufbau: Zuerst passiert der aus dem Reaktor austretende Neutronenstrahl einen Polarisator. Anschließend fliegen die nun polarisierten Neutronen durch den Spinflipper, wo der



Abbildung 5.1: Schematische Darstellung des Reflektometers. In Rot ist der Neutronenstrahl dargestellt.

Neutronenspin, falls gewünscht, invertiert wird. Im Anschluss daran erreichen die Neutronen den zweiten Polarisator, welcher als Analysator dient, falls er genauso wie der erste Polarisator orientiert ist. **Anschließend würden im idealen Fall, d.h. bei 100% Effektivität der Polarisatoren, mit ausgeschaltetem Spinflipper 50% der eintretenden, nicht polarisierten Neutonen detektiert. Im Falle eines angeschalteten Spinflippers sollte kein Neutron den Detektor erreichen.

Die zu untersuchenden Superspiegelproben werden zwischen Spinflipper und Analysator platziert, sodass die Depolarisationseffekte durch Reflexion an den Proben mit der oben genannten Methode gemessen werden können. Der Neutronenstrahl wird durch zwei parallel platzierte Proben reflektiert, bevor er den Analysator erreicht. Aus einfachen geometrischen Überlegungen hat dies zur Folge, dass der Winkel, mit dem die Neutronen den Analysator erreichen, immer konstant bleibt. Kleine Änderungen vom Winkel durch den Austausch von Proben bewirken nur eine seitliche Verschiebung des Strahls. Außerdem wird ein Magnetfeld an den Proben angelegt, damit die Depolarisationseffekte auch in Abhängigkeit von der magnetischen Flussdichte \mathbf{B} untersucht werden können.

Vor dem Polarisator wird ein Chopper mit mittlerer Auflösung verwendet, um die Abhängigkeit der Wellenlängen über den Winkel zu messen. Neutronen-Chopper sind rotierende mechanische Geräte, die aus sogenannten Chopperräder bestehen. Diese sitzen auf derselben Achse und rotieren einer gewissen Frequenz. Somit wird ein Bruchteil des Neutronenstrahls bei jeder Umdrehung des Choppers blockiert, und Neutronen gewisser Wellenlänge kommen aus dem Chopper durch [20].

Mit dem verwendeten Aufbau ist die Abhängigkeitsmessung der Wellenlängen über den Winkel besonders effektiv, da der Winkel, wie oben erklärt, für eine spezifische Wellenlänge immer konstant ist. Ist der Chopper andererseits in offener Stellung, so kann man hochstatistische Integralmessungen durchführen.



Abbildung 5.2: Reflektivität und Polarisation eines FeCoV/TiN Superspiegels [8]

5.2 Polarisator/Analysator

Es gibt drei Möglichkeiten, kalte Neutronen zu polarisieren [48]: (1)durch Reflexion an magnetisierten Superspiegeln, (2)über Transmission durch magnetisierten Filmen und (3) über Transmission durch ein polarisiertes Gas, z. B. ${}^{3}He$.

Als Polarisator wird für unseren Aufbau ein Superspiegel benutzt, denn dadurch wird eine höhere Neutronenstrahlintensität als bei den anderen zwei Methoden erreicht. Allerdings wird mit dieser Methode ein nicht so hoher Polarisationsgrad erreicht wie bei den anderen Methoden. Für unsere Zwecke spielt dies jedoch keine Rolle, da lediglich die Veränderung des Polarisationgrads bei der Reflexion des Neutronenstrahls an den Proben gemessen wird.

Das Prinzip der Polarisationsmethode über Reflexion an Superspiegeln beruhrt darauf, dass eine Wechselwirkung zwischen einem Neutron und dem Medium durch ein optisches Potential stattfindet. Dieses Potential V enthält die Information für die Kern- und die magnetische Wechselwirkung:

$$V = \underbrace{4\pi N_0 b}_{\equiv u} + 2\sigma \mathbf{B} \tag{5.1}$$

wobei u das Kernpotential, N_0 die Teilchenzahldichte, b die Streulänge und **B** das Magnetfeld des Polarisators bezeichnen. Das Potential V ist höher für Neutronen, die entlang des Magnetfeldes polarisiert sind (u + 2B), als für Neutronen, die gegen das Magnetfeld polarisiert sind (u-2B). Das Medium reflektiert also alle Neutronen, die entlang des Feldes polarisiert sind. Allerdings werden auch einige der Neutronen reflektiert, die gegen das Magnetfeld polarisiert sind, falls der relativ zur Grenzfläche tangentiale Impuls k innerhalb des Intervalls

$$\sqrt{u - 2B} \le k \le \sqrt{u - 2B} \tag{5.2}$$

liegt. Die transmitierten Neutronen werden gegen das Magnetfelld komplet polarisiert. In Abbildung 5.2 ist der Reflektivitäts- und die Polarisationsgrad über den m-Wert des eines typischen polarisierenden Superspiegels zu sehen.

Das Funktionsprinzip des Analysators ist das gleiche wie für Polarisatoren: Ein Analysator kann als ein Filter angesehen werden, welcher (im Fall von Superspiegeln) nur die Neutronen passieren lässt, die gegen das Feld polarisiert sind. Die entlang des B-Feldes polarisierten Neutronen werden reflektiert und erreichen den Detektor, wie in Abbildung 5.1 schematisch zu sehen ist.

Für unseren Aufbau (Abbildung 5.1) wird ein B-Feld parallel zur Bewegungsrichtung der Neutronen angelegt, damit ein ebenfalls in dieser Richtung polarisierter Neutronenstrahl gewonnen wird. Das longitudinale B-Feld wird mit Hilfe von Solenoidspulen erzeugt. Dies hat den Vorteil, dass die experimentelle Anordnung sehr kompakt aufgebaut werden kann.

5.3 Spin Flipper

Als "Spin Flipper" bezeichnet man einen Apparat, der die Spinrichtung des Neutrons bzw. die Polarisation des Neutronenstrahls um einen bestimmten Winkel relativ zum lokalen \mathbf{B} -Feld, dem sogenannten Führungsfeld, umdreht. Spin-Flipper werden ziemlich häufig in der Neutronenphysik benutzt, denn die Umkehrung der Polarisationsrichtung ist eine einfache Methode, um systematische Fehler zu kontrollieren [27].

In der Literatur werden verschiedene Arten von Flippern beschrieben, die auf unterschiedlichen Prinzipien basieren. In [48] sind z. B. vier allgemeine Arten von Flippern aufgelistet, nämlich das Verfahren der Strom-durchflossenen Folie, die Null-Feld Methode, der sogenannte Mezei-Spin-Rotator und die auf Resonanz basierenden Flipper, wobei alle eine bestimmte Konfiguration von Magnetfeldern benutzen. Jede dieser Methoden hat je nach Anwendung Vor- und Nachteile.

In Folgenden wird der sogenannte adiabatische Spin-Flipper genauer beschrieben, wobei NMR-Methoden auf einem polarisierten Neutronenstrahl angewendet werden. Dabei müssen kleine Modifikationen aufgrund der Tatsache vorgenommen werden, dass die Neutronen (und ihre Spins) sich im Labor-System bewegen. Für eine ausführlichere Beschreibung dieser Methoden siehe [26] oder [46].

5.3.1 Theoretischer Hintergrund

Um das Prinzip unseres Flippers leichter zu verstehen, muss zunächst der Formalismus eines rotierenden Bezugssystems eingeführt werden, welches die Beschreibung des hier vorhandenen physikalischen Phänomens deutlich vereinfacht. Danach wird dieses auf die Magnetisierung eines Spin-Systems angewendet, um so auf das Konzept der adiabatischen Inversionspulse zu kommen. Außerdem wird beschrieben, wie diese Feststellungen auf die Neutronenphysik angewendet werden können.



Abbildung 5.3: Zur Definition des a) Labor-Systems (S') und des b) mit der Frequenz ω_0 rotierenden Systems (S) [26].

Rotierendes Bezugssystem

Als Laborsystem S' bezeichnet man ein physikalisches Bezugssystem, in dem Fußboden und Wände des Labors ruhen. Für unsere Betrachtungen sei die kartesische z-Achse des Laborsystems parallel zu einem externen magnetischen $\vec{\mathbf{B}}_0$ -Feld definiert (siehe Abbildung 5.3). Die x und y Achsen seien orthogonal zueinander und die Fläche, die diese Achsen aufspannen, sei normal zu $\vec{\mathbf{B}}_0$ und sei als Transversalebene bezeichnet. Wenn das Laborsystem nun um die z-Achse mit einer Kreisfrequenz ω_0 rotiert, so nennt man dieses ein rotierendes Bezugssystem S (Abbildung 5.3.b).

Betrachten wir nun einen zeitabhängigen Vektor $\vec{p'}(t)$ im Laborsystem S'

$$\vec{p'}(t) = p_{x'}(t)\hat{x'} + p_{y'}(t)\hat{y'} + p_{z'}(t)\hat{z'}, \qquad (5.3)$$

wobei $p_{i'}$; i = (x, y, z) die Komponenten des Vektors $\vec{p'}(t)$ mit ihrem jeweiligen Einheitsvektor $\hat{i'}$ bezeichnen. Dieser Vektor $\vec{p'}(t)$ kann im rotierenden System S als $\vec{p}(t)$ beschrieben werden mit

$$\vec{p}(t) = p_x(t)\hat{x} + p_y(t)\hat{y} + p_z(t)\hat{z}.$$
(5.4)

Sind die Komponenten des Vektors $\vec{p'}(t)$ bekannt, so werden diese ins rotierende Bezugssystem mithilfe der sogenannten Drehmatrix R transformiert:

$$\begin{bmatrix} p_x(t) \\ p_y(t) \\ p_z(t) \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \cos \omega_0 t & -\sin \omega_0 t & 0 \\ \sin \omega_0 t & \cos \omega_0 t & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}}_{R} \cdot \begin{bmatrix} p_{x'}(t) \\ p_{y'}(t) \\ p_{z'}(t) \end{bmatrix} = R \cdot \vec{p'}(t)$$
(5.5)

Sind andererseits die Komponenten des Vektors $\vec{p}(t)$ im rotierenden System bekannt, so können die Komponenten dieses Vektors im Laborsystem folgendermaßen ausgerechnet werden

$$\begin{bmatrix} p_{x'}(t) \\ p_{y'}(t) \\ p_{z'}(t) \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \cos \omega_0 t & \sin \omega_0 t & 0 \\ -\sin \omega_0 t & \cos \omega_0 t & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}}_{R^{-1}} \cdot \begin{bmatrix} p_x(t) \\ p_y(t) \\ p_z(t) \end{bmatrix} = R^{-1} \cdot \vec{p}(t) = R^T \cdot \vec{p}(t), \quad (5.6)$$

wobe
i R^{-1} die invertierte und R^T die transponierte Matrix vo
nR bezeichnet und $R^T=R^{-1}$ gilt.

Man kann zeigen [46], dass die zeitliche Variation eines Vektors in den beiden Systemen, Labor- und rotierendes Bezugssystem, durch folgende Beziehung gegeben ist:

$$\left(\frac{d\vec{p'}(t)}{dt}\right)_{S'} = \left(\frac{d\vec{p}(t)}{dt}\right)_{S} + \vec{\Omega} \times \vec{p}(t);$$
(5.7)

wobei $\vec{\Omega} = -\omega_0 \hat{z}$ einen Winkelgeschwindigkeitsvektor bezeichnet (Abbildung 5.3.*b*).

Magnetisches Radiofrequenz(RF)-Feld

Es wird gleich klar, warum es notwendig ist, auf der Transversalebene ein hochfrequentes Wechselfeld einzusetzen, um die Spins von Neutronen umzuklappen. Die Frequenz des Wechselfeldes $\vec{\mathbf{B}'}_1$ wird Trägerfrequenz ω_{rf} genannt und liegt im Radiofrequenzbereich des elektromagnetischen Spektrums.

Im Laborsystem S' kann ein sogenanntes zirkular polarisiertes Feld durch

$$\vec{\mathbf{B}'}_1(t) = B'_1(t) \left[\cos(\omega_{rf} t) \hat{x'} - \sin(\omega_{rf} t) \hat{y'} \right]$$
(5.8)

mathematisch beschrieben werden, wobei die Amplitude $B_1(t)$ des Feldes auch von der Zeit abhängen kann. Transformiert man dieses Feld ins rotierende System nach Gleichung (5.5), wobei die Trägerfrequenz gleich der Kreisfrequenz des rotierenden Systems eingesetzt wird, d.h. $\omega_0 = \omega_{rf}$, so ergibt sich für $\vec{\mathbf{B}}_1(t)$ im rotierenden System:

$$\begin{bmatrix} B_{1,x}(t) \\ B_{1,y}(t) \\ B_{1,z}(t) \end{bmatrix}_{rot} = \begin{bmatrix} B'_1(t) \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$
(5.9)

Ein RF-Feld, dessen Komponenten auf der Transversalebene des Laborsystems liegen, vereinfacht sich also im rotierenden System zu einem Feld, dessen Komponenten in y- und z- Richtung verschwinden und bei dem es keine RF-Oszillation mehr gibt. Es bleibt nur die zeitabhängige Amplitude $B_1(t)$. Betrachten wir nun ein \vec{B} -Feld, dessen Komponenten sich aus einem statischen B_0 -Feld in z-Richtung und einem zirkular polarisierten Wechselfeld in der Transversalebene (Gleichung (5.8)) zusammensetzen:

$$\vec{B}(t) = B_1(t)\cos(\omega_{rf}t)\hat{x'} - B_1(t)\sin(\omega_{rf}t)\hat{y'} + B_0\hat{z'},$$
(5.10)

Dieses lässt sich dies auf analogem Wegemit 5.5 ins rotierende System transformieren. Somit ergibt sich nach einfacher Rechnung:

$$\begin{bmatrix} B_{1,x}(t) \\ B_{1,y}(t) \\ B_{1,z}(t) \end{bmatrix}_{rot} = \begin{bmatrix} B_1(t)\cos\left[(\omega_0 - \omega_{rf})t\right] \\ B_1(t)\sin\left[(\omega_0 - \omega_{rf})t\right] \\ B_0 \end{bmatrix}$$
(5.11)

Zeitliche Entwicklung der Polarisation

Die magnetische Polarisation der Neutronen äußert sich als eine Magnetisierung \vec{M} , deren zeitliche Entwicklung in einem äußeren Magnetfeld \vec{B} durch die sogenannte Bloch-Gleichungen [10] beschrieben werden kann:

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma \vec{M} \times \vec{B} - \hat{x} \frac{M_x}{T_2} - \hat{y} \frac{M_y}{T_2} - \hat{z} \frac{M_z - M_0}{T_1}$$
(5.12)

wobei γ das gyromagnetische Verhältnis des Neutrons ist. Die paramagnetische Relaxation wird durch die drei letzten Glieder der Gleichung beschrieben. Man bezeichnet dabei T_1 als die Spin-Gitter-Relaxationszeit und T_2 als Spin-Spin-Relaxationszeit. Für die hier vorliegenden Betrachtungen spielt allerdings das Phänomen der Relaxation keine Rolle. Diese Glieder der Gleichung können also vernachlässigt werden und es bleibt

$$\left(\frac{d\vec{M}}{dt}\right)_{S'} = \gamma \vec{M} \times \vec{B}(t), \tag{5.13}$$

was die Bewegung der Magnetisierung im freien Magnetfeld beschreibt. Unter Verwendung der Beziehung 5.7 und des B-Feldes 5.10 ergibt sich die Transformation der Bewegungsgleichung (5.13) ins rotierende Bezugssystem S zu:

$$\left(\frac{d\vec{M}}{dt}\right)_{S} = \left(\frac{d\vec{M}}{dt}\right)_{S'} - \vec{\Omega} \times \vec{M} \\
= \gamma \vec{M} \times \vec{B}(t) - \vec{\Omega} \times \vec{M} \\
= \gamma \vec{M} \times \left(\vec{B}(t) + \frac{\vec{\Omega}}{\gamma}\right)$$
(5.14)

Hierbei müssen natürlich die Komponenten des B-Feldes im rotierenden System eingesetzt werden (Gleichung (5.11)) und mit $\vec{\Omega} = -\omega_0 \hat{z}$ ergibt sich

$$\left(\frac{d\vec{M}}{dt}\right)_{S} = \gamma \vec{M} \times \underbrace{\left[B_{1}(t)\cos\left[(\omega_{0} - \omega_{rf})t\right]\hat{x} + B_{1}(t)\sin\left[(\omega_{0} - \omega_{rf})t\right]\hat{y} + \left(B_{0} - \frac{\omega_{0}}{\gamma}\right)\hat{z}\right]}_{\equiv \vec{B}_{\text{eff}}}$$

$$(5.15)$$

Im rotierenden System präzediert also der Magnetisierungsvektor um ein effektives Feld \vec{B}_{eff} . Betrachten wir erneut den Spezialfall, bei dem die Frequenz ω_0 des rotierenden Systems der Trägerfrequenz ω_{rf} gleicht, so ergibt sich:

$$\left(\frac{d\vec{M}}{dt}\right)_{S} = \gamma \vec{M} \times \left[B_{1}(t)\hat{x} + \left(B_{0} - \frac{\omega_{0}}{\gamma}\right)\hat{z}\right].$$
(5.16)

Das Wechselfeld tritt in diesem Fall also wieder statisch in Erscheinung. Aus dem Grund bezeichnet man dieses System auch als RF-Bezugssystem.

Nun machen wir von der Tatsache Gebrauch, dass der Drehimpuls eines Teilchens mit einem magnetischen Dipolmoment um ein äußeres Magnetfeld mit der sogenannten Larmorfrequenz ω_L präzediert, welche proportional zur magnetischen Flussdichte $|\vec{B}|$ ist:

$$\omega_L = \gamma \cdot |\vec{B}| \tag{5.17}$$

Stimmt die Trägerfrequenz mit der Larmorfrequenz überein, also $\omega_L = \omega_{rf}$, so ist das System in Resonanz. Setzt man 5.17 für B_0 in 5.16 und die Resonanzbedingung ein, so ergibt sich für die zeitliche Entwicklung des Magnetisierungsvektors:

$$\left(\frac{d\vec{M}}{dt}\right)_{S} = \gamma \vec{M} \times B_{1}(t)\hat{x}$$
(5.18)

Das effektive Magnetfeld vereinfacht sich also im Resonanzfall zu $\vec{B}_{\text{eff}} = B_1(t)\hat{x}$, d.h. im rotierendem System verschwindet das statische Feld B_0 , falls Resonanz vorhanden ist.

Adiabatische Inversion

Der im Rahmen dieser Diplomarbeit gebaute Spin-Flipper basiert auf dem sogenannten Prinzip des adiabatischen Übergangs, welches besagt, dass der Magnetisierungsvektor eines Spinsystems der Richtung des effektiven magnetischen Feldes folgt, solange sich die Richtung von B_{eff} während einer Präzessionsperiode des Magnetisierungsvektor um B_{eff} nicht drastisch bzw. langsam genug ändert [26]. Dies kann mathematisch durch

$$\left|\frac{d\psi}{dt}\right| \ll \gamma \left|\vec{B}_{\text{eff}}\right| \tag{5.19}$$



Abbildung 5.4: Adiabatischer Umkehrungsprozess des Magnetisierungsvektors [26]. \vec{M} folgt dabei die Richtung des effektiven Magnetfeldes B_{eff} .

beschrieben werden, wobei ψ die Richtung (Winkel in Radian) von B_{eff} beschreibt. Dies ist die sogenannte adiabatische Bedingung.

Betrachten wir nun ein Wechselfeld

$$\vec{B}_{1}(t) = A(t)e^{-i\omega_{rf}(t)t},$$
(5.20)

dessen Amplitude A(t) und Frequenz $\omega_{rf}(t)$ durch eine Sinus- bzw. Kosinusfunktion moduliert sind, d.h.

$$A(t) = B_x \sin(\zeta t) \tag{5.21}$$

$$\omega_{rf}(t) = \omega_L - \gamma B_z \cos(\zeta t) \tag{5.22}$$

wobei ζ die Modulationsfrequenz, ω_L die Larmorfrequenz und B_x die zeitunabhängige Amplitude bezeichnet. Wir nehmen dabei an, dass das Wechselfeld in x-Richtung eingeschaltet wird. γB_z ist dabei die Amplitude der Modulationsfrequenz, wobei B_z der Magnetfeldamplitude entlang der z-Achse entspricht, die sich aus dem Off-Resonanz-Effekt im rotierenden Bezugssystem ergibt. Ein Vergleich zwischen 5.22 und 5.16 ergibt

$$\frac{\omega_L - \omega_{rf}}{\gamma} = B_z \cos(\zeta t). \tag{5.23}$$

Die Amplitude und Richtung des effektiven Magnetfeldes sind also

$$\left|\vec{B}_{\text{eff}}\right| = \sqrt{(B_x \sin(\zeta t))^2 + (B_z \cos(\zeta t))^2} \tag{5.24}$$

$$\psi = \arctan\left(\frac{B_x \sin(\zeta t)}{B_z \cos(\zeta t)}\right). \tag{5.25}$$

Mit Hilfe dieser Ergebnisse können wir nun erklären, wie sich die Magnetisierung mit der Zeit entwickelt, wobei die adiabatische Bedingung 5.19 jederzeit erfüllt werden muss. Dies erreicht man, indem die Modulationsfrequenz ζ gering genug und/oder B_{eff} stark genug gewählt werden. Ist dies der Fall, so wird der Magnetisierungsvektor \vec{M} der Richtung von B_{eff} folgen, wobei \vec{M} eigentlich wegen 5.16 um B_{eff} präzediert.

Am Anfang (t = 0) hat B_{eff} dieselbe Richtung wie der Magnetisierungsvektor \dot{M} , denn $\psi(t = 0) = 0$ (Abbildung 5.4.a). Wenn $t = \pi/(2\zeta)$ zeigen beide B_{eff} und \vec{M} in x-Richtung, d.h. $\psi = 90^{\circ}$ (Abbildung 5.4.c) und am Ende $(t = \pi/\zeta)$ hat B_{eff} (und damit auch die Polarisation) eine 180°-Rotation erfahren (Abbildung 5.4e).

Wie man sieht, hängt die Umkehrung der Polarisation also unter anderem davon ab, wie das B_1 -Feld seine Amplitude (und Frequenz) ändert und nicht davon, ob B_1 perfekt homogen ist.

5.3.2 Spinflipper Design

Wie in Kapitel 5.2 erklärt, ist die Polarisationsrichtung des Neutronenstrahls in unserem Fall parallel zur Bewegungsrichtung der Neutronen. Sei diese Richtung parallel zur z-Achse. Dann muss das Führungsfeld B_0 auch in diese Richtung zeigen (Abbildung 5.4a). Folglich muss das Wechselfeld tangential dazu eingeschaltet werden, z. B. in x-Richtung.

Da sich die Neutronen parallel zur z-Achse mit der Geschwindigkeit v = x/tbewegen, muss die Amplitudenmodulation räumlich erfolgen, d.h. die zeitabhängige Amplitude 5.21 wird zu

$$A(x) = B_x \sin(\zeta' x), \tag{5.26}$$

damit die Neutronen ein Feld wie in Gleichung (5.20) "sehen". Allerdings wird hier kein zirkular polarisiertes Wechselfeld wie auf Gleichung (5.8) dargestellt eingeschaltet, sondern das Wechselfeld zeigt lediglich in x-Richtung. Dies liefert aber die selben Ergebnisse, da solch ein Feld in seine gegenläufig rotierenden Komponenten zerlegt werden kann:

$$B'_{1} = B_{x} \cos(\omega_{rf}t)$$
$$= \frac{B_{x}}{2} \left(\cos(\omega_{rf}t)\hat{x'} + \sin(\omega_{rf}t)\hat{y'} \right) + \frac{B_{x}}{2} \left(\cos(\omega_{rf}t)\hat{x'} - \sin(\omega_{rf}t)\hat{y'} \right) \quad (5.27)$$

Dies kann mit Hilfe der Gleichung (5.5) ins rotierende System transformiert werden, und es ergibt sich:

$$\vec{B}_{1} = \frac{B_{x}}{2}\hat{x} + \frac{B_{x}}{2}\left(\cos(2\omega_{rf}t)\hat{x} - \sin(2\omega_{rf}t)\hat{y}\right).$$
(5.28)

Wenn die $2\omega_{\rm rf}$ -Glieder vernachlässigt werden, ergibt sich das gleiche Ergebniss wie in Gleichung (5.9), außer dass die Amplitude des Wechselfeldes im rotierenden System um den Faktor 2 reduziert wird. Alle anderen Betrachtungen bleiben aber gültig.

Die Frequenzmodulation 5.22 erreicht man so, dass ins Führungsfeld ein Gradient in z-Richtung eingeführt wird. Man kann zwar eine Kosinusmodulation wie auf (5.22) bzw. (5.23) auswählen, aber man sieht in Gleichung (5.25), dass solange B_z einen positiven Gradienten hat und in der Mitte des Feldes die Resonanzbedingung $B_0 = \omega_0/\gamma$ gilt, sodass ein Vorzeichenwechsel in ψ stattfindet, werden die Richtung des effektiven Magnetfeldes und somit auch die Polarisation des Neutronenstrahls um 180° gedreht.

Für das Wechselfeld B_1 liegt es nahe, ein Paar Helmholtzspulen zu benutzen, die ein Feld in x-Richtung erzeugen, d.h. sie müssen geometrisch parallel zur z-Achse angeordnet werden. Um ein Feld mit einem Maximum in der Mitte des Flippers zu produzieren, muss die Geometrie einer Standard-Helmholtzspule verändert werden.

Es gibt in der Literatur einige Vorschläge, wie diese Geometrie auszusehen hat (siehe dazu [21] oder [28]). Einige dazu basierende Designs für den Flipper wurden nachgerechnet (Siehe Abbildung 5.5). Die in Abbildung 5.5a dargestellte Spule hat den Nachteil, dass wegen ihrer großen Fläche das Führungsfeld B_0 verändert werden kann. Dies hat zur Folge, dass sich weitere Resonanzpunkte im Inneren des Spinflippers ergeben können.

Die in Abbildung 5.5a dargestellte Spule hat den Nachteil, dass sich das davon erzeugte Wechselfeld zu weit nach außen ausdehnt, was ebenfalls die Ursache weiterer Resonanzpunkten sein kann. Außerdem kann das Wechselfeld durch die Korrekturspulen für das Führungsfeld B_0 verändert werden, was zum gleichen Problem führt. Für unsere Zwecke erwies es sich als die beste Lösung, die Geometrie der Helmholtzspulen in eine zu überführen, wie in Abbildung 5.6 zu sehen ist.

Die Spulenkörper wurden von der Werkstatt des physikalischen Instituts aus PVC angefertigt. Mit einer Stromdichte von $2.5 \frac{A}{mm^2}$ in der Spulen ergibt sich in der Mitte des Flippers eine zeitunabhängige Amplitude des Wechselfeldes von 2 mT in x-Richtung (siehe Abbildung 5.8). Das gesamte Magnetfeld wurde in Mathematica mit dem Tool "Radia" ausgerechnet [5]. Um diese Stromdichte zu erreichen, besitzt jede Spule 100 Wicklungen eines 0.5mm dicken Kupferlackdrahtes.

Es sei an dieser Stelle erwähnt, dass das Wickeln dieser Spulen sich als recht schwierig erwies, denn auf den Kurven der Spulen wird ein Zug nach innen auf den Draht ausgeübt, was dazu führt, dass die äußersten Wicklungen dazu tendieren,



Abbildung 5.5: Beispiele für das Design des Spinflippers.

sich eben in Richtung dieses Zuges zu platzieren. Dies führt wiederum dazu, dass die Wicklungen nicht ordentlich genug an den Spulenkörper angebracht werden konnten.

Dieses Problem wurde dadurch behoben, dass an jeder Stelle, wo eine Kurve anfängt, eine Leimzwinge mit passenden Plastikklötzen benutzt wurde, um den Draht in der richtigen Position zu halten. Dies war zwar sehr effektiv, um die Wicklungen ordentlich zu platzieren, es hat aber ungefähr 15 bis 30 Minuten gedauert, eine Wicklung zu fertigen.

Um ein Gradientfeld zu erreichen, benutzen wir eine Anordnung von Ringspulen, wie in Abbildung 5.7 dargestellt. Es sind insgesamt 6 Solenoidspulen verschiedener Großen, sodass ein Gradientfeld entsteht, wenn auf jede Spule die gleiche Stromdichte fließt. Es ist mit dieser Anordnung technisch einfach, das Gradientfeld zu erzeugen, denn nur ein Netzgerät dazu benutzt werden kann.

Jede Spule ist 15 mm breit und hat einen Innenradius von 100 mm. Die Höhe jeder Spule variert um jeweils 2 mm, d.h. die erste Spule hat ein Außenradius von 102 mm und die letzte 112 mm. Die Spulenkörper wurden auch von der Werkstatt des Physikalischen Instituts aus PVC angefertigt. Mit einer Stromdichte von $1\frac{A}{mm^2}$ und einem Abstand von 75mm zwischen den Spulen, ergibt sich ein Feld von 1,4 mT in der Mitte des Flippers. (Siehe Abbildung 5.8).

Die Spulen werden auf einem PVC-Rohr mit einem äußeren Radius von 100 mm aufgelegt und sind derar verschiebbar. Die Spulen für das Wechselfeld werden im Inneren des Rohrs mit Hilfe eines verschiebbaren Tisches zur Vermeidung von zusätliche Resonanzpunkten aufgebracht (Abbildung 5.7).



Abbildung 5.6: Geometrie der Spulen zur Erzeugung des Wechselfelds B_1 . Der Neutronenstrahl geht in die positive z-Richtung durch die Mitte der Spulen.

Für das Gradientfeld B_0 muss in Betracht gezogen werden, dass sich neben dem Spinflipper ein supraleitender Magnet befindet, der ein Feldgradient erzeugt, der sich räumlich stark ausdehnt (siehe Kapitel 5.4). Dieser Gradient kann als Führungsfeld ausgenutzt werden. Allerdings wird sich natürlich der Betrag des Feldes ändern: Die Depolarisation wird in Abhängigkeit der magnetischen Flussdichte bis 1,8 T gemessen. Dies macht es notwendig, dass sowohl die Spulen für das Wechselfeld als auch die Spulen für das Gradientfeld verschiebbar sind, sodass ein Resonanzpunkt in der Mitte des Flippers leicht zugänglich ist.

Die Frequenz des Wechselfeldes ω_{rf} wird mit Hilfe eines Funktionsgenerators erzeugt und wird nach Gleichung (5.16) gewählt, sodass die z-Komponente des effektiven B-Feldes dort verschwindet, wo das Maximum der Amplitude des Wechselfeldes liegt:

$$f = \frac{\omega_{rf}}{2\pi} = \frac{\omega_0}{2\pi} = \frac{\gamma}{2\pi} \cdot \left| \vec{B}_0(x=0) \right|.$$
(5.29)

Bei einer magnetischen Flussdichte von z. B. 2 mT in der Mitte des Flippers ergibt sich mit Gleichung (2.2) eine Frequenz von 58.3 kHz.



Abbildung 5.7: Solenoidsystem zur Erzeugung des Gradientfeldes B_0 . Die Spulen für das Wechselfeld werden in das Innere der Ringspulen gelegt.



Abbildung 5.8: Amplitude des Wechselfelds B_1 und Führungsfeld B_0 des Spinflippers als Funktion der Position z im Laborsystem.



Abbildung 5.9: Bild des fertiggestellten Spinflippers

5.4 Supraleitender Magnet: Perkino

Ein einstellbares Magnetfeld (maximale magnetische Flussdichte = 1.8 T) muss an den Proben angelegt werden, damit die Depolarisationseffekte in Abhängigkeit von der magnetischen Flussdichte B untersucht werden können.

Um so ein starkes B-Feld zu erzeugen, wird eine supraleitende Spule benutzt, die mit Flüssigem Helium bei $\approx 4 \,\mathrm{K}$ betrieben wird. In der Arbeitsgruppe steht ein supraleitender Solenoid mit einer maximalen magnetischen Flussdichte von 7 T zur Verfügung, der "Perkino" gennant wird.

Die Geometrie der Spule ist genau bekannt (Abbildung 5.10): Sie besitzt eine Länge von 30 cm, ein Innendurchmesser von 8 cm und ein Außendruchmesser von 13 cm (siehe Abbildung 5.10a). Anhand dieser Geometrie und der Stromdichte kann das Magnetfeld begerechnet werden (Abbildung 5.10b).

Das Gehäuse von Perkino ermöglicht die Ausnutzung des von der Spule erzeugten inneren Magnetfeldes, wo die Proben gelegt werden, wie in Abbildung 5.1 schematisch gezeigt.

5.5 CASCADE Detektor

Da Neutronen nicht ionisierend wirken, müssen sie indirekt nachgewissen werden. Sie werden aus dem Grund meistens über Kernreaktionen detektiert, bei denen



Abbildung 5.10: Supraleitender Magnet: Perkino

ionisierende Strahlung entsteht. Für einen Überblick über Neutronen Detektion siehe z. B. [23]. Wir werden den im Physikalischen Institut entwickelten, ortsauflösenden, hochratentauglichen CASCADE-Detektor benutzen. Für eine genaue Beschreibung des Detektors siehe [9].

Der Detektor besteht aus mehreren "Gas Electron Multiplier" (GEM)-Folien, die mit einer Anordnung aufgebaut sind, wie sie in Abbildung 5.11 zu sehen ist. Für eine genaue Beschreibung der Funktionsweise der GEM-Folien siehe [45]. Die GEM-Flolien sind mit einer dünnen Borschicht (¹⁰B) beschichtet, die mittels der Kernreaktion

$${}^{10}B + n \to {}^{7}Li + \alpha \tag{5.30}$$

als fester Neutronenkonverter benutzt wird. Die zu detektierenden Neutronen werden also von dieser Borschicht eingefangen, die dabei entstehenden ⁷Li und α -Teilchen verlassen die dünne (einige Mikrometer dicke) Borschicht und werden durch das von den GEM-Folien erzeugten E-Feld transportiert. Dabei ionisieren sie das Argon-CO₂-Gemisch-Gas, das bei Normaldruck als Zählgas zur Gasverstärkung benutzt wird. Es entsteht dadurch eine Ladungswolke, die durch den Drift-Feld transportiert und mittels einem ladungsempfindlichen Vorverstärker und einer zweidimensionalen Auslesestruktur detektiert wird.

Mit diesem Detektor kann eine Zeitauflösung von weniger als einer Mikrosekunde und eine Ortsauflösung von wenigen Millimetern erreicht werden.



Abbildung 5.11: Schematische Darstellung des CASCADE-Detektors

5.6 Gesamt-Magnetfeldkonfiguration des Reflektometers

Um die Abstände zwischen den in den vorherigen Kapitel beschriebenen Komponenten des Reflektometers zu bestimmen, wurde eine Simulation des Gesamtmagnetfeldes in Mathematica mit dem Tool "Radia" durchgeführt. Die Einzelne Komponenten sind in Abbildung 5.13 und der dazu berechneten Magnetfeldverlauf in Abbildung 5.12a und 5.12b dargestellt. Es ergibt sich eine Gesamtlänge von 3 m für den Reflektometer. Zur Vermeidung nicht gewünschter Resonanzpunkte müssen die RF-Spulen verschoben werden, sodass diese auf das Gradientfeld von Perkino angepasst wird.



(a) Bei einem maximalen Perkino-Feld von $0.5\,{\rm T}$ (b) Bei einem maximalen Perkino-Feld von $2\,{\rm T}$

Abbildung 5.12: Gesamtfeldkonfiguration des Reflektometers



Abbildung 5.13: Schematische Darstellung der Geometrie des Reflektometers für die Simulation des Gesamtfeldes in Radia. Der Neutronenstrahl ist dabei mit Grün dargestellt.

6 Zusammenfassung

Ziel der vorliegenden Diplomarbeit ist es, die im Physikalischen Institut der Universität Heidelberg hergestellten nicht-depolarisierenden, für PERC benötigten Superspiegeln auf zwei Eigenschaften zu untersuchen, nämlich auf ihre Schichtdicke und ihre Depolarisationseigenschaften.

Für die Bestimmung metallischer Schichtdicken wurde, wegen ihrer leichten Zugänglichkeit und hinreichenden Genauigkeit, die Spektralphotometrie als Messmethode eingesetzt. Die Wechselwirkung zwischen elektromagnetischer Strahlung und leitenden Medien wurde ausgehend von den klassischen Maxwellschen Gleichungen hergeleitet. Diese klassische Theorie wurde mit der Neutronenoptik verglichen, die eine quantenmechanische Herangehensweise darstellt. Einerseits konnte anhand dieses Vergleichs ein schon vorliegendes, auf Neutronenoptik basierendes Mathematica-Paket genutzt werden, um die Dicke der Superspiegel-Proben auszuwerten, andererseits konnte daraus die für die klassische Optik nicht leicht zugängliche Dichteabhängigkeit des Brechungsindex hergeleitet werden. Anhand von Silizium-Superspiegel-Proben konnte gezeigt werden, dass die Ergebnisse akzeptabel sind. Für Kupfer allerdings ist die Bestimmung der Dicke zwar ausreichend zutreffend, der Verlauf des Spektrums zeigt jedoch kleine Abweichungen. Letzteres konnte anhand der Dichteabhängigkeit des Brechungsindex noch nicht erklärt werden.

Am Spektrophotometer wurden mehrere technische Verbesserungen des Messverfahrens, die seine Genauigkeit und Effizienz verbessert haben. Außerdem wurde eine Methode zur Eichung des Photometers vorgestellt, welche sich als genauer erwiesen hat als die bisher benutzte. Die Rohdaten des Photomultipliers wurden erfolgreich digitalisiert. Allerdings hat sich dabei herausgestellt, dass der Photomultiplier aufgrund der internen Elektronik des Photometers auf einen der beiden Strahlen differentiell reagiert. Die gleichzeitige Messung des Transmissionsgrads gegen die volle Intensität und gegen das Rauschen konnte aus diesem Grund nicht erreicht werden.

Die hier hergeleitete Theorie für die Abhängigkeit des Brechungsindex von der Dichte soll in Zukunft für andere Metalle überprüft werden. Das Problem bei der Schichtdickenbestimmung einiger Metalle besteht darin, das die in den 70er Jahren gemessenen Koeffizienten des Brechungsindex nicht verlässlich genug sind.

Als Lösung für die Zukunft besteht für Kupfer und andere Metalle die Möglichkeit, anhand genau bekannter Methoden (z. B. der Röntgenreflektometrie) die Schichtdicke mehrerer Proben auszumessen und anhand dieser die Extintionskoeffitienten für Kupfer am Photometer neu zu bestimmen. Somit könnten die Schichtdicken der im Physikalischen Institut hergestellten Superspiegel-Proben anhand der leicht zugängliche Spektralphotometire mit fast der gleichen Genauigkeit wie die Röntgenreflektometrie bestimmt werden. Des weiteren sollte in Zukunft überprüft werden, ob die gewünschte Messung der Transmissionskoeffizienten gegen die 0% ige Intensität, wie in Kapitel 4.5 vorgeschlagen, erfolgen kann.

Für die Messung der Depolarisationseigenschaften der Superspiegel-Proben wurde im Rahmen dieser Diplomarbeit ein Neutronenreflektometer entwickelt und gebaut. Eine Messung des Depolarisationsgrades mit einer Genauigkeit von 10^{-4} kann erstmalig in einem Magnetfeld von bis zu 2 T durchgeführt werden. Dabei wurde besonderes Augenmerk auf das Design des Spinflippers gelegt, das NMR-Methoden auf bewegte Neutronen angewendet. Die theoretischen Grundlagen wurden präsentiert.

Aufgrund technischer Probleme des Reaktors am FRM II, können die Messungen, die im Rahmen dieser Arbeit vorbereitet wurden, erst im November 2012 stattfinden. Die dabei erwarteten Ergebnisse werden nicht nur für PERC, sondern auch für andere Instrumente, die nicht-depolarisierende Neutronenleiter benötigen, von Bedeutung sein.

A Abbildungsverzeichnis

2.1	Schematische Darstellung des Neutron- β -Zerfalls	6
3.1	Schematische Darstellung von PERC	10
3.2	Schematische Darstellung eines Superspiegels	11
3.3	Theoretische Reflektivität von Superspiegeln	12
4.1	Vielstrahlinterferenz an zwei plan parallelen Grenzschichten $\ . \ . \ .$	18
4.2	Schematische Darstellung eines Zweistrahl-Spektralphotometers	24
4.3	Funktionsweise eines geblazten Gitter	25
4.4	Strahlteiler des Photometers	26
4.5	Schaltplan des selbstgebauten Transistorschalters	26
4.6	Transmissionsspektrum des 405 nm-Filters	27
4.7	Transmissionsspektrum des 780 nm-Bandpassfilters	28
4.8	Spektrum der Deuterium Spektrallampe	29
4.9	Beispiel der Signale des Photomultipliers	31
4.10	Rohdaten des Photomultipliers 1	32
4.11	Rohdaten des Photomultipliers 2	33
4.12	Komplexer Brechungsindex von Kupfer	36
4.13	Transmissionsspektrum von Kupfer nach dem Lambertschen Gesetzt .	37
4.14	Transmissionsspektrum von Silizium	37
4.15	Transmissionsspektrum von Kupfer	38
5.1	Schematische Darstellung des Reflektometers	42
5.2	Reflektivität und Polarisation eines FeCoV/TiN Superspiegels	43
5.3	Bezugssysteme	45
5.4	Adiabatischer Umkehrungsprozess des Magnetisierungsvektors	49
5.5	Beispiele für das Design des Spinflippers	52
5.6	Geometrie der Spulen zur Erzeugung des Wechselfelds B_1	53
5.7	Solenoidsystem zur Erzeugung des Gradientfeldes	54
5.8	Feldverlauf des Spinflippers	54
5.9	Bild des fertiggestellten Spinflippers	55
5.10	Supraleitender Magnet: Perkino	56
5.11	Schematische Darstellung des CASCADE-Detektors	57
5.12	Feldkonfiguration des Reflektometers	57
5.13	Reflektometer: Geometrie zur Simulation des B-Feldes	58

B Literaturverzeichnis

- [1] CODATA, The Committee on Data for Science and Technology. URL http: //www.codata.org/resources/databases/data_access/index.html.
- [2] G. Konrad. Proton Detection in PERC. URL http://www.quantum.physik. uni-mainz.de/de/members/heil/konradg.html.
- [3] Mephisto: a measuring facility for particle physics with cold neutrons. URL http://www.frm2.tum.de/en/science/ fundamental-amp-particle-physics/mephisto/index.html.
- [4] Neutronenleiter, Forschungs-Neutronenquelle FRM II. URL http: //www.frm2.tum.de/de/technik/strahlfuehrung-der-neutronen/ neutronenleiter/index.html.
- [5] ESRF, Radia. URL http://www.esrf.eu/Accelerators/Groups/ InsertionDevices/Software/Radia.
- [6] Treiberschaltung. URL http://www.elektronik-kompendium.de/sites/ slt/1201131.htm.
- [7] Swiss Neutronics. Concept of neutron mirror: supermirror. URL http://www. swissneutronics.ch/products/concept-supermirror.html.
- [8] Swiss Neutronics Coatings. URL http://www.swissneutronics.ch/ products/coatings.html.
- [9] F. Allmendinger. Weiterentwicklung des CASCADE-MIEZE-Detektors und dessen Integration in RESEDA. Master's thesis, Universität Heidelberg, 2011.
- [10] F. Bloch. Nuclear induction. *Physical Review*, 70, 1946.
- [11] P. Böni. Supermirror-based beam devices. *Physica B*, 1997.
- [12] Max Born. Optik. Springer Verlag, 1985.
- [13] J. Chadwick. Possible Existence of a Neutron. Nature 192, 312, 1932.
- [14] Marciano W.J. Czarnecki A. and Sirlin A. Precision measurements and CKM unitarity. *Phys. Rev. D*, 70, 2004.
- [15] Wolfgang Demtröder. Experimentalphysik 2, Elektrizität und Optik. Springer Verlag, 2002.

- [16] G. H. Dieke and R. W. Blue. The Fulcher Bands of HD and D_2 . *Physical Review*, 47, 1935.
- [17] D. Dubbers and R. Scherm. Neutronen-Forschung am Institut Laue-Langevin: Neutronen-Quelle und Experimente. *Physik in unserer Zeit*, 34, 2003.
- [18] Dirk Dubbers and Michael G. Schmidt. The neutron and its role in cosmology and particle physics. *Rev. Mod. Phys.*, 83, 2011.
- [19] A. Dianoux G. Lander (Eds.). Neutron Data Booklet. Institute Laue-Langevin, 2003.
- [20] P.A. Egelstaff. General review of neutron chopper techniques. *Atomic Energy Research Establishment*, 1961.
- [21] A.A. Sumbatyan et al. Methods and Devices for Reversing Neutron Polarization. Nuclear Experimental Technique, 2008.
- [22] Alexei Erko et al. Modern Development in X-Ray and Neutron Optics. Springer Verlag, 2008.
- [23] A.P. Simpson et al. A review of neutron detection technology alternatives to helium-3 for safeguards applications. *INMM 52nd Annual Meeting*, 2011.
- [24] D. Dubbers et al. PERC: A clean, bright, and versatile source of neutron decay products. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A, 596, 2008.
- [25] Ludwig Bergmann et al. Lehrbuch der Experimentalphysik Bd.3 Optik: Wellenund Teilchenoptik. de Gruyter, 2004.
- [26] Matt A. Bernstein et al. Handbook of MRI Pulse Sequences. Elsevier Academic Press, 2004.
- [27] P.-N. Seo et al. High-efficiency resonant RF spin rotator with broad phase space acceptance for pulsed polarized cold neutron beams. *Physical Review Special Topics - Accelerators and Beams*, 11, 2008.
- [28] S.V. Grigoriev et al. Peculiarities of the construction and application of a broadband adiabatic flipper of cold neutrons. *Nuclear Instruments and Methods* in *Physics Research*, 1996.
- [29] J. Beringer et al. (Particle Data Group). The review of particle physics. PR D86, 2012.
- [30] Richard Feynman. Vorlesungen über Physik, Band 1. Oldenbourg Verlag, 2001.
- [31] G. Konrad et al. (The PERC collaboration). Neutron Decay with PERC: a Progress Report. Journal of Physics: Conference Series, 340, 2012.

- [32] M.L. Goldeberger and F. Seitz. Theory of the Refraction and the Diffraction of Neutrons by Crystals. *Physical Review*, 71, 1946.
- [33] Eugene Hecht. Optik. Oldenbourg Verlag, 2005.
- [34] P. B. Johnson and R. W. Christy. Optical constants of copper and nickel as a function of temperatures. *Physical Review B*, 1974.
- [35] T. Lauer. Entwicklung eines Borbeschichtungsprozesses mittels einer Sputteranlage. Master's thesis, Universität Heidelberg, 2006.
- [36] Schulz L.G. The optical Constants of Silver Gold Copper and Aluminium. Optical Society of America, 1953.
- [37] Ordal et al. M.A. Optical properties of fourteen metals in the infrared and far infrared. Optical Society of America, 1985.
- [38] H. Mest. Measurement of the Beta-Asymmetry in the Decay of Free Polarized Neutrons with the Spectrometer Perkeo III. PhD thesis, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2011.
- [39] C. Morhard. Herstellung, Untersuchung und Dickenbestimmung dünner Schichten zur Detektion und Polarisation von Neutronen. Master's thesis, Universität Heidelberg, 2007.
- [40] B. Märkisch. Das Spektrometer PERKEO III und der Zerfall des freien Neutrons. PhD thesis, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2006.
- [41] Wolfgang Nolting. Grundkurs Theoretische Physik 3, Elektrodynamik. Springer Verlag, 2011.
- [42] Edward D. Palik. Handbook of Optical Constants of Solids. Academic Press, 1985.
- [43] Bogdan Povh. Teilchen und Kerne: Eine Einführung in die physikalischen Konzepte. Springer Verglag, 2009.
- [44] N. Rebrova. PhD thesis, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, In preparation.
- [45] F. Sauli. GEM: A new concept for electron amplification in gas detectors. Nucl. Instr. and Meth. A, 1997.
- [46] C.P. Slichter. *Principles of magnetic resonance*. Springer Verlag, 1989.
- [47] Hitachi Ltd. Tokio. Instruction Manual for the Model 100-60 double beam Spectrophotometer.
- [48] M. Utsuro and V.K. Ignatovich. Handbook of Neutron Optics. Viley-VCH Verlag, 2010.
- [49] Hans Zappe. Fundamentals of Micro-Optics. Cambridge University Press, 2010.

Danksagung

Vielleicht sind manchmal Wörter nicht genug, um meinen Dank ausreichend auszudrücken, aber mein Dank gilt allen Menschen, die mich umgeben, ganz herzlich!

Mein erster Dank gilt Herrn Priv.-Doz. Dr. Ulrich Schmidt, der mir während der Diplomarbeit jederzeit mit Rat und Tat zur Seite stand. Ich danke Herrn Dr. Bastian Märkisch für seine gute fachliche Betreuung und sein Engagement für unser Team.

Ich bedanke mich ganz herzlich bei Prof. Dirk Dubbers, der mich in kurzer Zeit für das PERC Projekt begeistert hat und den Kontakt zum PERC Projekt hergestellt hat.

Ein besonderer Dank gilt dem PERC Team und der ANP-Gruppe, vor allem Christoph Roick, Carmen Ziener und Nataliya Rebrova, die mir jederzeit und bereitwillig Auskunft gaben. Die Zeit mit euch war richtig klasse!

Bei Steffen Görke möchte ich mich besonders für die Tipps und Tricks zur Physik und zum Leben bedanken. Dominik Scala, Ludger Schöttner, danke ich für die unvergessliche Momente, die auch in gewissem Sinne zur diesen Diplomarbeit beigetragen haben.

Für Natalie Izurieta finde ich keine Worte, um für die ganze Unterstützung Danke zu sagen. Ich kann mich immer auf dich verlassen! Gracias por ser tan especial y tan linda!

Meine Familie hat mich immer bedingungslos unterstützt. Danke an Veronica Lopez und Jan Schrader für ALLES, ohne euch wäre diese Arbeit und mein ganzes Studium nie entstanden. Danke Cecilia Carrera für die Motivation, madre gracias por ser tan linda conmigo y por saber siempre tener palabras para mi. Danke Carlos Lopez für das immer da sein, eres una persona increible, te admiro mucho.

Aber der größte Dank geht an meinen Vater, Lauro Lopez, ohne ihn wäre diese Diplomarbeit überhaupt nicht möglich gewessen! Padre, gracias inmensas por todo el apoyo y la confianza que has depopsitado en mi. Tu sabes lo que ha significado esto para mi. Has sido fuente de inspiración para mi trabajo y mi vida.

Erklärung:

Ich versichere, dass ich diese Arbeit selbstständig verfasst habe und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.

Heidelberg, den (Datum)

.....