

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

vorgelegt von  
Dipl.-Phys. Wolfgang Häußler  
aus Geislingen

Tag der mündlichen Prüfung: 21.4.1998

**Weiterentwicklung, Aufbau und Test  
eines Resonanzspinecho-Spektrometers  
zum Einsatz eines Multidetektors**

Gutachter:

Prof. Dr. Dirk Dubbers

Prof. Dr. Siegfried Hunklinger

Die vorliegende Arbeit befaßt sich mit der Konstruktion eines Neutronen-Resonanzspinecho-Spektrometers, das Laufzeitunterschiede in den Spektrometerarmen über die Neutronen-Spinphase feststellt und damit Energieüberträge auf die Streuprobe ermittelt.

Die Resonanzspinecho-Methode besitzt die Vorteile des konventionellen Spinechos: Der Einsatz eines breiten Neutronenspektrums ermöglicht kurze Meßzeiten, zudem kann langsame Probedynamik direkt in der Zeit-Domäne gemessen werden. Das Herzstück des Spektrometers bilden eigens entwickelte Resonanzflipspulen, deren Design die Verwendung langsamer Neutronen zuläßt.

Ein spezieller Vorteil der Resonanzspinecho-Methode besteht darin, daß es zum Aufbau eines Multidetektor-Spektrometers genügt, mehrere Flipspulen in dem betreffenden Kreissegment um die Probe anzuordnen. Zur Vermeidung von störenden Magnetfeldern sorgen spezielle Abschirmungen. Der erste Spektrometerarm besitzt eine Abschirmröhre, der zweite Spektrometerarm eine konische Magnetfeldabschirmung, um mehreren Flipspulen nebeneinander Platz zu bieten. Im Rahmen dieser Arbeit wurde der gesamte Multidetektor-Spektrometer-Aufbau geplant und fertiggestellt.

In den letzten Jahren fanden zwei Strahlzeiten statt. Nach Testmessungen, die Aufschluß über die Qualität der Flipspulen und der Abschirmung erbrachten, erfolgten erstmalig Messungen mit dem Multidetektor-Aufbau. Aus den Ergebnissen von elastischer Streuung an pyrolytischem Graphit wurde die Instrumentenfunktion ermittelt, die die Energieauflösung des Spektrometers widerspiegelt.

Als Anwendung untersuchten wir die quasielastische Streuung einer Polymerlösung und eines Diamantkorn Gemischs. Die Datenanalyse ermöglichte Rückschlüsse auf die Diffusionskoeffizienten und erwies die stabile Funktion des Spektrometers.

This thesis describe the construction of a neutron resonance spinecho spectrometer detecting the neutrons spin phase depending on velocity changes between the spectrometer arms and therefore energy transfer processes with respect to the sample.

The resonance spinecho method offers the advantages of the conventional spinecho: Using a wide neutron velocity range for short messure times and detecting dynamic effects directly in the time domain. The core element of the spectrometer represent special resonance flip coils devellopped for the usage of cold neutrons.

The resonance spinecho gives possibility for simply building a multidetector spectrometer. There are only several resonance coils necessary placed around the sample. To avoid magnetic fields in the spectrometer arms we used special cylindric respectively conical shieldings giving place for several coils. The complete spectrometer was built within this work.

We had two beam times for testing the instrument. These tests proved the function of the coils and the magnetic shielding. Afterwards elastic scattering from grafoil gave the instrument function determing the spectrometer's energy resolution.

As an application we performed measurements with quasielastic scattering from solved polymers and a diamant sample. The data analysis resulted in values for the diffusion coefficients and proved the spectrometer working very stable.

<b>EINLEITUNG.....</b>	<b>3</b>
<b>1 DAS PRINZIP DES NEUTRONEN-RESONANZ-SPINECHOS (NRSE).....</b>	<b>5</b>
1.1 DAS SPINECHO-PRINZIP .....	5
1.1.1 Die semiklassische Beschreibung .....	5
1.1.2 Die quantenmechanische Natur des Spins und das energetische Bild.....	8
1.1.3 Die Wellenfunktion im Magnetfeld.....	12
1.1.4 Der statistische Operator des Strahls .....	13
1.2 DAS RESONANZSPINECHO-PRINZIP .....	15
1.2.1 Die energetischen Verhältnisse .....	15
1.2.2 Die semiklassische Beschreibung eines Pi-Flips.....	16
1.2.3 Die quantenmechanische Beschreibung eines Pi-Flips .....	17
1.2.4 Die Polarisation mit polychromatischem Strahl .....	19
1.2.5 Die Korrekturen für linear polarisierte HF-Felder.....	21
1.2.6 Die semiklassische Beschreibung des Resonanzspinechos .....	21
1.3 DIE DEPOLARISATIONEFFEKTE.....	23
1.3.1 Der Effekt linear polarisierter HF-Felder.....	23
1.3.2 Die Pi-Flip-Bedingung.....	23
<b>2 DER EXPERIMENTELLE AUFBAU .....</b>	<b>25</b>
2.1 DAS GESAMTE EXPERIMENT IM ÜBERBLICK.....	25
2.2 DER GESCHWINDIGKEITSSSELEKTOR .....	27
2.3 DIE SPINPRÄPARATION .....	28
2.4 DIE EIN- UND AUSKOPPELSPULEN .....	30
2.5 DIE MU-METALLABSCHIRMUNG .....	33
2.5.1 Die zylinderförmige Abschirmung .....	33
2.5.2 Die konische Abschirmung .....	35
2.6 DIE RESONANZFLIPSPULEN.....	37
2.6.1 Das konstante Magnetfeld $B_0$ .....	38
2.6.2 Das Hochfrequenzfeld.....	41
2.6.3 Die Leistungsversorgung der Hochfrequenzspulen.....	45
2.6.4 Die Kühlung der Resonanzflipspulen .....	46
2.6.5 Die Polarisationsdetektion.....	48
2.7 DIE STEUERUNG DES EXPERIMENTS .....	48
<b>3 DIE EXPERIMENTELLEN TESTS DES SPEKTROMETERS .....</b>	<b>50</b>
3.1 DIE ABSCHIRMUNG .....	50
3.1.1 Die longitudinale Feldkorrektur.....	50
3.1.2 Die Störfelder durch die Spulenöffnungen.....	51
3.2 DIE RELATIVE BREITE DES NEUTRONENSPEKTRUMS .....	51
3.3 DIE FELDHOMOGENITÄT DER RESONANZFLIPSPULEN: MESSUNGEN AN EINER SPULE.....	54
3.3.1 Die $B_0$ - $B_1$ - Scans .....	55
3.3.2 Die HF-Resonanz.....	57
3.3.3 Die $B_0$ -Resonanzkurven .....	58
3.4 DIE MESSUNGEN ZUR EINSTELLUNG DES SPEKTROMETERS.....	59
3.4.1 Die Justage der Flugstrecken .....	60
3.4.2 Die Resonanzkurven im Spinechopunkt.....	61
3.4.3 Die Ermittlung der HF-Leistungen.....	64
3.5 DIE SPINECHOKURVEN.....	65
3.5.1 Die Nutzung der Rotationsspule .....	65
3.5.2 Die Variation der Frequenz.....	66
3.5.3 Die Polarisation im Spinechopunkt im Vergleich zur Theorie .....	67

<b>4</b>	<b>DIE STREUMESSUNGEN</b> .....	<b>69</b>
4.1	DIE SPINECHOMETHODE UND DIE INTERMEDIÄRE STREUFUNKTION .....	69
4.1.1	<i>Die Cosinus-Fouriertransformation des Spinechos</i> .....	69
4.1.2	<i>Die Probendynamik</i> .....	70
4.2	DIE INSTRUMENTENFUNKTION DES SPEKTROMETERS .....	72
4.2.1	<i>Die Inbetriebnahme der Spulen für Streuexperimente</i> .....	72
4.2.2	<i>Die Instrumentenfunktion</i> .....	76
4.2.3	<i>Die Divergenzeffekte</i> .....	78
4.2.4	<i>Der Test einer Divergenzkorrektur</i> .....	80
4.3	DIE ERGEBNISSE VON QUASIELASTISCHER STREUUNG.....	81
4.3.1	<i>Die Ermittlung der Polarisierung</i> .....	82
4.3.2	<i>Die Messungen unter Kontrolle des Spinechopunkts</i> .....	83
4.3.3	<i>Die Auswertung der Daten</i> .....	84
4.3.4	<i>Die Meßergebnisse für eine Latexpolymer-Lösung</i> .....	86
4.3.5	<i>Die Dynamik eines Diamantkugelmischs</i> .....	88
4.3.6	<i>Die Probenmessung während der ersten Strahlzeit</i> .....	89
<b>5</b>	<b>ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK</b> .....	<b>91</b>
	<b>LITERATURVERZEICHNIS</b> .....	<b>93</b>
	<b>ANHANG A: DIE QUANTENMECHANISCHE BEHANDLUNG DES SPINS IN EINER RESONANZFLIPSPULE</b> .....	<b>96</b>
	DIE LÖSUNG FÜR ROTIERENDE FELDER .....	96
	DIE NÄHERUNGEN FÜR LINEAR POLARISIERTE HF-FELDER.....	98
	<b>ANHANG B: DIE EFFEKTE BEI EINER POLARISATIONSKORREKTUR DURCH EINE STREUSPULE</b> .....	<b>102</b>
	<b>ANHANG C: DIE INTERMEDIÄRE STREUFUNKTION UNTER DER BERÜCKSICHTIGUNG VON UNTERGRUND UND DEPOLARISIERENDEN EFFEKTEN</b> .....	<b>104</b>
	INTERMEDIÄRE STREUFUNKTION UND POLARISATION.....	104
	KORREKTUR DER DOWN- UND MITTLEREN ZÄHLRATEN .....	105
	DAS VERHÄLTNISS AUS UNTERGRUNDRATE UND GESAMTZÄHLRATE.....	105
	DIE INSTRUMENTENFUNKTION .....	106

# Einleitung

Das Spiel der Farben in einem Quarzkristall, den das Licht der Sonne durchdringt, bietet uns - neben dem ästhetischen Genuß von Farbe und Form - Einblicke in die innere Struktur der Materie. Sind in diesem Erlebnis die Wurzeln zu suchen für die Entwicklung moderner Forschungsmethoden?

Neutronenstrahlen können Materie ebenso durchdringen, wie im eingangs erwähnten Beispiel die Lichtstrahlen der Sonne. Auch bezüglich der Wechselwirkung mit der Materie gibt es Parallelen: der Strahl wird hierbei mehr oder weniger abgelenkt und in seiner Energie verändert.

An die Stelle des Auges treten hier Detektoren, die die Strahlung orts aufgelöst registrieren können. Von der räumlichen Information läßt sich ebenso auf die Struktur der Streuprobe zurückschließen. Durch zeitaufgelöste Messungen erfahren wir zudem etwas über die energetischen Verhältnisse im Untersuchungsgegenstand.

Seit der Entdeckung des Neutrons durch Chadwick im Jahre 1932 hat sich der Bereich der Neutronenphysik etabliert, da das Neutron als Sonde zur Untersuchung von Materie einzigartige Eigenschaften besitzt. Anders als bei elektromagnetischer Strahlung findet keine Wechselwirkung des Neutrons mit ruhenden elektrisch geladenen Substanzen statt. Wie stark die Wechselwirkung mit einer Streuprobe ist, hängt ganz individuell vom jeweiligen Partner der Wechselwirkung in Form eines Atomkerns ab. Auch chemische Elemente mit identischer Atomhülle können aufgrund der unterschiedlichen Kernstruktur von Isotopen sehr verschiedene Wirkungsquerschnitte für die Wechselwirkung mit Neutronen besitzen. Damit geht die Existenz von Materialien einher, die sich von Neutronen fast ungehindert durchdringen lassen, und ebenso von anderen Stoffen mit entgegengesetztem Verhalten.

Die charakteristischen Wechselwirkungsstärken ermöglichen andererseits den Einsatz effizienter Detektoren. Auch die Abschirmung der Strahlung kann auf diese Weise geschehen. Unter bestimmten Voraussetzungen kann ein Neutronenstrahl sogar dazu gebracht werden, auf einer Strecke von einigen hundert Meter innerhalb eines Neutronenleiters zu verlaufen. Auf diese Weise findet die Verteilung der Neutronen einer Quelle auf die Experimente statt. Selbst die Einengung breiter Strahlen auf einen geringeren Querschnitt vor den Experimenten ist möglich [Dub94].

Um Energieüberträge auf Proben zu untersuchen, eignen sich beispielsweise Flugzeitmessungen. Nachdem der Strahl durch Neutronen-undurchlässige Materialien vor der Probe in kleine Portionen zerhackt worden ist, genügt bei dieser Methode die zeitaufgelöste Registrierung der Neutronen am Detektor, um zwischen den schnellen Neutronen, die zuerst ankommen, und den langsameren zu unterscheiden.

Einen Fortschritt brachte der Bau des ersten Drei-Achs-Spektrometers von Brockhouse [Bro61]. Diese Methode nutzt den Wellencharakter von Neutronenstrahlung, indem mit wellenlängenselektiven Methoden die Energie des Strahls vor dem Untersuchungsobjekt festgelegt und dahinter gemessen wird.

Beide Methoden besitzen den Nachteil, daß sie nur einen sehr geringen Anteil der Strahlintensität nutzen. Die Stärke der in dieser Arbeit verwendeten Spinechomethode liegt im Vergleich gerade darin, daß die Breite der Wellenlängenverteilung in der Praxis üblicherweise auf nicht viel weniger als 20% beschränkt ist. Für eine Forschungsrichtung, deren mächtigste Beeinträchtigung nach wie vor im Mangel an Intensität und Zählraten besteht, dürfte dieser Vorteil allein als Motivation zur Entwicklung geeigneter Experimente gelten.

Seit den Experimenten von Stern und Gerlach 1922 ist bekannt, daß Teilchen wie das Elektron einen Freiheitsgrad, eben den Spin, besitzen, der mit einem magnetischen Moment einhergeht. Der Spin von Atomkernen macht sich unter anderem in starken Magnetfeldern bemerkbar. Den Terminus „Spinecho“ prägte E. Hahn im Jahre 1950 [Hab50]. Er nutzte den Effekt, daß sich die Spins im semiklassischen Bild im Magnetfeld ausrichten. Eine Folge von Hochfrequenzpulsen zusätzlich zum konstanten Magnetfeld führt durch Drehung und Rückdrehung der Spins zum *Spin-Echo*, das in dem Moment erscheint, in dem die Spins wieder in der ursprünglichen Richtung stehen. Die Spinecho-Methode in der Zeitdomäne, d.h. durch sukzessives Anlegen magnetischer Felder an eine raumfeste Probe geht somit auf Hahn zurück. Beim In-Beam-Spinecho erübrigen sich dagegen die Ein- und Ausschaltvorgänge: die Strahlteilchen gelangen durch ihre Bewegung sukzessive in verschiedene, nun räumlich getrennte Magnetfelder.

Die In-Beam-Spinechomethode mit Neutronen geht auf einen Vorschlag von F. Mezei zurück [Mez72]. Sie beruht auf der Möglichkeit zur Präparation polarisierter Neutronenstrahlen, d.h. der Spin aller Neutronen ist zunächst einheitlich gerichtet. Während des Durchflugs der Neutronen durch das Experiment, das aus zwei Flugstrecken mit geeigneten Magnetfeldern besteht, drehen sich die Spins in Analogie zu Hahns Experiment, während sich die Neutronen jedoch zusätzlich im Raum bewegen. Über die Zahl der Drehungen läßt sich die Aufenthaltszeit im Magnetfeld feststellen, ganz analog dazu, wie wir die Zeit anhand der Drehungen der Erde um sich selbst messen. In der zweiten Flugstrecke erfolgt für die Neutronenspins die Rückdrehung in die Ausgangsstellung, falls sie nicht ihre Geschwindigkeit durch Wechselwirkungen mit der Streuprobe geändert haben. Da dies für alle Neutronen, auch mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten gilt, besitzt diese Methode den oben erwähnten Vorteil, daß die Geschwindigkeiten nicht auf Kosten der Intensität auf einen zu engen Bereich eingeschränkt werden müssen.

Von Golub und Gähler stammt der Vorschlag, im Vergleich mit dem beschriebenen konventionellen Spinecho den Spieß umzudrehen und während der Flugzeit der Neutronen nicht deren Spins, sondern geeignete Magnetfelder rotieren zu lassen [Gäh87]. Diese Methode läßt sich verstehen als Transformation aller beteiligten Komponenten in das mit den Spins mitrotierende Koordinatensystem. Aus den Magnetfeldern, die den Spin beim konventionellen Spinecho in die Ausgangsstellung zur Präzession in den Flugstrecken bringen, werden nun Kombinationen aus einem konstanten Magnetfeld und einem Hochfrequenzfeld. Dieser Tatsache verdankt diese Methode den Namen *Resonanzspinecho*. Eine weitere Bezeichnung folgt aus dem Verschwinden jeglicher Felder über die Flugstrecke zwischen den Resonanzflipspulen: die des *Nullfeld-Spinechos*.

Unsere Arbeit befaßt sich mit dem Aufbau und den Tests einer Resonanzspinecho-Apparatur. Hierbei wurde die Eigenschaft dieser Methode, keiner ausgedehnten Magnetfelder in den Flugstrecken zu bedürfen, erstmalig zur Realisierung eines Multidetektor-Spektrometers genutzt. Für einen derartigen Aufbau ist in erster Linie die Konstruktion geeigneter Resonanzflipspulen als „Zeitnahmestationen“ für jede Flugstrecke erforderlich, sowie Maßnahmen zur Erzeugung des „Nullfeldes“. Aber auch alle anderen Komponenten müssen sich nahtlos einfügen.

Im ersten Kapitel widmen wir uns neben einer kurzen Einführung in die Spinechomethode der möglichst exakten Beschreibung der Spindrehungen in den Feldern der Resonanzflipspulen. Die Kenntnis aller wesentlichen Parameter ist unumgänglich bei der Wahl des richtigen Designs für die Spulen. Das zweite Kapitel stellt alle Komponenten des experimentellen Aufbaus vor. Insbesondere auf die Eigenschaften der Magnetfeldabschirmung und der Resonanzflipspulen gehen wir ausführlich ein.

Das Ergebnis der experimentellen Tests folgt im dritten Kapitel. Im Mittelpunkt steht der Vergleich der Messungen mit den Berechnungen bezüglich der Qualität der Magnetfelder. Da bei allen Experimenten mit Spinechoapparaturen die Polarisation als Meßgröße fungiert, ist eine hohe Polarisation im direkten Strahl ohne Probe vonnöten, die nur durch Minimierung der Feldinhomogenitäten zu erreichen ist.

Schließlich folgt im letzten Kapitel eine Zusammenfassung der Messungen an Proben. Das *Resonanzspinecho-Spektrometer* soll dazu dienen, in Messungen mit Streuung an einer Probe Aufschluß zu erhalten über die *Probendynamik*. Die Spinechomethode ist sensitiv auf Dynamik in Zeitskalen bis in den Nanosekundenbereich. Dies bedeutet die Fähigkeit zur Auflösung sehr geringer Energieüberträge. Bei den Ergebnissen bezüglich der Dynamik in den vermessenen Proben steht die Frage im Vordergrund, welche Vorzüge das realisierte Spektrometer gegenüber den eingangs erwähnten Methoden zur Untersuchung von Neutronenstreuung besitzt. Das Ziel dieser Arbeit bestand weniger in Messungen an unbekanntem Proben oder der Entdeckung neuer Proben-Effekte, weshalb Steuproben mit bekannten Eigenschaften Verwendung fanden.

Im Zusammenhang mit den Probenmessungen taten sich zudem einige Perspektiven zur Weiterentwicklung und Optimierung des Spektrometers auf. Welche Schritte hier bereits anfänglich begangen wurden und für die Zukunft abzusehen sind, diskutieren wir zusammenfassend und abschließend.

# 1 Das Prinzip des Neutronen-Resonanz-Spinechos (NRSE)

Seit dem Jahre 1972 fand die Idee des In-Beam-Spinecho-Prinzips, das auf einem Vorschlag von Ferenc Mezei beruht [Mez72], reges Interesse bei Experimentatoren, die die Vorteile der Methode in Streuexperimenten nutzten. Darüber hinaus erfolgten in den letzten Jahren zum einen die Weiterentwicklung dieser Methode zum Resonanzspinecho-Prinzip [Gäh87], [Dub89] und zum Mieze-Spektrometer [Gäh89], [Kel93], zum anderen einige Erweiterungen in der Anwendung und theoretischen Beschreibung des Spinechos [Sch95], [Gäh96], [Gäh97].

Im folgenden Kapitel soll zunächst eine Einführung in das Spinecho-Prinzip gegeben werden, ganz im anschaulichen Bild vom Neutronenspin als magnetischem Dipol, der in einem Magnetfeld präzediert. Im nächsten Schritt wirft daran anknüpfend die quantenmechanische Beschreibung ein neues Licht auf die zentrale Größe der Spinechozeit. Daraufhin folgt die Beschreibung eines polarisierten Strahls im Magnetfeld. Im Bild der Quantenmechanik läßt sich der Übergang zum Resonanzspinecho-Prinzip im nächsten Abschnitt auf einfache Weise darstellen. Als Ergänzung fügen wir auch das semiklassische Bild hinzu. Für quantitative Aussagen über das Spektrometer, z.B. über die Homogenität der Magnetfelder, folgt auf die quantenmechanische Beschreibung des Resonanzspinechos eine Analyse möglicher Depolarisationseffekte.

## 1.1 Das Spinecho-Prinzip

### 1.1.1 Die semiklassische Beschreibung

Das Neutron als Spin-1/2-Teilchen besitzt im klassischen Bild eine Eigendrehung mit entsprechendem Drehimpuls, eben den Spin, und ein magnetisches Moment  $\vec{\mu}$ , wobei

$$(1.1) \quad \vec{\mu} = -\gamma \cdot \vec{S},$$

mit dem gyromagnetischen Verhältnis  $\gamma$  und dem Spin des Neutrons  $\vec{S}$ . (Wir folgen dem Teil der Literatur, der das gyromagnetische Verhältnis als positive Zahl definiert. Deshalb das Vorzeichen in der obenstehenden Formel.)

Nur um die Anknüpfung an das klassische Bild zu vervollständigen, sei noch darauf hingewiesen, daß für ein klassisches Teilchen der Ladung  $e$  mit der Masse  $m$  allgemein gilt: mit einer kreisförmigen Bewegung der Ladung, insbesondere einer Eigendrehung, geht ein magnetisches Moment proportional zum Drehimpuls  $L$  einher.

$$(1.2) \quad \vec{\mu} = \frac{e}{2m} \cdot \vec{L}.$$

Das Standardmodell beschreibt das Neutron als aus drei geladenen Quarks zusammengesetzt. Insofern ist es nicht unverständlich, daß auch das Neutron als ungeladenes Teilchen ein magnetisches Moment besitzt. Allerdings entzieht sich der Proportionalitätsfaktor  $\gamma$  einer anschaulichen Deutung. Er beträgt für das Neutron:

$$(1.3) \quad \gamma = 183.25 \frac{\text{Mhz}}{T}.$$

Das gyromagnetische Verhältnis des Neutrons unterscheidet sich damit um den Faktor  $g = -3.826$  von dem eines klassischen Teilchens mit einer Elementarladung und der Masse eines Nukleons (Proton und Neutron besitzen nur eine geringfügige Massendifferenz).



## 1.1 Das Spinecho-Prinzip

$$(1.4) \quad \gamma = |g| \cdot \frac{e}{2m_{\text{Proton}}}.$$

Das negative Vorzeichen von  $g$  deutet darauf hin, daß Spin und magnetisches Moment antiparallel stehen und nicht parallel, wie es z.B. beim Proton der Fall ist.

Wie auf jedes Teilchen mit einem magnetischen Moment wirkt im semiklassischen Bild auf das Neutron das Drehmoment

$$(1.5) \quad \vec{M} = \vec{\mu} \times \vec{B},$$

sobald es sich in einem magnetischen Feld  $\vec{B}$  befindet.

Analog zu einem Kreisel im Schwerfeld führt dieses Drehmoment, verbunden mit dem entsprechenden Eigendrehimpuls, der ein Parallelstellen zum Feld verhindert, zu einer Präzessionsbewegung. Die Präzessionsfrequenz  $\omega$  ergibt sich aus dem vorhandenen Drehimpuls und dem wirkenden Drehmoment unter Berücksichtigung von

$$(1.6) \quad \vec{M} = \frac{d}{dt} \vec{L}$$

zu

$$(1.7) \quad \omega = \frac{d\varphi}{dt} = \frac{dL/L_{\parallel}}{dt} = \frac{M \cdot dt/L_{\parallel}}{dt} = \frac{M}{L_{\parallel}}.$$

Die Bezeichnung des Drehimpulses  $L_{\parallel}$  weist darauf hin, daß in die Präzessionsfrequenz nur dessen Komponente parallel zu derjenigen Ebene eingeht, in der sich die Spitze des Kreisels bewegt. Da die Winkelabhängigkeit dieser Komponente mit der Winkelabhängigkeit des Drehmomentes identisch ist, enthält  $\omega$  selbst keinerlei Winkelabhängigkeit.

Im Fall eines Neutrons im Magnetfeld ergibt sich mit (1.1) und (1.5) die Präzessionsfrequenz, auch Larmorfrequenz genannt, zu

$$(1.8) \quad \omega_{\text{Larmor}} = \frac{|\mu \cdot B|}{S} = \frac{\gamma \cdot S \cdot B}{S} = \gamma \cdot B.$$

Die Spinecho-Methode stützt sich auf eben diesen Effekt der Larmorpräzession. Für In-Beam-Experimente erfolgt zunächst die Präparation eines Strahls von Neutronen, deren Spins alle gleich gerichtet sind. Wenn dieser Neutronenstrahl, dessen Spins z.B. in  $x$ -Richtung senkrecht zur Flugrichtung stehen, eine Region passiert, in der ein Magnetfeld in Flugrichtung herrscht, beginnen die Neutronenspins zu präzedieren. Sie drehen sich mit der Larmorfrequenz, d.h. „sammeln“ die Phase  $\varphi_{\text{Spin},1} - \varphi_{\text{Spin},0}$ , während sie mit der Geschwindigkeit  $v$  die Flugstrecke  $L_{\text{Flug}}$  zurücklegen.

$$(1.9) \quad \varphi_{\text{Spin},1} - \varphi_{\text{Spin},0} = \gamma \cdot B_0 \cdot \frac{L_{\text{Flug}}}{v}$$

Handelt es sich um einen Strahl von Neutronen mit identischer Geschwindigkeit, einen monoenergetischen Strahl, so oszilliert die Projektion der Spins auf die ursprüngliche Polarisationsrichtung cosinus-förmig. Diese Projektion bezeichnen wir als die *Polarisation in  $x$ -Richtung*.

## 1.1 Das Spinecho-Prinzip

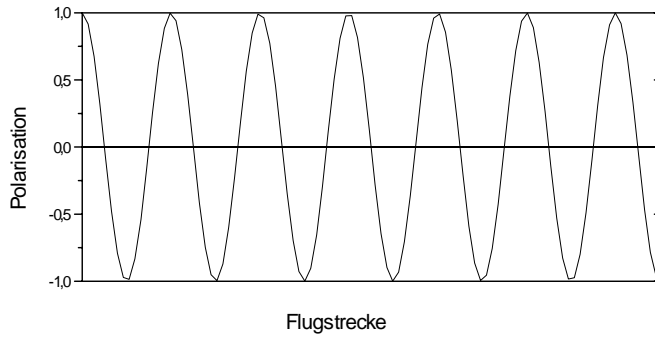


Abbildung 1.1: Spin-Polarisation eines monoenergetischen Strahls bezüglich der zurückgelegten Flugstrecke in einer Feldregion

Folgt anschließend eine analoge Feldregion, in der jedoch das Magnetfeld entgegengesetzt gerichtet ist, so erfolgt die Spinpräzession ebenfalls mit entgegengesetztem Drehsinn, und zuletzt befinden sich die Neutronenspins wieder in der ursprünglichen Richtung.

Setzt sich der Strahl aus Neutronen mehrerer Geschwindigkeiten zusammen, so benötigen diese zum Bewältigen der gleichen Flugstrecke unterschiedlich lange Zeiten. Daraus ist ersichtlich, daß nach einer bestimmten Flugstrecke die Spins dieser verschieden schnellen Neutronen nicht mehr in eine einheitliche Richtung deuten, da diejenigen Neutronen, die länger unterwegs waren, weiter präzediert sind als die schnelleren Neutronen mit kürzerer Flugzeit. Die Polarisation  $P$  des Strahls an einer bestimmten Stelle der Flugstrecke ergibt sich nun aus der Integration der Spinpolarisation über alle vorhandenen Flugzeiten.

$$(1.10) \quad P = \int dv \cdot \cos(\gamma \cdot B_0 \cdot \frac{L_{\text{Flug}}}{v}) \cdot f(v)$$

Sie nimmt mit der Flugstrecke ab, bis sie völlig verschwunden ist, wenn die Spins gleichmäßig auf alle Richtungen einer Kreisscheibe verteilt sind.

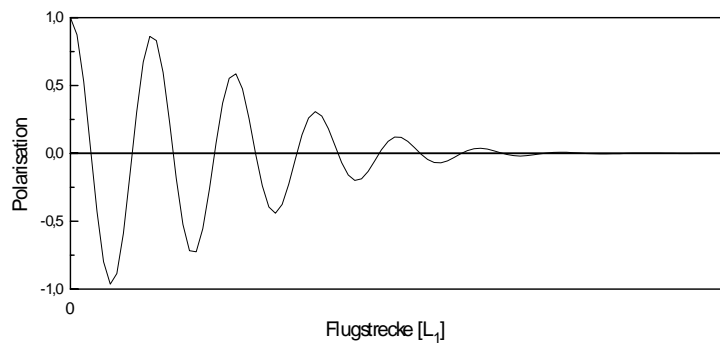


Abbildung 1.2: Spin-Polarisation eines Strahls mit verschiedenen Geschwindigkeiten der Neutronen in einer Magnetfeldregion der Länge  $L_1$ .

Obwohl nun keine Vorzugsrichtung der Spins mehr zu erkennen ist, ist die Phaseninformation doch nicht verloren gegangen. Dies zeigt sich, wenn sich nun wieder eine Feldregion zur Rückpräzession anschließt, wie im obigen Fall bereits diskutiert. Denn auch im Falle verschiedener Neutronengeschwindigkeiten kehrt jeder Spin in die Ausgangsstellung zurück, insofern die beiden Feldregionen identisch sind. Die schnellen Neutronen haben wenig Drehphase aufgesammelt, geben diese nun wieder zurück, ebenso wie die langsamen, die einen größeren Gesamtdrehwinkel besitzen. Zuletzt ist die Ausgangspolarisation wiederhergestellt.

## 1.1 Das Spinecho-Prinzip

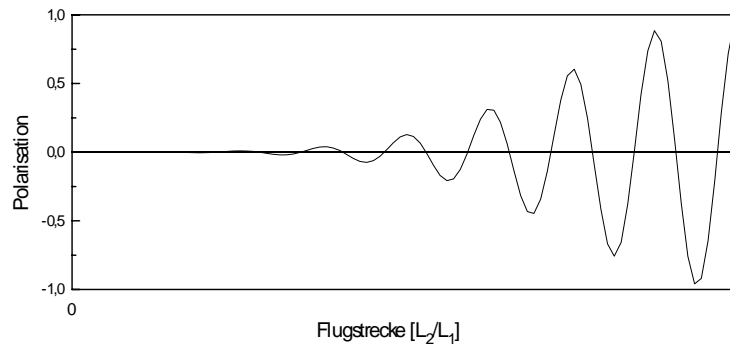


Abbildung 1.3: Spin-Polarisation eines Strahls mit verschiedenen Geschwindigkeiten der Neutronen am Ende einer doppelten Feldregion, deren zweites Magnetfeld der ersten Feldregion entgegengesetzt gerichtet ist

Der Name für das Spin-Echo erklärt sich aus diesem Effekt: das ursprüngliche Signal in Form der Polarisation verliert sich nach und nach, kommt jedoch am Ende wieder zum Vorschein.

Der späteren Diskussion geht hier ein kurzer Blick auf die Anwendung dieser Methode in Streuexperimenten voran. Befindet sich hinter der ersten Feldregion eine Streuprobe, die z.B. Energie aufnimmt, so werden die Neutronen gebremst, verbringen mehr Zeit in der zweiten Feldregion und erfahren bei identischen Feldern eine zu weite Rückdrehung -. Das Echo zeigt sich erst wieder nach einer Verringerung der Feldstärke (bzw. Verringerung der Länge) der zweiten Flugstrecke. Aus der Größe der Feldstärke, die zur Nachregelung erforderlich ist, ergibt sich direkt ein Maß für den Energieübertrag auf die Probe, dessen Kenntnis ein Ziel von Streuexperimenten ist. Ein Charakteristikum des Spinechos gegenüber anderen Methoden gründet sich auf die direkte Messung der Geschwindigkeitsdifferenz vor und hinter der Probe. Diese Differenz drückt sich in einer Phasendifferenz aus, die sich proportional zur Größe des Magnetfelds verhält (und in erster Näherung unabhängig von der Geschwindigkeit des einzelnen Neutrons ist). Bei hohen Magnetfeldern sind somit bereits sehr geringe Energieüberträge feststellbar, die durch andere Methoden nicht zugänglich sind.

Die Tatsache, daß sich jeder Neutronspin unabhängig von der Fluggeschwindigkeit im zweiten Feld wieder vollständig zurückdrehen läßt, ermöglicht den Einsatz eines breiten Geschwindigkeitsspektrums, üblich ist eine relative Breite von ca. 20 %. Die statistischen Fehler bei der Bestimmung der Zählraten spielen für die Genauigkeit der Bestimmung physikalischer Größen in Neutronenstreuexperimenten eine dominante Rolle. Die Nutzung vieler Neutronen unterschiedlicher Geschwindigkeit stellt somit einen enormen Vorteil der Spinechomethode dar.

### 1.1.2 Die quantenmechanische Natur des Spins und das energetische Bild

Bereits die Versuche von Stern und Gerlach erwiesen die quantenmechanische Natur des Spins, indem sie zeigten, daß sich ein Strahl mit Spin-1/2-Teilchen in einem inhomogenen Magnetfeld in zwei auseinander laufende Strahlen aufteilt.

Dies beruht auf der Tatsache, daß in einem Magnetfeld nicht beliebige Spinrichtungen des Neutrons beobachtet werden, sondern der Spin auf zwei sogenannte Einstellrichtungen *Up* und *Down* beschränkt ist. Die Größe des Eigendrehimpulses relativ zur Richtung des Magnetfeldes ist festgelegt auf zwei Werte, die sich nur durch ihr Vorzeichen unterscheiden und die Einstellrichtung repräsentieren:

$$S = \pm \frac{\hbar}{2}.$$

Die Strahlteilchen mit Spin erfahren somit im inhomogenen Magnetfeld eine Kraft in entgegengesetzter Richtung: Je nach Spin-Einstellrichtung in oder entgegen der Magnetfeldrichtung.

Doch auch ganz allgemein, z.B. in homogenen Magnetfeldern, in denen keine Kräfte auf Dipole wirken, spielt die erwähnte Quanten-Eigenschaft eine Rolle. Für das quantenmechanische Verständnis des Spinechos folgt eine kurze Zusammenfassung der bekannten mathematischen Methoden.

## 1.1 Das Spinecho-Prinzip

Die quantenmechanische Beschreibung der Polarisation erfolgt über die Pauli-Matrizen, im folgenden durch die Basis der z-Richtung dargestellt:

$$(1.11) \quad \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

und die zugehörigen Spinoperatoren

$$(1.12) \quad \hat{s}_{x,y,z} = \frac{\hbar}{2} \cdot \hat{\sigma}_{x,y,z}.$$

Sie stellen die Operatoren dar, die an die Stelle der klassischen Komponenten des Polarisationsvektors  $\vec{S}$  treten. Die „Dachsymbole“ kennzeichnen sie als Operatoren. Da sie nicht vertauschen, kann lediglich eine Komponente der Polarisation unabhängig gemessen werden. Eine Messung der Polarisation bedeutet somit die Auswahl einer Raumrichtung. Der Erwartungswert der Polarisation in dieser Richtung beträgt

$$(1.13) \quad \langle \hat{s}_i \rangle = \psi_{spin}^* \cdot \hat{s}_i \cdot \psi_{spin}, \quad i = x, y, z,$$

wobei  $\psi_{spin}$  die Spin-Wellenfunktion kennzeichnet, die den Strahl charakterisiert.

Die geeignete Spin-Wellenfunktion besteht offensichtlich in einem Vektor, dem sogenannten Spinor. Für jede Pauli-Matrix existieren zwei Eigenvektoren zu jeweils zwei Eigenwerten 1 und -1, die den Einstellrichtungen des Spins entsprechen.

$$(1.14) \quad up_x = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}, down_x = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$(1.15) \quad up_y = \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}, down_y = \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$(1.16) \quad up_z = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, down_z = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Sobald ein Strahl von Spin-1/2-Teilchen ein Magnetfeld erreicht, legt nun die Richtung des Feldes (ebenso wie eine Messung) die Quantisierungsrichtung und damit die Beschreibung der Strahlpolarisation fest. (Das Anbringen eines Magnetfeldes ist von einer Messung theoretisch nicht zu unterscheiden. Im Falle eines inhomogenen oder eines solch starken Feldes, daß es für Teilchen einer Polarisationsrichtung eine undurchdringliche Potentialbarriere darstellt, ist diese Analogie am deutlichsten.)

Ein in Feldrichtung polarisierter Strahl ist vollständig im *up*-Zustand gegeben, analog ist ein entgegengesetzt polarisierter Strahl durch den *down*-Zustand charakterisiert. Über diese einfachen Fälle hinaus kommen für einen nicht in Magnetfeldrichtung polarisierten Strahl kohärente Überlagerungen von *up*- und *down*-Zustand ins Spiel.

Bei der nun folgenden Beschreibung des Spinechos stehen zwei Raumrichtungen im Mittelpunkt: Wie im vorhergehenden Abschnitt beschrieben, stehen die Polarisationsrichtung der Neutronen und die Feldrichtung in den Spinecho-Flugstrecken senkrecht aufeinander. Am einfachsten läßt sich das Verhalten der Neutronen beschreiben, indem als Polarisationsrichtung die x-Richtung und als Feldrichtung die z-Richtung gewählt werden. Aus der oben verwendeten Darstellung des Zustands mit positiver x-Polarisation folgt auf eine einfache Weise der Übergang in die Basis, die durch die Richtung des Magnetfeldes gegeben ist:

$$(1.17) \quad up_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right].$$

## 1.1 Das Spinecho-Prinzip

Dem Blick in z-Richtung zeigt sich der Strahl sozusagen zur Hälfte in, zur Hälfte entgegen der Feldrichtung polarisiert. Gemäß ihrer Einstellrichtung besitzen die Spins unterschiedliche potentielle Energien  $E_{pot}$ :

$$(1.18) \quad E_{pot} = E_{mag} = -\gamma \cdot \hat{S} \cdot \vec{B} = \mp \frac{\hbar \cdot \gamma \cdot B_z}{2}$$

mit der Magnetfeldkomponente in z-Richtung  $B_z$ .

Für unseren Fall des Spinechos mit thermischen Neutronen, deren kinetische Energie ein Vielfaches (vier Größenordnungen) der magnetischen Energie beträgt, bedeutet die Vernachlässigung von Reflexion am Potentialwall eine sehr gute Näherung. Wir gehen demgemäß davon aus, daß sich der Neutronenfluß beim Übergang in die Feldregion nicht ändert. In der mathematischen Beschreibung bedeutet dies die Annahme, daß die Stetigkeitsbedingungen an die Wellenfunktion allein durch die transmittierende Komponente erfüllt sind.

Die Erhöhung der potentiellen Energie für den Spin-up-Zustand bedeutet eine Verminderung der kinetischen Energie, da die Gesamtenergie eines Dipols durch zeitunabhängige Magnetfelder nicht verändert wird. Dieser Teil des Strahls wird beim Eintritt in das Feld durch den Feldgradienten verzögert und legt die Flugstrecke im Feldbereich langsamer zurück als die beschleunigten Neutronen im down-Zustand. Nach dem Verlassen der ersten Feldregion ist die Geschwindigkeit der beiden Spinkomponenten zwar wieder identisch, jedoch hat die down-Komponente einen Vorsprung gewonnen.

Abbildung 1.4 verdeutlicht diesen Sachverhalt.

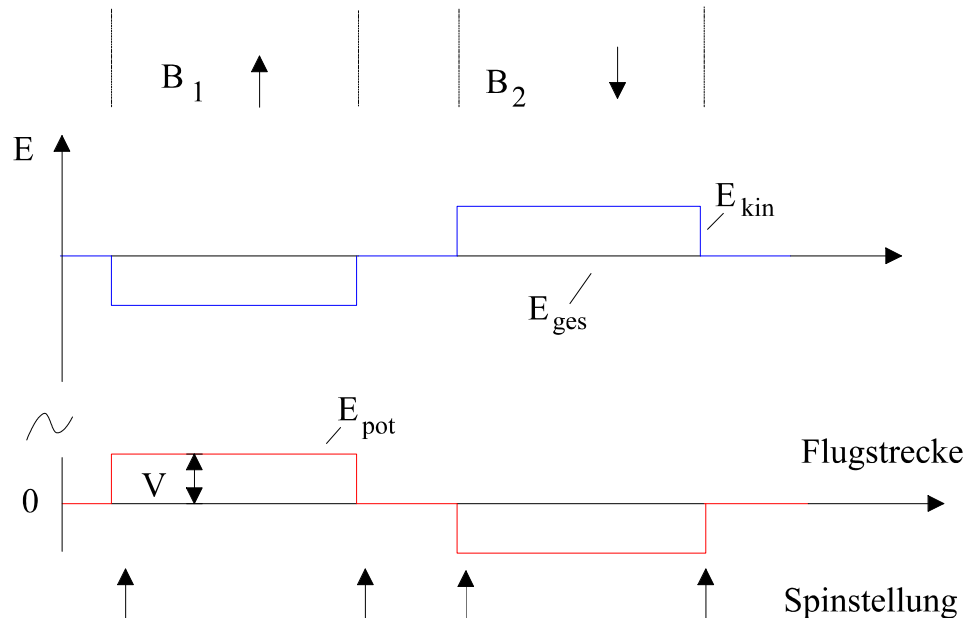


Abbildung 1.4: Die energetischen Verhältnisse im konventionellen Spinecho. Spin-up und Spin-down-Komponente besitzen zu Beginn identische Gesamtenergien  $E_{ges}$  und nähern sich von links der Feldregion. Beim Eintritt ins Magnetfeld ändert sich abhängig von der Spinrichtung die potentielle Energie  $E_{pot}$ , aufgetragen sind die Verhältnisse für Spin-up. Entsprechend unterscheiden sich die jeweiligen kinetischen Energien  $E_{kin}$ .

Zur Berechnung des zeitlichen Vorsprungs: es folgt aus der Erhaltung der Gesamtenergie  $E_{ges}$  als Summe von magnetischer Energie  $E_{mag}$  und kinetischer Energie  $E_{kin}$

$$(1.19) \quad E_{kin} = E_{ges} - E_{mag} = E_{ges} \cdot \left(1 - \frac{E_{mag}}{E_{ges}}\right)$$

und mit  $p = \sqrt{2 \cdot m \cdot E}$ , wobei  $m$  die Neutronenmasse darstellt, für den Impuls der up- bzw. down-Komponente  $p_{up/down}$ :

$$(1.20) \quad p_{up/down} = \sqrt{2 \cdot m \cdot E_{kin}^{up/down}},$$

## 1.1 Das Spinecho-Prinzip

$$p_{up/down} = \sqrt{2 \cdot m \cdot E_{ges}} \cdot \sqrt{1 - \frac{E_{mag}^{up/down}}{E_{ges}}}$$

Nun verwenden wir wieder die Tatsache, daß die magnetische Energie  $E_{mag}$  sehr klein gegenüber der kinetischen  $E_{kin}$  ist und nähern die Wurzel durch die erste Ordnung ihrer Taylor-Entwicklung:

$$(1.21) \quad p_{up/down} \approx \sqrt{2 \cdot m \cdot E_{ges}} \cdot \left( 1 - \frac{E_{mag}^{up/down}}{2 \cdot E_{ges}} \right)$$

Für die Berechnung der Zeitdifferenz zwischen  $up$ - und  $down$ -Zustand betrachten wir semiklassisch die Flugzeiten eines Teilchens bis zur Probe. Für ein  $up$ -Teilchen ergibt sich die Flugeschwindigkeit

$$(1.22) \quad v_{up} \approx \frac{p_{up}}{m} = \frac{p_0}{m} \cdot \left( 1 - \frac{E_{mag}^{up}}{2 \cdot E_0} \right)$$

und die Flugzeit

$$(1.23) \quad t_{up} \approx \frac{L \cdot m}{p_0} \cdot \left( 1 + \frac{E_{mag}^{up}}{2 \cdot E_0} \right)$$

mit dem Impuls im feldfreien Raum  $p_0$ , der entsprechenden Energie  $E_0$  und der Flugstrecke  $L$ .

Der Zeitunterschied  $\tau_{SE}$  zwischen  $up$ - und  $down$ -Komponente, der die Bezeichnung *Spinechozeit* gefunden hat, ergibt sich schließlich aus

$$\tau_{SE} = t_{up} - t_{down}$$

mit (1.23) zu

$$(1.24) \quad \tau_{SE} \approx \frac{L \cdot m}{p_0} \cdot \frac{|E_{mag}|}{E_0}$$

und unter Berücksichtigung von (1.18) erhält man

$$(1.25) \quad \tau_{SE} \approx \frac{L \cdot \hbar \cdot \gamma \cdot B_z \cdot m^2}{p_0^3}$$

Da der Strahl nicht auf einen Impuls bzw. eine Wellenlänge beschränkt ist, werden die Neutronen durch Wellenpakete beschrieben. Die Länge der Pakete ist durch die Kohärenzlänge gegeben. Das vorgeführte energetische Bild beschreibt dann die „Halbierung“ eines solchen Wellenpakets gemäß der Spinkomponenten. Diese Hälften werden in den Magnetfeldern zunächst räumlich getrennt und im zweiten Arm wieder kohärent überlagert.

Diese Betrachtungsart wirft ein weiteres Licht auf die Anwendung der Spinechomethode in Streuexperimenten. Zwischen der Ankunft und Streuung der beiden partiellen Wellenpaketen besteht die Zeitdifferenz  $\tau_{SE}$ . Hat sich die Probenstruktur in diesem Zeitraum verändert, so wirkt sich dies auf die Gestalt des zweiten Wellenpakets aus und die kohärente Überlagerung nach der zweiten Flugstrecke führt zu einer geringeren Polarisation. Insofern, als sich dynamische Prozesse in einer Depolarisation auswirken, eignet sich diese Methode dafür, Probendynamik direkt in der Zeitdomäne zu verfolgen.

## 1.1 Das Spinecho-Prinzip

### 1.1.3 Die Wellenfunktion im Magnetfeld

Um im quantenmechanischen Bild Aussagen über die Form der Strahlkomponenten nach der ersten Flugstrecke zu treffen, ist eine geeignete Beschreibung des Strahls erforderlich. Für den freien Strahl vor dem Eintritt in das Magnetfeld ergeben sich als Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung

$$(1.26) \quad \hat{H}_0 \psi = E \cdot \psi, \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2 \cdot m}$$

die ebenen Wellen

$$(1.27) \quad \psi_{\vec{p}_0}(\vec{x}, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_0 \cdot \vec{x} - E t)}$$

mit der Dispersionsrelation

$$(1.28) \quad E = \frac{\vec{p}_0^2}{2 \cdot m},$$

wobei  $\vec{p}_0$  der Erwartungswert des Impulses im feldfreien Raum ist. Im Magnetfeld wird (1.26) zu

$$(1.29) \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2 \cdot m} + \gamma \cdot \hat{S} \cdot \vec{B}$$

und mit der Beschränkung auf ein Magnetfeld in z-Richtung zu

$$(1.30) \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2 \cdot m} + \frac{\hbar}{2} \cdot \gamma \cdot \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_x \\ \hat{\sigma}_y \\ \hat{\sigma}_z \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B_z \end{pmatrix},$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \gamma \cdot B_z \cdot \hat{s}_z.$$

Diese Gleichung, die nun aus zwei Komponenten entsprechend den möglichen Spineinstellungen besteht, läßt sich für ein beliebiges ortsabhängiges Magnetfeld  $B_z(\vec{r})$  nicht mehr analytisch exakt lösen. Eine in unserem Fall geeignete Näherung liefert die WKB-Methode [Sch92]. Sie setzt voraus, daß sich die räumliche Zunahme der Phase im Potential nur relativ gering ändert. An zwei Extremfällen wird klar, was dies bedeutet: Eine ebene Welle ist durch einen festen Wellenvektor charakterisiert, der die räumliche Phasenänderung beschreibt. Im Gegensatz zu diesem Beispiel, bei dem sich demnach die räumliche Phasenzunahme nicht ändert, führt eine steile Potentialbarriere von der Größenordnung der kinetischen Energie zu einer plötzlichen Änderung des Verhaltens der räumlichen Phase - bis hin zum Übergang in eine rein reelle Phase beim exponentiellen Abfall in der Oberfläche eines reflektierenden Mediums.

Der Grenzfall der ebenen Welle liefert zudem die klassische Deutung der erwähnten Bedingung an die Phasenänderung, damit die WKB-Näherung zulässig ist: Ebene Wellen besitzen im Zusammenhang mit den Wellenzahlen einen definierten Impuls. Die WKB-Näherung stellt demnach den quasi-klassischen Grenzfall dar, da der Impulsbegriff nur in diesem Fall sinnvoll ist. Ist es jedoch unmöglich, etwas ähnliches wie die Zahl von Perioden je Längeneinheit festzustellen, verliert der Begriff eines Impulses aller Teilchen seinen Sinn.

Die WKB-Näherung ergibt als Lösung von (1.30) die Wellenfunktion

$$(1.31) \quad \psi(\vec{x}, t) = \sqrt{\frac{p_0}{p_{up/down}}} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(\int p_{up/down} d\xi - E_0 t)}$$

mit der ortsabhängigen Phase

## 1.1 Das Spinecho-Prinzip

$$(1.32) \quad \varphi_{up/down}(\vec{x}) = \frac{i}{\hbar} \cdot \int_0^z p_{up/down} d\xi,$$

wobei in Strahlrichtung integriert wird.

Der Vorfaktor liegt unter der Bedingung sehr kleiner Feld- gegenüber kinetischer Energie sehr nahe 1.

Zusammen mit (1.21) erhalten wir für die Phasen von *up*- und *down*-Zustand:

$$(1.33) \quad \varphi_{up/down}(\vec{x}) = \frac{i}{\hbar} \cdot \int_0^z p_0 \cdot \left( 1 - \frac{E^{up/down}_{mag}}{2 \cdot E_0} \right) d\xi$$

und mit (1.18) folgt:

$$(1.34) \quad \varphi_{up/down}(\vec{x}) = \frac{i}{\hbar} \cdot \left( p_0 \cdot z - \int_0^z \left( \frac{\pm \frac{\hbar}{2} \cdot \gamma \cdot B_z}{2 \cdot E_0 / p_0} \right) d\xi \right).$$

Für einen Zustand, der in der x-Richtung polarisiert das Magnetfeld bei  $z = 0$  betritt, gilt mit (1.17) unter Vernachlässigung des Normierungsfaktors, der sehr nahe bei 1 liegt,

$$(1.35) \quad \psi(\vec{x}, t) = \left( e^{\frac{i}{2 \cdot p_0 / m} \cdot \gamma \cdot \int B_z d\xi} \right) \cdot e^{\frac{i}{\hbar} (p_0 \cdot z - E_0 \cdot t)}.$$

Dies entspricht dem einfachen Ergebnis mit konstantem Magnetfeld  $B_z$ . In diesem Fall kann das Integral durch das Produkt  $B_z \cdot L$  ersetzt werden, wobei  $L$  wieder die Länge der Flugstrecke in z-Richtung angibt. Dies zeigt auch die einfache exakte Lösung der Schrödingergleichung für diesen Fall.

$$\psi_{B_z, const}(\vec{x}, t) = \left( e^{\frac{i}{\hbar} \left( \sqrt{\frac{p_0^2}{2m} - \frac{\hbar}{2} \gamma B_z} \right) 2m \cdot z - E_0 \cdot t} \right) \approx \left( e^{\frac{i}{\hbar} \left( \left( p_0 - \frac{\hbar \gamma B}{2 p_0 / m_z} \right) z - E_0 \cdot t \right)} \right)$$

$$\left( e^{\frac{i}{\hbar} \left( \sqrt{\frac{p_0^2}{2m} + \frac{\hbar}{2} \gamma B_z} \right) 2m \cdot z - E_0 \cdot t} \right) \approx \left( e^{\frac{i}{\hbar} \left( \left( p_0 + \frac{\hbar \gamma B}{2 p_0 / m_z} \right) z - E_0 \cdot t \right)} \right)$$

Da bei allen folgenden Problemen ein hinreichend homogenes oder sogar konstantes Magnetfeld vorliegt, gehen wir von Zuständen in der Form von (1.35) aus. Sie sind zusammengesetzt aus der freien Wellenfunktion ohne Feld im zweiten Faktor und einem Spinor als erstem Faktor. Sämtliche Manipulationen zur Beeinflussung des Spins äußern sich lediglich in diesem ersten Faktor.

In einer zweiten Feldregion mit entgegengesetzter Richtung tauschen *up*- und *down*-Zustand ihre Rollen. Die im ersten Feld aufgesammelte Spin-Phase, die der Spinor beschreibt, verringert sich, bis sie bei identischen Feldintegralen verschwindet. Dies stellt die quantenmechanische Analogie zum Zurückdrehen des Spins dar.

Um die Beziehung zum oben diskutierten energetischen Bild aufzuzeigen, ist es lediglich erforderlich, die Gruppengeschwindigkeit  $d\omega / dk = dE / dp = dE / dp_0 \cdot dp_0 / dp = v_0 / (dp / dp_0)$  der Wellen im Magnetfeld zu berechnen. Wie nicht anders erwartet ergibt sich der Wert der semiklassischen Rechnung.

### 1.1.4 Der statistische Operator des Strahls

Im vorangehenden Abschnitt stand die Beschreibung von Neutronen eines einheitlichen Impulses bzw. einer einheitlichen Energie im Mittelpunkt. Der Neutronenstrahl, der in einem Spinechospektrometer zum Einsatz kommt, unterliegt jedoch keinerlei engen Beschränkungen hinsichtlich der Energien der einzelnen Neutronen, wie in Abschnitt 1.1.1 gezeigt. Für den Fall eines solchen „polychromatischen“ Strahls zeigte die klassische Betrachtung, daß sich nach der ersten Flugstrecke keine Vorzugsrichtung der Spins mehr finden läßt. Es folgt, daß im Falle eines nicht mehr vollständig polarisierten Strahles die Darstellung mittels Spinoren versagt:



## 1.1 Das Spinecho-Prinzip

Der Zustand eines polychromatischen Strahls erfordert die Möglichkeit, daß der Polarisationsvektor des Zustands auch beliebige Werte vom Betrag kleiner 1 annehmen kann. Dagegen besitzt jeder „reine Zustand“, durch einen Spinor der Form

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

darstellbar, immer eine Polarisation vom Betrag 1:

$$(1.36) \quad \langle \vec{P} \rangle^2 = \begin{pmatrix} |a|^2 - |b|^2 \\ 2 \cdot \text{Re}(a^* \cdot b) \\ 2 \cdot \text{Im}(a^* \cdot b) \end{pmatrix}^2 = (|a|^2 + |b|^2)^2 = 1,$$

wobei die letzte Identität in der Normierung des Spinors begründet ist.

Zur Beschreibung eines „polychromatischen“ Strahls mit unterschiedlichen Neutronenenergien dient die Dichtematrix  $\rho$  des oben definierten reinen Strahlzustandes:

$$(1.37) \quad \rho = \frac{1}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 + |a|^2 - |b|^2 & (a^* \cdot b)^* \\ a^* \cdot b & 1 - (|a|^2 - |b|^2) \end{pmatrix},$$

aus der sich der Erwartungswert der Polarisation wie folgt ergibt:

$$(1.38) \quad \langle \hat{P} \rangle = \text{Sp}(\rho \cdot \hat{P}).$$

Die Bedeutung der Dichtematrix liegt in ihrer Eigenschaft, daß sie auch die Beschreibung von Erwartungswerten kleiner 1 für die Polarisation zuläßt, ohne daß der Erwartungswert für die Teilchenzahl abnimmt.

$$(1.39) \quad \rho = \frac{1}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 + p_z & p_x - i \cdot p_y \\ p_x + i \cdot p_y & 1 - p_z \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \langle \hat{P} \rangle = \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix}$$

Der Grund für die Erhaltung der Teilchenzahl gründet in der nicht verschwindenden Spur von  $\rho$ . Der Erwartungswert für die Einheitsmatrix, die den Operator für die Teilchenzahl darstellt, ergibt sich hierdurch immer zu 1.

Der Dichteoperator unseres monochromatischen Strahls folgt mit (1.35) zu

$$(1.40) \quad \rho = \frac{1}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 & e^{\frac{-i}{2 \cdot p_0/m} \gamma \cdot \int_{B_z} d\xi} \\ e^{\frac{i}{2 \cdot p_0/m} \gamma \cdot \int_{B_z} d\xi} & 1 \end{pmatrix}.$$

Gehen wir zu einem polychromatischen Strahl der Breite  $\Delta p$  über, so müssen wir, um den Spindichteoperator im Endzustand zu erhalten, über alle Zustände mit verschiedenem Impuls  $p_0$  integrieren:

## 1.2 Das Resonanzspinecho-Prinzip

$$(1.41) \quad \rho = \frac{1}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{\Delta p} \int_{-\Delta p/2}^{\Delta p/2} e^{-\frac{i}{2(p_0+p)/m} \gamma \int B_z d\xi} dp \\ \frac{1}{\Delta p} \int_{-\Delta p/2}^{\Delta p/2} e^{\frac{i}{2(p_0+p)/m} \gamma \int B_z d\xi} dp & 1 \end{pmatrix}.$$

Bei einer Polarisationsmessung nach einer Flugstrecke mit genügend großem Magnetfeldintegral, so daß die Integrale in den Nebendiagonalelementen verschwinden, zeigt sich der Strahl demnach völlig *unpolarisiert*. Folgt eine zweite Flugstrecke mit entgegengesetztem Magnetfeld, verschwindet entsprechend das Magnetfeldintegral im Exponenten der e-Funktion und die Nebendiagonalelemente ergeben den Wert 1. Wie im semiklassischen Bild bereits diskutiert, zeigt eine Messung zuletzt wieder vollständige Polarisation in x-Richtung - das *Spin-Echo* wird sichtbar.

## 1.2 Das Resonanzspinecho-Prinzip

### 1.2.1 Die energetischen Verhältnisse

Besonders einfach ist die Variante des Resonanzspinechos an die Darstellung der Energieverhältnisse (1.1.2, Abbildung 1.4) anzuknüpfen.

Durch resonante elektromagnetische Strahlung lassen sich im Magnetfeld Übergänge zwischen den up- und down-Zuständen induzieren. Bei der Wahl von geeigneten Strahlungs-Intensitäten verlassen somit die Spins das konstante Magnetfeld in dem jeweils anderen Zustand („andersherum gerichtet“, „geflippt“). Bei diesem magnetischen Übergang ändern die Neutronen ihre kinetische Energie nicht. Allerdings liegt danach eine veränderte Gesamtenergie vor, die sich aus der Absorption bzw. Emission eines Photons aus dem bzw. in das Strahlungsfeld erklärt.

Während der Feldgradient beim Feldaustritt der Neutronen ohne Pi-Flip wieder für die ursprüngliche Geschwindigkeit der Neutronen sorgte, verdoppelt sich der Beschleunigungseffekt des Feldgradienten im Fall mit Flip.

Das ausgedehnte Magnetfeld der beiden Flugstrecken reduziert sich auf je zwei kurze Bereiche. Dennoch legen die Neutronen-Spinnkomponenten die gesamte „Nullfeld“-Flugstrecke mit unterschiedlicher Geschwindigkeit zurück, da zum konstanten Magnetfeld in den Spulen das beschriebene Wechselfeld hinzugetreten ist.

Abbildung 1.5 zeigt die Verhältnisse anschaulich.

An dem Zusammenspiel zwischen einem konstanten und einem zeitabhängigen Feld zeigt sich die Verwandtschaft zwischen der Spinecho-Methode und der bekannten Spin-Resonanz-Methode der NMR (Nuclear Magnetic Resonance) bzw. ESR (Electron Spin Resonance). Während die Hochfrequenzübergänge bei dieser Technik durch Pulsfolgen in der Zeit erfolgen, läßt sich die hier vorgestellte Resonanz-Spinecho-Methode als In-Beam-NMR bezeichnen: Für die zeitliche Folge der HF-Strahlung auf ein Neutron sorgt dessen Fortbewegung im Strahl und sukzessives Erscheinen in den verschiedenen Feldregionen.

Im Vergleich zum konventionellen Spinecho ergeben sich mehrere Unterschiede: Ein bedeutender Vorteil besteht darin, daß keine Magnetfelder entlang der Flugstrecken benötigt werden, an die das konventionelle Spinecho sehr hohe Anforderungen bezüglich der Homogenität, d.h. der Gleichheit für alle Neutronen bezüglich des Magnetfeldintegrals stellt.

Eng verbunden damit ist die Möglichkeit zu einem Multidetektor-Aufbau. Um in Streuexperimenten simultan unter mehreren Winkeln messen zu können, kommt lediglich eine größere Anzahl von Spulen zum Einsatz, die als Abschluß der zweiten Flugstrecke dienen.

Mit konventioneller Spinecho-Technik ist die Realisierung eines Multidetektor-Aufbaus mit sehr großen Schwierigkeiten beim Design des Magnetfeldes der zweiten Flugstrecke verbunden. Zum Zeitpunkt der Fertigstellung des experimentellen Aufbaus im Rahmen dieser Arbeit gibt es zwar zwei Experimente in Planung mit unterschiedlichen Lösungsansätzen, doch noch kein erprobtes Multidetektor-Spektrometer.

## 1.2 Das Resonanzspinecho-Prinzip

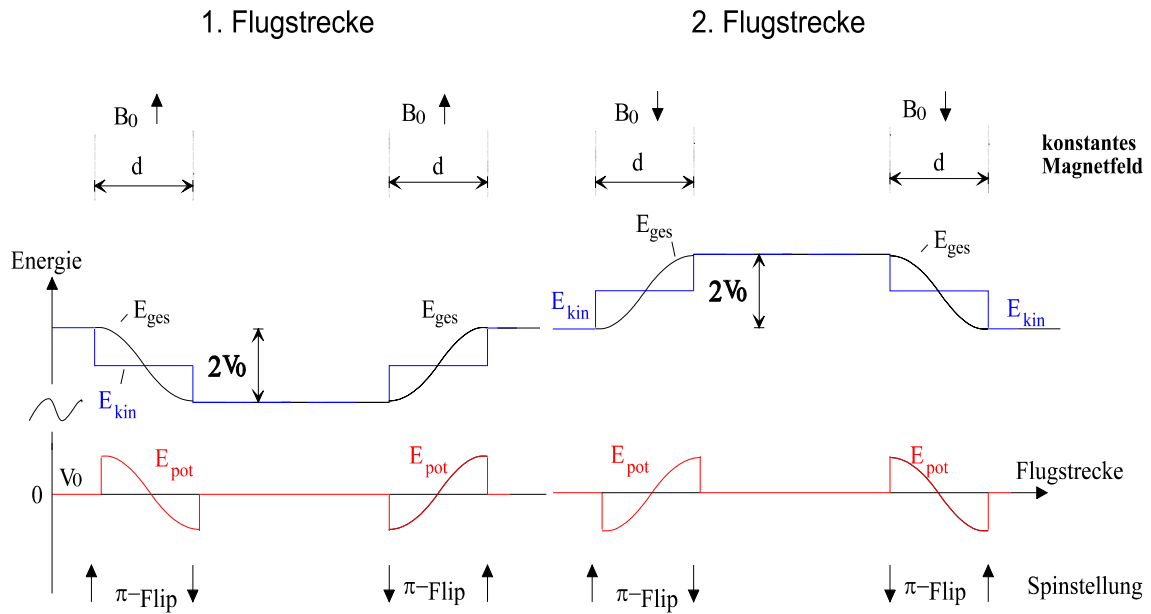


Abbildung 1.5: Die Energieverhältnisse beim Resonanzspinecho. Beim Eintritt in die erste Spule nimmt die kinetische Energie  $E_{kin}$  des up-Zustandes ab, da die potentielle Energie  $E_{pot}$  zunimmt. Die Gesamtenergie  $E_{ges}$  nimmt analog zur potentiellen Energie während des  $\pi$ -Flips ab. Die kinetische Energie ändert sich hierbei nicht, erst wieder beim Austritt aus der Spule, und zwar mit gleichem Vorzeichen wie beim Eintritt. Die Verhältnisse an den anderen Spulen verhalten sich analog.

Da die Potentialstufe pro Spule zweimal durchlaufen wird, verdoppelt sich der Energieunterschied zwischen spin-up und spin-down und damit die erreichbare Spinechozeit im Vergleich zum konventionellen Spinecho bei identischem konstantem Magnetfeld.

Eine weitere Verdoppelung der Spinechozeit liefert die sogenannte *Bootstrap*-Methode: Indem anstatt einzelner Spulen jeweils Spulen-Paare zum Einsatz kommen, existieren für die Neutronen entsprechend mehr Potentialstufen, die zur Beschleunigung bzw. Verzögerung führen. Ein wichtiger Nebeneffekt besteht darin, daß die Magnetfeldrichtung in den Spulen der Paare entgegengesetzt ist. Infolge dieser antiparallelen Anordnung wird das Magnetfeld der einen Spule durch das Feld der benachbarten Spule zurückgeführt, ohne daß erhebliche Außenfelder entstehen.

Im Rahmen dieser Arbeit konnte erstmals ein Multidetektor-Bootstrap-Resonanz-Spinecho-Spektrometer entwickelt und erfolgreich getestet werden.

### 1.2.2 Die semiklassische Beschreibung eines $\pi$ -Flips

Die beiden folgenden Abschnitte widmen sich der Beschreibung der  $\pi$ -Flips des Resonanzspinechos. Zum zeitlich konstanten Magnetfeld des konventionellen Spinechos tritt in dessen Resonanzflipspulen ein hochfrequentes, also zeitlich oszillierendes Wechselfeld senkrecht zum konstanten B-Feld hinzu. Zunächst lassen sich im semiklassischen Bild die Bewegungen des Spins und der Magnetfelder anschaulich darstellen. Für die darauf folgende quantenmechanische Beschreibung soll dieses klassische Bild im dreidimensionalen Raum eine Vorbereitung darstellen.

Zur Erläuterung der erwähnten  $\pi$ -Flips im Hochfrequenzfeld folgen wir in einem Punkt der quantenmechanischen Beschreibung und gehen von Spins aus, die entweder parallel oder antiparallel zum konstanten B-Feld stehen. Insbesondere beschränken wir uns zunächst auf einen Spin in up-Richtung und stellen ihn semiklassisch als magnetischen Dipol vor.

Ein mit der Larmorfrequenz rotierendes B-Feld  $B_{HF}$  erscheint in einem mit derselben Frequenz rotierenden Koordinatensystem ruhend. Diese Tatsache ist entscheidend dafür, daß die Bewegung des Spins im rotierenden Koordinatensystem ganz analog zur Larmorpräzession verstanden werden kann: der Spin präzediert um das „ruhende“ Magnetfeld der Hochfrequenzstrahlung. (Das ursprünglich vorhandene konstante Magnetfeld in z-Richtung ist durch die Transformation ins rotierende Koordinatensystem verschwunden.)

Diese Bewegung im  $B_{HF}$ -Feld trägt die Bezeichnung Rabioszillation. Die Rabifrequenz hängt analog zur Larmorfrequenz von der Feldstärke des Magnetfelds  $B_{HF}$  ab.

## 1.2 Das Resonanzspinecho-Prinzip

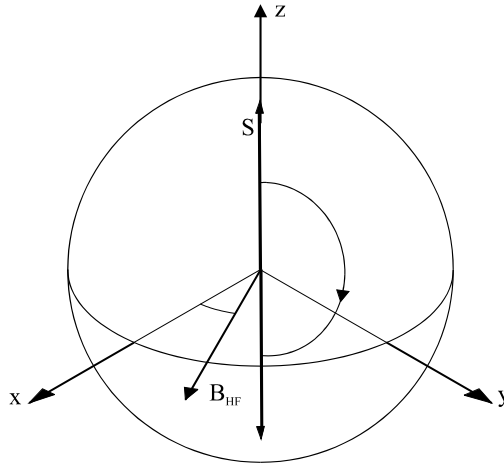


Abbildung 1.6: Der Spin  $S$  befindet sich zunächst in  $z$ -Richtung. Wir betrachten die Situation im mit der Larmorfrequenz rotierenden Koordinatensystem. Das konstante Magnetfeld in  $z$ -Richtung verschwindet dadurch. Fügen wir das rotierende Feld  $B_{HF}$  hinzu, dessen Frequenz auf die Larmorfrequenz abgestimmt ist, so ruht dieses Feld im rotierenden Koordinatensystem und der Spin präzediert mit der Rabi-Frequenz um  $B_{HF}$ . Nach einer halben Drehung befindet er sich wieder in  $z$ -Richtung, aber mit entgegengesetztem Vorzeichen.

Für einen Pi-Flip sind zwei Bedingungen zu erfüllen. Zum einen muß - wie oben erwähnt - die Larmorfrequenz auf die Hochfrequenz abgestimmt sein, damit das HF-Feld im rotierenden Koordinatensystem ruht und das konstante Magnetfeld völlig verschwindet. Darüber hinaus soll für einen Pi-Flip die Rabi-Oszillation gerade zu einer halben Umdrehung um das Hochfrequenzfeld führen, so daß der Spin an der x-y-Ebene „gespiegelt“ wird.

### 1.2.3 Die quantenmechanische Beschreibung eines Pi-Flips

Das Ziel dieses Abschnittes ist die quantenmechanische Beschreibung des Neutronenspins in den Feldern der Resonanzspinechospulen. In diesem Abschnitt findet sich nur eine Zusammenfassung der Ergebnisse, die Herleitung erfolgt in Anhang A.

Der Hamiltonoperator wird durch das HF-Feld zeitabhängig. Die Bewegung eines Spin-1/2-Teilchens in einer Feldanordnung mit einem zirkular polarisierten Wechselfeld stellt eines der wenigen exakt lösbaren zeitabhängigen Probleme dar. Ein linear polarisiertes HF-Feld erlaubt lediglich Näherungen, wobei die Berücksichtigung der zweiten Ordnung einen wesentlichen Fortschritt darstellt [Sch95].

Wir gehen vom Hamiltonoperator von (1.30) aus, der zusätzlich zum konstanten Feld  $B_0 = B_z$  ein in der x-y-Ebene mit der Frequenz  $\omega$  rotierendes Feld der Amplitude  $B_1$  erhält:

$$(1.42) \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2 \cdot m} + \frac{\hbar}{2} \cdot \gamma \cdot \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_x \\ \hat{\sigma}_y \\ \hat{\sigma}_z \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} B_1 \cdot \cos(\omega \cdot t) \\ B_1 \cdot \sin(\omega \cdot t) \\ B_0 \end{pmatrix}.$$

Zur Transformation in die jeweils geeignete Basis verwenden wir die Wechselwirkungsdarstellung (z.B. [Sch92]). Wir zerlegen den Hamiltonian in einen zeitlich konstanten und einen zeitabhängigen Wechselwirkungsanteil.

$$(1.43) \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)$$

$$\hat{H}_0 = \frac{p^2}{2 \cdot m} + \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} \omega & 0 \\ 0 & -\omega \end{pmatrix}$$

$$\hat{H}_1(t) = \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} \gamma \cdot B_0 - \omega & \gamma \cdot B_1 \cdot e^{-i(\omega t - \varphi_1)} \\ \gamma \cdot B_1 \cdot e^{i(\omega t - \varphi_1)} & -(\gamma \cdot B_0 - \omega) \end{pmatrix}.$$

Hier haben wir die Phase  $\varphi_1$  ergänzt, welche die Phase der Hochfrequenz zum Zerlegungszeitpunkt  $t=0$  bestimmt.

## 1.2 Das Resonanzspinecho-Prinzip

Im Wechselwirkungssystem, d.h. im mit der Hochfrequenz mitrotierende Koordinatensystem  $KS_1^{rot}$  ist die Zeitabhängigkeit des Hamiltonoperators verschwunden. In diesem Koordinatensystem existiert die nun ruhende HF-Feldstärke, ohne Beschränkung der Allgemeinheit in x-Richtung angenommen, und ein Magnetfeld in z-Richtung, das aus der Differenz des konstanten Feldes im Laborsystem und einem mit der Rotationsfrequenz zunehmenden Feld besteht.

Für die zeitabhängige Schrödingergleichung des Zeitentwicklungsoperators  $\hat{U}_W(t)$  ergibt sich in diesem System:

$$(1.44) \quad i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}_W(t) = \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} \gamma \cdot B_0 - \omega & \gamma \cdot B_1 \cdot e^{i\varphi_1} \\ \gamma \cdot B_1 \cdot e^{-i\varphi_1} & -(\gamma \cdot B_0 - \omega) \end{pmatrix} \cdot \hat{U}_W(t).$$

Diese Matrix erlaubt es, sie durch die Transformation  $T$  zu diagonalisieren und die Zeitabhängigkeit zu erhalten. Die diagonalisierte Matrix mit den Energieeigenwerten auf der Hauptdiagonalen führt auf eine einfache Zeitentwicklung von der Form

$$(1.45) \quad \hat{U}_R(t) = \begin{pmatrix} e^{i \frac{-\omega_R}{2} t} & 0 \\ 0 & e^{i \frac{\omega_R}{2} t} \end{pmatrix}.$$

Der Index „R“ weist auf die Benennung *Rabifrequenz* für die beschriebene Rotation um das konstante Magnetfeld im rotierenden Koordinatensystem.

Für die zeitliche Entwicklung im Laborsystem folgt mit

$$(1.46) \quad \hat{U}_{Labor}(t) = e^{-i \cdot \hat{H}_0 t / \hbar} \cdot T \cdot \hat{U}_R(t) \cdot T^*$$

$$\hat{U}_{Labor}^{\varphi_1}(t) = e^{-i \cdot \hat{H}_0 t / \hbar} \cdot \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\omega_R}{2} t\right) - \frac{i \cdot (\gamma \cdot B_0 - \omega)}{\omega_R} \sin\left(\frac{\omega_R}{2} t\right) & \frac{-i \cdot \gamma \cdot B_1}{\omega_R} \sin\left(\frac{\omega_R}{2} t\right) e^{i\varphi_1} \\ \frac{-i \cdot \gamma \cdot B_1}{\omega_R} \sin\left(\frac{\omega_R}{2} t\right) e^{-i\varphi_1} & \cos\left(\frac{\omega_R}{2} t\right) + \frac{i \cdot (\gamma \cdot B_0 - \omega)}{\omega_R} \sin\left(\frac{\omega_R}{2} t\right) \end{pmatrix}$$

$$\hat{U}_{Labor}^{\varphi_1}(t) = e^{-i \cdot \hat{H}_0 t / \hbar} \cdot \left( \begin{pmatrix} e^{-i \frac{\omega_R}{2} t} & 0 \\ 0 & e^{i \frac{\omega_R}{2} t} \end{pmatrix} + i \sin\left(\frac{\omega_R}{2} t\right) \begin{pmatrix} 1 - \sqrt{1 - f^2} & -f \cdot e^{i\varphi_1} \\ -f \cdot e^{-i\varphi_1} & -1 + \sqrt{1 - f^2} \end{pmatrix} \right)$$

In diesen Ausdrücken tritt die Natur der Bewegung deutlich zutage: im rotierenden Koordinatensystem die Rabioszillation, im Laborsystem zusätzlich die Larmorpräzession.

Die *Resonanzbedingung*  $\gamma \cdot B_0 - \omega \equiv 0$  ist gleichbedeutend damit, daß die Hochfrequenz auf die Larmorfrequenz abgestimmt und im mit der Hochfrequenz rotierenden Koordinatensystem somit keine  $B_0$ -Komponente vorhanden ist. Der Faktor  $f$  wird in Resonanz zu 1, und die obere Matrix zeigt, daß die Bewegung einer Drehung mit einer in der x-y-Ebene liegenden Drehachse entspricht. Außerhalb der Resonanz ist  $f=0$  und die untere Beziehung zeigt, daß dann lediglich eine Drehung um die z-Richtung erfolgt.

Die erforderliche Aufenthaltszeit im HF-Feld, damit die Rabioszillation zu einem Pi-Flip führt, ist durch  $\omega_R \cdot t \equiv \pi$  festgelegt. Doch nur in Resonanz bei  $f=1$  findet der Pi-Flip auf solche Weise statt, daß zum Beispiel ein  $\uparrow\downarrow$ -Zustand vollständig in den  $\downarrow\downarrow$ -Zustand übergeht.

Unter den Bedingungen, daß sowohl Resonanz wie ein Pi-Flip vorliegen, läßt sich der Neutronenstrahl des Resonanzspinechos auf einfache Weise quantenmechanisch beschreiben. Nach der ersten Flugstrecke stellt sich der Spin-Zustand  $\psi_1$  durch die Zeitentwicklung in den beiden Spulen und der dazwischen liegenden feldfreien Zone folgendermaßen dar:

$$(1.47) \quad \psi_1 = \hat{U}_{Labor}^{\varphi_2}(t_2) \cdot \hat{U}_{Labor}^{\varphi_1}(t_1) \cdot \psi_0$$

## 1.2 Das Resonanzspinecho-Prinzip

mit den Flugzeiten durch die Resonanzflipspulen  $t_1$  bzw.  $t_2$  und der HF-Phase  $\varphi_2$ , die außer von der HF-Frequenz von der Zeitdauer abhängt, die zwischen dem Eintritt der Neutronen in die erste Spule und in die zweite Spule liegt:  $\varphi_2 = \omega_{HF} \cdot T_{12} + \varphi_1 = \omega_{HF} \cdot L / (p/m) + \varphi_1$ .  $L$  bezeichnet hier die Summe der Strecken, die die Neutronen durch eine HF-Spule und durch das Nullfeld zurückliegen.

Mit (1.49) bis (1.52) und den geeigneten Magnetfeldern ergibt sich schließlich

$$(1.48) \quad \psi_1 = e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t_2} \cdot \begin{pmatrix} 0 & e^{i(\varphi_1 + \omega_{HF} \cdot T_{12})} \\ e^{-i(\varphi_1 + \omega_{HF} \cdot T_{12})} & 0 \end{pmatrix} \cdot e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t_1} \begin{pmatrix} 0 & e^{i\varphi_1} \\ e^{-i\varphi_1} & 0 \end{pmatrix} \cdot \psi_0$$

und mit  $t_1 = t_2$  und der Tatsache, daß die Phase des HF-Feldes beim Eintritt in die zweite Spule auf  $\omega \cdot (t_1 + T_{12}) + \varphi_1$  angewachsen ist, folgt das Ergebnis.

$$(1.49) \quad \psi_1 = e^{i \begin{pmatrix} \omega T_{12} & 0 \\ 0 & -\omega T_{12} \end{pmatrix}} \cdot \psi_0$$

Die Analogie zum konventionellen Spinecho ist ersichtlich (siehe (1.35)). Als Pendant zum Feld der Länge  $z$  fungiert hier die feldfreie Region, die die Neutronen zwischen den Spulen durchqueren, und zusätzlich die Flugstrecke durch *eine* der beiden Resonanzflipspulen, entsprechend der Zeitdauer  $t_1$ . In der zweiten Spektrometerhälfte sind die Verhältnisse gerade umgekehrt, bis schließlich der ursprüngliche Spinor vorliegt.

Da das Verhalten der Spins bis auf den Faktor 2 identisch zum konventionellen Spinecho ist, können alle wesentlichen Betrachtungen, unverändert auf das Resonanzspinecho übertragen werden. Eine Ausnahme bildet den Inhalt des folgenden Abschnitts.

### 1.2.4 Die Polarisation mit polychromatischem Strahl

Die Analogie zum konventionellen Spinecho besitzt eine Ausnahme: für einen „polychromatischen“ Strahl gilt sie nur qualitativ, wie wir sehen werden, da nicht alle Neutronen zugleich die Pi-Flipbedingung erfüllen können. Zur Berechnung der genauen Verhältnisse müssen wir die Zeitentwicklungsoperatoren etwas allgemeiner, ohne Annahme erfüllter Pi-Flip-Bedingung berechnen. Die Resonanzbedingung setzen wir aus Gründen der Übersichtlichkeit weiterhin voraus. Die Zeitentwicklung einer Spule im Laborsystem lautet dann:

$$(1.50) \quad \hat{U}_{Labor}^{\varphi_1}(t) = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \cdot \begin{pmatrix} \cos(\frac{\omega_R}{2}t) & -i \sin(\frac{\omega_R}{2}t)e^{i\varphi_1} \\ i \sin(\frac{\omega_R}{2}t)e^{-i\varphi_1} & \cos(\frac{\omega_R}{2}t) \end{pmatrix}.$$

Wir beschränken uns auf die Beziehung für insgesamt vier Einfach-Spulen (NRSE), je eine als Begrenzung jeder Flugstrecke. Nach der ersten Flugstrecke ergibt sich die Zeitentwicklung

$$(1.51) \quad \hat{U}_{Labor}^{\varphi_2}(t) \cdot \hat{U}_{Labor}^{\varphi_1}(t) = \begin{pmatrix} \cos^2(\frac{\omega_R}{2}t) - \sin^2(\frac{\omega_R}{2}t)e^{i(\varphi_2 - \varphi_1)} & -i \sin(\frac{\omega_R}{2}t)\cos(\frac{\omega_R}{2}t)(e^{-i\varphi_2} + e^{-i\varphi_1}) \\ -i \sin(\frac{\omega_R}{2}t)\cos(\frac{\omega_R}{2}t)(e^{i\varphi_2} + e^{i\varphi_1}) & \cos^2(\frac{\omega_R}{2}t) - \sin^2(\frac{\omega_R}{2}t)e^{-i(\varphi_2 - \varphi_1)} \end{pmatrix}.$$

Wir diskutieren hier nur anhand dieser Beziehung die wesentlichen Punkte und verzichten im weiteren auf die Darstellung in allen einzelnen Schritten.

In der Hauptdiagonale taucht erwartungsgemäß die Differenz der HF-Phasen auf, die sich aus der Flugzeit im ersten Arm ergibt. Der Ausdruck in den Nebendiagonalen berücksichtigt jedoch noch die Phase der einzelnen Spulen. Bei einem kontinuierlichen Strahl, wie er in unserem Experiment genutzt wird, muß für die HF-Phasen eine Gleichverteilung gelten, d.h. die Neutronen „sehen“ mit gleicher Wahrscheinlichkeit alle verschiedenen HF-Richtungen beim Eintritt in die Spulen. Die innerhalb der Meßzeiten, die minimal bei 1 Sekunde liegen, erfolgten HF-Rotationen liegen bei über 100000, so daß sich die Nebendiagonale wegmittelt.

## 1.2 Das Resonanzspinecho-Prinzip

Setzt man den solchermaßen vereinfachten Ausdruck in die Beziehung für den Erwartungswert der Polarisation in x-Richtung nach der Passage aller Spulen ein, so folgt:

$$(1.52) \quad \langle \hat{s}_x \rangle = \left( \hat{U}_{ges}^{Resonanz} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right)^* \cdot \hat{s}_x \cdot \hat{U}_{ges}^{Resonanz} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} / 2$$

$$\langle \hat{s}_x \rangle = \cos^8\left(\frac{\omega_R}{2}t\right) + \sin^8\left(\frac{\omega_R}{2}t\right) \cdot \cos(2(\Delta\varphi_{21} + \Delta\varphi_{43})) + R_1 + R_2.$$

Hier haben wir die Phasendifferenzen der Hochfrequenzfelder beim Eintritt der Neutronen in die Spulen i und j mit  $\Delta\varphi_{ij}$  abgekürzt.

Der erste Term wird in der Nähe eines Pi-Flips klein, er beträgt z.B. bei einer 10%-Abweichung maximal  $10^{-8}$ .

Der zweite, in der Nähe des Pi-Flips dominante Term zeigt die Analogie zum konventionellen Spinecho. Bei einer Integration über ein Geschwindigkeitsspektrum führt der Sinus-Ausdruck zu einer (geringen) Depolarisation.

Die beiden letzten Ausdrücke betrachten wir gesondert.

$$R_1 = 4 \cdot \sin^4\left(\frac{\omega_R}{2}t\right) \cos^4\left(\frac{\omega_R}{2}t\right) \cdot \cos(\Delta\varphi_{21} + \Delta\varphi_{43})$$

Die Cosinusfunktion besitzt gerade die halbe Phase gegenüber der zuletzt diskutierten Funktion. Zudem wird dieser Ausdruck am größten, wenn das HF-Feld nur für einen Pi/2-Flip ausreicht. Er verweist damit auf die Möglichkeit, das Resonanzspinechoprinzip nur mit Pi/2-Flips zu betreiben, indem sich der Spin an der ersten Spule einer Flugstrecke aus der x-y-Ebene hinausdreht, um in der zweiten Spule HF-phasenabhängig wieder hineingedreht zu werden. Soll dieses Prinzip verwendet werden, so muß der Spin allerdings in der z-Richtung präpariert sein, um am Ende volle Polarisation zu erhalten. In unserem Fall liegt die Maximalpolarisation des Terms bei 1/4, da bei Pi/2-Flips mit unterschiedlichen HF-Phasen die x-y-Ebene nicht wieder erreicht wird.

Mit erfüllter Pi-Flip-Bedingung für die mittlere Wellenlänge läßt sich der Term bei einer Breite des Spektrums von 10% zu maximal  $3 \cdot 10^{-5}$  abschätzen.

Der letzte Ausdruck

$$\sin^2\left(\frac{\omega_R}{2}t\right) \cos^2\left(\frac{\omega_R}{2}t\right) \left( \begin{array}{l} \sin^2\left(\frac{\omega_R}{2}t\right) \cos^2\left(\frac{\omega_R}{2}t\right) \cdot (\cos(2\Delta\varphi_{43}) + 2\cos(2(\Delta\varphi_{43} + \Delta\varphi_{21})) + \cos(2\Delta\varphi_{21})) + \\ - \cos^4\left(\frac{\omega_R}{2}t\right) \cdot (\cos(\Delta\varphi_{43}) + \cos(\Delta\varphi_{21})) + \\ - \sin^4\left(\frac{\omega_R}{2}t\right) \cdot (\cos(2\Delta\varphi_{43} + \Delta\varphi_{21}) + \cos(\Delta\varphi_{43} + 2\Delta\varphi_{21})) \end{array} \right)$$

beinhaltet die Fälle, daß der oben beschriebene unvollständige Pi-Flip nicht in allen Spulen, sondern z.B. nur in den Spulen eines Armes eintritt. Im quantenmechanischen Bild bedeutet ein unvollständiger Pi-Flip, daß die Flipwahrscheinlichkeit ungleich 1 ist. Anhand der trigonometrischen Vorfaktoren ist im Vergleich mit den Bloch-Gleichungen zu sehen, daß z.B. die unterste Zeile des Ausdrucks dem Fall gerecht wird, daß nur in einer Spule ein Pi-Flip stattfindet.

Alle Terme beinhalten die Tatsache, daß die HF-Phasen der beiden Spektrometerarme einseitig berücksichtigt sind. Da nach dem Durchlauf durch einen Spektrometerarm unser polychromatischer Strahl bereits völlig depolarisiert ist, läßt sich der gesamte Ausdruck zu Null abschätzen.

Der Vollständigkeit halber nennen wir das Ergebnis einer analogen Berechnung und Näherungsbetrachtung, das auch außerhalb der Resonanz Gültigkeit besitzt.

$$(1.53) \quad \langle \hat{s}_x \rangle \approx \left( \cos^2\left(\frac{\omega_R}{2}t\right) + (1-f^2) \sin^2\left(\frac{\omega_R}{2}t\right) \right)^4 + f^2 \sin^8\left(\frac{\omega_R}{2}t\right) \cos(2(\Delta\varphi_{21} + \Delta\varphi_{43}))$$

Damit ist das „ideale“ Resonanzspinecho vollständig beschrieben. Alle Polarisationseffekte unseres experimentellen Aufbaus lassen sich hiermit verstehen.

## 1.2 Das Resonanzspinecho-Prinzip

### 1.2.5 Die Korrekturen für linear polarisierte HF-Felder

Rotierende Magnetfelder sind technisch nur mit hohem Aufwand realisierbar. Aus diesem Grund finden in den meisten Problemen der beschriebenen Art linear polarisierte elektromagnetische Wellen Verwendung. In einfacher Art läßt sich jede lineare harmonische Bewegung in zwei gegenläufige Rotationen zerlegen. Durch Transformation in ein rotierendes Koordinatensystem kann naturgemäß nur eine Komponente ruhend erscheinen. Die zweite rotierende Komponente erscheint nun als Störung mit doppelter Frequenz und der Feldstärke  $B_2 = B_1 / 2$ .

Die Berechnung der Lösung unter Einbezug der Korrekturen erster Ordnung führt zunächst zu einer leicht abgewandelten Resonanzbedingung. Mit der Verstimmung  $\Delta B_0$  in der  $B_0$  - Feldstärke - als Bloch-Siegert-shift [Blo40] bekannt - ergibt sich für die Resonanzfeldstärke  $B_{BS}$ :

$$(1.54) \quad B_{BS} = B_0 + \Delta B_0, \text{ wo } \Delta B_0 = \frac{B_2^2}{4 \cdot B_0}.$$

Zudem findet durch die „falsch herum“ rotierende Komponente eine Beeinträchtigung der „richtigen“ HF-Komponente statt [Sch95]:

$$(1.55) \quad B_1^{eff} = \frac{(\gamma B_0 + \omega)^2 + (\gamma B_2)^2}{(\gamma B_0 + \omega)^2 + (\gamma B_2)^2 / 2} \cdot B_1$$

Für die Labor-Zeitentwicklung der Wechselwirkungszustände (1.67) ergibt sich unter Vernachlässigung von Rotationen mit Frequenzen, die ein Vielfaches von  $\omega$  betragen, für  $\hat{U}_{ges}(t)$  der gleiche Ausdruck - bis auf einen konstanten Faktor - wie für das Problem mit rotierendem Feld (1.52). Für  $B_0$  und  $B_1$  sind nun allerdings die Effektivwerte zu verwenden.

### 1.2.6 Die semiklassische Beschreibung des Resonanzspinechos

Ergänzend folgt eine semiklassische Darstellung des Resonanzspinechos. Hierbei tritt entgegen der quantenmechanischen Beschreibung nicht der Laufzeitunterschied der up- und down-Komponenten, sondern die Drehung des Spins in den Vordergrund.

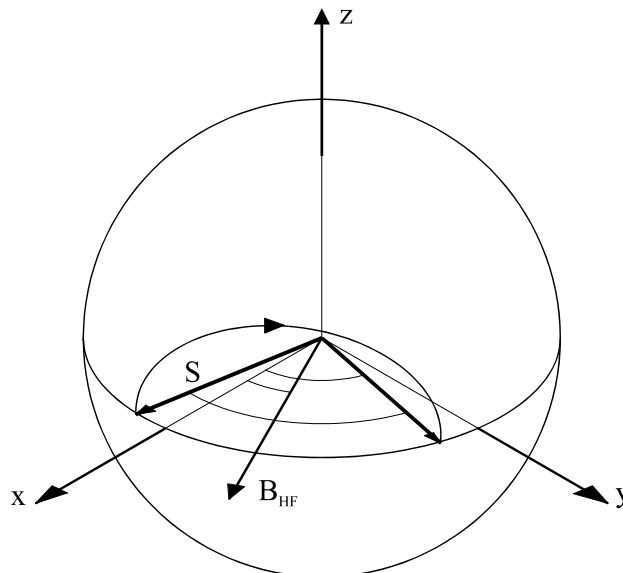


Abbildung 1.7: Der Spin  $S$  befindet sich zunächst in der  $x$ - $y$ -Ebene. Da wir die Situation im mit der Larmorfrequenz rotierenden Koordinatensystem betrachten, ruht der Spin ohne Anwesenheit eines HF-Feldes. Fügen wir das rotierende Feld  $B_{HF}$  hinzu, dessen Frequenz auf die Larmorfrequenz abgestimmt ist, so ruht dieses Feld im rotierenden Koordinatensystem und der Spin präzediert mit der Rabi-Frequenz um  $B_{HF}$ . Nach einer halben Drehung befindet er sich wieder in der  $x$ - $y$ -Ebene, und zwar „an  $B_{HF}$  gespiegelt“.



## 1.2 Das Resonanzspinecho-Prinzip

Wie im ersten Abschnitt diskutiert, präzediert der Spin  $S$  im konstanten Magnetfeld, das in  $z$ -Richtung steht, mit der Larmorfrequenz in der  $x$ - $y$ -Ebene. Ein mit derselben Frequenz rotierendes B-Feld  $B_{HF}$  erscheint aus der Sicht des selbst rotierenden Spins ruhend: der Spin präzediert um  $B_{HF}$ . Er verläßt die  $x$ - $y$ -Ebene und befindet sich erst nach einer halben Umdrehung wieder in ihr.

Oben wurde vorausgesetzt, daß die Resonanzbedingung erfüllt ist. Zusätzlich nehmen wir im folgenden an, daß die Rabifrequenz und die Durchflugzeit durch eine Resonanzflipspule gerade zu einer halben Umdrehung des Spins führen. Die Anfangs- und Endposition des Spins hängen demnach durch eine Achsenspiegelung am HF-Feld zusammen, wenn sich die Betrachtung auf die  $x$ - $y$ -Ebene beschränkt.

Je eine Flugstrecke setzt sich aus zwei Spulen mit einer Nullfeld-Flugstrecke im Zwischenraum zusammen. Die Größe des Winkels zwischen Spin und Hochfrequenz ist durch ihren Phasenunterschied zum Eintrittszeitpunkt des Neutrons in die jeweilige Resonanzflipspule bestimmt. Die Phasen des HF-Feldes in den beiden die Flugstrecke begrenzenden Spulen sind gekoppelt, d.h. ohne Einschränkung der Allgemeinheit identisch. Jedoch erreicht ein Neutron des Strahls die zweite Spule gerade um die Zeitdauer später, die es zum Durchqueren der feldfreien Region benötigt. Die Phase des HF-Feldes beim Eintrittszeitpunkt des Neutrons in die zweite Spule ist demnach proportional zur Flugzeit gewachsen.

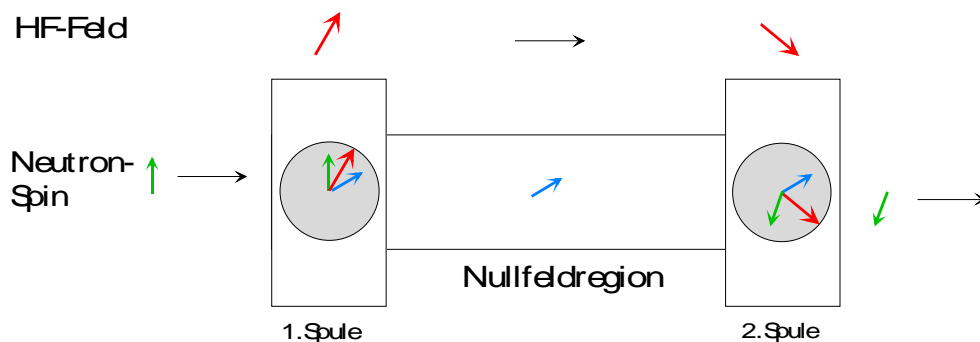


Abbildung 1.8: Die Pfeile in der Mitte kennzeichnen die Spinstellung, die oberen Pfeile die Phase des HF-Feldes. In den rechts und links als Rechtecke angedeuteten Spulen findet die Spiegelung des Neutronenspins an der Hochfrequenz statt.

Insgesamt ergibt sich eine Verkettung zweier Achsenspiegelungen. Der Winkel zwischen der ursprünglichen und der resultierenden Spinstellung  $\varphi_{Spin,1} - \varphi_{Spin,0}$ , d.h. zwischen Urbild und zweitem Spiegelbild, ist bekanntlich weder von der ursprünglichen Spinstellung, noch von der Lage der Spiegelachsen relativ zum Spin abhängig, sondern beträgt gerade das Doppelte des Winkels zwischen den Achsen.

$$(1.56) \quad \varphi_{Spin,1} - \varphi_{Spin,0} = 2 \cdot (\varphi_{HF,1} - \varphi_{HF,0})$$

Ersetzen wir die HF-Phasendifferenz durch das Produkt aus der Hochfrequenz (=Larmorfrequenz)  $\omega$  und Flugzeit  $t_{Flug}$ , so ergibt sich

$$(1.57) \quad \varphi_{Spin,1} - \varphi_{Spin,0} = 2 \cdot \omega \cdot t_{Flug} = 2 \cdot \gamma \cdot B_0 \cdot t_{Flug} \cdot$$

Schließlich ersetzen wir die Flugzeit  $t_{Flug} = L/v$  durch die Flugstrecke  $L$  und die Geschwindigkeit  $v$  der Neutronen. Hinzuzufügen ist noch die Phase, die im Laborsystem durch die Rotation des bewegten Koordinatensystems mit der Larmorfrequenz entsteht. Dies ist dadurch erledigt, daß zur Flugstrecke auch die Länge einer Resonanzflipspule hinzugerechnet wird. Damit ergibt sich der analoge Ausdruck zum konventionellen Spinecho aus (1.10)

$$(1.58) \quad \varphi_{Spin,1} - \varphi_{Spin,0} = 2 \cdot \gamma \cdot B_0 \cdot L / v \cdot$$

Wie bereits erwähnt, sind in der zweiten Flugstrecke die Felder entgegengesetzt gerichtet, so daß die Spinphase zuletzt wieder ihren ursprünglichen Wert annimmt.

## 1.3 Die Depolarisationseffekte

### 1.3 Die Depolarisationseffekte

Das Resonanzspinecho mit linear polarisiertem HF-Feld unterscheidet sich hinsichtlich der maximal erreichbaren Polarisation vom konventionellen Spinecho. Die „verkehrt“ rotierende Komponente bewirkt eine Depolarisation, auch bei einem monochromatischen Strahl.

Ein zweiter Depolarisationseffekt liegt in der Bedingung für einen Pi-Flip um die „richtige“ Hochfrequenzkomponente begründet. Da der Strahl niemals völlig monochromatisch ist, sondern in der Praxis eine relative Breite von bis zu zwanzig Prozent aufweist (FWHM=volle Halbwertsbreite), können nur die Neutronen mit mittlerer Geschwindigkeit die Pi-Flip-Bedingung erfüllen. Die Phase der schnelleren Neutronen erreicht diesen Wert nicht ganz, entsprechend führen die langsameren Neutronen die Rabioszillation „zu lange“ aus.

Hinzu kommt der Einfluß von inhomogenen Feldern auf die Polarisation. Falls das konstante  $B_0$ -Feld lokal oder das  $B_1$ -Feldintegral in Strahlrichtung vom mittleren Wert abweichen, sind für die Neutronen, deren Weg durch diesen Ort führt, die Resonanzbedingung bzw. Pi-Flipbedingung nicht erfüllt. Wie sich Inhomogenitäten dieser Art bemerkbar machen, behandelt Kapitel 3, dem in Kapitel 2 die Beschreibung der Spulenkonstruktionen vorangeht. An dieser Stelle gehen wir auf die systematischen Effekte ein.

#### 1.3.1 Der Effekt linear polarisierter HF-Felder

Die quantenmechanische Beschreibung der Rabioszillation mit linear polarisiertem HF-Feld in Abschnitt 1.2.4 zeigte, daß der zugehörige Zeitentwicklungsoperator dem entsprechenden Operator mit rotierender HF zwar ähnlich ist, jedoch einen für feste Felder konstanten Vorfaktor  $nut$  erhält (Näherung unter Einbezug der Nutation). Bei jedem Pi-Flip „verliert“ der Strahl ein wenig an Polarisation, da in den Erwartungswert das (Betrags-)Quadrat des Vorfaktors eingeht:

$$(1.59) \quad \langle P_x \rangle = (nut \cdot \hat{U}_{ges} \cdot \psi_0)^* \cdot \hat{s}_z \cdot nut \cdot \hat{U}_{ges} = |nut|^2 \cdot \hat{U}_{ges}^* \cdot \psi \cdot \hat{s}_z \cdot \hat{U}_{ges} .$$

Der Polarisations-Vorfaktor ergibt sich zu

$$(1.60) \quad nut = \left( \frac{\gamma \cdot B_0 + \omega}{\sqrt{(\gamma \cdot B_0 + \omega)^2 + (\gamma \cdot B_2)^2}} + 1 \right) \cdot \frac{1}{2}$$

[Sch95] mit dem konstanten Feld  $B_0$ , der „verkehrt“ rotierenden Hf-Komponente  $B_2$  und der HF-Frequenz  $\omega$ . In Resonanz gilt  $\gamma \cdot B_0 \approx \omega$ . Für kleine  $B_2$ -Werte läßt sich der Bruch nähern und wir erhalten

$$(1.61) \quad nut = \left( \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{(\gamma \cdot B_2)^2}{(2 \cdot \omega)^2}}} + 1 \right) \cdot \frac{1}{2} \approx 1 - \frac{(\gamma \cdot B_2)^2}{16 \cdot \omega^2} .$$

Entsprechend der Anzahl von Resonanzflipspulen sind für die maximal erreichbare Polarisation die doppelte Zahl von  $nut$ -Faktoren zu berücksichtigen, beim Bootstrap-Spinecho demnach 16.

#### 1.3.2 Die Pi-Flip-Bedingung

Während die Depolarisation durch die Nutation infolge der  $B_2$ -Komponente völlig unabhängig von der Neutronengeschwindigkeit ist, ist die Breite des Spektrums für den folgenden Effekt wesentlich. Da in der Praxis jedoch nie mit einem engen Geschwindigkeitsspektrum zu rechnen ist, - die Möglichkeit zu hoher Energieauflösung trotz relativ breitem Spektrum stellt gerade einen entscheidenden Vorteil der Spinechomethode dar - zählen wir diese Depolarisationsursache zu den systematischen Effekten.

Die Pi-Flip-Bedingung ist lediglich für eine bestimmte Neutronengeschwindigkeit, in der Praxis für die mittlere Geschwindigkeit zu erfüllen. Welchen Einfluß diese Tatsache auf die Polarisation ausübt, berechnen wir zunächst für eine Resonanzflipspule.

Mit der Zeitentwicklung (1.52) ergibt sich unter der Voraussetzung von Resonanz ( $\gamma \cdot B_0 - \omega \equiv 0$ ):

### 1.3 Die Depolarisationseffekte

$$(1.62) \quad \hat{U}_{ges}^{Resonanz} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\gamma B_1}{2} \cdot t\right) & -i \cdot \sin\left(\frac{\gamma B_1}{2} \cdot t\right) \cdot e^{i\varphi_1} \\ -i \cdot \sin\left(\frac{\gamma B_1}{2} \cdot t\right) \cdot e^{-i\varphi_1} & \cos\left(\frac{\gamma B_1}{2} \cdot t\right) \end{pmatrix}$$

und damit für den Erwartungswert der z-Polarisation

$$(1.63) \quad \langle \hat{s}_z \rangle = \left( \hat{U}_{ges}^{Resonanz} \cdot \psi_0 \right)^* \cdot \hat{s}_z \cdot \hat{U}_{ges}^{Resonanz} \cdot \psi_0$$

$$\langle \hat{s}_z \rangle = \cos^2\left(\frac{\gamma B_1}{2} \cdot t\right) - \sin^2\left(\frac{\gamma B_1}{2} \cdot t\right).$$

eines Neutrons, das sich ursprünglich im up-Zustand befand. Für dieses Neutron bedeutet ein Pi-Flip den Übergang in den down-Zustand. Dies zeigt sich im oben berechneten Erwartungswert als Polarisation -1 für den Fall, daß das Argument der Sinus- und der Cosinusfunktion zu  $\pi/2$  wird. Ein von diesem Wert abweichendes Argument für Neutronen mit Aufenthaltszeiten in der Spule  $t \neq \pi/2$  führt zu Depolarisation, d.h. der Betrag des Polarisationserwartungswertes wird kleiner als 1. Nach der Entwicklung des Erwartungswertes bis zur zweiten Ordnung und Integration über ein Neutronenspektrum der Breite  $\Delta\lambda$  erhalten wir

$$(1.64) \quad \left| \langle \hat{s}_z \rangle \right| = 1 - dep\lambda \quad \text{mit}$$

$$dep\lambda = \frac{2}{\Delta\lambda} \int_{-\Delta\lambda/2}^{\Delta\lambda/2} \left( \frac{\gamma B_1}{2} \cdot \frac{l}{\hbar / (\Delta\lambda \cdot m)} \right)^2 d(\Delta\lambda)$$

$$dep\lambda = \left( \frac{\gamma B_1 \cdot l \cdot m}{2\hbar / (\lambda \cdot m)} \right)^2 \cdot \frac{\left( \frac{\Delta\lambda}{\lambda} \right)^2}{12}$$

und der Spulenbreite  $l$ .

Ein Beispiel: Eine Wellenlängenverteilung von  $6\text{\AA} \pm 10\%$  (gleichverteilt) bewirkt eine Depolarisation von ca.  $0.8\%$ .

Obwohl sich die Betrachtung auf einen einlaufenden up-Zustand bezog, besitzt der berechnete Wert bis auf einen Faktor 2 allgemeine Gültigkeit auch für einen in x- oder y-Richtung polarisierten Strahl. Die Berechnung wird allerdings umfangreicher, da die quadratische Summe der Polarisationserwartungswerte in x- bzw. y-Richtung zu errechnen ist. Das Ergebnis der längeren Rechnung führt auf den Wert

$$(1.65) \quad \sqrt{\langle \hat{s}_x \rangle^2 + \langle \hat{s}_y \rangle^2} = 1 - \cos^2\left(\frac{\gamma B_1}{2} \cdot t\right) \cdot \sin^2\left(\frac{\gamma B_1}{2} \cdot t\right) \cdot (1 - \cos(2 \cdot \varphi_1)).$$

Der letzte Faktor mittelt sich zu Null, da die HF-Phase beim Eintritt der Neutronen gleich verteilt ist. Die Entwicklung der trigonometrischen Funktionen liefert das gewünschte Ergebnis.

Für einen Spinechoaufbau mit vier bzw. acht (Bootstrap) Flipspulen sind entsprechende Depolarisationsfaktoren von gleicher Anzahl zu berücksichtigen.

## 2 Der experimentelle Aufbau

Zu einem Neutronenexperiment zählen im weitesten Sinn sowohl der Reaktor als Neutronenquelle, als auch sämtliche Komponenten auf dem Weg des Neutronenstrahls vom Reaktor bis zum Detektor. Die Erzeugung des Neutronenstrahls soll hier lediglich im Zusammenhang mit der Auswahl eines geeigneten Spektrums in Betracht kommen. So widmet sich dieses Kapitel hauptsächlich den Komponenten unseres Spinecho-Experiments vom Geschwindigkeitsselektor über die Polarisationspräparation bis zur „Einkopplung“, d.h. das Überführen des Strahls ohne Polarisationsverlust in die Abschirmvorrichtung gegen äußere Magnetfelder aus Mumetall. Sodann folgen als Herzstücke die Resonanzflipspulen des ersten und zweiten Spektrometerarms, dazwischen die Streuregion und schließlich die Auskoppelung und die Detektion der interessierenden Spinkomponente.

Im Rahmen dieser Arbeit fanden zwei Strahlzeiten statt. Die erste Strahlzeit zielte in erster Linie auf die Erprobung der völlig neuen Konzepte zum Aufbau eines Multidetektorspektrometers an einem kalten Neutronenstrahl. Hierbei kommen zum einen das Design der Mumetallabschirmung, zum anderen die Anforderungen an die Flipspulen in Betracht.

Bei der zweiten Strahlzeit stand der erprobte und optimierte Aufbau mit vollständigem Multidetektorarray zur Verfügung, und es konnten mit zufriedenstellender Statistik Tests und Probenmessungen vorgenommen werden. Die Diskussion der Ergebnisse folgt in Kapitel 3 und 4.

### 2.1 Das gesamte Experiment im Überblick

Abbildung 2.1 bietet einen Überblick über die Erzeugung und den Transport der Neutronen bis zu den Experimenten am ILL in Grenoble. Der Neutronenstrahl der kalten Quelle entsteht durch Wechselwirkung mit deren Deuteriumbad, das eine Temperatur von 25 Kelvin besitzt. Im thermischen Gleichgewicht entsteht eine Verteilung der Neutronengeschwindigkeiten, die einer Maxwellverteilung sehr nahe kommt.

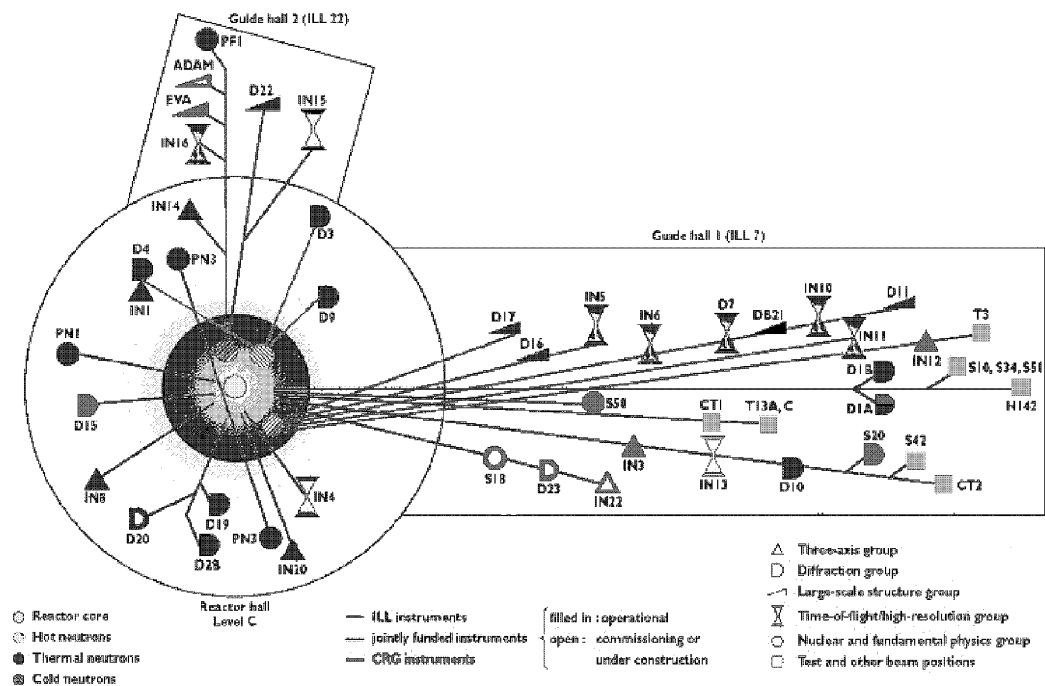


Abbildung 2.1: Links ist der Reaktor dargestellt. Von verschiedenen Quellen, darunter zwei kalte Quellen, führen Neutronenleiter den Strahl zu den Experimenten. Der Spinechoaufbau erfolgte an der Endposition des Leiters H142 am rechten Rand der Abbildung.

## 2.1 Das gesamte Experiment im Überblick

Vom Reaktor führen Neutronenleiter zu den Instrumenten. Sie verlaufen auf einer gekrümmten Bahn, so daß lediglich die Neutronen, die an der speziellen Beschichtung ( $^{58}\text{Nickel}$ ) reflektiert werden, zum Experiment gelangen. Der Gamma-Untergrund wird somit unterdrückt.

In Abbildung 2.1 finden sich sämtliche Komponenten des experimentellen Aufbaus. Während der Geschwindigkeitsselektor [Sch91] vom vorhergehenden Aufbau übernommen werden konnte ebenso wie die Polarisatoren, stellen alle anderen Komponenten Neukonstruktionen dar.

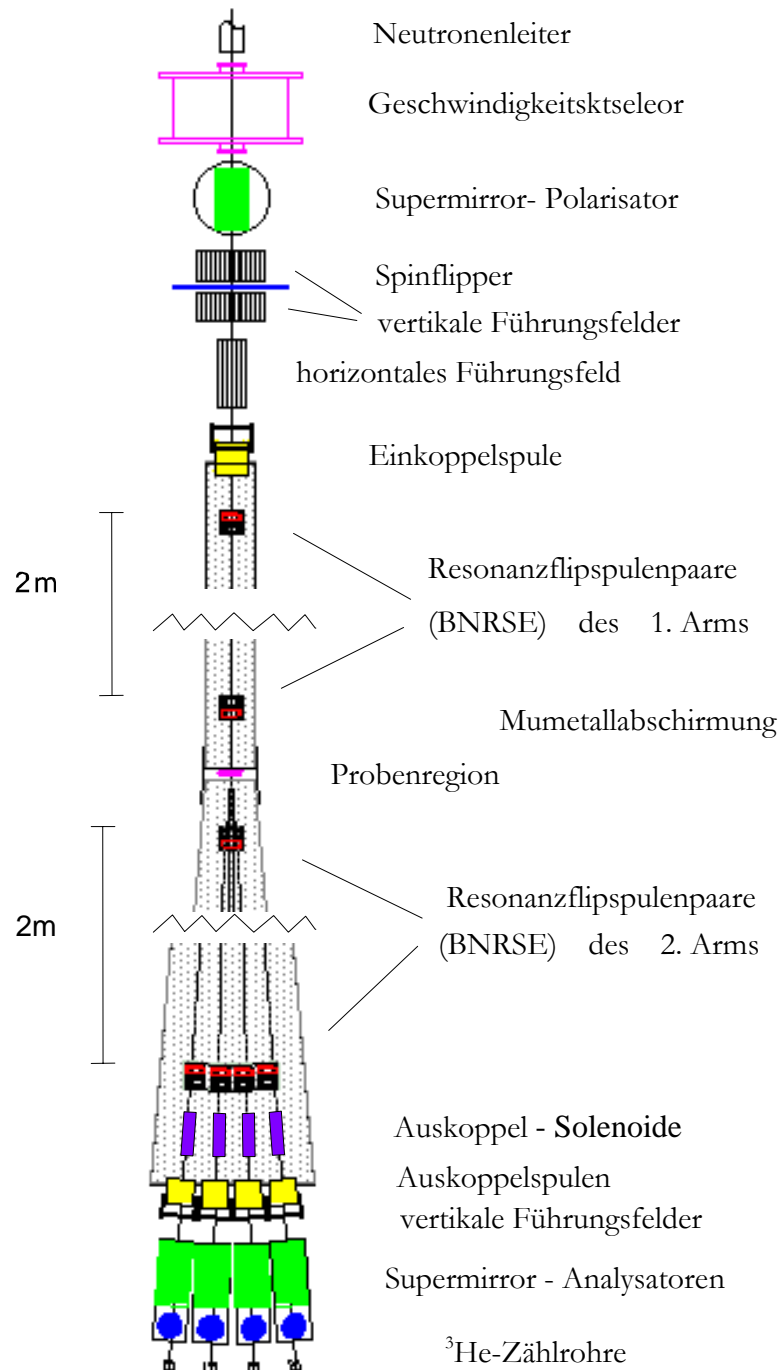


Abbildung 2.2: Der gesamte Aufbau des Experiments. Die Neutronen erreichen das Experiment durch den Neutronenleiter (oben), der die Neutronen vom Reaktor zum Experiment führt. Anschließend passieren die Neutronen die Komponenten des Experiments und werden an den Detektoren (Zählrohre unten) registriert

## 2.2 Der Geschwindigkeitsselektor

Da die Energie- (bzw. Zeit-) Auflösung des Spektrometers gegenüber den Vorgängern gesteigert werden sollte, wurde die Distanz zwischen den Spulenpositionen eines Armes verdoppelt, sie beträgt nun  $2m$ . Die zylinderförmige Mu-Metallabschirmung (für  $Mu$ - oder  $\mu$ -Metall siehe Abschn. 2.5.1) des ersten Armes besitzt die entsprechende Länge, einschließlich der Abschirmung von Ein- und Austrittsregion an den beiden Enden.

Die konische Mumetallabschirmung des zweiten Spektrometerarmes erfüllt eine wesentliche Forderung an die Neukonstruktion des Experiments: Da die Präzession fast jeglicher Streuexperimente mit Neutronen im wesentlichen durch die statistischen Fehler begrenzt ist, bedeutet die Realisierung eines Multidetektoraufbaus eine Vervielfachung der Meßgenauigkeit bzw. alternativ eine bedeutende Reduzierung der Meßzeit bei vorgegebenem statistischen Fehler. Die hierfür benötigte konische Abschirmung stellt unseres Wissens die derzeit einzige ihrer Art dar. Gemäß den Ergebnissen von numerischen Simulationen der Abschirmungswirkung erhielten die Ein- und Austrittsregion größere Dimensionen im Vergleich zum Zylinder.

Soll mit einem Spinecho-Spektrometer nicht nur ein Streuwinkel detektierbar sein, so sind Spulen erforderlich, die einen Winkelbereich mit gewisser Breite zulassen. Beim Resonanzspinecho konzentriert sich die dadurch entstehende Forderung auf die Flipspulen, die ausgedehnte homogene Felder liefern müssen. Die Entwicklung der geeigneten Spulen und die Ergebnisse stellt einen großen Teil des Kapitels dar.

Die neu konstruierten Resonanzflipspulen hatten zudem der Anforderung Genüge zu leisten, sich auch für geringe Neutronenwellenlängen zu eignen. Denn da die Auflösung des Spektrometers mit der Spinechozeit und damit mit der dritten Potenz der Wellenlänge zunimmt, bringt die Verwendung von sogenannten kalten Neutronen mit ca.  $5\text{\AA} - 10\text{\AA}$  gegenüber thermischen Neutronen (ca.  $1\text{\AA} - 4\text{\AA}$ , Energie  $10\text{meV} - 100\text{meV}$ ) eine bedeutende Vergrößerung der Spinechozeit. Aus diesem Grund mußten durch genaue Berechnung der Magnetfelder und durch sorgfältige Fertigung alle Störfelder minimiert werden, damit sie sich auch dann nicht depolarisierend auswirken, wenn sich die Neutronen relativ lange in ihrem Bereich aufhalten.

Aus denselben Gründen wurden die Außenfelder der Ein- und Auskoppelspulen minimiert. Insbesondere die Anordnung dieser Spulen nebeneinander am Ende der konischen Abschirmung erforderte hier ein neues Konzept.

Schließlich folgt eine kurze Beschreibung des Prinzips der Signaldetektion und Verarbeitung. Für die Strahlzeit im April und Mai 1996 verzichteten wir noch auf eine simultane Detektion und konnten die Komponenten des Vorgängers übernehmen.

## 2.2 Der Geschwindigkeitsselektor

Die Geschwindigkeitsverteilung der Neutronen am Ende des Leiters stimmt näherungsweise mit einer Maxwellverteilung überein. In Spinechoexperimenten ist eine gaußähnliche Verteilung mit einer Breite von ca. 20% erwünscht (F(ull) W(idth) at H(alf) M(aximum), d.h. die volle Breite der Wahrscheinlichkeitsverteilung an der Stelle, wo sie auf den halben Wert abgenommen hat). Die Divergenz des Strahls ist durch den Neutronenleiter bestimmt, da langsame Neutronen größere kritische Winkel bei der Reflexion an den mit Nickel-58 beschichteten Wänden besitzen.

Es existieren prinzipiell zwei verschiedene Möglichkeiten, aus dem Maxwellspektrum das gewünschte Spektrum „herauszuschneiden“. Die eine, erst in den letzten Jahren entwickelte Methode bedient sich Super-Spiegeln aus vielen Lagen zweier verschiedener Elemente mit unterschiedlichem Brechungsindex für Neutronen. Der Spiegel fungiert als Quasikristall und liefert Braggreflexe. Durch Variation der Schichtdicken wird das Wellenlängenspektrum der Reflexe verbreitert, so daß das gewünschte Wellenlängenband reflektiert wird. Der Nachteil dieser Methode besteht darin, daß sich bei einer Änderung der mittleren Wellenlänge zwangsläufig der Reflexionswinkel ändert und das gesamte Experiment im Raum verschoben werden müßte.

Die zweite, bewährte Methode stützt sich auf mechanische Selektion eines Geschwindigkeitsbandes. Geeignete, zu einer Helix geformte rotierende Wände beschränken die Transmission durch den Selektor auf einen bestimmten Geschwindigkeitsbereich. Ähnlich einer drehenden Schraube „frißt“ sich eine rotierende helixförmige Wand durch den Neutronenstrahl, allerdings mit dem Unterschied, daß zu langsame bzw. zu schnelle Neutronen nicht beschleunigt bzw. verzögert, sondern in der Wand der Selektorscheibe absorbiert werden.

Ein mechanischer Geschwindigkeitsselektor wurde im Rahmen einer früheren Arbeit konstruiert [Sch91] und bei den Experimenten verwendet. In Abhängigkeit von der Rotationsgeschwindigkeit und der Verkipfung der Rotationsachse zur Strahlrichtung liefert der Selektor ein gaußähnliches Spektrum im Bereich von ca.  $2\text{\AA} - 10\text{\AA}$  und bis zu einer relativen Breite von 24%. Für die Spinecho-Experimente wurden Wellenlängen von ca.  $5\text{\AA} - 8\text{\AA}$  mit  $\Delta\lambda / \lambda$  von ca. 17% - 20% verwendet.

## 2.3 Die Spinpräparation

### 2.3 Die Spinpräparation

Für das Spinechoexperiment ist ein möglichst vollständig polarisierter Strahl erforderlich. Sowohl hierzu als auch zur Feststellung der verbliebenen Polarisation am Ort des Detektors lassen sich Supermirror-Polarisatoren verwenden. Diese reflektieren lediglich eine Spinkomponente und absorbieren die andere. Hierdurch wird die Strahlintensität im Idealfall etwa halbiert und eine vollständige Polarisation erreicht.

Typische Supermirror-Polarisatoren bestehen aus ca. 50-70 Doppellagen von Kobalt und Titan. Ein starkes Magnetfeld in z-Richtung führt zunächst zu einer Aufspaltung in die up- und down-Komponente. Da die Streuung von Neutronen sowohl *elementspezifisch*, als auch bei einem Ferromagneten wie Kobalt *spinabhängig* erfolgt, kann eine geeignete Wahl von zwei Schichtmaterialien darauf zielen, daß ihre Streulängen zwar für die eine Spinkomponente unterschiedlich, jedoch für die andere identisch sind. Für diese Spinkomponente stellen die Schichten ein homogenes Medium dar. Die betreffenden Neutronen durchdringen die Schichten ohne Ablenkung, bis sie in einer geeigneten Beschichtung auf dem Trägermaterial absorbiert werden. Die andere Spinkomponente erfährt in dem Quasikristall Braggreflexionen und verläßt den Polarisator im Idealfall ungeschwächt. Die Variation der Schichtdicke  $d$  sorgt dafür, daß alle Neutronenwellenlängen der Strahlverteilung Schichten finden, für welche die entsprechende Braggbedingung  $n \cdot \lambda \equiv 2 \cdot d \cdot \sin \varphi$  erfüllt ist.

Im weiteren Strahlverlauf führen Magnetfelder aus Permanentmagneten mit einer Feldstärke von ca.  $1mT$  den Spin. Das semiklassische Bild: Die Spinrichtung bleibt (anti-)parallel zur Magnetfeldrichtung in diesen „Führungsfeldern“, falls das Feld nicht zu schnell seine Richtung ändert. Diese Bedingung ist erfüllt, wenn im Ruhesystem des Neutrons die Larmorfrequenz erheblich größer als die Drehgeschwindigkeit des Feldes ist.

Quantenmechanisch entspricht die langsame Drehung einer leichten Zeitabhängigkeit des Hamiltonian. Für den Fall einer Drehung des Führungsfeldes  $B_F$  aus der x- in die y-Richtung ergibt sich

$$(2.1) \quad \hat{H} = \frac{P^2}{2m} + \frac{\hbar \cdot \gamma B_F}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} & 0 \end{pmatrix}.$$

Die Transformation in ein mit  $\omega$  rotierendes Koordinatensystem ergibt

$$(2.2) \quad \hat{H}_\omega = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -\omega & \gamma B_F \\ \gamma B_F & \omega \end{pmatrix}.$$

Im rotierenden Eigensystem der B-Feldrichtung taucht demnach senkrecht zum Führungsfeld ein virtuelles Feld auf, das um das Verhältnis zwischen Drehgeschwindigkeit des Feldes  $\omega$  zu Larmorfrequenz  $\omega_L = \gamma B_F$  geringer ist. Die Vernachlässigung dieses Feldes liefert für einen ursprünglichen Spinor aus Eigenfunktionen in x-Richtung die obige Behauptung, nämlich daß der Erwartungswert der Felddrehung „folgt“.

$$(2.3) \quad \psi(t) = e^{\frac{i(-\omega \ 0)}{2}t} \cdot e^{\frac{i(0 \ \gamma B_F)}{2}t} \cdot \psi_0 = \begin{pmatrix} 0 & e^{\frac{i(-\omega + \gamma B_F)t}{2}} \\ e^{\frac{i(\omega + \gamma B_F)t}{2}} & 0 \end{pmatrix} \cdot \psi_0$$

$$\begin{pmatrix} \langle P_x \rangle \\ \langle P_y \rangle \\ \langle P_z \rangle \end{pmatrix} = (\psi_x(t))^* \begin{pmatrix} \hat{s}_x \\ \hat{s}_y \\ \hat{s}_z \end{pmatrix} \psi_x(t) = \begin{pmatrix} \cos(\omega t) \\ \sin(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix}$$

Auf analoge Weise führt ein mit  $\omega$  „schnell“ rotierendes Feld durch Vernachlässigung von  $\omega_L = \gamma B_F$  (im rotierenden Koordinatensystem) zu einem räumlichen „Stehenbleiben“ des Spins ( $\psi(t) = \psi_0$ ), d.h. zu einem nicht-adiabatischen Übergang.

Im folgenden verzichten wir auf die quantenmechanische Betrachtung und wählen das anschauliche semiklassische Bild, insofern qualitative Aussagen genügen.

Bei entsprechender Einstellung, z.B. ohne Streuprobe bei entgegengesetzten, ansonsten identischen Feldern in den beiden Armen, verläßt der Neutronenstrahl das Spektrometer im ursprünglichen Zustand (up). Einen zweiten Polarisator wird ein solcher Strahl ohne Abschwächung passieren. Falls andererseits sämtliche Neutronenspins den zweiten Polarisator nach einem Flip im anderen Spinzustand (down) erreichen, so werden sie absorbiert und die

## 2.3 Die Spinpräparation

Zählrate sinkt auf Null. Eine Drehung des zweiten Polarisators würde zur ursprünglichen Zählrate führen. Auf diese Weise könnte der Anteil beider Spinkomponenten festgestellt werden.

Anstelle der Drehung des „Analysators“ (=zweiter Polarisator) existiert die viel einfachere Möglichkeit, den Neutronenspin bereits vor dem Experiment hinter dem ersten Polarisator zu flippen. Dabei tauschen up und down die Rollen. Bei gleicher Einstellung des Aufbaus wie im obigen Beispiel liegt dadurch am zweiten Polarisator ein up-Zustand vor, der ohne Drehung des Polarisators zur ursprünglichen Zählrate führt. Die down-Komponente läßt sich durch Verwendung eines „Spinflippers“ demnach auf einfache Weise vermessen.

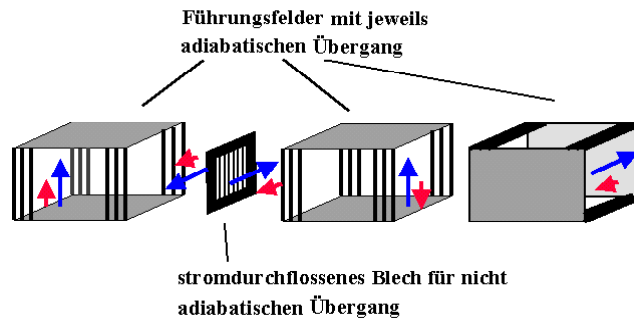


Abbildung 2.3: In den Führungsfeldern und bis zur Wand des Spinflippers folgt der Spin (kleiner Pfeil) adiabatisch der Feldrichtung (großer Pfeil). An der stromdurchflossenen Wand des Spinflippers findet ein nichtadiabatischer Spin-Übergang statt: Die Spinrichtung relativ zum Feld ändert sich. Die adiabatische Drehung des Spins zwischen Führungsfeldern und Flipperfeld bei aktiviertem Flipper führt zur räumlichen Spindrehung. Das Führungsfeld rechts bestimmt die Spinrichtung beim Eintritt in die Magnetfeldabschirmung.

Der Spinflipper besteht aus einer 1mm-dünnen stromdurchflossenen Aluminiumfläche („current sheet“). Das Magnetfeld des elektrischen Stromes verläuft in geschlossenen Feldlinien um den Leiter und ist demnach auf den gegenüberliegenden Seiten entgegengesetzt gerichtet. Für den Neutronenspin, der vor dem current sheet z.B. parallel zum Magnetfeld steht, findet bei entsprechender Fluggeschwindigkeit ein plötzlicher Wechsel der Feldrichtung statt. In diesem Fall bleibt der Spin räumlich in der ursprünglichen Richtung stehen und ist nun antiparallel zum Magnetfeld gerichtet. Nach diesem „nicht-adiabatischen“ oder „diabatischen“ Spinflip führt eine Rückdrehung des Feldes in die ursprüngliche Richtung zu der gewünschten Spinrichtung.

Das letzte Führungsfeld legt die Richtung des Spins vor dem Übergang in die Mumetallabschirmung fest. In unserem Aufbau wählten wir für Spinechoexperimente die horizontale Richtung transversal zur Flugrichtung der Neutronen (im weiteren als x-Richtung bezeichnet). Die Gründe dieser Wahl bestehen darin, daß sich bei dem Streuprozeß zwar die Flugrichtung der Neutronen ändert, jedoch nicht die Spinrichtung, falls wir von Spinflipstreuung absehen. An dem Beispiel einer Richtungsänderung um 90 Grad sind die Konsequenzen einfach einzusehen: Ein zuvor transversal zur Strahlrichtung befindlicher Spin ist nun longitudinal gerichtet. Um wieder maximale Polarisation zu erhalten, muß er um den gleichen Winkel gedreht werden.

Falls der Spin in z-Richtung eingekoppelt wird und sich wie z.B. bei konventionellen Spinechos in einem Longitudinalfeld bewegte, so ist nach einer 90-Grad-Streuung immerhin noch eine Polarisation von 50% meßbar, obwohl sich die Spins in die x-z-Ebene verteilt haben und anschließend im zweiten Arm der Apparatur senkrecht dazu verdreht werden. Die Ursache und Berechnung für beliebige Winkel findet sich in Anhang C. Wir merken dies hier an, da es mit der erstaunlichen Tatsache verbunden ist, daß im erwähnten Beispiel einer 90-Grad-Streuung nicht nur bei der gewöhnlichen Anordnung mit entgegengesetztem Magnetfeld ein Spinecho vorliegt, sondern auch mit der ungewöhnlichen Einstellung von gleichgerichteten Feldern. Der direkte Strahl wird dadurch völlig depolarisiert, während im gestreuten Strahl noch Polarisation vorhanden ist! Um allerdings das Polarisationsmaximum einzustellen, ist eine gesonderte Streuwinkel-Korrekturspule erforderlich, die mit der Fortbewegungsrichtung auch die Ebene dreht, in der sich die Spins (gleichverteilt) befinden, im erwähnten Beispiel ist das die senkrecht-transversale x-z-Ebene.

Bei unserer Apparatur, in die der Spin in x-Richtung eingekoppelt wird und die konstanten Magnetfelder in der senkrechten z-Richtung stehen, ist die Bewerkstellung des Nachdrehens einfach: es erfordert keine andere als die Spinrotationsspule, mit der sich das Polarisations-Maximum jederzeit ermitteln läßt.



### 2.4 Die Ein- und Auskoppelpulen

Von besonderer Wichtigkeit ist der Übergang zwischen dem starken Führungsfeld außerhalb der Mumetallabschirmung und der „Nullfeld“-Region innerhalb der Abschirmung. Die Resonanzspinechomethode bedarf einer Nullfeldregion zumindest in den Flugstrecken zwischen den Resonanzflipsulen. Da das Feld in den Flipsulen jedoch ebenfalls frei von allen äußeren Störfeldeinflüssen sein soll, um die Feldhomogenität nicht zu beeinträchtigen, ragt das Abschirmungsrohr ca. 20cm über die Spulen hinaus (siehe Abbildung 2.2). Die Aufgabe der Einkoppelpulen ist es, die Spinnstellung in dieser Region zu kontrollieren und stabil zu halten.

Im Nahbereich außerhalb der Rohrenden können starke Führungsfelder aus Permanentmagneten die Abschirmwirkung beeinträchtigen, insofern das Mumetall teilweise in Sättigung geht und dadurch seine Wirkung verliert. Aus diesem Grund muß das Führungsfeld in der Nähe der Abschirmung elektromagnetisch erzeugt werden.

Darüber hinaus ist die Abschirmwirkung im Inneren der Röhre im Bereich der Enden begrenzt. Insbesondere existieren auf einer Distanz von 5-10 cm noch störende Felder in axialer Richtung. Da es nicht möglich ist, in diesem Bereich ein ideales Nullfeld zu erzeugen, ohne einen unverhältnismäßigen Aufwand zu betreiben, sorgen hier umgekehrt Einkoppelpulen für die Existenz eines Führungsfeldes, das wesentlich stärker ist als die Störfelder. Um die Problematik mit Störfeldern nicht nur räumlich zu verlagern, stellt sich an die Einkoppelpulen die Anforderung, das Nullfeld nicht zu beeinträchtigen. Die technische Realisierung wird dieser Tatsache gerecht, indem die Spulen mit einer Feldrückführung aus Mumetall konstruiert wurden, die das Außenfeld der Spule minimiert.

Die numerische Berechnung des Magnetfeldes im Inneren der Mumetallabschirmung zeigte das gewünschte Verhalten für die im Rahmen einer Diplomarbeit zunächst gefertigten kastenförmigen Spulen [Bü97]. Diese vollständig - bis auf die Flächen in Strahlrichtung - mit einem Mumetallmantel umgebenen Spulen erbrachten im Inneren analog einer „unendlich langen“ Spule ein homogenes Magnetfeld in der Polarisationsrichtung (x) und um mehrere Größenordnungen geringere Magnetfelder im Außenraum der Einkoppelpule.

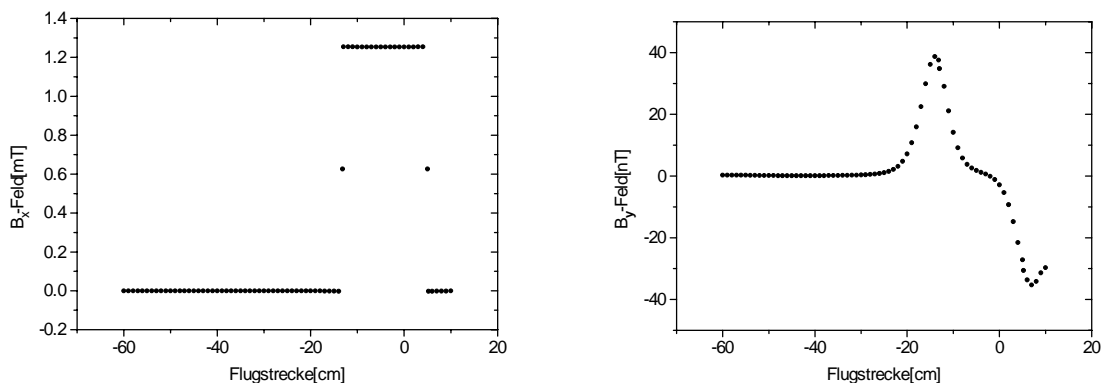


Abbildung 2.4: Das Feld der kastenförmigen Einkoppelpule. Auf der horizontalen Achse in Flugrichtung befindet sich die Einkoppelpule zwischen -12cm und +4cm; das Mumetall beginnt bei 0cm; links die x-, rechts die y-Komponente. Die simulierte Stromdichte entspricht einem Strom von 1A in einer einlagigen Wicklung mit Drahtdurchmesser 1mm. Da das Feld im Mumetall zurückgeführt wird, zeigt es ein Verhalten wie in einer langen Spule: in x-Richtung im Inneren der Spule homogen. Das im rechten Plot gezeigte Feld in nT-Größe stellt Störfelder außerhalb der Mittelachse (=Strahlachse) dar.

Auf der Mittelachse der Spule, auf der bei optimaler Justage die Neutronenstrahlmitte verläuft, gibt es aus Symmetriegründen keine Außenfelder in der y- und z-Richtung. Anders in Entfernung von der Strahlmitte: Schlitze in der Drahtwicklung und unvollständige Feldrückführung führen zu Außenfeldern im nT-Bereich. Im schlimmsten Fall stehen sie senkrecht zum Neutronenspin und führen zu Larmorpräzession. Um die Eignung der Einkoppelpule zu erweisen, erfolgte unter dieser Annahme die Berechnung der Spindrehung. Sie ergab eine maximale Störphase von 0.025 rad, gleichbedeutend mit einer maximalen Depolarisation von unter einem Promille. Dies bedeutet einen problemlosen Übergang vom Einkoppelfeld ins Nullfeld.

Im Verlauf der experimentellen Erprobung stellte sich allerdings heraus, daß der Übergangsbereich zwischen den permanentmagnetischen Führungsfeldern und der Kastenspule mit Mumetallmantel eine starke Feldkomponente in

## 2.4 Die Ein- und Auskoppelpulen

Strahlrichtung, d.h. senkrecht zur Polarisationsrichtung aufwies. Diese Komponente ließ sich durch eine räumliche Distanzierung von Führungsfeld und Einkoppelpule reduzieren. Jedoch im Bereich der Auskoppelung aus dem Mumetall, die nach identischem Prinzip mit Kastenspule und folgendem permanentmagnetischen Führungsfeld erfolgt, erreichte die Störkomponente ein Mehrfaches der Stärke des Führungsfeldes. Diesem Verhalten liegt die Tatsache zugrunde, daß im Auskoppelbereich mehrere, bis zu vier identische Auskoppelpulen und ein entsprechend räumlich ausgedehntes Führungsfeld vorliegen, die unter verschiedenen Winkeln die Flugstrecken zum Multidetektor abdecken (s. Abbildung (2.2)). Die zugehörigen Feldlinien werden von der Mumetallabschirmung der Kastenspule angezogen und verlaufen zum Teil vom Führungsfeld zum Mumetall der Kastenspule und zurück.

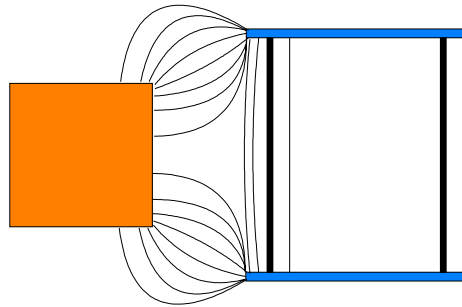


Abbildung 2.5: Der Feldlinienverlauf (schematisch) zwischen einer Ein- bzw. Auskoppelpule (links) und einem Führungsfeld (rechts). An der Eintrittsfläche in die Spule findet ein nichtadiabatischer Übergang statt. Durch Larmorpräzession in der Spule sinkt die Polarisation des Strahls.

Die horizontale Störkomponente bewirkt zunächst lediglich ein adiabatisches Mitdrehen des Spins in die Strahlrichtung. An der Stromwand der kastenförmigen Ein- und Auskoppelpulen findet dann jedoch ein nichtadiabatischer Übergang in das transversale Innenfeld (x-Richtung) statt. Die Folge dieses Geschehens besteht in einer weitgehenden Depolarisation durch Larmorpräzession im Ein- bzw. Auskoppelpulenfeld.

Zur Lösung dieses Problems wurde eine Neukonstruktion sogenannter „Maulspulen“ gewählt. Diejenige Hälfte der Spulen, die sich im Mumetall befindet, blieb unverändert. Auf der den Führungsfeldern zugewandten Seite fiel zum einen der Mumetallmantel ganz weg. Zum anderen erhielt diese Seite ein Maul: Jede Drahtwindung der Spulenlängsseite, d.h. in Strahlrichtung, verläuft nun in einem Knick. Alle Windungen in der oberen Hälfte knicken nach oben, analog die restlichen nach unten ab.

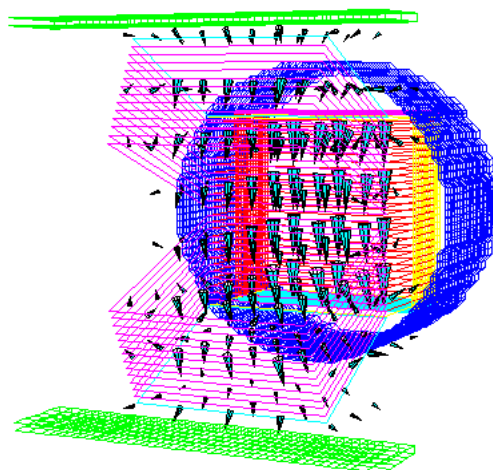


Abbildung 2.6: Die Maulspulen zur Ein- und Auskopplung des Spins aus der Mumetallabschirmung. Links ist der vordere, maulförmige Teil der Wicklung zu erkennen. Im Hintergrund ist der Beginn der Abschirmung angedeutet (rund). Die Pfeile kennzeichnen das numerisch berechnete Magnetfeld der Spule.

Durch diese Konstruktion ließ sich zum einen die Störkomponente stark reduzieren, da die Entfernung zwischen Führungsfeld und Mumetall anwuchs. Zum anderen existiert keine Stromwand mehr zwischen Führungsfeld und

## 2.4 Die Ein- und Auskoppelpulen

Einkoppelpule. Auch wenn es zu einer adiabatischen Spindrehung durch restliche Magnetfeldkomponenten in Strahlrichtung kommen sollte, so findet in der Spule ebenso adiabatisch eine Rückdrehung in die gewünschte Richtung statt. Aus diesem Grund können auch die Außenfelder der beiden „Mäuler“ die Funktion nicht beeinträchtigen: Direkt unter den Wicklungen existiert zwar unvermeidlich eine Feldkomponente in Flugrichtung (s. Abbildung 2.6), die jedoch im Bereich des Neutronenstrahls um eine Größenordnung geringer ist als das dadurch nur geringfügig veränderte Feld in x-Richtung.

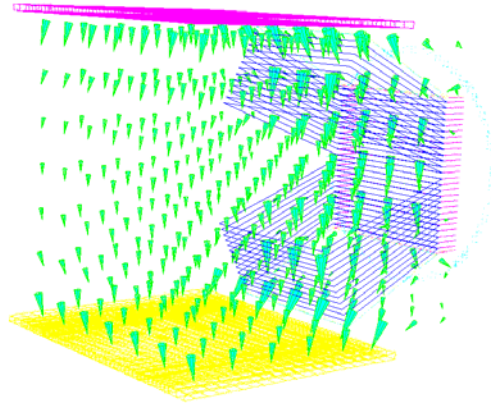


Abbildung 2.7: Das Führungsfeld und der Zwischenbereich zur Maulspule. Die Pfeile kennzeichnen das numerisch berechnete Gesamtfeld aus Führungsfeld und Spule. Im Bereich des Neutronenstrahls existiert ein ausreichend homogenes Feld.

An der gegenüberliegenden Stromwand beim Eintritt ins Nullfeld steht das dank der Mumetallabschirmung homogene Magnetfeld vollständig in dieser Richtung und koppelt den Spin ohne Polarisationsverlust in das Nullfeld ein. Abbildung 2.7 zeigt qualitativ den Feldverlauf der Einkoppelpule im Äußeren der Mumetallabschirmung, in Abbildung 2.8 ist der Abfall des Feldes im Inneren der Abschirmung quantitativ dargestellt.

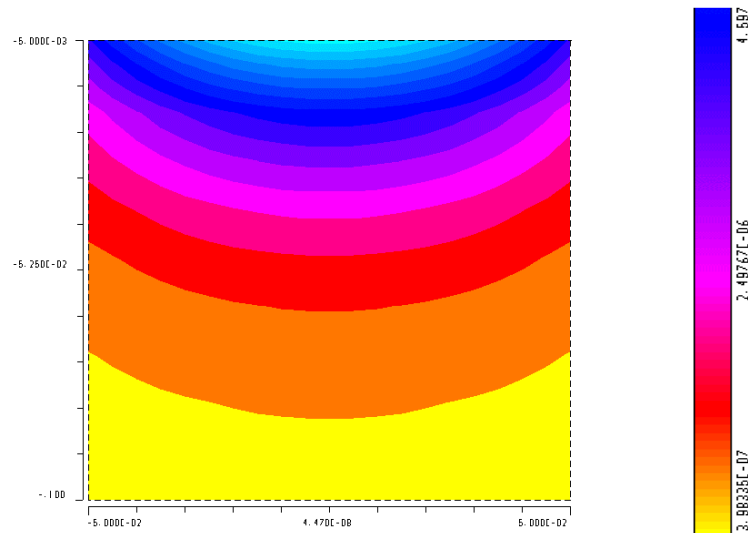


Abbildung 2.8: Konturplot des Feldverlaufs im Inneren des Mumetalls außerhalb der Spule. Das Feld liegt im Bereich zwischen  $4.6 \mu\text{T}$  und  $0.4 \mu\text{T}$ . Das Feldintegral außerhalb der Spule beträgt insgesamt weniger als  $0.1 \text{ mT} \cdot \text{mm}$ . Dies entspricht bei Neutronengeschwindigkeiten von  $500 \text{ m/s}$  einem maximalen Drehwinkel des Spins von weniger als 2 Grad.

Die Auskoppel-Maulspulen lassen sich aufgrund der größeren Breite des Mauls nicht derart nebeneinander anordnen, daß das Innenfeld in horizontaler x-Richtung verläuft, sondern nur auf solche Weise, daß sie ein Feld in z-Richtung besitzen. Zwischen den Resonanzflipspulen, die den zweiten Spektrometerarm abschließen, und den Auskoppelpulen muß somit eine 90-Grad Drehung des Spins erfolgen, da die Spins die Flipspulen in der x-y-Ebene polarisiert verlassen. Zu diesem Zweck befinden sich zwischen jeder dieser Resonanzflipspulen und den entsprechenden Auskoppelpulen neu konstruierte Solenoide, die den Spin in die gewünschte Richtung präzedieren lassen. Die Solenoide bestehen aus einem zylinderförmigen Kunststoffkörper, auf dem sich je 50 Wicklungen eines

## 2.5 Die Mu-Metallabschirmung

1-mm-dicken Drahtes befinden. Das Feld des Solenoids ist parallel zu der Flugrichtung der Neutronen und damit transversal zu der ursprünglich präparierten Polarisation gerichtet. Diese passieren die Spule in der Mittelachse, wobei sich ihr Spin während der Durchflugszeit aus der x-y-Ebene in die y-z-Richtung dreht.

Anschließend bleibt die z-Komponente auf dem Weg durch die Auskoppelspulen und die nachfolgenden Führungsfelder mit gleichgerichtetem Feld konstant. Anhand des Polarisators, der die up-Komponente bezüglich der z-Richtung transmittiert und der abschließenden Detektoren findet zuletzt die Polarisationsanalyse statt.

### 2.5 Die Mu-Metallabschirmung

#### 2.5.1 Die zylinderförmige Abschirmung

Das bereits mehrfach erwähnte Mu-Metall besteht aus einer Legierung aus Eisen und Nickel, die sich - wie durch den Namen suggeriert - durch eine sehr hohe magnetische Permeabilität von ca.  $\mu_{\text{Permeab.}} = 10^4$  auszeichnet. Die Abschirmwirkung besteht anschaulich darin, daß der magnetische Fluß bzw. die Feldlinien aller Felder in der Nähe von Mumetall in dasselbe „hineingezogen“ wird.

Für magnetostatische Probleme folgt aus den Maxwellgleichungen die Laplacegleichung (homogene Poissongleichung)  $\Delta \vec{A} \equiv 0$  für die Komponenten eines geeigneten Vektorpotentials  $\vec{A}$  (bei entsprechender Eichung), die sich unter bestimmten Bedingungen analytisch lösen läßt.

Noch einfacher ist der Fall ohne elektrische Ströme als Quelle eines magnetischen Feldes. Dann läßt sich das Magnetfeld  $\vec{H}$  als Gradient eines Skalarpotentials  $F$  darstellen, da seine Rotation verschwindet. Aus der Nichtexistenz magnetischer Feldquellen  $\text{div} \vec{B} = \text{div}(\mu \cdot \vec{H}) \equiv 0$  folgt unmittelbar die aus der Elektrostatik bekannte Laplacegleichung  $\Delta F \equiv 0$ . Damit zeigt sich die Analogie zur Elektrostatik, aber auch z.B. zu hydrodynamischen Strömungsfeldern, deren Feldlinien (=Weg eines strömenden Teilchens) sich in die Potentialtäler drängen.

Die Möglichkeit zur Lösung der Laplacegleichung hängt von den Randbedingungen des Problems ab. Für zylinderförmige Röhren läßt sich das Magnetfeld im Inneren und damit die Abschirmwirkung analytisch berechnen [Mag67], [Mol96]. Die Lösung der Poissongleichung

$$(2.4) \quad \Delta F = \frac{\partial^2}{\partial r^2} F + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} F + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} F + \frac{\partial^2}{\partial z^2} F \equiv 0$$

erfolgt durch einen Separationsansatz. Für das Potential ergibt sich dadurch das Produkt aus einer Exponentialfunktion in z-Richtung, deren Exponent aus Normierungsgründen negativ reell gewählt wird, einer trigonometrischen Funktion in  $\varphi$ -Richtung und einer Bessel-Zylinderfunktion in radialer Richtung (deren Art hängt von der Kreisfrequenz der trigonometrischen Funktion ab). In unserem Problem werden aus Symmetriegründen im allgemeinen keine Magnetfelder in  $\varphi$ -Richtung auftreten. Für die Magnetfeldkomponenten in radialer und axialer Richtung folgt somit das Produkt aus einer Besselfunktion der ersten bzw. nullten Art und einem exponentiellen Abfall in axialer Richtung.

$$(2.5) \quad H_z \propto J_0(kr) \cdot e^{-kz}$$

$$H_r \propto J_1(kr) \cdot e^{-kz}$$

Die Berechnung der Konstanten für den Abfall des Feldes in axialer Richtung, die uns in erster Linie interessiert, erfordert eine Näherung der Permeabilität. Indem diese im Mumetall als unendlich groß angenommen wird, verschwindet dort die Feldstärke  $H_z = B_z / \mu$ , die Feldlinien treffen senkrecht auf das Mumetall. Aus dieser Bedingung an die entsprechende Feldfunktion folgt sofort die exponentielle Abfallkonstante  $k$ , da Bessel- und Exponentialfunktion diesen Faktor gemeinsam besitzen - Wenn die Dichte der Feldlinien in axialer Richtung abnimmt, müssen deshalb die Feldlinien in die radiale Richtung „abbiegen“.

Unter den gemachten Annahmen ergibt sich für eine Röhre des Durchmessers  $d = 200\text{mm}$

$$(2.6) \quad k_{\parallel} \approx \frac{1}{83.3\text{mm}} \quad \text{und} \quad k_{\perp} \approx \frac{1}{52.6\text{mm}},$$

## 2.5 Die Mu-Metallabschirmung

wobei ein zur Zylinderachse senkrechtetes Feld eine stärkere Schwächung  $k_{\perp}$  erfährt als ein paralleles ( $k_{\parallel}$ ). Ein Feld von der Größe des Erdmagnetfeldes ( $\approx 40\mu T$ ) nimmt zum Beispiel auf den ersten 20 cm von der Eintrittsfläche an auf wenige  $\mu T$  ab. Das Feldintegral einer 2 m-langen, an diesen Eintrittsbereich anschließenden Flugstrecke verursacht für kalte Neutronen lediglich eine Spindrehung von wenigen Grad.

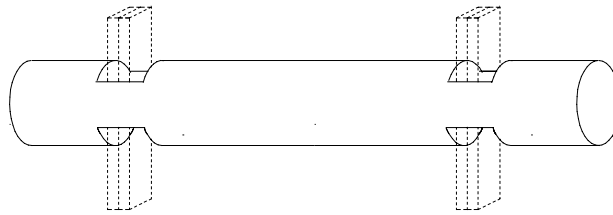


Abbildung 2.9: Der zylinderförmige Mumetallabschirmung des ersten Spektrometerarms. Zwischen den Spulenöffnungen befindet sich die 2m-lange Flugstrecke. Der 20cm-lange Bereich an den Enden läßt das Außenfeld exponentiell abfallen.

In der Praxis muß berücksichtigt werden, daß die Permeabilität des Mumetalls einen endlichen Wert besitzt. Die Schirmwirkung ist dadurch begrenzt. Dies kommt im Schirmfaktor  $S$  zum Ausdruck, der das Verhältnis von Außen- zu verbleibendem Innenfeld angibt:  $S_{transversal} = H_{außen} / H_{innen} \approx \mu \cdot b / d$ ,  $S_{longitudinal} \approx 4 \cdot \mu \cdot b / d \cdot N$ , wobei  $b$  die Wandstärke der Abschirmung und  $N$  den Entmagnetisierungsfaktor bezeichnet. Ein weiterer Unterschied zur Berechnung ergibt sich durch die Geometrie. Die analytische Lösung ist nur für ein unendlich langes Rohr möglich und macht keine Aussagen über die Gebiete jenseits der axialen Enden der Abschirmung. Experimentell wurde festgestellt, daß auf der Eintrittsfläche äußere Störfelder bereits um Faktoren von ca. 1/3 abgefallen sind.

Eine Mumetallröhre mit einem Durchmesser  $d = 200mm$  und einer Wandstärke  $b = 1.4mm$  erbringt sowohl für die Abfallkonstante, als auch für den Schirmfaktor (1000) geeignete Werte. Dabei muß hinzugefügt werden, daß die longitudinale Magnetisierung durch ein Solenoid minimiert wird, dessen Wicklungen direkt auf dem Mumetallrohr liegen. Abbildung 2.9 zeigt den Mumetallzylinder samt der Öffnungen für die Flipspulen.

Nach der Fertigung der Röhre in diesen Maßen fand die Abschätzung der Innenfelder in einer Messung mittels einer hochempfindlichen Magnetfeldsonde ihre Bestätigung. Dabei stellte sich insbesondere heraus, daß die Öffnungen für die Flipspulen im Bereich des Strahls, d.h. maximal 25 mm von der Achse entfernt, keine negativen Auswirkungen mit sich bringen. Für die exponentiellen Abfallkonstanten ergaben sich sogar die etwas größeren Werte von  $k_{\parallel} \approx 1/74mm$  und  $k_{\perp} \approx 1/49mm$ , die auf einen zur Zylinderachse geneigten Verfahrensweg der Sonde schließen lassen.

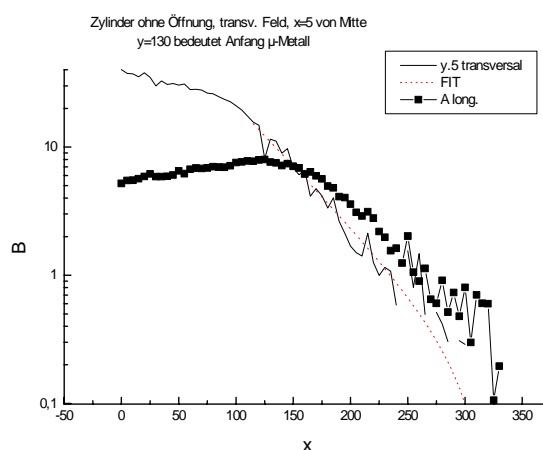


Abbildung 2.10: Der gemessene Verlauf des Magnetfeldes  $B$  in  $\mu T$  im Mumetallzylinder. Eine sensitive Magnetfeldsonde (Förstersonde) bewegte sich annähernd axial auf der  $x$ -Achse (Werte in cm) vom Außenraum ins Innere. Der Zylinder beginnt bei  $x = 130cm$ . Der exponentielle Abfall des Innenfeldes ist deutlich zu erkennen.

## 2.5 Die Mu-Metallabschirmung

### 2.5.2 Die konische Abschirmung

Der Aufbau eines Spektrometers mit der Fähigkeit zur simultanen Streuung unter mehreren Winkeln erfordert die Abschirmung des entsprechenden Winkelbereichs im zweiten Spektrometerarm. Die einfachste Möglichkeit zur Erfüllung dieser Forderung stellt eine in horizontaler (x-)Richtung konische Röhre dar. Im Vergleich zu einer Anordnung mit mehreren zylinderförmigen Abschirmungen leistet sie dasselbe, ohne einer komplizierten Kupplungsvorrichtung in der Streuregion zu bedürfen. Mit einer Länge und Materialdicke, die dem Zylinder des ersten Armes entsprechen, bleibt eine konische Abschirmung handhabbar: Ihr Gewicht beträgt ca. 50 kg.

Allerdings läßt sich das Innenfeld einer Abschirmung dieser Gestalt, ohne Zylindersymmetrie, nicht mehr analytisch berechnen. Bei der Dimensionierung gingen wir aus diesem Grund so vor, daß eine Abschätzung des Innenfeldes anhand der Zylinderegebnisse den Anfang bildete. Dem folgte die numerische Simulation einer Abschirmung mit den auf diese Weise erhaltenen Werten.

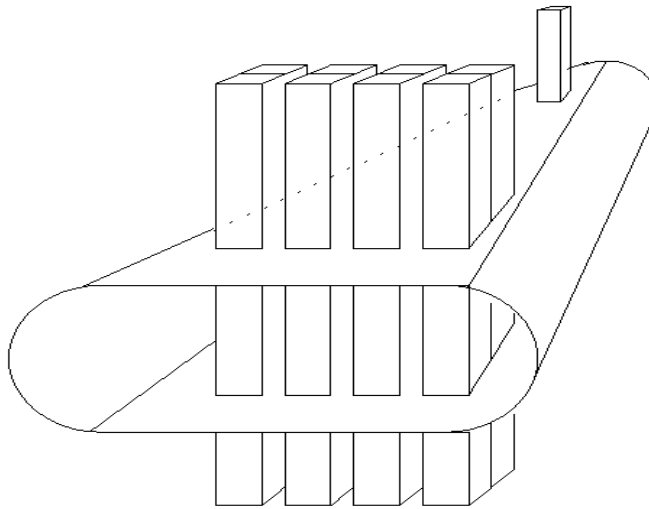


Abbildung 2.11: Die konische Abschirmung. Die Resonanzflipspulen sind schematisch angedeutet. Die Mittelpunkte der beiden äußeren Spulen schließen bezüglich der Steuprobe einen Winkel von ca. 7,5 Grad ein.

In horizontaler Richtung verbreitert sich die Abschirmung um 40 cm (von 20 cm auf 60 cm). Somit finden vier Resonanzflipspulenpaare nebeneinander Platz. Der maximale Streuwinkel für eine Probe, die sich in der Streuregion, d.h. 30 cm vor dem Beginn der zweiten Nullfeldstrecke befindet, beträgt ca. 7,5 Grad, falls mit der gegenüberliegenden Spule der direkte Strahl simultan detektiert werden soll. Abbildung 2.11 zeigt schematisch das gewählte Design der Abschirmung. In Abbildung 2.12 findet sich in der Blickrichtung von oben eine Darstellung des kompletten damit abgedeckten Strahlwinkels.

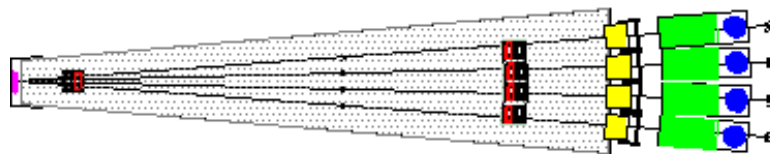


Abbildung 2.12: Blick von oben auf den zweiten Spektrometerarm. Zusätzlich sind rechts die Komponenten zur Polarisationsanalyse und die Detektoren dargestellt.



## 2.5 Die Mu-Metallabschirmung

Analog dem Vorgehen bei der Konstruktion der Ein- und Auskoppelpulen erfolgte eine numerische Berechnung des Feldverlaufs in der Abschirmung. Für eine Minimierung der Rechenzeiten ließen sich die Symmetrien des Problems nutzen, indem lediglich ein Viertel der Abschirmung programmiert wurde. Da der konische Zylinder Spiegelsymmetrien sowohl in horizontaler als auch in vertikaler achsialer Richtung aufweist, besitzen die Feldlinien an diesen Ebenen aus Differenzierbarkeitsgründen lediglich eine Normalkomponente. Diese Tatsache liefert die Randbedingungen des auf ein Viertel reduzierten Problems.

Mit diesen Vorgaben erhielten wir das Ergebnis, das in Abbildung 2.13 für den interessierenden Bereich an der Austrittsöffnung der konischen Abschirmung qualitativ angedeutet ist. Ein Außenfeld in senkrechter  $z$ -Richtung, das sehr gut der Erdmagnetfeldrichtung am ILL entspricht, erfährt in der Mittelebene der Abschirmung eine Schwächung um den Faktor 100, bevor es im Bereich der Spulenöffnungen wieder ansteigt. Es erzeugt zudem ein Innenfeld in Strahlrichtung, das ein ähnliches Verhalten zeigt, wobei in der Mitte der Spulenöffnung ein Vorzeichenwechsel stattfindet. Dort biegen die Feldlinien aus der senkrechten Richtung in die waagrechte ab und „suchen“ den am nächsten befindlichen Ort der Mumetallabschirmung auf.

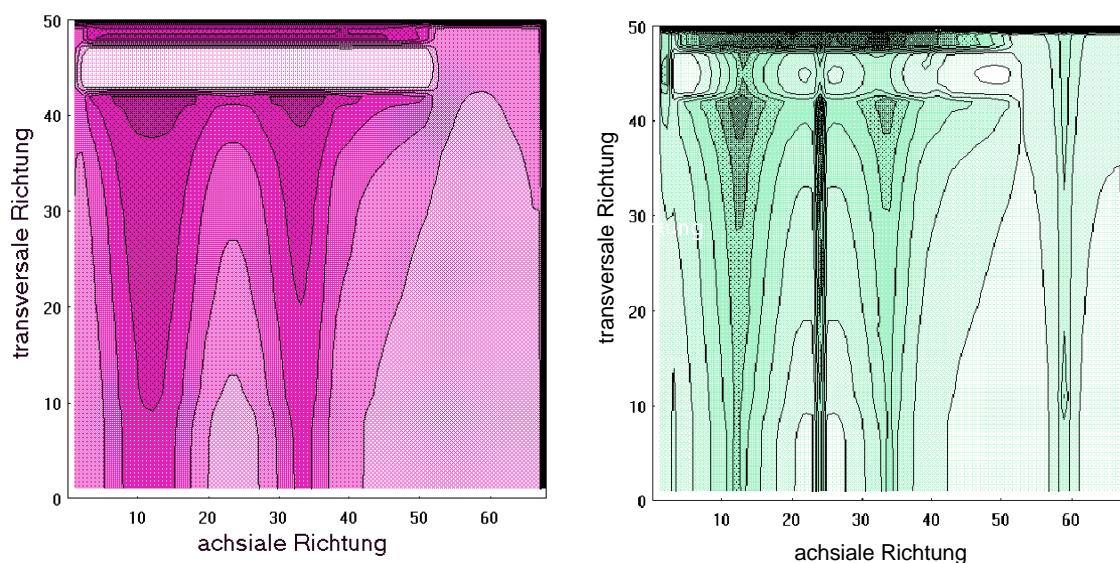


Abbildung 2.13: Senkrechte  $z$  (links) und axiale (rechts) Komponente auf der Mittelebene der konischen Abschirmung bei einem Außenfeld in  $z$ -Richtung. Beide Feldkomponenten im Inneren verhalten sich ähnlich (auf dem Konturplot kennzeichnet die horizontale Achse die axiale Richtung der Abschirmung mit arbiträren Einheiten, pro Konturlinie Faktor 10): von der großen Öffnung der Abschirmung (bei „58“ auf der horizontalen Achse) nach links abnehmend. Das axiale Feld erfährt bei „24“, der Mitte der Spulenöffnung, einen Vorzeichenwechsel.

Die exponentielle Abfallkonstante liegt nach der Simulation auf dem Niveau der zylinderförmigen Röhre. Lediglich der Eintrittsbereich fällt mit 20 cm zu kurz aus. Aus diesem Grund fiel die Wahl auf eine konische Abschirmung mit den Dimensionen der Simulation, jedoch einem auf 40 cm verlängerten Zwischenraum von den Spulenöffnungen zur hinteren Strahlöffnung.

Nach der Fertigstellung der vierteiligen Abschirmung (Fa. MSL) erfolgte die Überprüfung der numerischen Berechnung wie im Falle des Zylinders mit Hilfe einer Magnetfeldmessung (Abbildung 2.14). Die quantitative Analyse des Ergebnisses erweist die berechnete Funktion der Abschirmung. Allerdings bleiben bei der gewählten Geometrie infolge der Spulenöffnungen im Bereich der Resonanzflipspulen beträchtliche Streufelder.

Dieses vertikale Störfeld ist zwar um einen Faktor zehntausend geringer als die Innenfelder der Flipspulen. Jedoch besteht die Gefahr von adiabatischen Spindrehungen vor und hinter den Flipspulen. Deshalb erfolgte bei den Strahlzeiten eine Korrektur des Feldes durch ein Solenoid über den Spulenöffnungen bzw. durch nachträglich hinzugefügte senkrechte Wände zwischen den Positionen der einzelnen Spulen.

## 2.6 Die Resonanzflipspulen

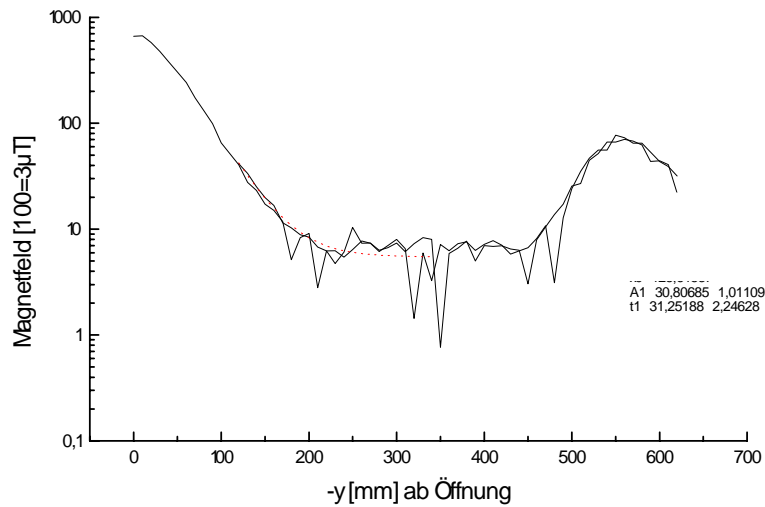


Abbildung 2.14: Das gemessene transversale Innen-Magnetfeld, gemessen in axialer Richtung (von links nach rechts entgegen der Strahlrichtung). Zunächst fällt das Feld exponentiell ab, bis im Bereich der Öffnung ein Plateau erreicht ist. Der Anstieg danach stellt die Folge einer mangelhaften Verschraubung der beiden hinteren Teile der Abschirmung dar.

### 2.6 Die Resonanzflipspulen

Die Resonanzflipspulen bilden das Herzstück des Resonanzspinechos. In ihnen finden durch die Kombination aus konstantem Magnetfeld und aus resonantem Hochfrequenzfeld die Pi-Flips statt, die die Phaseninformation der Hochfrequenz auf die Neutronenspins übertragen (s. Kapitel 1).

Um mit z.T. fest installierten Instrumenten konkurrieren zu können (z.B. IN11 am ILL), stellten wir an das  $B_0$ -Feld die Anforderung, vergleichbare Werte für das Feld eines konventionellen Spinechos von ca. 100 - 150 mT zu erreichen - entsprechend der Formel für die Spinechozeit für einen Bootstrap-Aufbau (s. Kapitel 1) dienen beim Resonanzspinecho viermal schwächere Felder demselben Zweck. Das Ziel waren demnach Felder von ca. 40 mT. Zudem sollten die Hochfrequenzspulen geeignet sein zur Resonanz mit Larmorfrequenzen in Feldern dieser Größe.

Die Anwendung eines Multidetektors stellt die Anforderung an die Spulen, sich durch geringe Breite für eine Anordnung senkrecht nebeneinander zu eignen. Abbildung 2.15 zeigt die Mehrfachspulenhalterung.

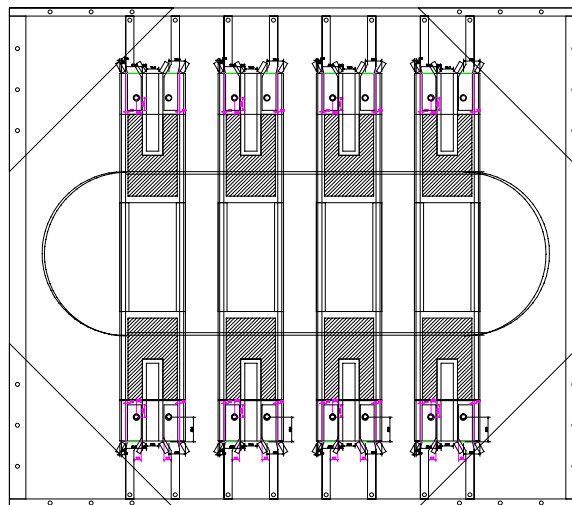


Abbildung 2.15: Die Mehrfachspulenhalterung am Ende der konischen Mumetallabschirmung. Durch schmale Bauweise gelingt es, einen großen Winkelbereich abzudecken.



## 2.6 Die Resonanzflipspulen

Um homogene Magnetfelder über den gesamten Strahlquerschnitt zu erzeugen, hat sich die Konstruktion von langen Kastenspulen aus Aluminium bewährt. Kalte Neutronen erfahren nur unerhebliche Streuung an Aluminium, so daß der Neutronenstrahl die (dünnen) Spulenkörper durchdringen kann.

Im ersten Abschnitt folgt die Beschreibung der weiterentwickelten  $B_0$ -Spulen. Daran schließt sich der Abschnitt über die neu entwickelten HF-Spulen an.

### 2.6.1 Das konstante Magnetfeld $B_0$

Wie im Abschnitt über die Mumetallabschirmung erwähnt, behalten wir die bewährte Methode [Sch94] zur Erzeugung des  $B_0$ -Feldes innerhalb der „Nullfeldregion“ bei: Die Mitte langer Spulen befindet sich im Bereich des Neutronenstrahls und ragt mit ihren Enden durch Öffnungen im Mumetall in den Außenraum (Abbildungen 2.9 und 2.11). Durch die Konstruktion langer Spulen erfüllt das Innenfeld die hohen Anforderungen an seine Homogenität im Bereich des Strahls. Indem die Enden der Spule vom Nullfeld distanziert sind, führt das dort austretende Magnetfeld nicht zu einer Beeinträchtigung desselben, sondern erfährt seine Rückführung bei der Bootstrap-Anordnung direkt durch die zweite Spule eines Spulenpaares oder bei der Anordnung mit jeweils nur einer Flipspule durch das Mumetall.

Diese Methode besitzt erhebliche Vorteile, z.B. gegenüber kurzen Spulen, die völlig von der Abschirmung umschlossen sind [Kel95]. Um in diesem Fall das Nullfeld nicht zu beeinträchtigen, muß die Rückführung des  $B_0$ -Feldes mittels einer Mumetallrückführung erfolgen. Eine Problematik dieses Vorgehens besteht jedoch darin, daß bereits geringe Toleranzen in der Rückführung die Homogenität des  $B_0$ -Feldes verschlechtern. Dieses Problem tritt bei genügend langen Luftspulen nicht auf.

An die  $B_0$ -Spulen war die Anforderung gestellt, Felder bis zu ca. 40 mT liefern zu können. Um mit einer einfachen Wasserkühlung, die den Aufwand z.B. gegenüber Kühlung mit flüssigem Stickstoff gering hält, in einer Kastenspule Felder dieser Größenordnung zu realisieren, sind der Geometrie von vorneherein Grenzen gesetzt. Eine grobe Abschätzung anhand des spezifischen Widerstandes von Aluminium liefert bei einer Materialdicke von 1 mm, einer Stromstärke für ein Feld von 40 mT und einem Kühlwasserfluß von ca. 6 Liter pro Minute einen maximalen Umfang von ca. 20-30 cm, sofern die Spule nicht heißer als 200 Grad Celcius werden soll.

Eine Auslegung für den Niederspannungsbereich und Ströme bis ca. 200 A reduziert die Anzahl von Drahtwindungen (für ein homogenes Feld von 40 mT sind bei 220 A stromführende Windungen ca. alle 7 mm erforderlich) und wirkt sich damit günstig auf die Homogenität des Feldes aus, da sich die Anzahl der Zwischenräume zwischen den Windungen ebenso verringert.

Die Breite der Spulen bestimmt den nutzbaren Strahldurchmesser. Da dieser durch andere Elemente wie z.B. Polarisatoren auf ca. 50 mm festgelegt ist, fiel die Wahl auf Vierkantrohre vom Querschnitt 80mm·30mm als Rohlinge für die Spulen. Mit diesen Dimensionen ist noch etwas Spiel in der Breite für das Anbringen von Kühlleitungen. Erfahrungen mit thermischen Neutronen zeigten, daß die gewählte Spulentiefe für HF-Pi-Flip-Spulen ausreicht.

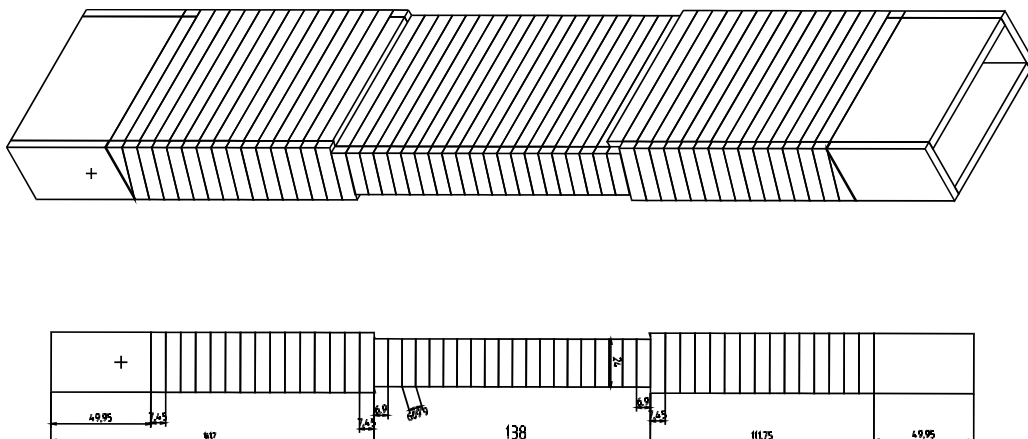


Abbildung 2.16: Der Aluminium-Spulenkörper der Flipspule. Nachdem der Fensterbereich von 4mm auf 1mm abgefräst wurde, entsteht aus dem Rohling eine Spule durch Schneiden der Windungszwischenräume mittels Elektroerosion. Die Stromstege besitzen eine Breite von 6,9mm bzw. 7,45mm inner- bzw. außerhalb des Fensters. Der Windungsfortschritt befindet sich auf der Unterseite der oben gezeigten Spule.

## 2.6 Die Resonanzflipspulen

Um Toleranzen bei der Fertigung gering zu halten, fand die Fertigung der Spule nicht durch Wicklungen eines Drahtes statt, sondern umgekehrt durch Elektro-Erosion der Luftspalte zwischen den Stromstegen aus dem vollen Stück. Hierbei schneidet ein Wolfram-Draht die Zwischenräume zwischen den Stromstegen. Der Schneidedraht besitzt gegenüber dem Spulenkörper-Rohling eine erhebliche elektrische Potentialdifferenz, die verantwortlich für das Herauslösen (Erosion) des Materials ist. Sehr vorteilhaft ist die verhältnismäßig geringe bzw. verschwindende mechanische Belastung und Verformung des Werkstücks. Abbildung 2.16 zeigt die Spule und die gewählte Geometrie.

Ein Aluminium-Vierkantrohr mit einer Wandstärke von 4 mm bildet den Rohling. Im Durchgangsbereich des Neutronenstrahls sind „Fenster“ angebracht, d.h. die Materialstärke beträgt hier lediglich 1 mm, um eventuelle Kleinwinkelstreuung an der Aluminiumlegierung zu minimieren. Diese vollständige Abtragung des Materials auf der gesamten Breitseite stellt eine wichtige Neuerung dar. Die Spule erhält dadurch auch im Fensterbereich einen rechteckigen Querschnitt im Gegensatz zu früher verwendeten Prototypen, die aus thermischen Gründen lediglich auf einer Breite von 50 mm abgefräst waren. Da somit nun im Außenbereich keine Streufelder das Nullfeld beeinträchtigen und im Innenbereich die Feldlinien keine wesentlichen Komponenten außer in Längsrichtung aufweisen, läßt sich der maximale Strahlquerschnitt von ca. 50 mm voll nutzen - ein erheblicher Vorteil zum Erreichen einer guten Statistik und der Detektion eines kontinuierlichen Winkelbereichs.

Der Windungs- bzw. Stromfortschritt befindet sich auf einer Schmalseite der Spule. Indem die entsprechende Anschlußleitung mit entgegengesetzter Stromrichtung in zwei Hälften geteilt innerhalb und außerhalb der Seite mit dem Stromfortschritt entlangläuft, reduziert sich das senkrecht zur gewünschten Feldrichtung liegende Störfeld des Stromfortschritts auf ein Quadrupolfeld mit geringer Stärke.

Vor der Konstruktion fand eine analytische Berechnung des Innenfeldes statt. Das Ergebnis sollte den Erfolg der geschilderten Maßnahmen erweisen, den Fensterbereich mit einem rechteckigen Querschnitt zu versehen und das Störfeld der Stromrückführung zu minimieren. Die Berechnung des Innenfeldes der konstruierten Spule erfolgte durch mehrmalige Integration über quaderförmige Stromelemente, die den Strom durch die Spule repräsentieren. Durch Superposition der Felder jedes einzelnen Quaders erhält man das Gesamtfeld der Spule. Der Grund für diese Vorgehensweise liegt darin begründet, daß sich das Feld eines Quaders analytisch berechnen läßt [Sch95]. Hierzu genügt die Annahme, daß durch den Quader ein homogener und einheitlich gerichteter Strom fließt. Die konstante Stromdichte ist gleichbedeutend mit identischen infinitesimalen Stromelementen  $\vec{d\vec{j}}$ , die nun an jedem Punkt des Quaders ein Magnetfeld  $d\vec{B}$  erzeugen, dessen Form nach dem Bio-Savart-Gesetz bekannt ist.

$$(2.7) \quad d\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{d\vec{j} \times \hat{r}}{r^2}$$

Dabei bedeutet  $r$  den Abstand, d.h. Betrag des Abstandsvektors zwischen dem Stromelement und dem Ort, an dem das Magnetfeld existiert. Analog bezeichnet  $\hat{r}$  den Einheitsvektor in dieser Richtung.

Wegen der Rotationssymmetrie des Problems genügt es für einen Strom in z-Richtung lediglich die x-Komponente des Magnetfelds zu betrachten.

$$(2.8) \quad dB_x = \frac{\mu_0}{4\pi} \cdot \frac{-dj_z \cdot \hat{r}_y}{r^2} = \frac{\mu_0}{4\pi} \cdot \frac{-dj_z \cdot y / (x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{1}{2}}}{x^2 + y^2 + z^2}$$

Eine Stammfunktion für die Integration über einen stromführenden Quader erhält man durch Integration über  $y$ , anschließende Integration über  $x$  (mit dem *Arctan* als Stammfunktion) und abschließender Integration über  $z$ , die nach wiederholter partieller Integration und Substitution zum Ziel führt. Diejenige Stammfunktion, die die Randbedingung des Problems (für große  $r$  verschwindende Felder) erfüllt, lautet

$$\frac{\mu_0}{4\pi} \cdot j \cdot \left( -x \cdot \operatorname{arcsinh} \frac{z}{(x^2 + y^2)^{1/2}} - z \cdot \operatorname{arcsinh} \frac{x}{(y^2 + z^2)^{1/2}} - y \cdot \arctan \frac{xz}{(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}} \right).$$

## 2.6 Die Resonanzflipspulen

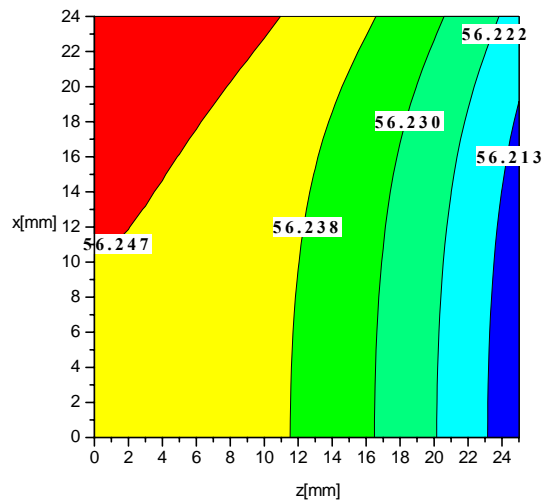


Abbildung 2.17: Die  $z$ -Komponente des Innenfelds einer Resonanzflipspule in  $x$ - $z$ -Richtung, also senkrecht zur Flugrichtung ( $y$ ). Die Feldwerte in  $mT$  beziehen sich auf eine Stromdichte von  $10 A/qmm$ , d.h. eine Stromstärke von  $298 A$ . Gezeigt ist ein Querschnitt in Strahlrichtung in der Vorderebene der Spule, dessen Größe dem Strahlquerschnitt entspricht. Das Feld nimmt vom Mittelpunkt in  $z$ -Richtung nur geringfügig ab. Die entsprechende Inhomogenität beträgt relativ weniger als  $0.9$  Promille. In  $x$ -Richtung ist es weitgehend homogen ( $0.15$  Promille relative Abweichung).

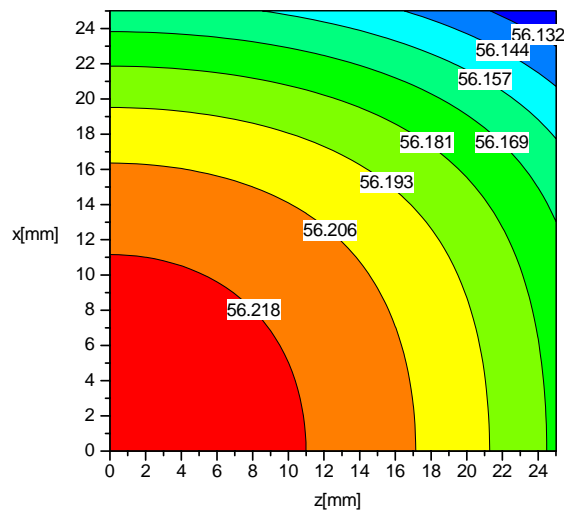


Abbildung 2.18: Wie zuvor die  $z$ -Komponente des Innenfelds in  $x$ - $z$ -Richtung. Gezeigt ist zum Vergleich mit der vorherigen Abbildung ein Querschnitt in Strahlrichtung in der Mittelebene der Spule. Das Feld nimmt vom Mittelpunkt nur geringfügig ab, am wenigsten in  $z$ -Richtung. Dort beträgt die relative Inhomogenität weniger als  $1$  Promille und insgesamt immerhin noch weniger als  $1.8$  Promille.

Die Stammfunktion muß über die Differenzvektoren des Raumpunktes, an dem das Magnetfeld interessiert, zu den Ecken des Quaders ausgewertet werden. Für die Berechnung der Spulenfelder erfolgte dies für die nicht unerhebliche Anzahl an Quadern mit Hilfe eines FORTRAN-Programms [Sch95].

Die Abbildungen 2.17, 2.18 und 2.19 zeigen das Ergebnis der Berechnung für die  $xz$ - bzw. die  $yz$ -Richtung. Aus Symmetriegründen genügt die Berechnung vom Mittelpunkt der Spule in je eine Richtung. Die Inhomogenitäten in diesen Flächen auf einem quadratischen Querschnitt von  $25mm \times 25mm$  sind verantwortlich für Depolarisationseffekte (s. Kapitel 3) und sollten kleiner als  $0.5\%$  sein. Durch die gesamte Spule hindurch bleibt die Varianz des Feldes bei unserer Konstruktion unter  $2.4$  Promille. Im Vergleich zu den Spulen des bereits erwähnten Prototyps für thermische Neutronen bedeutet dies eine Verbesserung um etwa eine Größenordnung.

## 2.6 Die Resonanzflipspulen

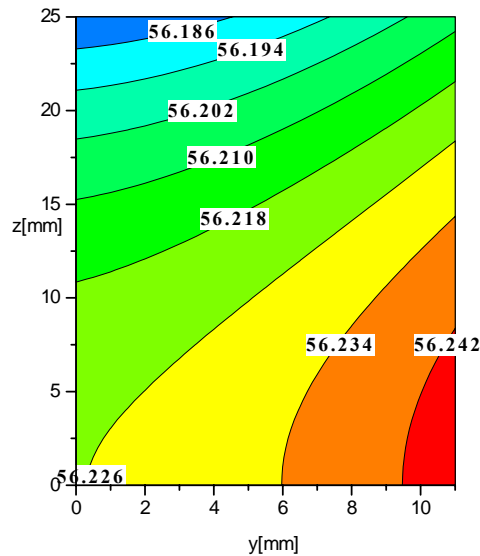


Abbildung 2.19: Die  $z$ -Komponente des Innenfelds einer Resonanzflipspule in  $y$ - $z$ -Richtung. Gezeigt ist ein Querschnitt transversal zur Strahlrichtung in der senkrechten Mittelebene. Das Feld nimmt in Strahlrichtung vom Mittelpunkt nur geringfügig zu. In dieser Richtung beträgt die relative Inhomogenität weniger als 0.5 Promille und insgesamt weniger als 1.3 Promille.

Die Ergebnisse zeigen einen leichten Abfall des Feldes in  $z$ -Richtung und einen sehr geringen Anstieg in  $y$ -Richtung. Dieses Verhalten erklärt sich aus der Form des Spulenkörpers. Wie erwähnt sind die Spulen im Strahlbereich auf einer Länge von ca. 140 mm und auf der ganzen Breite abgefräst, um Streuung am Aluminium zu vermeiden. Dadurch sinkt in diesem Bereich der effektive Querschnitt der Spule und damit auch der magnetische Fluß, falls im unveränderten und im abgefrästen Bereich die gleichen Feldstärken herrschen. Dies hätte zur Folge, daß an der Grenze zum abgefrästen Bereich Feldlinien austreten würden und das Nullfeld stören könnten. Damit dieser Fall nicht eintritt und der Fluß im Mittelteil der Spule eine identische Größe zum Fluß an den Enden besitzt, erhielt der Mittelteil eine höhere Windungsdichte für ein stärkeres Magnetfeld, so daß der Fluß trotz geringeren Querschnitts identisch bleibt.

Der Abfall des Feldes von der Mitte aus in  $z$ -Richtung ist auf das im Mittelteil um ca. 9% höhere Feld zurückzuführen, das sich langsam der Feldstärke im nicht abgefrästen Teil der Spulen nähert.

Der Anstieg in  $y$ -Richtung spiegelt die Tatsache wider, daß die Feldlinien im engeren Spulenquerschnitt von außen „zusammengezwängt“ werden.

In  $x$ -Richtung ist am vorderen Spulenrand eine sehr geringe Feldzunahme und dagegen in der Spulenmitte ein ebenfalls geringer Abfall im 1-Promillebereich festzustellen. Dieses Verhalten spiegelt die Tatsache wider, daß die konstruierte Spule nicht unendlich lang ist und das Innenfeld aus diesem Grund wie bei jeder begrenzten Spule mit rechteckigem Querschnitt in den Kanten gegenüber der Mitte zunimmt. Diese Tendenz geht einher mit der Querschnittsverengung im Mittelbereich und erzeugt die berechnete Feldverteilung.

Zusammenfassend ist zu bemerken, daß das exakt berechnete Innenfeld lediglich Inhomogenitäten im Promillebereich aufweist, so daß hierdurch ebenso wie infolge der Vermeidung von Außenfeldern die Beeinträchtigung der Polarisation des Neutronenstrahls auf ein unwesentliches Maß fällt.

Die Strom-Feld-Konstante folgt aus der Berechnung zu  $0.1887 \text{ mT/A}$ . Der Vergleich mit den gemessenen Werten und die Bestätigung der Berechnung folgen im nächsten Kapitel.

### 2.6.2 Das Hochfrequenzfeld

Die Spulen zur Erzeugung des hochfrequenten Wechselfeldes befinden sich innerhalb der  $B_0$ -Spulenkörper. Dabei handelt es sich um 62mm breite Kastenspulen, die ein zum konstanten Magnetfeld transversales Feld erzeugen. Ein solches Wechselfeld läßt sich zusammengesetzt denken aus zwei in der  $x$ - $y$ -Ebene rotierenden Komponenten, die sich in Resonanz mit Larmorfrequenz in gleicher bzw. entgegengesetzter Richtung bewegen im Vergleich zum Neutronenspin. Um die kompletten Spulen in den Mittelbereich der  $B_0$ -Spulenkörper transportieren zu können, sind sie zwischen zwei Teflonschienen angebracht, die zudem die Position der Spule definieren und einen Abstand

## 2.6 Die Resonanzflipspulen

von  $4\text{mm}$  zu der Spulenschmalseite herstellen. Die Isolation gegenüber der  $B_0$ -Spulenkörper in Strahlrichtung besorgt eine  $0.1\text{mm}$  dünne Glimmerfolie.

Die Anordnung und die Bestandteile der HF-Spule zeigt die Abbildung 2.20. Der Spulenkörper besteht aus glasfaserverstärktem Kunststoff, der die nötige mechanische Belastbarkeit bei den herrschenden Arbeitstemperaturen besitzt. Bis hin zu den Schrauben, die den Spulenkörper mit den Teflonschienen verbinden, fanden nur nichtmetallische Werkstoffe Verwendung, um Wirbelströme in der Nähe des HF-Feldes zu vermeiden.

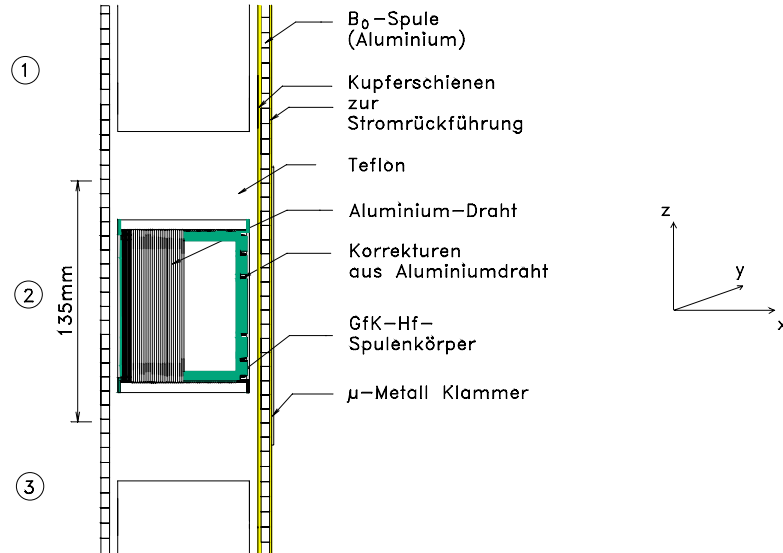


Abbildung 2.20: Die HF-Spule im Inneren des  $B_0$ -Spulenkörpers. Die Wicklungen ( $1.17\text{mm}$ -Draht) verlaufen in der senkrechten  $z$ -Richtung und erzeugen ein oszillierendes Feld in der  $x$ -Richtung, das sich aus zwei rotierenden Komponenten in der  $x$ - $y$ -Ebene zusammensetzt. Das Aluminium der  $B_0$ -Spule stellt neben der Stromrückführung diejenigen leitenden Teile dar, die sich in größter Nähe zum Wechselfeld befinden und das Feld durch Wirbelströme schwächen.

Abbildung 2.21 zeigt den Spulenquerschnitt von  $60\text{mm} \cdot 22\text{mm}$ . In  $z$ -Richtung beträgt die Breite der Spule  $62\text{mm}$ . Zusammen mit einer  $1.17\text{mm}$ -Drahtwicklung fügt sich die Spule nahtlos in das sie umgebende Aluminiumvierkantrohr.

Durch die „richtig“ rotierende Komponente des HF-Spulenfeldes kommt der Pi-Flip des Neutronenspins während der Aufenthaltsdauer  $t_{HF}$  der Neutronen in der Spule zustande. Für die Gültigkeit der Pi-Flipbedingung  $\gamma B_1 \cdot t_{HF} \equiv \pi$  über den gesamten Strahlquerschnitt ist die Homogenität des HF-Magnetfeldintegrals entscheidend. Über eine Fläche von ca.  $50\text{mm} \cdot 50\text{mm}$  sollte das Feldintegral in Strahlrichtung relative Abweichungen von wenigen Prozenten aufweisen, um die Polarisation nur im Promillebereich zu beeinträchtigen (s.Kapitel 1).

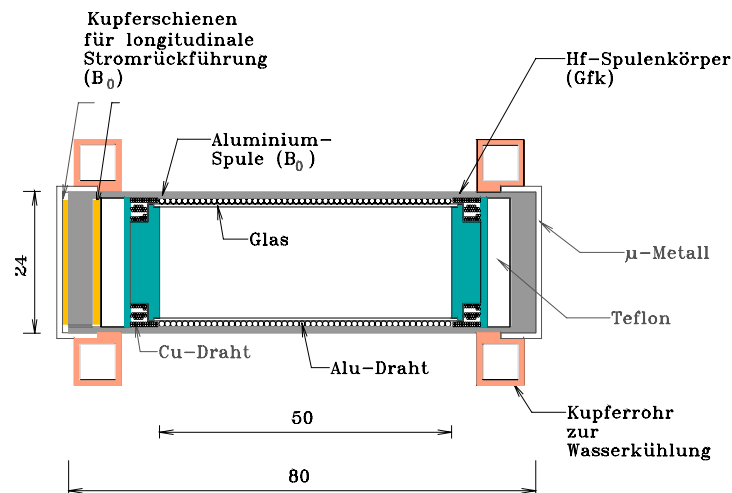


Abbildung 2.21: Die HF-Spule im  $x$ - $y$ -Schnitt. Das Streufeld der Spule greift links und rechts in den Aluminiumkörper und verursacht Wirbelströme.

## 2.6 Die Resonanzflipspulen

Die Kastenspulen können keine „langen“ Spulen darstellen, d.h. Spulen, deren Länge ihre Breite um ein Vielfaches übertrifft, da ihre Länge durch die Breite des  $B_0$ -Spulenkörpers nach oben begrenzt ist und die Breite den nutzbaren Neutronenstrahlquerschnitt bestimmt. Aus dieser Tatsache folgt, daß Maßnahmen zur Erhöhung des Feldes in Entfernung von der Mitte zu treffen sind, da es andernfalls dort aufgrund der Spulengeometrie stark abnimmt. Ein weiterer Punkt von zentraler Bedeutung besteht im Auftreten von Wirbelströmen in dem Bereich des  $B_0$ -Spulenkörpers, dem die Enden der HF-Spule und damit die Streufelder zugewandt sind.

Um zeitlich veränderliche Felder und die damit einhergehenden Wirbelströme zu berechnen, sind - wie zuvor im Falle von nichtlinearen magnetischen Materialien wie Mumetall - numerische Methoden erforderlich. Mit der oben beschriebenen Methode läßt sich das Problem auf den Punkten eines räumlichen Gitters simulieren und lösen. Neu ist lediglich, daß auch die zeitabhängigen Teile der Maxwell-Gleichungen vonnöten sind.

Um das Feldintegral zu erhalten, muß zum ersten Schritt, bei dem zunächst die numerische Berechnung des Feldes einer Spule erfolgt, ein zweiter hinzugefügt werden: Durch anschließende Addition der Werte auf den einzelnen Gitterpunkten in Strahlrichtung ergibt sich daraus eine sehr gute Näherung für das Feldintegral.

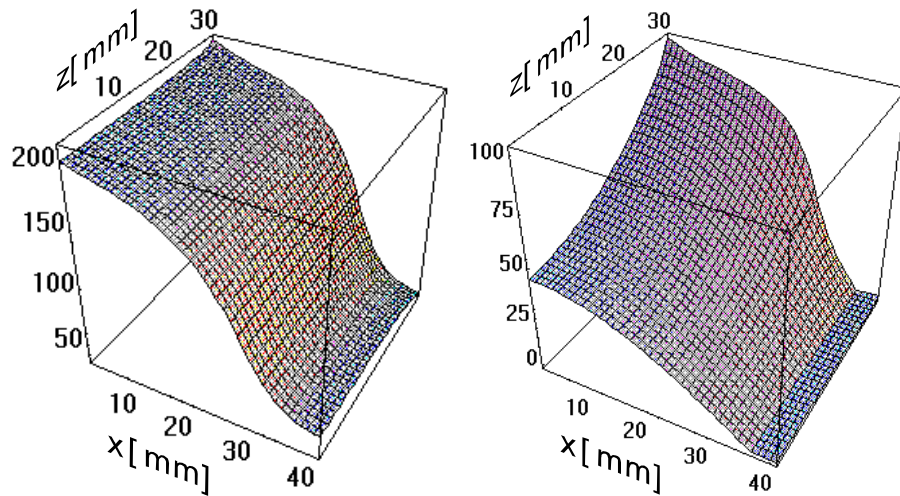


Abbildung 2.22: Das Feldintegral der  $x$ -Komponente entlang der Strahlrichtung bei einer einfachen Kastenspule. Gezeigt ist aus Symmetriegründen nur ein Viertel der  $x$ - $z$ -Ebene. Links ein zeitlich konstantes, rechts ein Wechselfeld mit 493 kHz. Bei  $x=36$  beginnt die Aluminiumwand der  $B_0$ -Spule. Die Schwächung des Feldes durch das Gegenfeld der induzierten Wirbelströme vor allem in der Spulenmitte ist gut zu erkennen (arbiträre Einheiten, links wurde mit einer höheren Stromstärke simuliert).

Der Einfluß der Wirbelströme, die ein Feld erzeugen, das ihrer Ursache entgegenwirkt, ist in der Abbildung 2.22 sehr gut zu erkennen. Im statischen Fall sinkt das integrale Feld zu den Enden der Spule bereits um ca. 40% ab. In  $z$ -Richtung steigt es leicht an: Die Feldlinien verdichten sich in den Kanten der Spule. Im dynamischen Fall mit einer Frequenz von 493 kHz ist dieser Anstieg in  $z$ -Richtung sehr verstärkt, da im Zentrum der Spule das Feld der Wirbelströme bereits wirksam ist. Die Folge ist ein äußerst inhomogenes Feldintegral: es wächst in  $z$ - und fällt in  $x$ -Richtung.

Die erste Maßnahme zur Homogenisierung des Feldintegrals besteht in einer Erhöhung der Wicklungsdichte an den Enden der Spulen. Damit gelingt es, die rasche Abnahme des Feldintegrals in  $x$ -Richtung zu dämpfen. Allerdings bleibt die Korrektur der Zunahme aus der Spulenmitte heraus in  $z$ -Richtung nur unvollständig. In der ersten Strahlzeit kamen aus Zeitgründen nur unvollständig korrigierte Spulen dieser Bauart zum Einsatz. Da sie zum Vergleich mit den Messungen (Kapitel 3) dienen, sind die berechneten Verläufe der Feldintegrale interessant. Die Abbildung 2.23 zeigt das Ergebnis der numerischen Simulation einer Spule, an deren Enden in einem 5mm-breiten Bereich die Wicklungsdichte um den Faktor 4 gegenüber dem Rest der Spule erhöht ist. Die Korrekturwicklungen besitzen eine geringere Ausdehnung in der  $z$ -Richtung, ihr Querschnitt beträgt lediglich  $54\text{mm} \cdot 17\text{mm}$ , da die Außenabmessungen der Spule durch den umgebenden Aluminiumkörper begrenzt sind.

## 2.6 Die Resonanzflipspulen

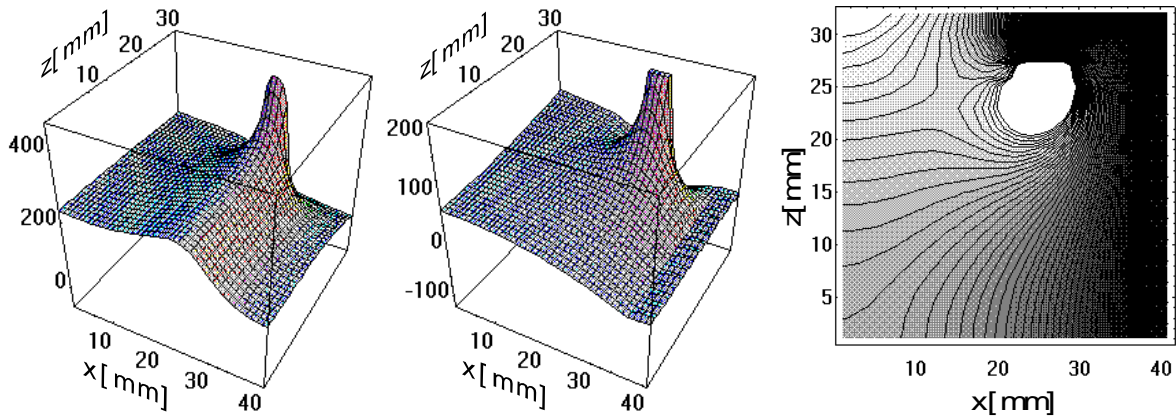


Abbildung 2.23: Das Feldintegral in  $y$ -Richtung von korrigierten Kastenspulen. Links mit statischem Feld, in der Mitte und rechts mit einem Wechselfeld von  $493\text{kHz}$ , wobei die 3D-Plots arbiträre Einheiten besitzen, die Konturlinien rechts kennzeichnen je Stufen von  $3\%$ . Die Wirkung der Korrekturwicklungen mit vierfacher Wicklungsdichte fällt in Form einer „Spitze“, einem steilen Maximum des Feldintegrals ins Auge. An der linken Abbildung ist zu erkennen, daß statisch bereits eine Überkorrektur vorliegt, während das Integral eines HF-Feldes in  $25\text{mm}$ -Abstand von der Mitte in  $x$ -Richtung um ca.  $35\%$  abnimmt.

Die Korrekturwicklungen sorgen für eine wesentlich schwächere Dämpfung des Feldintegrals in der Mitte der Spule gegenüber den Kanten, während zu den Spulenöffnungen hin ein relativ starker Abfall des Feldintegrals von ca.  $35\%$  bleibt. Nur in einem Bereich von ca.  $2 \cdot 15\text{mm} \cdot 2 \cdot 15\text{mm}$  bleibt die relative Inhomogenität in der Größe der relativen Impulsbreite des Strahls, die ebenfalls zu einer Abweichung von der Pi-Flip-Bedingung führt (s. Kapitel 1).

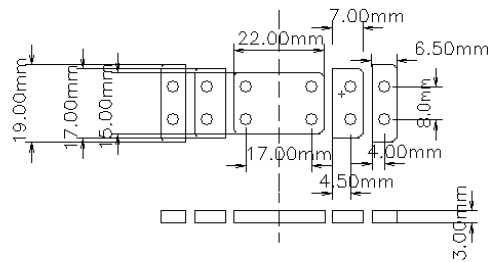


Abbildung 2.24: Die Spulenkörper für die Korrekturwicklungen. Sukzessive werden die Körper vom kleinsten in der Mitte bis zu den äußersten auf dem zentralen Körper montiert und mit  $5/10/16$  Wicklungen eines  $0.5\text{mm}$ -Drabtes versehen. Eine Deckelplatte hält die Wicklungen in Position. Die vierte Korrekturspule besteht in zusätzlichen Wicklungen auf dem zentralen Spulenkörper.

Um den gesamten Strahlquerschnitt zu nutzen, wurden spezielle Mehrfachkorrektur-Spulen entwickelt. Sie besitzen mehrere ineinander liegende Korrekturwicklungen an beiden Seiten (Abbildung 2.24). Bei der Entwicklung von Spulen dieser Art stellt sich die Schwierigkeit, daß innenliegende Korrekturwicklungen ein Gegenfeld zu den äußeren Wicklungen erzeugen. Aus diesem Grund mußte in mehreren Optimierungsschritten eine Anordnung der Korrekturen und eine (ganzzahlige!) Wicklungsdichte für sie gefunden werden, die durch nach außen wachsende Stärke der Korrekturen das gewünschte Ergebnis liefert. Abbildung 2.25 zeigt das Feldintegral der konstruierten Spulen. Den Abfall in  $x$ -Richtung und den Anstieg in  $z$ -Richtung korrigieren insgesamt vier Korrekturwicklungen mit einer zwei- bis fünffachen Wicklungsdichte. Dadurch entsteht ein ca.  $2 \cdot 23\text{mm} \cdot 2 \cdot 23\text{mm}$ -großes Plateau des Feldintegrals mit relativen Abweichungen kleiner  $5\%$ . Die Depolarisation hierdurch ist kleiner als  $0.25\%$ .

Die Größe des erreichbaren Plateaus ist in  $x$ -Richtung durch die Position der Korrekturspulen begrenzt, da diese Feldstärken erzeugen, die ein Vielfaches der Feldstärke in der Mitte der Spule betragen. Damit einher gehen jedoch auch sehr viel größere Wirbelströme, deren Existenz einen genügenden Abstand der Korrekturen vom Aluminium erfordert, da ansonsten die Ohmschen Verluste die Leistung der HF-Verstärker übertreffen.

Die gewählte Geometrie stellt den besten Kompromiß zwischen Wirbelstromverlusten und nutzbarem Strahlquerschnitt dar.



## 2.6 Die Resonanzflipspulen

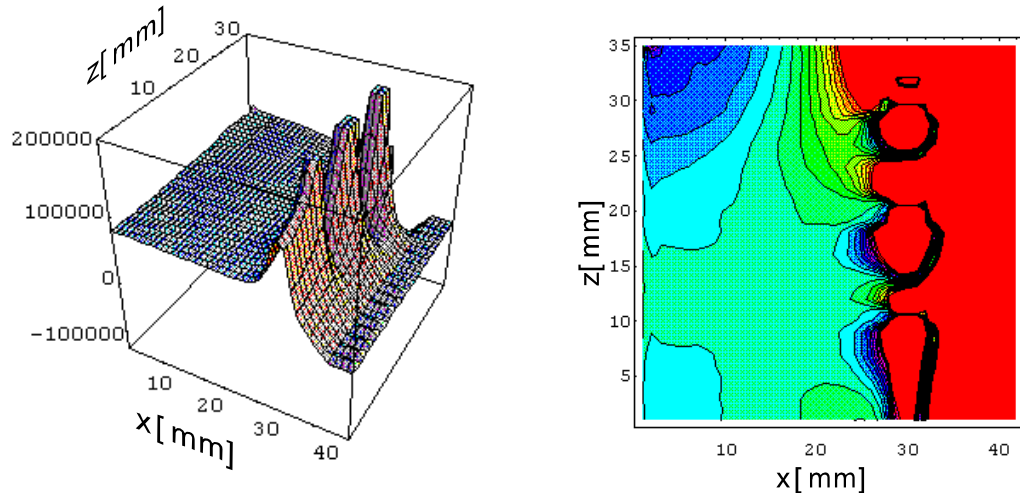


Abbildung 2.25: Das Feldintegral in Strahlrichtung der Mehrfachkorrektur-Spulen. Links ist der Verlauf mit 4 ineinanderliegenden Korrekturen qualitativ zu erkennen (arbiträre Einheiten). Der Konturplot unterscheidet Gebiete mit relativ je 5% Feldintegralunterschied. Diese Spule besitzt Varianzen von nur 2.8% auf einer Fläche von  $2 \cdot 15\text{mm} \cdot 2 \cdot 15\text{mm}$  und selbst auf einem Querschnitt von  $2 \cdot 23\text{mm} \cdot 2 \cdot 23\text{mm}$  lediglich Abweichungen von  $\pm 5\%$ .

### 2.6.3 Die Leistungsverorgung der Hochfrequenzspulen

Während die Stromversorgung der  $B_0$ -Spulen relativ einfach durch handelsübliche Stromquellen erfolgen kann, erfordert die Versorgung der HF-Spulen Maßnahmen zur Anpassung kommerzieller HF-Verstärker (ENI 400) an die individuellen Eigenschaften der Spulen. Der HF-Stromkreis wird als Schwingkreis in Resonanz betrieben, damit die Amplituden die nötige Größe erreichen. Mit Resonanz ist die Abstimmung auf maximale Stromamplitude (nicht Spannungsamplitude) gemeint, für die gilt:  $\omega = 1/\sqrt{LC}$  mit der Induktivität  $L$  und der (Gesamt-)Kapazität  $C$ . Zur Anpassung an verschiedene Frequenzen dienen Kapazitätsschalter, die den Betrieb in einem Frequenzbereich von  $80 \text{ kHz}$  bis  $700 \text{ kHz}$  ermöglichen.

Zudem variiert der Ohmsche Widerstand der Spulen mit der Frequenz, da die Verluste durch Wirbelströme, den Skin-Effekt und elektromagnetische Abstrahlung frequenzabhängig sind. Der Gleichstromwiderstand der Spulen von ca.  $1.2 \Omega$  wird bei hohen Frequenzen um bis zu zwei Größenordnungen übertroffen. Aus diesem Grund muß eine regelbare Anpassung an den Ausgangswiderstand der Verstärker ( $50 \Omega$ ) anhand von HF-Transformatoren erfolgen.

Zur Dimensionierung der Schwingkreis-Kapazitäten und der Transformatoren sind Abschätzungen der Spulen-Induktivität, -Kapazität und der Ohmschen Verluste erforderlich.

Für die Induktivität sind bei der vorliegenden Wicklungsdichte und für „lange“ Spulen Werte von  $0.15 \text{ mH}$  zu erwarten. Unter Berücksichtigung der realen Geometrie und der Beeinträchtigung des Feldes durch die Wirbelströme läßt sich dieser Wert jedoch nur als obere Abschätzung verstehen. Messungen an Prototypen zeigten, daß ungefähr die halben Werte zutreffen [Bic97].

Nicht zu vernachlässigen ist die Kapazität der HF-Spulen gegen den umgebenden Aluminiumkörper. Sie beträgt ca.  $0.1 \text{ nF}$ . Bei der Dimensionierung der Schwingkreis-Kapazitäten nach der Resonanzbeziehung ist diese Kapazität abzuziehen. Zudem bestimmt sie die maximale Resonanzfrequenz.

Zum Ohmschen Widerstand tragen zunächst die Wirbelströme durch die damit einhergehende Aufheizung des  $B_0$ -Körpers bei. Um Wirbelströme gering zu halten, befinden sich im Bereich der HF-Spule zusätzlich Schlitze im Aluminium. Dennoch ist eine Abschätzung der Ströme durch die erweiterten Korrekturen unverzichtbar.

Die Verlustleistung der Wirbelströme läßt sich unter zwei Annahmen berechnen: Das verursachende Magnetfeld sei homogen und besitze lediglich eine Komponente in x-Richtung. In den rechteckigen Aluminiumstegen werden Ströme angenommen, die gemäß dieser Form auf Rechtecken umlaufen. Mit diesen Annahmen folgt aus der vierten Maxwellgleichung  $\text{rot} \mathbf{E} = -d\mathbf{B}_1 / dt$  die elektrische Spannung und schließlich mit dem Ohmschen Gesetz der Strom und die Leistung eines Rechtecks. Aus einem homogenen Wechselfeld folgt eine lineare Zunahme der Stromstärke mit der Umlaufstrecke. Dies ist auch z.B. für kreisförmige Wirbelströme gültig und begründet die Maßnahme, die leitenden Flächen möglichst klein zu gestalten.



## 2.6 Die Resonanzflipspulen

Der Skineneffekt bewirkt eine Verengung des effektiven Leiterquerschnitts, indem das erzeugte Magnetfeld die Ladungsträger an die Oberfläche drängt. Der Effekt ist vor allem in guten Leitern wie Aluminium wirksam, da das ablenkende Magnetfeld die Transportbewegung aufgrund des elektrischen Feldes dominiert.

Wie jeder Ladungs-Oszillator strahlt die HF-Spule elektromagnetische Wellen ab. Da die Stärke der Abstrahlung durch das oszillierende magnetische Moment bestimmt wird, geht außer der Frequenz die Spulenfläche ein. Die Ohmsche Leistung setzt sich wie folgt aus den genannten drei Ursachen zusammen:

$$(2.9) \quad P_{\Omega} = R_0 \cdot I^2 + P_{Wirbel}(B_1, \omega) + P_{Skin}(I, \omega, R_0) + P_{el.m.}(I, \omega, A).$$

Dabei sind  $I$  die effektive Stromstärke,  $\omega$  die Frequenz im Schwingkreis,  $B_1$  die effektive Feldstärke,  $A$  die Fläche einer Spule und  $R_0$  der Gleichstromwiderstand.

Die Frequenzabhängigkeit der einzelnen Beiträge unterscheidet sich folgendermaßen: Die Verlustleistung der Wirbelströme steigt quadratisch, die durch den Skineneffekt verursachte annähernd linear und die abgestrahlte Leistung mit der vierten Potenz der Frequenz. Aufgrund dieses unterschiedlichen Verhaltens lassen sich die einzelnen Beiträge aus Messungen bei verschiedenen Frequenzen eruieren [Bic97]. In der Abbildung 2.26 ist neben dem Verlauf der Resonanzfrequenz die an einem Prototypen ohne Mehrfachkorrekturen gemessene Frequenzabhängigkeit des elektrischen Widerstandes in Resonanz  $R = P_{\Omega} / I^2$  zusammen mit einer Fitfunktion der Form (2.1) aufgetragen. Für die korrigierte Spule sind diese Werte zu verdoppeln!

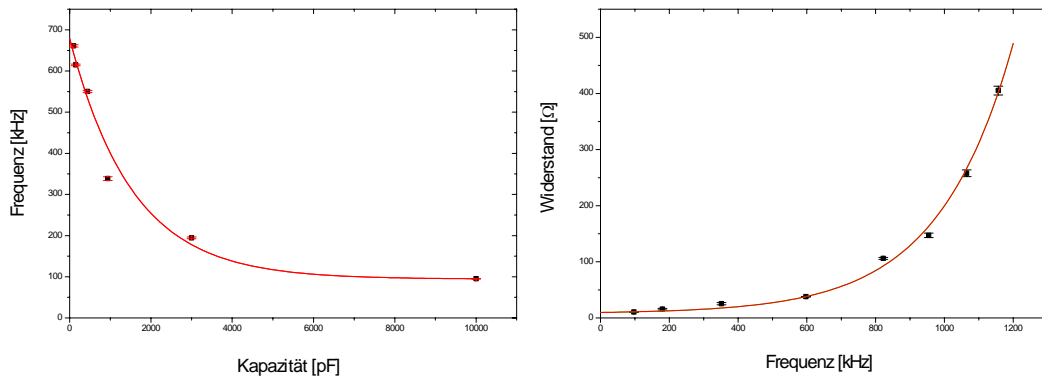


Abbildung 2.26: Links die Resonanzfrequenz des HF-Schwingkreises über den verwendeten Kapazitäten. Rechts der Verlauf des Ohmschen Widerstandes über der Frequenz. Das Verhältnis der einzelnen Beiträge exemplarisch bei 400 kHz: Wirbelstromverluste  $6 \Omega$ , Skineneffekt  $5 \Omega$ , Abstrahlung  $14 \Omega$ .

Da in die Berechnung einige vereinfachende Annahmen eingingen, läßt sich nur die Größenordnung für die einzelnen Verlustmechanismen vergleichen. Hierin stimmen Theorie und Messung überein und letztere bestätigt die Tatsache, daß bereits im Frequenzbereich weniger hundert kHz die Abstrahlungsleistung den dominanten Term darstellt.

Zur Anpassung an die HF-Verstärker dienen HF-Transformatoren mit Ferrit-Ringkernen. Sie bewirken nur geringe Ummagnetisierungsverluste und sind mit 100 Wicklungen einer HF-Litze bei Strömen bis ca. 10 A noch genügend weit von ihrer Sättigungsfeldstärke entfernt. Die Primärseite erhielt mehrere geeignete Wicklungen, so daß durch die unterschiedlichen Wicklungsverhältnisse zwischen Primär- und Sekundärseite für jede Frequenz die entsprechenden Sekundärwiderstände zwischen  $50 \Omega$  und  $200 \Omega$  an die Verstärker angepaßt werden können.

### 2.6.4 Die Kühlung der Resonanzflipspulen

Der Leistungsbedarf aller Resonanzflipspulen liegt bei starken Feldern im kW-Bereich. Aus diesem Grund ist eine Wasserkühlung vonnöten.

Den größten Anteil der thermischen Energie liefern die  $B_0$ -Spulen. Im Bereich der Abfräsungen, der „Neutronenfenster“ des Aluminiumkörpers, liegt der engste Leiterquerschnitt vor. Dies bedeutet, daß in der Fenstermitte zugleich die größte Ohmsche Wärmeentwicklung und die geringste Wärmeleitfähigkeit vorliegen. Um möglichst nahe an diesem heißesten Punkt zu kühlen, ist es erforderlich, die Kühlung an der Breitseite der Spule anzubringen. Dabei müssen jedoch zwei weitere Anforderungen berücksichtigt werden: Da die Spule auch mit Kühlung Temperaturgradienten aufweist, die zu einer Zunahme der Breite im Fensterbereich gegenüber den nicht

## 2.6 Die Resonanzflipspulen

abgefrästen Enden führen, dürfen diese Teile nicht starr verbunden werden. Außerdem gibt es Anwendungen der Resonanzspinechomethode, bei der die Spulen um die vertikale Achse gedreht zum Einsatz kommen, z.B. bei der Messung der Linienbreite eines Phonons [Kel95]. Deshalb sind flache Kühlungen von Vorteil, die auch den Einsatz von solcherart gedrehten Spulenpaaren erlauben, ohne den Strahlquerschnitt zu verengen.

Eine grundsätzliche Abschätzung liefert nach Hagen-Poiseulle für den Wasserdurchsatz durch ein Kühlsystem von ca.  $l=30m$  Länge

$$(2.10) \quad \dot{V} = \frac{\pi \cdot \Delta p}{8 \cdot \eta_{Wasser} \cdot l} \cdot R^4 \approx 1.6 \cdot 10^6 \cdot R^4 \frac{1}{m \cdot s},$$

wobei von einer Druckdifferenz  $\Delta p$  zwischen Zu- und Ablauf von 2 bar ausgegangen wurde. Die Kühlleistung ergibt sich zu

$$(2.11) \quad P_{Kühl} = c_{Wasser} \cdot \rho_{Wasser} \cdot \dot{V} \approx 6.7 \cdot 10^9 \cdot R^4 \frac{kW}{m^4 \cdot K}.$$

Für die Kühlung der Spulen mit einem Wärmeeintrag von ca. 1 kW sind demnach Kühlungen mit einem Mindestdurchmesser von 2 mm erforderlich.

Um einen hohen Durchsatz zu gewährleisten, kommen Kupferrohre mit einem üppig dimensionierten rechteckigen Querschnitt von 6mm · 8mm (erste 9 Spulen) bzw. mit einem Durchmesser von 7mm (restliche 12) zum Einsatz. Abbildung 2.27 zeigt einen Kühlkörper mit Kühlrohr und Kontaktflächen, an denen die Kühlung auf beiden Seiten einer Spule befestigt ist.

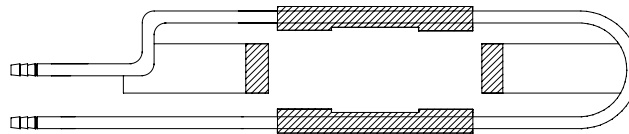


Abbildung 2.27: Ein Kühlkörper für eine Seite einer Resonanzflipspule. Das Rohr besitzt einen Rechteckquerschnitt von 6mm · 8mm. Die Montage der Kühlung erfolgt durch Verkleben der gekennzeichneten Flächen. Das biegsame Kupferrohr läßt thermische Verformungen der Spule zu.

In die Abfräsung fügt sich je ein Kupferblock ein, der den Wärmekontakt zwischen Rohr und Aluminium herstellt. Die Kühlung der Spulenenenden erfolgt durch Kupferblöcke, die seitlich mit dem Kühlrohr verbunden sind. Die Geometrie und Befestigung der Kühlkörper erlaubt thermische Längenänderungen der Spule, z.B. eine Ausdehnung des Fensterbereichs gegenüber den Spulenenenden.

Entscheidend für die heißeste Stelle der Spule, die Fenstermitte, ist die Dimensionierung, insbesondere die Breite der Kontaktflächen im Fensterbereich. Die Temperatur darf nicht zur Erweichung des GFK-HF-Spulenkörpers führen und muß deshalb unter 200 Grad Celcius bleiben. Aus diesem Grund erfolgte vor der Konstruktion eine analytische Berechnung der Temperaturprofils von der Mitte zum Rand des Fensters.

Wir betrachten ein kleines Teilstück eines Stromsteiges mit dem spezifischen Widerstand von Aluminium  $\rho$ , der Länge  $\Delta x$  und dem Querschnitt  $A$ . Für die bei der Stromstärke  $I$  darin produzierte Leistung durch Ohmsche Wärme gilt:

$$(2.12) \quad \Delta P_{el} = \frac{\rho}{A} \cdot I^2 \cdot \Delta x.$$

Die Wärmemenge, die dieses Teilstück zum Rand transportiert, hängt von der Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$  und dem Temperaturgradienten  $\Delta T / \Delta x$  ab:

$$(2.13) \quad P_{Leitung} = \lambda \cdot A \cdot \frac{\Delta T}{\Delta x}.$$

Der Übergang zu Differentialen und die nachfolgende Gleichsetzung von (2.4) mit der Ableitung von (2.5) liefert die Lösung

## 2.7 Die Steuerung des Experiments

$$(2.14) \quad \frac{d^2T}{dx^2} = -\frac{\rho}{\lambda} \cdot \frac{I^2}{A^2} \Rightarrow T = -\frac{\rho}{\lambda} \cdot \frac{I^2}{A^2} \cdot x^2 + T_0 (+T_1 \cdot x).$$

Hierbei wurde näherungsweise von konstanten Leitungskoeffizienten im interessanten Temperaturbereich ausgegangen.

Die quadratische Abhängigkeit der Temperatur spiegelt die Tatsache wider, daß die zu transportierende Wärmemenge zum Rand hin immer größer wird, da auf dem gesamten Weg zusätzliche Ohmsche Wärme entsteht. Das Vorzeichen deutet auf abnehmende Temperatur in Richtung des Wärmetransports zur Kühlung hin. Der in  $x$  lineare Term verschwindet in unserem Problem.

Die entscheidende Bedingung ergibt sich durch Auswertung von (2.6) an der Kontaktfläche zur Kühlung. Diese Stelle besitzt eine einfach zu errechnende Mindesttemperatur, die durch die zu transportierende Wärmeleistung (Formel (2.4) über die gesamte Breite integriert), die Wärmeleitfähigkeit  $\lambda_{Sty} = 1.36W / (m \cdot K)$  einer 0.05-mm-Schicht des verwendeten Klebers der Firma Stycast, die Wärmeleitfähigkeit und Breite (10 mm) des Kupferblocks und die Kühlwassertemperatur (max. 30 Grad C) festgelegt ist.

Insgesamt ergibt sich als Bedingung an den Abstand der Kühlung von der Fenstermitte:

$$(2.15) \quad x_{Kühl} \leq \sqrt{\frac{\lambda \cdot (T_0 - T_{\min}(\lambda_{Sty}, \lambda_{Cu}, I))}{\rho} \frac{A}{I}}.$$

Für  $I=200 A$  ergibt sich  $T_{\min}(\lambda_{Sty}, \lambda_{Cu}, I) \approx 5K$  und somit ein Maximalabstand von 35 mm.

Um noch Luft für Toleranzen zu besitzen (Dicke der Verklebung, Näherungen), erhielten die Kupferblöcke eine Breite von 14 mm und einen Abstand von der Fenstermitte von nur 29 mm. Im Bereich des Neutronenstrahls beträgt der Abstand 31 mm, um die Kupferteile nicht zu aktivieren.

Damit sollte die Kühlung Strömen bis ca. 220 A standhalten. In der Praxis fanden bisher lediglich Stromstärken bis 130 A Verwendung. Abschätzungen der Temperatur der Fenstermitte bei dieser Stromstärke bestätigen die berechnete Wirkung der Kühlkonstruktion.

### 2.6.5 Die Polarisationsdetektion

Die interessante Meßgröße ist der Erwartungswert der Polarisation des Strahls in  $x$ -Richtung, d.h. in der Richtung der Polarisationspräparation. Alle Phasen, die der Spin der Neutronen beim Passieren des Experiments erfährt, wirken sich auf diesen Erwartungswert aus.

Die Ermittlung des Polarisationserwartungswertes erfolgt in zwei Schritten. Zunächst entfernt ein Superspiegel-Polarisator, der zu dem bei der Präparation eingesetzten identisch ist, die „falsche“ (down-)Spinkomponente aus dem Strahl. Im folgenden stellt ein handelsüblicher  $^3He$ -Neutronendetektor die Zählrate der im Strahl verbliebenen Neutronen fest. Die Neutronen verursachen durch die bei einer Kernreaktion freiwerdende Energie über Ionisation des Füllgases Ladungsimpulse am Zählrohr, die verstärkt und gezählt werden.

Für den Einsatz mehrerer Zählrohre fand die Konstruktion eines zweistufigen 16-Kanal Verstärkers statt. Die Anstiegszeit dieses Verstärkers ist geringer als die Totzeit der zweieinhalb-Zoll-Zählrohre.

Aus der Detektion einer hinreichenden Zahl von Neutronen bei fixer Experimentjustage läßt sich der Erwartungswert der Zählrate mit statistischer Genauigkeit ermitteln. Durch die zusätzliche Messung der anderen (down-)Spinkomponente folgt der Erwartungswert für die Polarisation.

## 2.7 Die Steuerung des Experiments

Die Versorgung aller Komponenten erfolgt durch geeignete Stromquellen und Verstärker. Sämtliche Stromquellen sind extern analog anzusteuern. Den Steuerstrom regelt nach entsprechenden Vorgaben ein CAMAC-Crate. Der Meßrechner (LSI) übermittelt die gewünschten Werte an den Controller.

Eine Ausnahme stellt die Einstellung des Frequenzgenerators für den HF-Stromkreis dar. Sie erfolgt direkt über den Meßrechner und den IEEE-Eingang des Generators.

## 2.7 Die Steuerung des Experiments

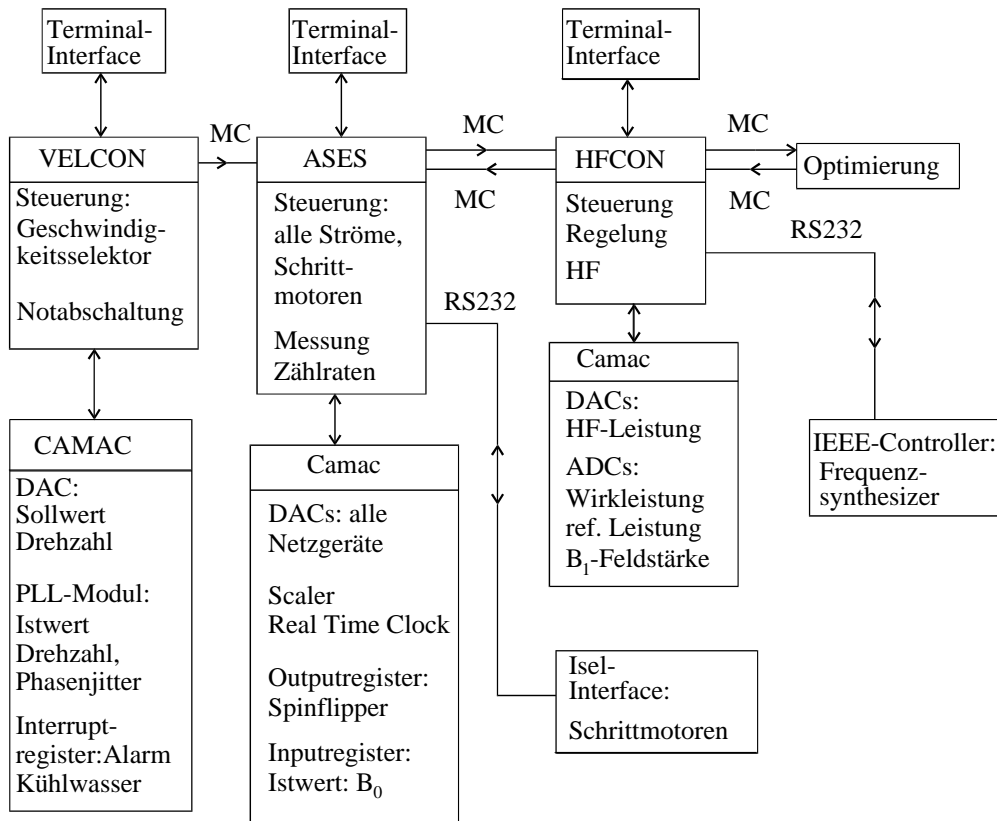


Abbildung 2.28: Die Experimentsteuerung. Im Zentrum befinden sich die Steuerprogramme VELCON, ASES und HFCON auf dem Meßrechner. Zur Experimentseite hin erfolgt die Weitergabe der Sollwerte an die Komponenten des Experiments über ein CAMAC-Crate und zwei RS232-Schnittstellen. Auf der anderen Seite vollzieht sich der Dialog über Terminal-Interfaces. Ein intelligentes Terminal stellt ein PC mit entsprechend entwickeltem C-Programm dar. Mehr zu diesem Programm folgt in Kapitel 4.

Die Aufnahme der Meßwerte geht in umgekehrter Reihenfolge vor sich: Die Detektorsignale werden nach ihrer Vorverstärkung elektronisch vorgespeichert (CAMAC-Counter) und danach vom Meßrechner ausgelesen. Wahlweise erfolgt die sofortige Speicherung aller relevanten Parameter und der Zählraten in files.

Für die Regelung der HF-Feldstärken genügt die bloße Einstellung der Verstärkerleistung nicht, da in den HF-Kreisen Temperaturdrifts auftreten können, die trotz gleichbleibender Verstärkerleistung zu einer Abweichung von den für Pi-Flips erforderlichen Feldstärkewerten führen, z.B. durch geringfügige Veränderung der Resonanzfrequenz des Kreises. Aus diesem Grund findet hier der Einsatz einer aktiven Regelkreisschaltung statt. Pick-up-Spulen ermitteln kontinuierlich die Feldschwankungen, auf die dann korrigiert wird.

Alle Parameter des Experiments lassen sich aufgrund dieser Maßnahmen einstellen und kontrollieren. Abbildung 2.28 gibt einen Überblick über die gesamte Steuerung. Weitere Maßnahmen, die zur Korrektur driftender Parameter (thermische Ausdehnung) ergriffen wurden, kommen in Kapitel 4 zur Sprache.

## 3 Die experimentellen Tests des Spektrometers

Der erste Aufbau des Experiments für Testmessungen erfolgte im April 1996 an einer Endposition (T 17) der alten Neutronenleiterhalle am ILL (Institut-Laue-Langevin) in Grenoble. Im Mittelpunkt stand die Erprobung der erstmalig eingesetzten konischen Mumetallabschirmung samt Einkoppelspulen und der neukonstruierten, für kalte Neutronen geeigneten Resonanzflipspulen. Erst an zweiter Stelle standen Messungen an Streuproben, die die Informationen über die Qualität der Abschirmung des zweiten Spektrometerarmes vervollständigten. Zur Demonstration der Sensitivität des Spektrometers für Probedynamik schloß eine Messung (mit mäßiger Statistik) an einer Polymerlösung die Strahlzeit ab.

Im Sommer 1997 fand eine weitere Strahlzeit mit dem endgültigen Aufbau statt. In der Zwischenzeit erfolgten einige Verbesserungen, insbesondere der Resonanzflipspulen und der Ein- und Auskoppelspulen, und die Vervollständigung des Detektorsystems.

Im Zentrum dieses Kapitels stehen Messungen, die Aufschluß über die Funktion der Komponenten des Experiments geben. Die Diskussion der Ergebnisse mit Probenstreuung folgt in Kapitel 4.

Der Nachweis einer befriedigenden Magnetfeldabschirmung erfolgte über Messungen im direkten Strahl mit und ohne Spinecho. Dabei kontrollieren die Resonanzflipspulen die richtige Spinstellung an verschiedenen Stellen der Flugstrecke. Dieser im 1. Abschnitt dieses Kapitels beschriebene Test der Mumetallabschirmung ergab insgesamt sehr befriedigende Ergebnisse. Allerdings waren zur Minimierung des Innenfeldes, insbesondere im hinteren Teil der konischen Abschirmung, starke Korrekturspulen vonnöten.

Im weiteren sollten die Messungen Aufschluß geben über die Homogenität der Magnetfelder in den Resonanzflipspulen. Zu diesem Zweck fanden Messungen in einer In-Beam-NMR-Konfiguration an einzelnen Spulen statt, die den Gegenstand des zweiten Abschnitts des Kapitels darstellen. Die Auswertung der gemessenen Polarisationsverteilungen erbrachte Werte, die gut sowohl mit den analytisch berechneten  $B_0$ -Feldgrößen als auch mit den numerisch ermittelten Ergebnissen bezüglich der HF-Spulen übereinstimmten.

Schließlich lieferten Messungen im direkten Strahl mit einer vollständigen Bootstrap-Anordnung die Werte zur optimalen Einstellung der Spulen und bestätigten die Funktion aller Komponenten anhand der gemessenen Polarisationswerte.

### 3.1 Die Abschirmung

#### 3.1.1 Die longitudinale Feldkorrektur

Die in Kapitel 2 beschriebene Mumetallabschirmung gegen Störfelder besitzt Grenzen ihrer Wirksamkeit. Zum einen beschreibt der Schirmfaktor, der die tatsächliche Permeabilität berücksichtigt, das Vorhandensein von Restfeldern auch in großer Entfernung von den Enden der Abschirmung. Zudem ist die Länge des Experiments und der Abschirmung beschränkt, so daß der Rest der exponentiell abfallenden Störfelder nicht ganz unerheblich ist, insbesondere da die Spulenöffnungen zusätzliche Gelegenheit zum Einbrechen von Feldern geben.

Die wirkungsvollste Maßnahme gegen Restfelder stellen elektromagnetische Gegenfelder dar. So erhalten der Mumetallzylinder und die konische Abschirmung Solenoide, die direkt am Mumetall zu liegen kommen und verbliebene Longitudinalkomponenten wirkungsvoll verringern. Abbildung 3.3 zeigt die gemessene Strahlpolarisation bei Variation der Stromstärke in der Abschirmung. Wie im folgenden sind die Fehler der Datenpunkte in der Größenordnung der Punktsymbole, auch ohne ausdrücklichen Hinweis, falls nicht eigens Fehlerbalken vorhanden sind.

### 3.2 Die relative Breite des Neutronenspektrums

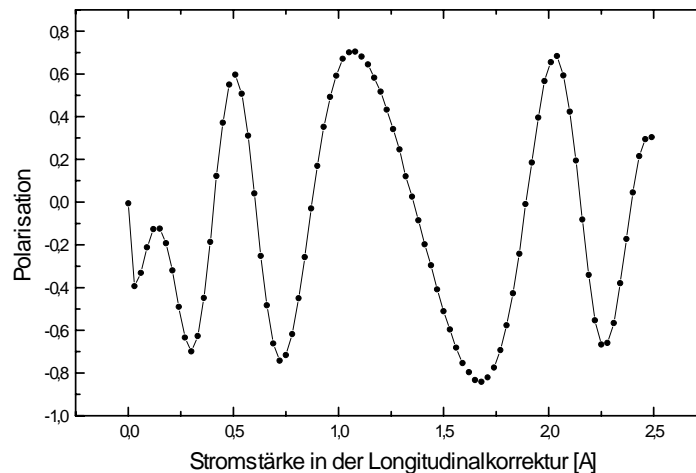


Abbildung 3.1: Eine Spinrotationskurve durch Variation der Longitudinalkorrektur. Das Maximum der Polarisierung liegt bei ca. 1.05 A. Durch den Verlauf im linken Teil der Kurve ist zu sehen, daß der Spin ohne Korrektur trotz Abschirmung etwa drei Umdrehungen ausführt, die auf longitudinale Restfelder zurückzuführen sind. Die Fehler der Datenpunkte sind kleiner als die Ausmaße der gezeichneten Punkte.

In dem verbliebenen Longitudinalfeld führt der Spin Rotationen aus. Eine Abschätzung des mittleren Feldes auf der gesamten Flugstrecke zeigt, daß im Vergleich zum Erdmagnetfeld lediglich ungefähr 4 mal geringere Felder vorliegen. Dies ist jedoch nicht allein auf den begrenzten Schirmfaktor zurückzuführen, sondern auf die Störfelder an den Verbindungsstellen der vierteiligen konischen Abschirmung (s. Kapitel 2). Da die Felder vorwiegend longitudinal gerichtet sind, ist eine sehr gute Korrektur möglich.

Die an den seitlichen Mumetallöffnungen verbleibenden Felder besitzen wesentlich größere Wirkungen, bevor sie exponentiell abgeklungen sind, indem sie zu adiabatischen Spindrehungen führen. Die im vorigen Kapitel beschriebenen Ein- und Auskoppelspulen sorgen für starke Führungsfelder in diesem Bereich. Damit diese nicht durch zu starke longitudinale Felder im Bereich der Enden gestört werden, sind dort zusätzliche Korrekturspulenwicklungen angebracht. Die Optimierung der Stromstärken in diesen Spulen findet bei geringen Feldern der Ein- und Auskoppelspulen statt, da sich unter dieser Voraussetzung die Richtung der Felder in diesem Bereich und damit die Spinrichtung sehr empfindlich mit der Variation von longitudinalen Komponenten modifizieren läßt.

#### 3.1.2 Die Störfelder durch die Spulenöffnungen

Vor allem im Bereich der Öffnungen im hinteren Teil der konischen Mumetallabschirmung für vier Resonanzflipspulen nebeneinander sind Störfelder unvermeidlich. Da das Erdmagnetfeld am Strahlplatz eine deutlich senkrechte Richtung besaß, herrschte diese Komponente auch in der Abschirmung vor.

Im Verlauf beider Strahlzeiten fand die Korrektur der Felder auf zwei verschiedenen Wegen statt. Zunächst sorgten über die Öffnungen gewickelte Spulen für die Verringerung der Störfelder. Da nachträglich angebrachte senkrechte Verbindungswände, die zwischen den Resonanzflipspulen montiert werden, die gleiche Wirkung zeigen, ist diese einfacher handhabbare Lösung vorzuziehen.

### 3.2 Die relative Breite des Neutronenspektrums

Um ein maximal breites Neutronenspektrum zu nutzen, ist eine möglichst parallele Positionierung des Geschwindigkeitsselektors zur Strahlachse erforderlich. Ist diese Geometrie einmal fix gewählt, steht die relative Breite des Neutronenspektrums fest.

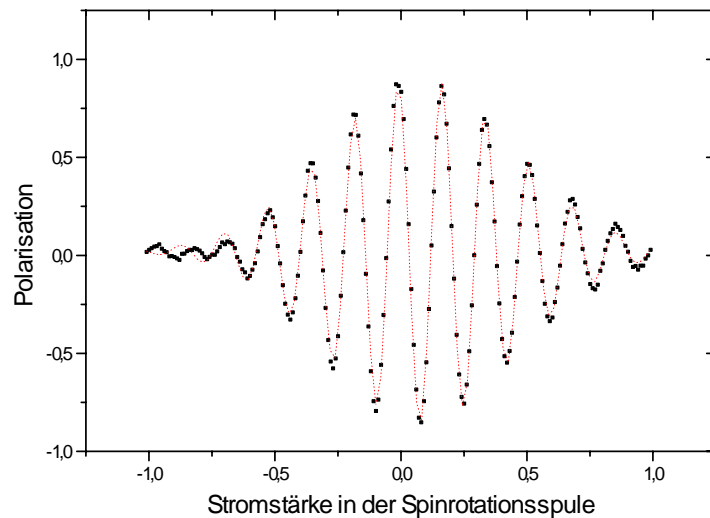
Die mittlere Wellenlänge variiert mit der Selektordrehzahl. Das Verhältnis zwischen Selektordrehzahl und mittlerer Wellenlänge hängt zum einen vom Design der rotierenden Scheiben des Geschwindigkeitsselektors, zum anderen ebenfalls von der axialen Positionierung des Selektors ab [Fri89].

Auskunft über das Neutronenspektrum geben *Spinrotationskurven*. Sie zeigen die Polarisierung des Strahls in Abhängigkeit von einem zur Polarisationsrichtung senkrechten Magnetfeld. Im Magnetfeld präzessieren die Spins,

### 3.2 Die relative Breite des Neutronenspektrums

wie in Kapitel 1 beschrieben, wobei die Phase von der Aufenthaltszeit im Magnetfeld und damit von der Geschwindigkeit der Neutronen abhängt. Die Polarisation bei einem Magnetfeld, in dem sich die Neutronen durchschnittlich mehrmals gedreht haben, ist dadurch gedämpft, daß langsamere Neutronen eine größere Phase gesammelt haben als schnelle. Die Periode der Maxima (und Minima) läßt auf die mittlere Geschwindigkeit schließen, wie die Einhüllende auf die Breite des Spektrums, da die Spinrotationskurve die Cosinus-Fouriertransformierte des Spektrums darstellt.

Abbildung 3.2 zeigt eine gemessene Spinrotationskurve. Die Spindrehung bewirkt in unserem Experiment eine Kastenspule vom Typ der Einkoppelpulen mit vollständigem Mu-Metallmantel (s. Kapitel 2), deren Feld jedoch nicht wie in der Einkoppelpule parallel zur präparierten Spinrichtung, sondern senkrecht dazu steht. Kastenspulen dieser Bauart besitzen ein sehr homogenes Feld, das über den gesamten Strahl zu einem homogenen Feldintegral führt.



*Abbildung 3.2: Eine Spinrotationskurve. Aufgetragen ist die Polarisation über der Variation der Stromstärke einer Kastenspule. Die Periode gibt Aufschluß über die mittlere Wellenlänge, die Einhüllende über die Breite des Neutronenspektrums.*

Das durch Fouriertransformation erhaltene Neutronenspektrum, das der Geschwindigkeitsselektor erzeugt, ist in Abbildung 3.3 erkennbar. Die Form des Spektrums ist sehr gaußähnlich, so daß wir bei allen folgenden Berechnungen in guter Näherung von einem Gaußspektrum ausgehen können.

Komplementär zur Breite des Spektrums ist die Betrachtung der longitudinalen Kohärenzlänge der Wellenpakete. Eine einfache Betrachtung zeigt, daß die Einhüllende der Spinrotationskurve direkt ein Maß für diese Kohärenzlänge darstellt: Die etwas geringere Polarisation nach einer Spinrotation im energetischen Bild kommt dadurch zustande, daß im Magnetfeld die up- und down-Komponenten auseinandergelaufen sind. Je geringer die longitudinale Kohärenzlänge eines Wellenpakets, desto erheblicher ist die dadurch verursachte Depolarisation. Geringe Kohärenzlängen, d.h. „kurze“ Wellenpakete bedeuten somit steil abfallende Einhüllende der Spinrotationskurve.

Die transversale Kohärenzlänge ist durch die Transversalwellenlängenverteilung und damit in erster Linie durch die Strahldivergenz bestimmt und wesentlich größer als die longitudinale.

### 3.2 Die relative Breite des Neutronenspektrums

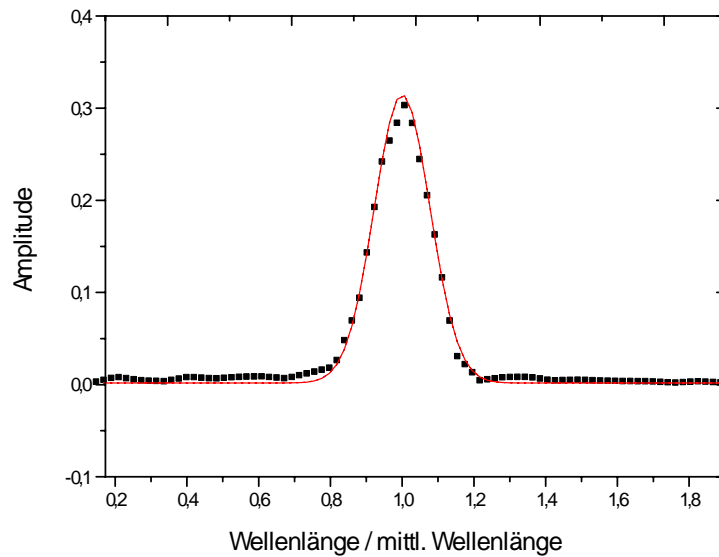


Abbildung 3.3: Die Fouriertransformierte der oben gezeigten Spinrotationskurve. Sie zeigt die Wellenlängenverteilung des Neutronenspektrums (gepunktet). Die durchgezogene Linie stellt einen Fit mit einer Gaußfunktion dar und zeigt die gute Übereinstimmung des durch den Geschwindigkeitsselektor erzeugten Wellenlängenspektrums mit dieser Kurve.

Zur Ermittlung der Breite des Spektrums und der mittleren Wellenlänge, wie auch anderer Größen wie z.B. der Inhomogenitäten der Felder ist es sinnvoll, auf die Fouriertransformation zu verzichten und die Daten direkt an eine geeignete Fitfunktion anzupassen. Für Spinrotationskurven setzt sich diese Funktion zusammen aus dem Erwartungswert der Polarisation eines im Magnetfeld  $B$  der Länge  $L$  rotierenden Spins und der nachfolgenden Integration über ein gaußförmiges Neutronenspektrum:

$$(3.1) \quad srfit(B) \propto \int \cos\left(\gamma B \cdot \frac{L}{(h/\lambda)/m}\right) \cdot e^{-\frac{-(\lambda-\bar{\lambda})^2}{2(\sigma_\lambda)^2}} d\lambda.$$

Durch Wahl der Integrationsvariablen  $(\lambda - \bar{\lambda})$ , entsprechende Zerlegung des Cosinus und Durchführung der Integration folgt:

$$srfit(B) = \cos\left(\gamma B \cdot \frac{L}{(h/\bar{\lambda})/m}\right) \cdot e^{-\frac{B^2}{2} \left(\gamma \cdot \frac{L \cdot \sigma_\lambda}{h/m}\right)^2},$$

was sich durch die Abkürzung

$$a = \gamma \cdot \frac{L}{(h/\bar{\lambda})/m}$$

einfacher schreibt.

$$(3.2) \quad srfit(B) = \cos(a \cdot B) \cdot e^{-\frac{B^2 a^2 (\sigma_\lambda)^2}{2 \lambda^2}}$$

Die Einhüllende der Spinrotationskurve gibt demnach, wie oben erwähnt, die Kohärenzlänge bis auf einen Faktor wieder, der die Wirkung des Magnetfelds beschreibt.

Durch Anpassung einer geeigneteren und in der Praxis verwendeten Funktion der Form



### 3.3 Die Feldhomogenität der Resonanzflipspulen: Messungen an einer Spule

$$srfit(B) = pl \cdot \cos(a \cdot (B - B_0)) \cdot e^{-\frac{(B-B_0)^2}{2 \cdot sta^2}} + y_0,$$

die eventuelle Offsets im Magnetfeld und der Polarisierung sowie eventuelle Depolarisationseffekte durch Streufelder berücksichtigt, läßt sich die Breite des Neutronenspektrums ermitteln durch

$$(3.3) \quad \frac{(\sigma\lambda)}{\lambda} = \frac{1}{a \cdot sta}.$$

Für das in Abbildung 3.2 gezeigte Spektrum aus der zweiten Strahlzeit ergibt sich

$$\frac{(\sigma\lambda)}{\lambda} = (7.37 \pm 0.06)\%.$$

Der angegebene Fehler bezieht sich nur auf den Fit einer Spinrotationskurve. Die Unsicherheit über die Breite unseres Spektrums ist jedoch sehr viel geringer, da die insgesamt über 300 im Verlauf der zweiten Strahlzeit gespeicherten Spinrotationen nur geringe Abweichungen aufweisen.

Der angegebene Wert bezieht sich auf eine Selektordrehzahl von 3300 Umdrehungen pro Minute. Bei der ebenfalls verwendeten Drehzahl von 2200 U/min ergibt sich der leicht veränderte Wert für die Breite des Spektrums von

$$(3.4) \quad \frac{(\sigma\lambda)}{\lambda} = (8.2 \pm 0.14)\%.$$

Dieser Effekt beruht auf der Form des vor dem Selektor vorliegenden Spektrums, das von der Eigenschaft des Neutronenleiters abhängt, längerwellige Neutronen mit relativ großer Divergenz zu bevorzugen, da kurzwellige Neutronen mit relativ großer Divergenz nicht mehr reflektiert werden.

Der zweite Wert bezieht sich wie der erste auf die Justage des Selektors während der zweiten Strahlzeit. Die Geschwindigkeitsverteilungen während der ersten Strahlzeit besaßen geringfügig geringere relative Breiten [Bic97], da die Selektorachse leicht gegenüber der Strahlrichtung gedreht war.

Die angegebenen Werte entsprechen einer vollen Halbwertsbreite (FWHM) von 17.4% bzw. 19.3%. Bei der Ausführung von Spinecho-Messungen führt der zweite Wert lediglich zu einer erträglichen Depolarisation von ca. 5% (NRSE) bzw. 10% (BNRSE) (s. Kapitel 1). Bezüglich einer hohen Neutronenintensität sind beide Werte von Vorteil und nutzen die Fähigkeiten der Spinechomethode.

Für die Berechnung der mittleren Wellenlänge aus diesen Messungen ist die Kenntnis des Magnetfeldintegrals, insbesondere der Länge der Spule vonnöten. Da die Spinecho-Messungen (Abschnitt 3.4) jedoch eine einfachere und genauere Bestimmung ermöglichen, verzichten wir an dieser Stelle auf deren Ermittlung aus diesen Größen. Der Vollständigkeit halber geben wir den Wert an, bei welchem die oben beschriebenen Messungen stattfanden.

$$\bar{\lambda} = (5.15 \pm 0.07)\text{Å}$$

### 3.3 Die Feldhomogenität der Resonanzflipspulen: Messungen an einer Spule

Zur experimentellen Bestätigung der guten Werte, die Berechnungen und Simulationen über die Homogenität der Magnetfelder in den neu konstruierten Spulen erbrachten (Kapitel 2), erfolgten Messungen an nur einer Spule. Die Polarisierung des Strahls innerhalb der Mumetallabschirmung ließ sich parallel zum konstanten  $B_0$ -Feld ausrichten, indem die Spins vor und hinter der Abschirmung zwischen zwei Führungsfeldern adiabatisch einer 90-Grad-Drehung der Feldrichtung folgten.

Ein in der Resonanzflipspule erfolgter Spinflip bedeutete die Umkehrung der Polarisierung am Analysator. Die Polarisationsanalyse liefert somit Informationen über die Vollständigkeit eines Flips über den gesamten Strahlquerschnitt. Ortsabhängige Inhomogenitäten mitteln sich auf diese Weise zu einer leichten Depolarisation des Strahls.

### 3.3 Die Feldhomogenität der Resonanzflipspulen: Messungen an einer Spule

#### 3.3.1 Die $B_0$ - $B_1$ - Scans

Das Ergebnis der Messung unter Variation der  $B_0$ - und der  $B_1$ -Feldstärken zeigt Abbildung 3.4. Die Hochfrequenz betrug 493 kHz. Sind sowohl Resonanz- als auch Pi-Flip-Bedingung erfüllt, ergibt sich ein globales Minimum. Analog führt die Einstellung der 3-Pi-Flip-Bedingung zu einem weiteren, lokalen Minimum. Die weiteren Minima entstehen durch das Zusammenspiel von  $B_0$  und HF: Eine Verstimmung von  $B_0$  gegenüber der Hochfrequenz sorgt im rotierenden Koordinatensystem für nicht völlig wegtransformierte Felder in der Richtung von  $B_0$ . Dadurch kommt es zu schnelleren Rabi-Oszillationen.

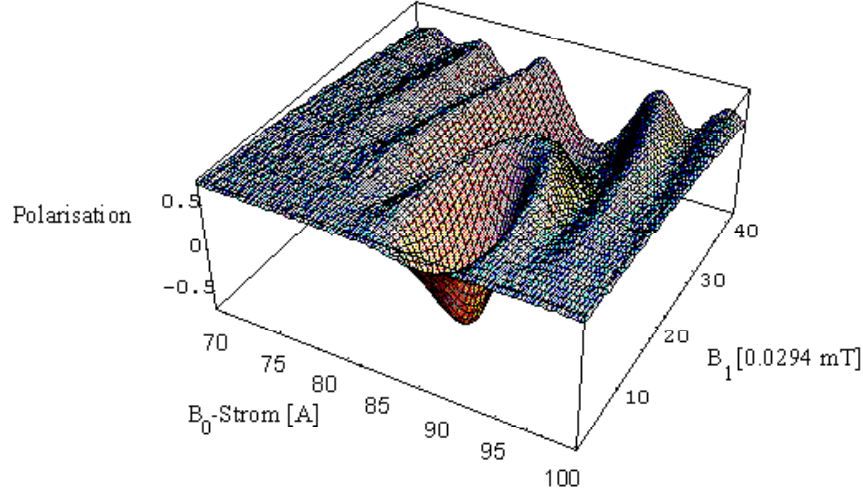


Abbildung 3.4: Das Ergebnis der Messung an einer Resonanzflipspule. Für geringe HF-Feldstärken ( $B_1$ -Achse, 493 kHz) verändert sich die Polarisation bei Variation des  $B_0$ -Feldes nur unwesentlich. Bei der Einstellung der Pi-Flip-Feldstärke entsteht das deutlich erkennbare Minimum. Bei der Einstellung der doppelten  $B_1$ -Feldstärke befindet sich der Spin in Resonanz wieder (im Mittel) in der ursprünglichen Richtung, dies ist der Rand „hinter“ dem Minimum. Lediglich bei Verstimmung von  $B_0$  sind bei dieser HF-Feldstärke Minima erkennbar. Diese entstehen durch das nicht wegtransformierte  $B_0$ -Feld im rotierenden Koordinatensystem. Sie vergrößern das effektive Feld und führen zu einer zusätzlichen Drehung, die allerdings gegen die  $x$ - $y$ -Richtung verdreht ist. Erst bei Einstellung des 3-Pi-Flips erhält man wieder ein tiefes Minimum.

Zum Anpassen der Daten mit geeigneten Funktionen kommen wir auf die Ergebnisse von Kapitel 1 zurück. Für den Erwartungswert der Polarisation in  $z$ -Richtung folgt - bei vorangegangener Präparation ebenfalls in dieser Richtung - aus der Zeitentwicklung des Spins in der Resonanzflipspule

$$(3.5) \quad \langle \hat{s}_z \rangle = \cos^2\left(\frac{\omega_{Rabi}}{2} \cdot t\right) + \frac{d^2}{d^2 + (\gamma B_{1eff})^2} \sin^2\left(\frac{\omega_{Rabi}}{2} \cdot t\right) - \frac{(\gamma B_{1eff})^2}{d^2 + (\gamma B_{1eff})^2} \sin^2\left(\frac{\omega_{Rabi}}{2} \cdot t\right)$$

$$\langle \hat{s}_z \rangle = 1 - \frac{2}{\frac{d^2}{(\gamma B_{1eff})^2} + 1} \sin^2\left(\frac{\omega_{Rabi}}{2} \cdot t\right) = 1 - \left(\frac{d^2}{(\gamma B_{1eff})^2} + 1\right)^{-1} \cdot (1 - \cos(\omega_{Rabi} \cdot t))$$

mit

$$\omega_{Rabi} = \sqrt{d^2 + (\gamma B_{1eff})^2} = \gamma B_{1eff} \cdot \sqrt{\frac{d^2}{(\gamma B_{1eff})^2} + 1}.$$

### 3.3 Die Feldhomogenität der Resonanzflüsspulen: Messungen an einer Spule

An dieser Formel ist abzulesen, wie der Spin mit der Rabifrequenz im rotierenden Koordinatensystem um das effektive Feld präzediert. Ist die Resonanzbedingung nicht erfüllt, so verläuft die Rabioszillation zum einen schneller, da ein „virtuelles“  $B_0$ -Feld übrig ist, zum anderen wird die negative Polarisation nicht voll erreicht, da die Rabioszillation um das effektive Feld in einer gegenüber der Senkrechten verdrehten Ebene verläuft. Diesen Effekt beschreibt der Faktor vor der trigonometrischen Funktion.

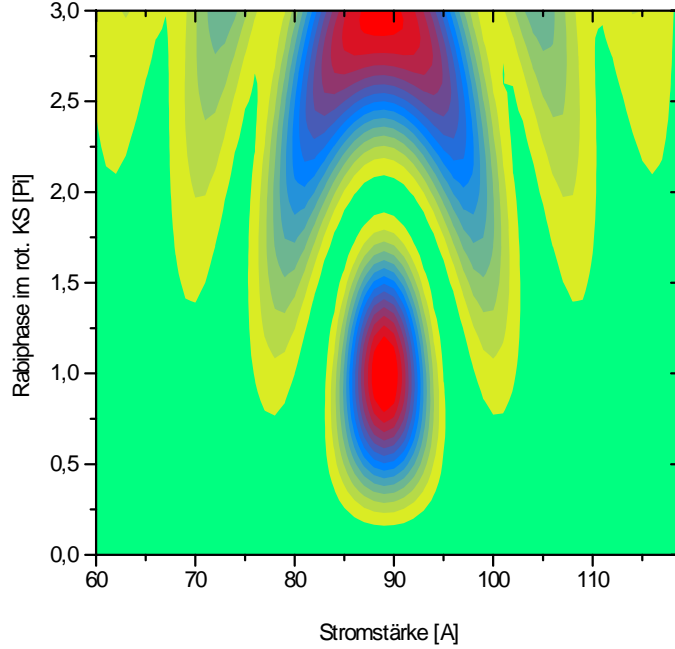


Abbildung 3.5: Die berechnete Polarisation bei Variation von  $B_0$  und HF-Feldstärke. Der Ausschnitt entspricht etwa der in Abbildung 3.4 gezeigten Messung. Verwendet wurde die Theorie für linear polarisierte HF-Felder. Die Auswirkungen der „Siegert-Bloch“-shift sind als eine leichte Links-Rechts-Asymmetrie am oberen Rand zu erkennen.

Über das Wellenlängenspektrum der Neutronen integriert schreibt sich die Polarisation

$$(3.6) \quad \langle \hat{s}_z \rangle = 1 - \left( \frac{d^2}{(\gamma B_{1\text{eff}})^2} + 1 \right)^{-1} \cdot \left( 1 - \int \cos(\omega_{\text{Rabi}} \cdot \frac{l}{h/m} \cdot \lambda) \cdot \sqrt{2\pi\sigma\lambda} e^{-\frac{(\lambda-\bar{\lambda})^2}{2(\sigma\lambda)^2}} d\lambda \right),$$

wobei  $l$  die Länge einer HF-Spule in Strahlrichtung bezeichnet.

Für die Abschätzung des Einflusses von Feldinhomogenitäten ist es vorteilhaft, die Integration über das Spektrum zuerst durchzuführen.

$$(3.7) \quad \langle \hat{s}_z \rangle = 1 - \left( \frac{(\gamma B_0 - \omega)^2}{(\gamma B_{1\text{eff}})^2} + 1 \right)^{-1} \cdot \left( 1 - \cos\left(\frac{\bar{\lambda} \cdot l}{h/m} \cdot \omega_{\text{Rabi}}\right) \cdot e^{-\frac{(\omega_{\text{Rabi}} \cdot l)^2 (\sigma\lambda)^2}{2}} \right)$$

Eine lokale  $B_0$ -Inhomogenität bewirkt, wie oben erwähnt, zum einen eine Verdrehung der Rabioszillation, da durch die „virtuelle“ Feldkomponente das effektive Feld im rotierenden Koordinatensystem verdreht ist. Wir beschränken uns zunächst auf diesen Effekt und entwickeln hierzu den ersten Faktor  $f$  bis zur zweiten Ordnung in  $\gamma B_0$ .

### 3.3 Die Feldhomogenität der Resonanzflipspulen: Messungen an einer Spule

( 3.8 )

$$f(\gamma B_0 + \Delta\gamma B_0) \approx \left( \frac{(\gamma B_0 - \omega)^2}{(\gamma B_{1eff})^2} + 1 \right)^{-1} + \frac{\partial f}{\partial (\gamma B_0)} \cdot \Delta\gamma B_0 + f \cdot \frac{6(\gamma B_0 - \omega)^2 - 2(\gamma B_{1eff})^2}{((\gamma B_0 - \omega)^2 + (\gamma B_{1eff})^2)^2} \cdot (\Delta\gamma B_0)^2$$

Da die Inhomogenitäten symmetrisch um einen Feldmittelwert liegen sollten, mittelt sich jeglicher linearer Effekt zu Null. Wir haben demnach lediglich die zweite Ordnung zu berücksichtigen.

Der auf den behandelten Faktor folgende Ausdruck enthält ebenfalls eine leichte Abhängigkeit von  $B_0$ . Allerdings kommt eine Abweichung vom Mittelwert lediglich in einer leichten Veränderung der Rabioszillation zur Wirkung. Außerhalb der Resonanz hebt sich der Effekt weg, da auf dem Weg des Neutrons durch die Spule mit gleicher Wahrscheinlichkeit Stellen zu schneller Oszillation mit entgegengesetzten abwechseln. In Resonanz führen sowohl positive als auch negative Abweichungen zu etwas schnelleren Rabioszillationen. Dies bedeutet aber nur, daß dem Fit nicht die exakten HF-Feldstärken zu entnehmen sind, da die Oszillation beschleunigt ist. Da unsere HF-Steuerung als Regelkreis mit Pick-up-Spulen nicht mit absoluten Werten arbeitet, sondern für die relative Konstanz der Werte sorgt, ist diese Einschränkung unwesentlich. Bei der Anpassung der Daten ist in Ausdruck ( 3.7 ) eine HF-Offsetvariable einzufügen.

Die nächste Aufgabe besteht darin, die Wirkung von Inhomogenitäten des HF-Feldintegrals auf die Polarisation zu betrachten. Der Einfluß von Inhomogenitäten des Hochfrequenzfeldes gleicht dem Umstand verschiedener Neutronengeschwindigkeiten. Anstelle der Flugzeit durch eine Spule variiert in diesem Fall die Rabifrequenz lokal. Bei der Annahme von gaußverteilten Inhomogenitäten genügt es, die scheinbare Breite des Neutronenspektrums aus einer Anpassung der Theorie an die Daten des Spulentests zu betrachten und mit der bekannten Breite zu vergleichen. Analog zur Faltung zweier Gaußfunktionen läßt sich die Standardabweichung der gaußförmig angenommenen unbekanntenen Feldintegralverteilung ermitteln.

Der Fit von ( 3.7 ) erbrachte unter Berücksichtigung von ( 3.8 ) und einer aus Spinrotationen bekannten Breite der Wellenlängenverteilung  $\sigma\lambda / \lambda \approx 0.0744$  folgende Werte:

$$\text{für } B_0 : \quad \Delta B_0 \approx 1.85 \cdot 10^{-2} \text{ mT}$$

$$\Rightarrow \frac{\Delta B_0}{B_0} \approx (1.1 \pm 0.4) \text{ ‰}$$

$$\text{und für } B_1 : \quad \frac{\Delta B_1}{B_1} \approx (2.6 \pm 0.18) \text{ ‰}$$

Die Fehler berücksichtigen die Unsicherheit des Fits. Der  $B_1$ -Wert ist besser, als die Berechnungen erwarten ließen, und dürfte eine untere Grenze für die relativen Inhomogenitäten darstellen. Es ist allerdings zu berücksichtigen, daß bei einem verkleinerten Strahlquerschnitt gemessen wurde, da diese Messung während der ersten Strahlzeit und an einer nur einfach korrigierten HF-Spule erfolgte.

Der Wert für  $B_0$ -Inhomogenitäten ist noch geringer, als bereits die Berechnung versprach, besitzt aber einen beträchtlichen statistischen Fehler.

Beide Werte zeigen aber immerhin, daß keine mit der Theorie und Feldberechnungen unvereinbaren Depolarisationen auftreten.

#### 3.3.2 Die HF-Resonanz

Um die angepaßten Werte zu kontrollieren, erfolgte eine genauere Näherung der Theorie für die HF-Kurve in  $B_0$ -Resonanz, die also einen Schnitt parallel zur HF-Achse in Abbildung 3.4 darstellt. Außerdem ermöglicht die folgende Näherung Vergleiche mit weiteren HF-Scans.

Für die Anpassung der in Abbildung 3.6 gezeigten Daten in der Nähe der Resonanz bietet es sich an, den Integranden in ( 3.5 ) zu entwickeln und die Integration anschließend auszuführen. Die Entwicklung nach der Verstimmung  $d$  bis zur zweiten Ordnung ergibt den Vorfaktor zur Fitfunktion ( 3.2 ), der den maximal erreichbaren Hub der Polarisation beschreibt.

### 3.3 Die Feldhomogenität der Resonanzflipspulen: Messungen an einer Spule

$$(3.9) \quad \langle \hat{s}_z \rangle_{\text{Feldinh.}} = \left( 1 - \frac{2 \cdot d^2}{(\gamma B_{1\text{eff}})^2} - O\left(d \cdot \frac{L}{h/m} (\sigma\lambda)\right)^2 \right) \cdot \cos(a \cdot B_1) \cdot e^{-B_1^2 \frac{a^2 (\sigma\lambda)^2}{2 \lambda^2}}$$

Der erste Ausdruck gibt die Depolarisation durch ein (lokales) Nichterfüllen der Resonanzbedingung an. Bei der Frage, inwieweit die Depolarisation zu berücksichtigen ist, bleibt der zweite Term bei den kleinen hier auftretenden Verstimmungen irrelevant. Er sagt aus, daß  $B_0$ -Inhomogenitäten bei breiten Neutronen-Geschwindigkeitsverteilungen schwerer wiegen, als wenn ein schmales Spektrum vorliegt. Zur Berechnung der Dämpfung setzen wir die mittlere Inhomogenität als Detuning:

$$\text{depolarisation}_{\text{Feldinh.}} = 2(\Delta\gamma B_0)^2 / \omega_{\text{HF}}^2.$$

Für Feldinhomogenitäten, die bei unseren Spulen maximal im Prozentbereich liegen, ergibt sich:

$$(\Delta\gamma B_0)^2 / \omega_{\text{HF}}^2 \approx 5 \cdot 10^{-7}.$$

Diese Depolarisation können wir bei dem Fit von HF-Resonanzkurven vernachlässigen.

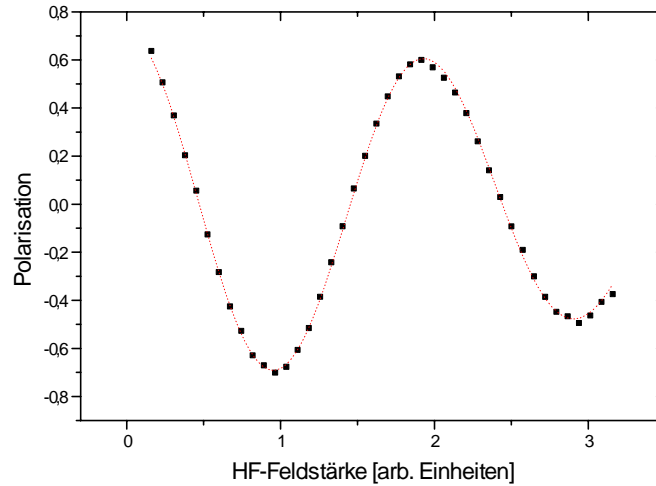


Abbildung 3.6: HF-Resonanzkurve. Die Punkte stellen die Daten und die Linie den Fit durch einen eindimensionalen Schnitt der Daten von Abbildung 3.4 dar. Die Ausgangspolarisation war 72.57% - dieser niedrige Wert beruht auf den kurzfristigen Umbauten für senkrechte Polarisationspräparation und -detektion.

Der Ausdruck (3.9) zeigt, daß ein Scan der HF-Feldstärke in Resonanz ebenfalls als Spinrotation verstanden werden kann, allerdings nun in einem rotierenden Koordinatensystem. Die Einhüllende gibt dabei, wie oben erwähnt, bis auf die Korrektur der HF-Inhomogenität die Breite des Spektrums wieder. Aus der Anpassung ergibt sich in guter Übereinstimmung mit dem obigen Wert:

$$\frac{\Delta B_1}{B_1} \approx (2.5 \pm 0.3)\%.$$

Es sollte noch angemerkt werden, daß für den Fit der in Abbildung 3.4 gezeigten Daten diese Näherung unbrauchbar ist, da das Detuning dort gegenüber der HF-Feldstärke nicht sehr klein ist, sondern jene an Größe sogar übertrifft.

#### 3.3.3 Die $B_0$ -Resonanzkurven

Eine andere Möglichkeit besteht darin, die HF-Feldstärke auf dem Wert konstant zu halten, der für die mittlere Geschwindigkeitskomponente einen Pi-Flip bedeutet, und die  $B_0$ -Feldstärke zu variieren. Abbildung 3.7 zeigt eine dadurch entstehende Resonanzkurve.

### 3.4 Die Messungen zur Einstellung des Spektrometers

Der Stromwert für Resonanz mit der Hochfrequenz (493 kHz) beträgt

$$I_{B_0} = (87.7 \pm 0.003 \pm 0.05) A.$$

Die Toleranz ist durch die Unsicherheit der Anpassung, also statistisch und durch die Genauigkeit der Stromregelung systematisch bedingt.

Auf Kurven dieser Art kommen wir im Abschnitt über die Justierung des gesamten Spinechoaufbaus ausführlicher zu sprechen.

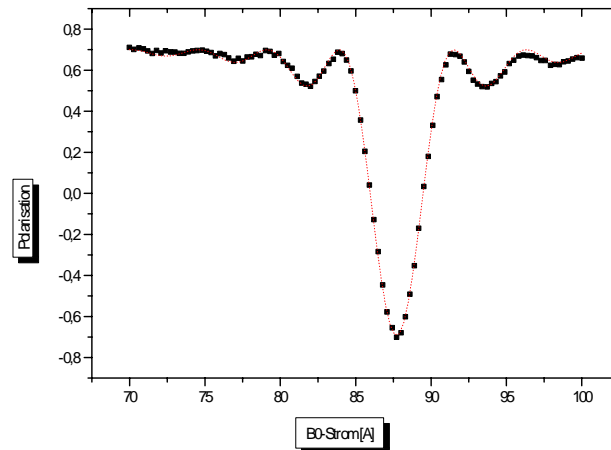


Abbildung 3.7:  $B_0$ -Resonanzkurve. Die Daten stellen einen eindimensionalen Schnitt der in Abbildung 3.4 gezeigten Meßergebnisse bei konstanter HF-Feldstärke dar (Punkte). Die Linie kennzeichnet den Fit. Die charakteristische Resonanzform ist in (3.7) durch den Vorfaktor  $f$  bestimmt. Die lokalen Minima repräsentieren die Feldstärken, bei denen der Spin im rotierenden Koordinatensystem zwar eine halbe Drehung ausführt, jedoch in einer gegen die Vertikalen verkippten Richtung endet. Das globale Minimum, d.h. die  $B_0$ -Resonanz, liegt bei  $I_{B_0} = (87.7 \pm 0.003 \pm 0.05) A$ .

Der leichte Abfall der Polarisation außer Resonanz deutet auf Störfelder im Außenraum der Resonanzflipspule. Sie entstehen vor allem durch die erodierten Windungszwischenräume. Dieser Effekt ist nicht zu vermeiden, macht sich bei der hier vermessenen Spule jedoch lediglich in einer Depolarisation von ca. 0.13%/A bemerkbar.

### 3.4 Die Messungen zur Einstellung des Spektrometers

Um die Funktion des Experiments im Hinblick auf die Probenmessungen zu gewährleisten, ist die Kenntnis aller Parameter zur reproduzierbaren Einstellung unerlässlich. Im Unterschied zu den in Abschnitt 3.3 gezeigten Kurven sind nun alle Spulen (NRSE=4, Bootstrap-BNRSE=8) beteiligt. Die Polarisations-Präparation und -Analyse erfolgt in der waagerechten x-Richtung.

Die Einstellung einer gewünschten HF-Frequenz (und Spinechozeit) erfordert zunächst das Auffinden der Resonanz, d.h. des entsprechenden  $B_0$ -Stroms. Die Einzelspulenmessungen, die Informationen über die Einstellung der zur Resonanz notwendigen Stromstärke liefern, waren aus Zeitgründen nur bei einer Frequenz möglich.

Im Prinzip läßt sich die Stromstärke für beliebige Frequenzen aus den Daten für eine Frequenz vorhersagen. In der Praxis ist die Präzision durch Abweichungen von einem linearen Verhalten limitiert. Hier spielt zum einen die teilweise Rückführung des Feldes durch die nichtlineare Mumetallabschirmung eine Rolle, ferner die Genauigkeit der Netzgeräte. Die genaue Einstellung der Stromstärke erfolgt mit Hilfe von  $B_0$ -Resonanzkurven.

Genauso sind Hochfrequenzscans zur Ermittlung der Parameter für einen Pi-Flip für jede Frequenz erforderlich, da der Regelkreis mit Pick-up-Spulen infolge der Abstrahlung frequenzabhängig ist. Eine ungefähre Einstellung der korrekten Feldstärke ermöglicht die direkte Einstellung entsprechender Verstärkerleistungen, die allerdings sehr ungenau quadratisch mit der Frequenz skalieren.

### 3.4 Die Messungen zur Einstellung des Spektrometers

Die Einstellung der ungefähren Parameter, deren Kenntnis durch Erfahrung mit dem experimentellen Aufbau verbunden ist, erlaubt es zunächst, die Flipspulen zu justieren. Darauf folgen Schritte zur Optimierung der Polarisation.

#### 3.4.1 Die Justage der Flugstrecken

Wie in Kapitel 1 gezeigt, beruht die Spindrehung der Neutronen beim Resonanzspinecho auf unterschiedlichen Phasen der Hochfrequenz bezüglich der Ankunft in der ersten und in der zweiten Spule bzw. Spulenpaar einer Flugstrecke. Daraus folgt, daß sich aus der Variation der Spulen in einem Spektrometerarm unterschiedliche Flugzeiten und Spinphasen ergeben. In Analogie zum konventionellen Spinecho könnte man von der Variation des Magnetfeldintegrals einer Flugstrecke durch Veränderung von deren Länge sprechen.

Zur Variation der Position eines Spulenpaares befindet sich dieses auf einem schrittmotorgesteuerten Verschiebetisch. Da die Verfahrstrecke über die Anzahl der Schritte genau bekannt ist, ermöglicht diese Methode die Bestimmung der mittleren Wellenlänge der Neutronen. Abbildung 3.8 zeigt exemplarisch zwei auf solche Weise erhaltene Spinechokurven.

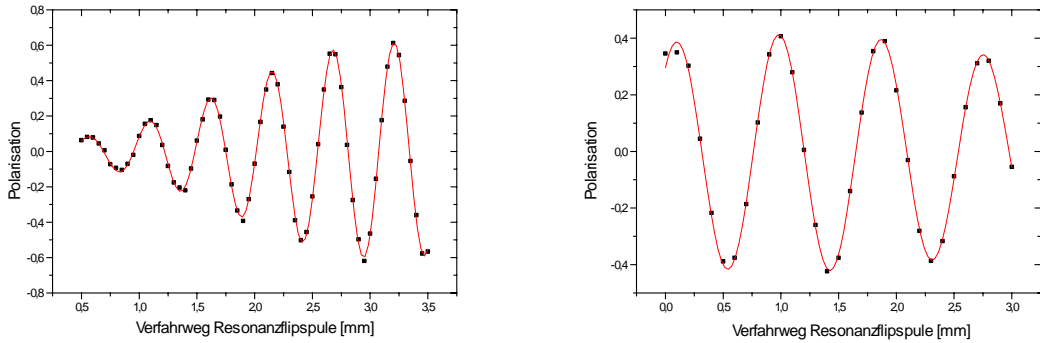


Abbildung 3.8: Durch Verfahren eines Flipspulenpaares erhaltene Spinechokurven. Die Punkte stellen die Meßwerte dar, die durchgezogene Linie ist ein Fit an die Daten. Aus der Länge einer Periode läßt sich die mittlere Wellenlänge des Neutronenstrahls ermitteln.

Der Verlauf der Kurve folgt aus der in Kapitel 1 hergeleiteten Beziehung für den Erwartungswert der Polarisation hinter einer Spinechoanordnung mit vier bzw. acht (BNRSE) Resonanzflipspulen.

$$(3.10) \quad \langle \hat{s}_x \rangle \propto \sin^8\left(\frac{\omega_R}{2} \cdot t_R\right) \cdot \cos\left(N \cdot \frac{\omega_{HF}}{2} \cdot t_L\right) \cdot \left(\frac{(\gamma B_1)^2}{\omega_R^2}\right)^8$$

$$+ 4 \cdot \sin^4\left(\frac{\omega_R}{2} \cdot t_R\right) \cdot \cos\left(\frac{N}{2} \cdot \frac{\omega_{HF}}{2} \cdot t_L\right) \cdot \left(\frac{(\gamma B_1)^2}{\omega_R^2}\right)^4 \cdot \left(\cos^2\left(\frac{\omega_R}{2} \cdot t_R\right) + \frac{d^2}{\omega_R^2} \sin^2\left(\frac{\omega_R}{2} \cdot t_R\right)\right)^2$$

$$+ \left(\cos^2\left(\frac{\omega_R}{2} \cdot t_R\right) + \frac{d^2}{\omega_R^2} \sin^2\left(\frac{\omega_R}{2} \cdot t_R\right)\right)^4.$$

In Resonanz und weitgehend erfüllter Pi-Flip-Bedingung ist nur der erste Term relevant.

$$(3.11) \quad \langle \hat{s}_x \rangle \propto \int \sin^8\left(\frac{\omega_R \cdot l}{2 \cdot h/m} \cdot \lambda\right) \cdot \cos\left(N \cdot \frac{\omega_{HF} \cdot \Delta L}{2 \cdot h/m} \cdot \lambda\right) \cdot e^{\frac{-(\lambda - \bar{\lambda})^2}{2(\sigma\lambda)^2}} d\lambda$$

### 3.4 Die Messungen zur Einstellung des Spektrometers

Hier haben wir noch über ein gaußförmiges Spektrum integriert und die Zeiten gemäß der Aufenthaltsdauer in den Spulen bzw. Flugstrecken eingesetzt.  $l$  ist die Flugstrecke durch eine Spule,  $\Delta L$  der Wegunterschied zwischen den Spulen des ersten und zweiten Armes. Für  $N$  ist die Zahl der Resonanzflipspulen einzusetzen.

Der trigonometrische Faktor läßt sich durch Cosinus-Funktionen ausdrücken, so daß die Integration durchgeführt werden kann. Für jeden Cosinus-Ausdruck erhält die Cosinus-Transformierte des Gauß eine andere Breite. Das Ergebnis besitzt die Form:

$$\langle \hat{s}_x \rangle \propto \sum \cos \left( N \cdot \frac{\omega_{HF} \cdot \Delta L}{2 \cdot h / m} \cdot \bar{\lambda} + \varphi_i \right) \cdot a_i e^{-\frac{(\sigma \lambda)_i^2}{2} - k_i^2 (\Delta L)^2}.$$

Da die Pi-Flip-Bedingung für alle Wellenlängen hinreichend erfüllt ist, sind die zusätzlichen Phasen modulo zwei Pi im Cosinusterm sehr klein. Wir vernachlässigen sie und klammern den Cosinusfaktor aus. Die Summe über die Gaußfunktionen nähern wir durch einen einzigen Gauß.

Die geeignete Fitfunktion lautet somit in Analogie zu (3.2)

$$(3.12) \quad \text{sefit}(\Delta L) = pl \cdot \cos(a \cdot (\Delta L - \Delta L_0)) \cdot e^{-\frac{(\Delta L - \Delta L_0)^2}{2 \cdot \sigma a^2}} + y_0,$$

was durch die Form der Kurve und die Verwandtschaft zum konventionellen Spinecho naheliegt.

Hier haben wir vereinfachend geschrieben

$$a = 4 \cdot \omega_{HF} \cdot \frac{\bar{\lambda}}{h / m}.$$

Der Faktor 4 rührt von der Tatsache her, daß mit Bootstrap-Aufbau gemessen wurde. Wir passen hiermit die Daten aus Abbildung 3.8 an. Allerdings ist aus der Standardabweichung auf die Breite des Spektrums nicht mehr unmittelbar zurückzuschließen, da die Funktion eine Näherung der exakten Berechnung des Polarisationserwartungswertes darstellt.

Das konstante  $B_0$ -Feld ist sehr gut bekannt, da die Einstellung der Hochfrequenz  $\omega_1$  auf Resonanz mit der Larmorfrequenz erfolgt. Für die mittlere Wellenlänge bei einer Selektordrehzahl von 3300 U/min folgt somit

$$\bar{\lambda} = a \cdot \frac{h / m}{4 \cdot \omega_1} = (5.15 \pm 0.07) \text{Å}.$$

Der Fehler gründet in der Standardabweichung der Werte für mehrere verschiedene Spinechokurven. Seine Größe dürfte durch Schwankungen des Strahlspektrums infolge der Umgebung - Reaktor, andere Experimente - bestimmt sein.

Anhand der Position der Spulen kann die Justage der Spulen auf identische Abstände im ersten und zweiten Arm stattfinden. In der Praxis ist das Verfahren eines Spulenpaares für die routinemäßige Aufnahme von Spinechos nicht zweckdienlich. Ein technischer Grund hierfür besteht darin, daß mechanische Verfahreinheiten eine Hysterese aufweisen können. Unser Verfahrtisch besaß nur eine sehr geringe Hysterese im Bereich weniger  $\mu m$ . Die Empfindlichkeit der Spinechomethode auf Phasenshifts ist jedoch weitaus größer, wie in Abbildung 3.8 zu erkennen ist. Die Verzögerung beim Anfahren des Tisches von links wirkt sich im rechten Plot durch einen zu flachen Verlauf der Kurve aus.

#### 3.4.2 Die Resonanzkurven im Spinechopunkt

Bei Einstellung des Spinechopunkts hebt sich die Phase, die die Neutronen insgesamt gesammelt haben, zum Schluß auf. Die Polarisation ist bei dieser Einstellung auf Verstimmungen der Resonanz empfindlich. Das Verhalten bei Änderung der Feldstärke, das ebenfalls auf der Beziehung (3.10) beruht, zeigen die Kurven in Abbildung 3.9.

Die Funktion zur Anpassung der Daten läßt sich hier nicht wie im letzten Absatz nähern, da die Resonanzbedingung nicht erfüllt ist. Das gleiche gilt auch für die Pi-Flip-Bedingung, obwohl die Hochfrequenzfeldstärke konstant gehalten wird, da im rotierenden Koordinatensystem das mehrfach erwähnte Restfeld im rotierenden Koordinatensystem für variable Feldstärken und Rabifrequenzen sorgt.



### 3.4 Die Messungen zur Einstellung des Spektrometers

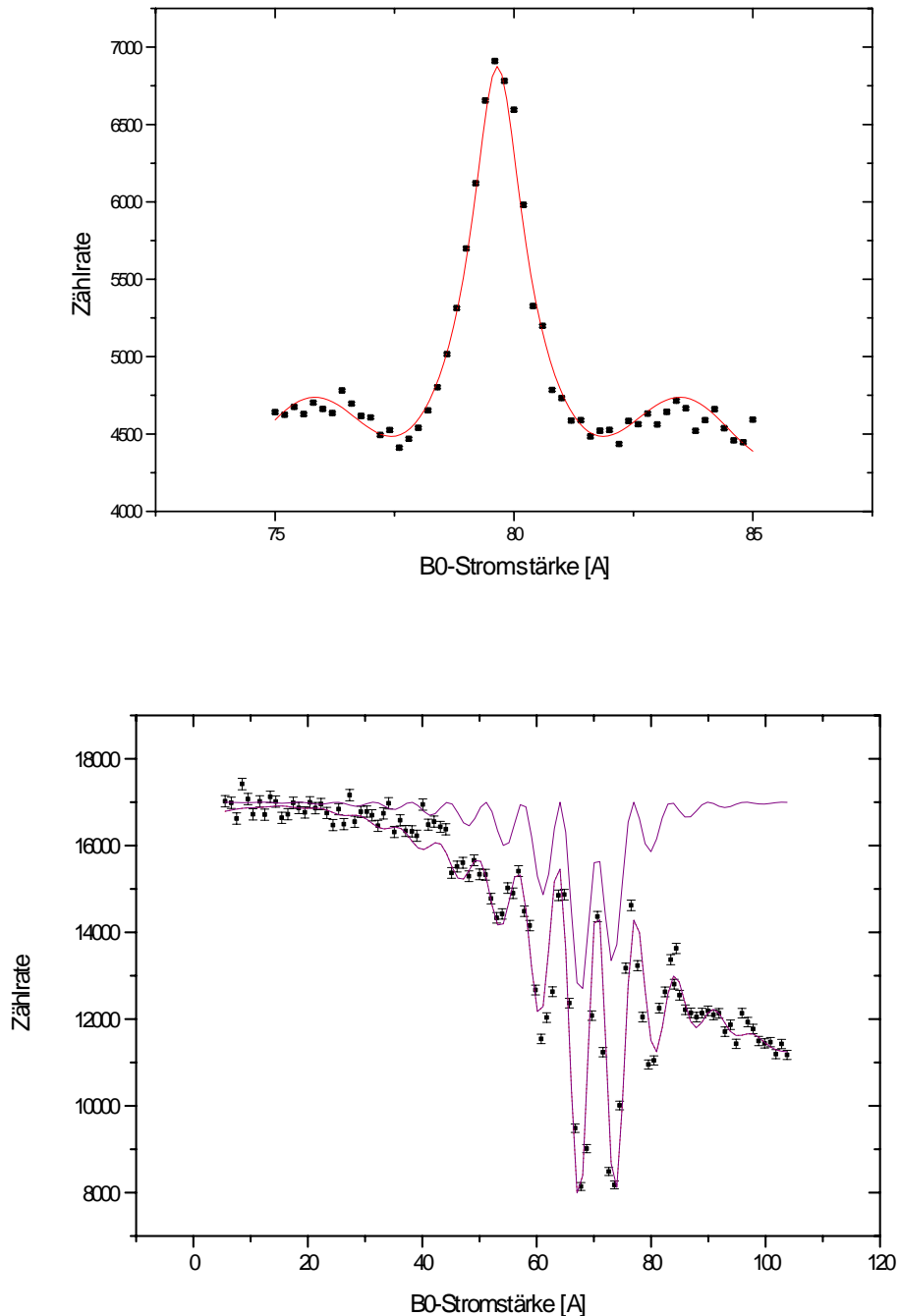


Abbildung 3.9: Zwei  $B_0$ -Resonanzkurven. Aufgetragen ist die Zählrate gegen den Strom in der  $B_0$ -Spule. Der kleinere Bereich oben spiegelt lediglich den Bereich um die Resonanz wider, während die Abbildung unten von kleinen Feldstärken an den ganzen Verlauf zeigt. An der Resonanzstromstärke ist erkennbar, daß bei unterschiedlichen Frequenzen gemessen wurde. Unten sind zwei Fitkurven (Linien) gezeichnet. Deutlich erkennbar ist, daß die Anpassung ohne einen Parameter, der die zusätzliche Spinrotation durch nicht identische Spulen beschreibt, unmöglich ist. Auch die Anpassung einer entsprechend modifizierten Funktion ist nicht optimal, zeigt jedoch, daß der Effekt verstanden ist.

Wir beschränken uns auf die NRSE-Theorie. Die Integration von (3.10) über das Neutronenspektrum erfordert die Cosinus-Fourierreihenentwicklung der trigonometrischen Funktionen. Unter Zuhilfenahme von

$$(3.13) \quad \sin^4(x) = \frac{1}{8} \cdot (\cos(4x) - 4 \cdot \cos(2x) + 3),$$

### 3.4 Die Messungen zur Einstellung des Spektrometers

$$\sin^6(x) = \frac{1}{32} \cdot (-\cos(6x) + 6 \cdot \cos(4x) - 15 \cdot \cos(2x) + 10) \quad \text{und}$$

$$\sin^8(x) = \frac{1}{128} \cdot (\cos(8x) - 8 \cdot \cos(6x) + 28 \cdot \cos(4x) - 56 \cdot \cos(2x) + 35)$$

ergibt sich der Erwartungswert der Polarisation im Spinechopunkt

( 3.14 )

$$\langle s_x \rangle = 1 - 2f^2 + \frac{15}{4}f^4 - \frac{15}{4}f^6 - \frac{105}{64}f^8 + \cos(\omega_{Rt_R})(2f^2 - 5f^4 + \frac{48}{8}f^6 - \frac{21}{8}f^8) +$$

$$\cos(2\omega_{Rt_R})(\frac{5}{4}f^4 - \frac{9}{4}f^6 + \frac{21}{16}f^8) + \cos(3\omega_{Rt_R})(\frac{3}{8}f^4 - \frac{3}{8}f^6) + \cos(4\omega_{Rt_R})\frac{3}{64}f^8.$$

Dieser Ausdruck läßt sich einfach über ein gaußförmiges Spektrum integrieren und ergibt die Fitfunktion.

Die untere Kurve in Abbildung 3.9 läßt sich mit dieser Funktion nicht anpassen. Dies bedeutet, daß die theoretische Beschreibung einen weiteren Parameter enthalten muß. Der Abfall der Polarisation zu größeren Feldstärken hin deutet darauf hin, daß die Feldintegrale der  $B_0$ -Spulen Unterschiede aufweisen. Um diese Tatsache zu verdeutlichen, zeigt Abbildung 3.10 das Verhalten der Zählrate bei ausgeschalteter Hochfrequenz. An diese Kurven läßt sich ein Cosinus anpassen, der eine Spinrotation mit der Periodenlänge 307 A erweist. Durch Spinrotationen an einzelnen Spulen ließ sich der Verursacher feststellen. Da eine Reparatur zu einem Ausfall mehrerer Strahlzeit-Tage geführt hätte, wurde im folgenden diese Spule nur bei denjenigen Messungen eingesetzt, deren Polarisation nicht kritisch war, d.h. im direkten Strahl mit guter Statistik.

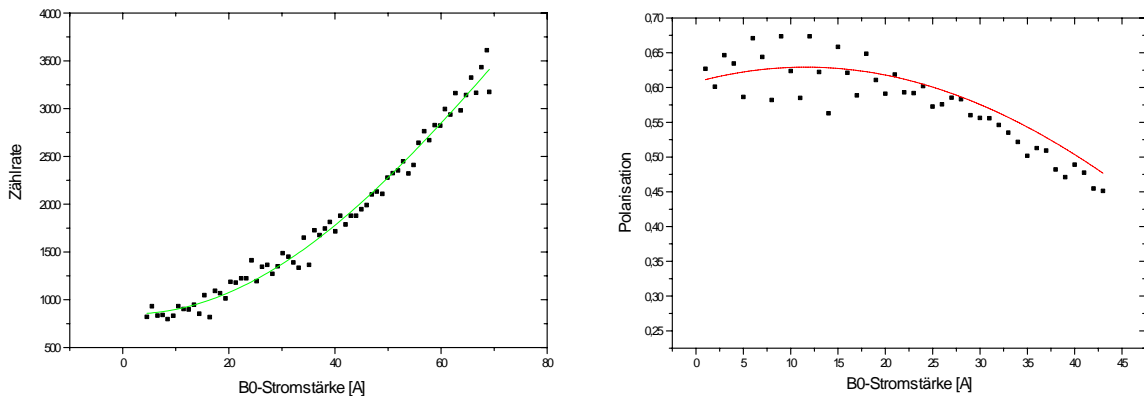


Abbildung 3.10: Das Verhalten der Zählrate bzw. Polarisation durch Unterschiede in den Feldintegralen der  $B_0$ -Spulen. Deutlich ist eine Spinrotation mit einer Periode von 307 A zu erkennen. Zusätzlich zeigt die linke Abbildung bei kleinen Stromstärken Oszillationen. Die Analyse ergab, daß in einer Spule durch einen Feinschluß zwischen zwei Windungen das Feld nicht senkrecht gerichtet war. Die gegenläufige Rotation in den Spulen eines Bootstrap-Paares führt zu diesen Oszillationen, da der Spin periodisch aus der x-y-Ebene verkippelt wird.

Beim Einsatz des Spektrometers mit Multidetektor und zwölf Spulen erfordert die Stromversorgung der Spulen den Einsatz zweier Netzgeräte. Die Resonanzkurven beim Scan der Stromstärke einer Stromquelle und gleichzeitiger fester Einstellung auf Resonanz am anderen Gerät besitzen eine Form, die sich von den oben gezeigten Daten unterscheidet. Nur bei erfüllter Resonanzbedingung in allen Spulen existiert überhaupt ein Polarisationsmaximum (bei Justage auf den Spinechopunkt). Bei Abweichungen davon stellt sich eine vollständige Depolarisation des Strahls ein, da die in den resonanten Spulen eines Spektrometerarmes gesammelte Phase nicht wieder in der anderen Flugstrecke aufgehoben wird. Abbildung 3.11 zeigt die Einzelresonanzen beider Spektrometerarme.

### 3.4 Die Messungen zur Einstellung des Spektrometers

Anhand der gezeigten  $B_0$ -Resonanzkurven ließ sich die theoretisch ermittelte Konstante für die Feldstärke in den Spulen im Verhältnis zur Stromstärke überprüfen. Der Wert liegt in guter Übereinstimmung mit der Berechnung bei  $0.1864 \text{ mT/A}$  (Berechnung:  $0.1887 \text{ mT/A}$ ).

Zudem konnten auf analoge Weise für verschiedene Frequenzen im direkten Strahl die Parameter zur Ansteuerung der Resonanzflipspulen gewonnen werden, die bei den Messungen an Streuproben mit geringerer Statistik nur reproduziert werden mußten.

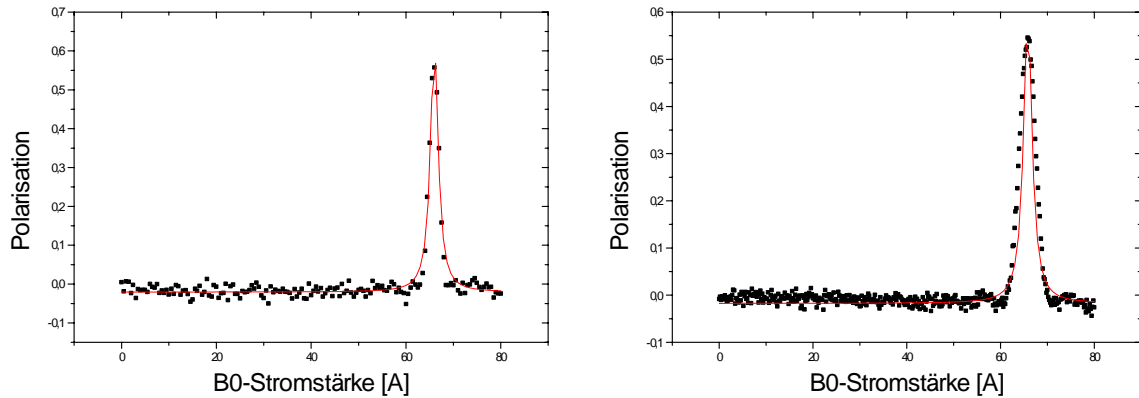


Abbildung 3.11: Resonanzkurven bei Änderung des Stroms in nur einem Spektrometerarm. Die Polarisation besitzt lediglich ein Maximum bei erfüllter Resonanzbedingung. Die Fits erfolgten mit einfachen Resonanzkurven, da nur die Lage des Maximums interessierte.

#### 3.4.3 Die Ermittlung der HF-Leistungen

Bei vorheriger Justage des Spinechopunktes läßt sich schließlich die HF-Feldstärke über die Polarisation einstellen. Wichtig ist hierfür, daß die  $B_0$ -Stromstärke für Resonanz mit der Hochfrequenz sorgt, da ansonsten restliche  $B_0$ -Komponenten im rotierenden Koordinatensystem den Wert für die Hochfrequenzfeldstärke nach unten verfälschen.

Abbildung 3.12 zeigt typische Kurven aus Arm 1 und 2, die durch HF-Scans entstehen und deren Maxima die optimale Einstellung widerspiegeln. Da die Resonanzflipspulen von insgesamt drei Verstärkern angesteuert werden, erfolgen die Scans nicht simultan für alle Spulen. In den vom jeweiligen Scan nicht betroffenen Spulen herrschen Feldstärken, die zu einem Pi-Flip führen. Die Polarisation geht außerhalb des Maximums auf Null zurück, da der Strahl bei der Passage des nicht gescannten Armes völlig depolarisiert wird. Die Plots unterscheiden sich lediglich darin, daß bei der linken Kurve der Spinflipper aktiviert war.

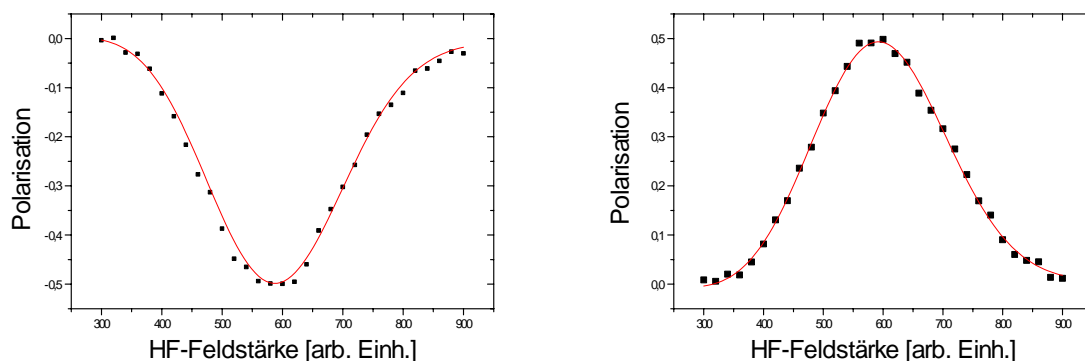


Abbildung 3.12: Die Polarisation bei Änderung der HF-Feldstärke in einem der beiden Spektrometerarme. Auf der x-Achse ist der Sollwert für den HF-Regelkreis aufgetragen. Die Spulen des anderen Armes sind auf Pi-Flip gestellt. Bei der Aufnahme der linken Kurve war der Spinflipper aktiviert.

### 3.5 Die Spinechokurven

Die exakte theoretische Beschreibung der Polarisation bei HF-Scans erfolgt wieder mittels der Umformung der allgemeinen Gleichung für den Erwartungswert in Cosinus-Terme. Vereinfacht wird die Lage in diesem Fall dadurch, daß die Resonanzbedingung erfüllt ist und  $f$  damit zu Eins wird.

Zur Ermittlung der Maxima bzw. Minima der gezeigten Kurven genügt es allerdings, eine geeignete einfache Resonanzbeziehung zu verwenden.

#### 3.5 Die Spinechokurven

Im Hinblick auf präzise Polarisationsmessungen bei Streuung an Proben stellen wir hier die einfachste und überwiegend genutzte Möglichkeit zur Aufnahme von Spinechos durch eine Rotationsspule vor. Die Variation der Frequenz stellt eine interessante Alternative dar, die wir deshalb erwähnen. Beide Methoden verzichten im Gegensatz zur Veränderung der Flugstrecke auf mechanische Bewegung.

Die Übereinstimmung aller Methoden besteht darin, die den Neutronen im ersten Spektrometerarm aufgeprägte Spinphase nicht im zweiten Arm wieder völlig zu Null gehen zu lassen, sondern die Phasendifferenz zu variieren und die jeweilige Polarisation zu detektieren.

Um Aussagen über die Funktion der Resonanzflipspulen zu treffen, ist die erreichbare Polarisation von Interesse.

##### 3.5.1 Die Nutzung der Rotationsspule

Die technisch am einfachsten zu realisierende Methode greift auf die Kastenspule für Spinrotationen zurück. Bei identischen Abständen, Strömen und HF-Frequenzen der Flipspulen in beiden Armen bewirkt ein zusätzliches Feldintegral durch diese Spule ein Analogon zur Spinrotation. Die Spinechokurven sind vergleichbar mit den Rotationskurven, es besteht lediglich der Unterschied, daß im Maximum der Kurve die Spins nicht ruhen, sondern in beiden Flugstrecken sich aufhebende Drehphasen sammeln.

Die Fitfunktionen für diese Spinechokurven sind identisch mit (3.2). Dies bedeutet auch, daß die mittlere Wellenlänge aus den Daten nicht unmittelbar hervorgeht. Immerhin folgt jedoch das Verhältnis unterschiedlicher Wellenlängen aus der Periodenlänge der Oszillationen verschiedener Kurven.

Ebenso wie bei Spinrotationen und im Unterschied zu den Spinechos durch Verfahren einer Spule folgt aus der Einhüllenden die Breite der Wellenlängenverteilung. Abbildung 3.13 erweist die Ähnlichkeit zu den oben gezeigten Spinrotationskurven.

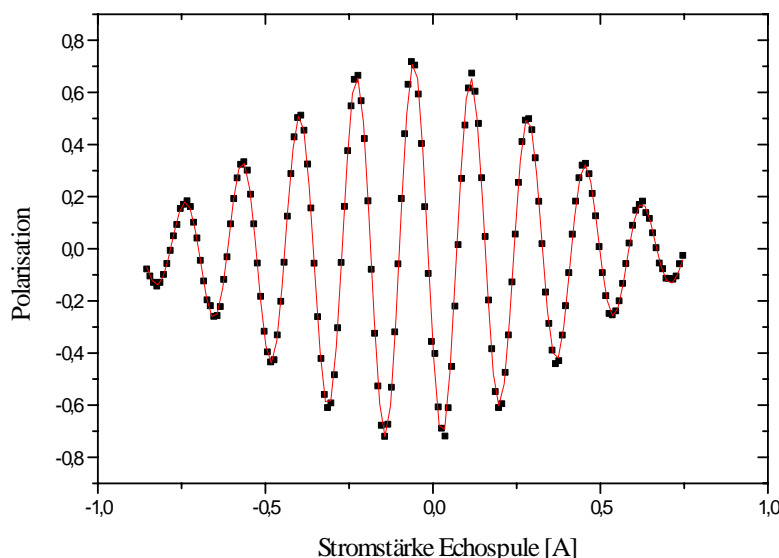


Abbildung 3.13: Eine Spinechokurve, die durch zusätzliche Rotation der Spins in der bereits bei Spinrotationen eingesetzten Spule zustandekommt. Wieder kennzeichnen die Punkte die Daten, die durchgezogene Linie den Fit.

Die Anpassung einer geeigneten Fitfunktion enthält zudem Informationen über die Lage des Spins bezüglich der senkrechten Präzessionsachse, da eine Abweichung in Form eines Offsets in Erscheinung tritt.

Sämtliche Messungen an Proben (Kapitel 4) bedienen sich dieser Methode zur Aufnahme von Spinechokurven.

### 3.5 Die Spinechokurven

#### 3.5.2 Die Variation der Frequenz

Auf dieselbe Weise, wie die Länge der Flugstrecke, die ein Neutron zwischen den Flipspulen eines Arms passiert, die Spinphase bestimmt, wirkt sich die Frequenz der rotierenden Komponente auf die resultierende Phase aus. Durch das Verstimmen der Frequenzen eines Arms entsteht demnach ebenfalls eine Spinechokurve.

Werden die Spulen in Resonanz betrieben, muß für das Abstimmen der Larmorfrequenz auch das  $B_0$ -Feld und damit die  $B_0$ -Stromstärke der Hochfrequenz folgen. Es besteht jedoch auch die Möglichkeit, hierauf zu verzichten, da die  $B_0$ -Resonanz eine genügende Breite aufweist. Abbildung 3.14 zeigt die Folge einer HF-Verstimmung.

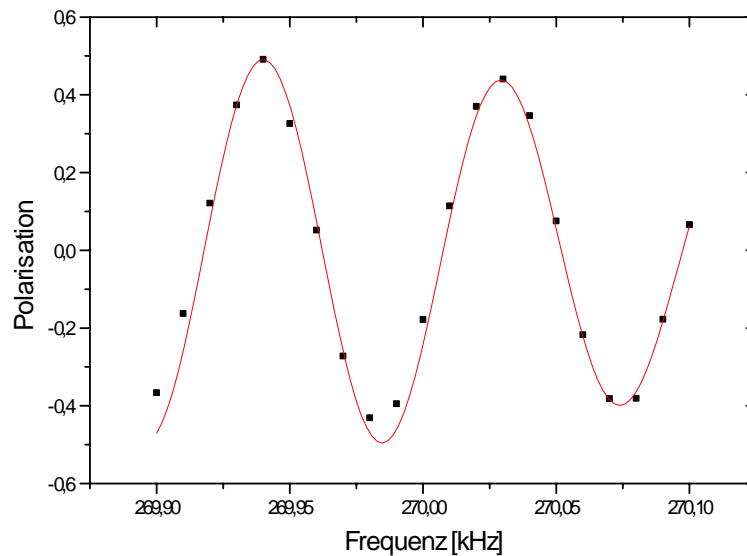


Abbildung 3.14: Spinechokurve durch das Verstimmen der Frequenzen eines Arms. Gepunktet sind die Daten, durchgezogen ein Fit.

Zur Veranschaulichung der Folgen, die eine Verstimmung der HF-Frequenz gegenüber der Larmorfrequenz nach sich zieht und die zur Spinechokurve führen, zeigt Abbildung 3.15 die Polarisation über der zweidimensionalen Variation von Frequenz und Echospule. Deutlich ist zu sehen, daß sich die Maxima der Echospulen-Spinechokurven mit der Frequenz verschieben. Der Grund hierfür liegt darin, daß das mit der Hochfrequenz rotierende Koordinatensystem, in dem das HF-Feld ruht und der Spin durch die Rabioszillation den Pi-Flip vollführt, für eine zusätzliche Phase sorgt, die von keinem anderen Spulenpaar kompensiert wird. Es existiert zwar eine Rest- $B_0$ -Komponente in diesem System, da dieses Feld nicht der Hochfrequenz nachgeführt wurde. Doch bei kleinen Verstimmungen ist diese Komponente gering gegenüber der HF-Komponente, und die Rabioszillation ist kaum gestört.

Aus praktischen Gründen ist dieser Methode zur Aufnahme von Spinechokurven die Variation der Echospule vorzuziehen, da in vollem Betrieb ein HF-Verstärker mehrere Spulenpaare (mit identischer Frequenz) versorgt, wobei eine geeignete Kapazität für die Resonanz im Schwingkreis sorgt. Die Verstimmung der Frequenz müßte das Nachregeln der Kapazität nach sich ziehen. Der technische Aufwand für die Echospulenmethode ist wesentlich geringer.

### 3.5 Die Spinechokurven

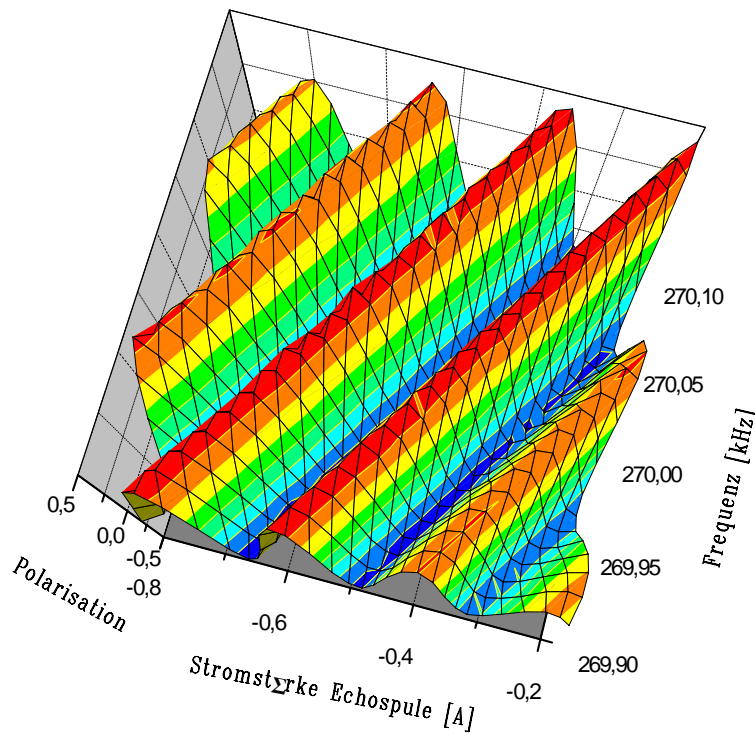


Abbildung 3.15: 3D-Plot der Polarisation über der Frequenz eines Spulenpaares und der Stromstärke der Echospule. Die Variation der Frequenz führt zu Spinechokurven, da der Spin in der betreffenden Spule eine größere Phase erlangt als in den übrigen Flipspulen.

#### 3.5.3 Die Polarisation im Spinechopunkt im Vergleich zur Theorie

Die Effizienz des Spektrometers hängt von der erreichbaren Polarisation, und diese insbesondere von der Funktion aller Resonanzflipspulen ab. Die oben beschriebenen Einzelmessungen konnten aus Zeitgründen nicht mit allen Spulen durchgeführt werden. Zum Test der Funktion aller Spulen läßt sich geschickter die bei den gemessenen Spinechokurven erreichte Polarisation mit den theoretischen Werten für einen Spinechoaufbau vergleichen. Abbildung 3.16 zeigt eine Spinechokurve nach Optimierung der gesamten Apparatur im Vergleich mit einer Spinrotationskurve. Bei beiden Messungen bestanden identische Bedingungen.

Die theoretisch erwartete Depolarisation durch die Breite des Neutronenspektrums und die „falsche Komponente“ der linear polarisierten HF liegt bei ca. 6%. Es bleiben ca. 9% Differenz, die auf Feldinhomogenitäten zurückzuführen sind.

Die Berechnung der Depolarisation bei der Spinechokonfiguration erfolgt wie im Falle der Einzelspulenmessung. Für den Erwartungswert der Polarisation ist lediglich nun der Zeitentwicklungsoperator aller Spulen zu berücksichtigen. Es ergibt sich:

$$(3.15) \quad \langle \hat{s}_x \rangle = \left( \hat{U}_{ges} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right)^* \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \hat{U}_{ges} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

mit den in Kapitel 1 hergeleiteten Zeitentwicklungsoperatoren. Im Ergebnis der Berechnung lassen sich, wie dort gezeigt, in Analogie zu der ausführlichen Betrachtung der Verhältnisse an nur einer Spule auch in diesem Fall Vorfaktoren, die die Resonanz beschreiben, und Faktoren, die die Rabioszillation beschreiben, finden. Die näherungsweise Abschätzung der Depolarisation erfolgte anhand der Ableitungen der Vorfaktoren.

Die genaue Aufteilung der Depolarisation auf  $B_0$ - und HF-Inhomogenitäten ist nicht möglich. Wir gehen von zwei Grenzfällen aus. Unter der Annahme eines ideal homogenen  $B_0$ -Feldes ergibt sich für die HF-Feldintegral-Inhomogenität

$$\frac{\Delta B_{int}}{B_{int}} \approx \sqrt{9\% \cdot \frac{6}{10}} / \pi \approx 7.4\% .$$

### 3.5 Die Spinechokurven

Umgekehrt ergibt sich für die maximal mögliche  $B_0$ -Inhomogenität

$$\frac{\Delta B_0}{B_0} \approx \sqrt{9\% \cdot \frac{1}{4} \frac{B_1}{B_0}} \approx 1.3\% .$$

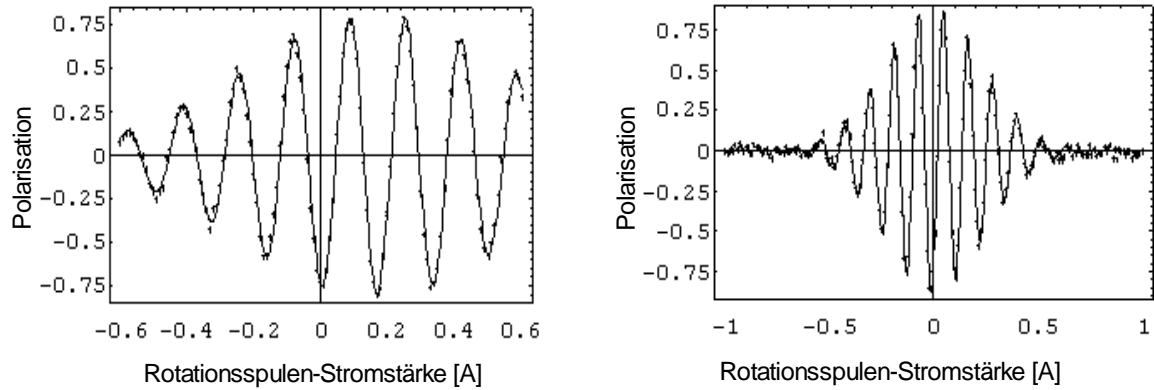


Abbildung 3.16: Eine Spinechokurve (178 kHz) neben einer Spinrotationskurve zum Vergleich der Polarisation. Das Verhältnis der gemessenen Polarisationen beträgt 0.855. Die theoretisch erreichbare Polarisation ohne Berücksichtigung von Feldinhomogenitäten liegt bei ca. 94%.

Falls wir der Hochfrequenz zwei Drittel der Depolarisation und den  $B_0$ -Feldern das verbleibende Drittel zuschreiben, so erhalten wir die theoretisch vorausgesagten Werte. Damit sind alle Eigenschaften des Spektrometers gut verstanden und, noch wichtiger, sie lassen auf gute Eignung des Spektrometers für Streuexperimente schließen.

Abbildung 3.17 zeigt abschließend die Polarisation im direkten Strahl für verschiedene Frequenzen und Wellenlängen. Die angepaßte Funktion berücksichtigt den oben exemplarisch diskutierten Einfluß von Feldinhomogenitäten und die Depolarisation durch die „verkehrt“ rotierende HF-Komponente.

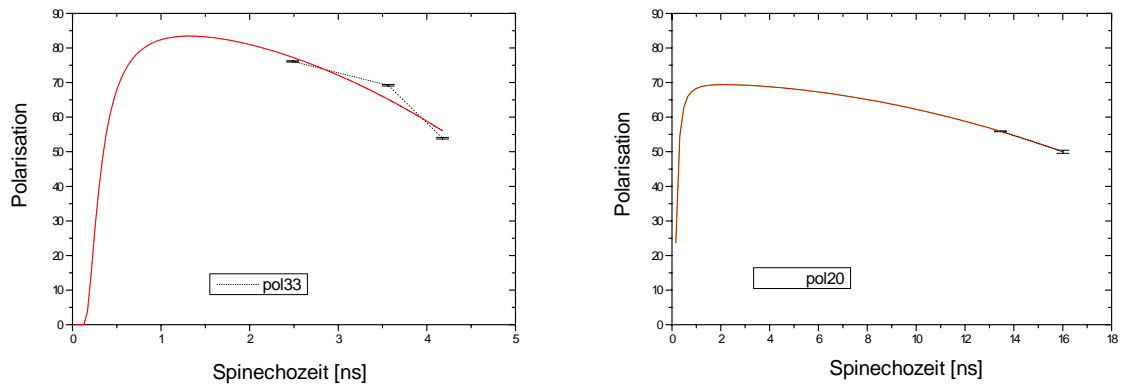


Abbildung 3.17: Der Verlauf der Polarisation des BNRSE-Aufbaus im direkten Strahl. Die linke Kurve ist eine Anpassung an drei Meßwerte bei 357, 512 und 600kHz. Die Wellenlänge betrug 5.15 Å. Rechts erfolgte die Anpassung an zwei Meßwerte bei 430 und 512kHz und einer mittleren Wellenlänge von 8.50 Å. Die Fitfunktionen tragen der Depolarisation durch die „verkehrt“ rotierende HF-Komponente und  $B_0$ -Inhomogenitäten Rechnung.

## 4 Die Streumessungen

Die Tests des Spektrometers zeigten, daß sich alle Eigenschaften des gebauten Spektrometers anhand der theoretischen Überlegungen verstehen lassen. Zudem ließen sich mit ihrer Hilfe alle Komponenten hinsichtlich der Polarisierung im direkten Strahl optimieren.

Diese Eigenschaften bilden die Voraussetzung für Messungen mit Streuung an Proben. Im Gegensatz zu anderen Spektrometern, die der Messung von Energieüberträgen dienen, ist bei der Verwendung der Spinechomethode die gewonnene Information in der Zeitdomäne verfügbar. Die theoretische Beschreibung von quasielastischer Streuung führt zur Interpretation der Polarisationsmessungen als direktes Maß für zeitliche Korrelationen in der Probe.

Das Spektrometer ist als Kleinwinkelstreuanlage und in erster Linie für Untersuchung von quasielastischer Streuung konzipiert. Die Meßgröße, die Aufschluß über Probendynamik geben soll, ist hierbei die Polarisierung, nachdem der Strahl neben beiden Spektrometerarmen die Probenregion passiert hat. Die Messergebnisse an interessanten Streuproben setzen sich aus dem Polarisationsvergleich zwischen Messungen an einem bekannten elastischen Streuer und an der jeweiligen Probe zusammen. Hohe Ausgangswerte der Polarisierung wirken sich günstig auf die erforderlichen Meßzeiten aus. Zudem ist gute Reproduzierbarkeit der Einstellungen für die Vergleichsmessungen erforderlich.

Der Ausbau der Spinechoanordnung zur Multidetektor-Kleinwinkelanlage bringt Fragen bezüglich der Anordnung der Resonanzflipspulen des zweiten Armes mit sich. Der zweite Abschnitt geht auf diese Problematik und die Ergebnisse von Kalibrationsmessungen an Proben mit elastischer Streuung ein.

Schließlich folgt die Vorstellung der Meßergebnisse, die an quasielastischen Streuproben gewonnen wurden. Das Spektrometer ermöglichte die Messung von Diffusionskonstanten in Lösungen mit langsamer Dynamik. Anhand der Diskussion der Ergebnisse zeigen sich die Stärken des Aufbaus, ergeben sich jedoch auch Möglichkeiten zu dessen Verbesserung und Optimierung.

### 4.1 Die Spinechomethode und die intermediäre Streufunktion

#### 4.1.1 Die Cosinus-Fouriertransformation des Spinechos

Wie in Kapitel 1 gezeigt, läßt sich die (Resonanz-)Spinechomethode im energetischen Bild als zeitliche Trennung der up- und down-Komponenten von Neutronen-Wellenpaketen verstehen. Die Komponenten erreichen die Probenregion zu unterschiedlichen Zeiten, da sie in den Spektrometerarmen, im Fall des Resonanzspinechos zwischen den beiden Spulen(-Paaren) eines Arms unterschiedliche Geschwindigkeiten besitzen. Um die Auswirkung von zwischenzeitlichen Veränderungen der Streuprobe quantitativ zu beschreiben, eignet sich als Ausgangspunkt der Ausdruck für den Spinerwartungswert (3.11) aus dem vorangegangenen Kapitel.

$$(4.1) \quad \langle \hat{s}_x \rangle \propto \int \sin^8 \left( \frac{\omega_R \cdot l}{2 \cdot h / m} \cdot \lambda \right) \cdot \cos \left( 4 \cdot \frac{\omega_{HF} \cdot \Delta L}{2 \cdot h / m} \cdot \lambda \right) \cdot e^{-\frac{(\lambda - \bar{\lambda})^2}{2(\sigma\lambda)^2}} d\lambda.$$

Wir beschränken uns auf das NRSE. Bei BNSRE-Messungen ändert sich entsprechend der Sinusfaktor und die Phase des Cosinus. Bei quasielastischer Streuung existiert kein Energieübertrag integral über den gesamten Strahl, d.h. die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Neutron beschleunigt wird, gleicht der Wahrscheinlichkeit für den umgekehrten Fall. Aus diesem Grund ändern sich die Einstellungen für den Spinechopunkt im gestreuten Strahl gegenüber den Messungen ohne Probe nicht. Das Polarisationsmaximum befindet sich nach wie vor bei gleich langen Flugstrecken in beiden Armen. Im folgenden beschränken wir uns auf Berechnungen der Polarisierung im Spinechopunkt. In der Beziehung (4.1) ist deshalb kein Wegunterschied zu berücksichtigen.

Einzelne Neutronen ändern jedoch durch den Streuprozess durchaus ihre Energie, und damit ihren Impuls. In Ausdruck (4.1) muß deshalb die Wellenlänge der Neutronen in beiden Spektrometerarmen einzeln



#### 4.1 Die Spinechomethode und die intermediäre Streufunktion

berücksichtigt werden. Für die Wirkung einer Energieänderung der Neutronen auf ihre Wellenlänge gilt in linearer Näherung:

$$E_S = E_2 - E_1 = \frac{h^2}{2m} \cdot \left( \frac{1}{\lambda_2^2} - \frac{1}{\lambda_1^2} \right) \Rightarrow \Delta E = \frac{h^2}{m} \cdot \left( \frac{1}{\lambda_1^3} \Big|_{\bar{\lambda}} \Delta \lambda_1 - \frac{1}{\lambda_2^3} \Big|_{\bar{\lambda}} \Delta \lambda_2 \right) + O(\Delta \lambda_i^2) = \frac{h^2}{m} \cdot \frac{\Delta \lambda_1 - \Delta \lambda_2}{\bar{\lambda}^3} + O(\Delta \lambda_i^2)$$

mit dem Energieübertrag durch Streuung an einer Probe  $E_S$ , der mittleren Wellenlänge aller Neutronen  $\bar{\lambda}$  und den Wellenlängen eines Neutrons in der jeweiligen Flugstrecke  $\lambda_i$ . Damit schreibt sich (4.1) folgendermaßen:

$$(4.2) \quad \int \sin^4 \left( \frac{\omega_R \cdot l \cdot \lambda_1}{2 \cdot h / m} \right) \sin^4 \left( \frac{\omega_R \cdot l \cdot \lambda_2}{2 \cdot h / m} \right) \cdot \cos \left( \frac{N}{2} \cdot \frac{\omega_{HF} \cdot L}{h^3 / m^2 / \bar{\lambda}^3} \cdot E_S \right) \cdot e^{-\frac{-(\lambda - \bar{\lambda})^2}{2(\sigma\lambda)^2}} d\lambda.$$

Der Ausdruck im Argument des Cosinus, der den Proportionalitätsfaktor zwischen einer Änderung der Phase und dem Energieübertrag darstellt, ist bis auf einen Faktor  $\hbar$  die in Kapitel 1 auf anderem Wege abgeleitete *Spinechozeit*  $t_{SE}$ .

Das Argument des in (4.2) unverändert belassenen Sinusfunktion-Terms betrachten wir nun gesondert. Bei Energieüberträgen, die in der Größenordnung der magnetischen Energie liegen und in den Armen des Spektrometers der Länge  $L$  maximal zu einer Spinphasendifferenz von  $2\pi$  führen, beträgt die Abweichung vom Maximum durch die Energieabhängigkeit des Sinus-Terms bei erfüllter Pi-Flip-Bedingung für die mittlere Wellenlänge maximal  $(2\pi \cdot l / (N \cdot L))^2 \leq 0.25\%$ . Außerhalb des Maximums ist die Abweichung noch geringer, da über ein symmetrisches Spektrum integriert wird. Wir vernachlässigen deshalb diese Abhängigkeit vom Energieübertrag in den Sinus-Termen.

Passieren die Neutronen auf ihrem Weg eine Streuprobe, ist in Form der Streufunktion  $S$  die Wahrscheinlichkeit hinzuzufügen, daß die Neutronen des detektierten Strahls bei der Streuung den Energieübertrag  $\hbar\omega_S$  und den Impulsübertrag  $\hbar q$  erfahren. Insgesamt erhalten wir

$$(4.3) \quad \langle \hat{s}_x \rangle = \int \sin^8 \left( \frac{\omega_R \cdot l \cdot \lambda}{2 \cdot h / m} \right) \cdot e^{-\frac{-(\lambda - \bar{\lambda})^2}{2(\sigma\lambda)^2}} d\lambda \cdot \int \cos(t_{SE} \cdot \omega_S) \cdot S(q, \omega_S) d\omega_S.$$

Das erste Integral führt lediglich zu einem Faktor, der die spektrumsabhängige Depolarisation ausdrückt. Das zweite Integral bedeutet eine Cosinus-Fouriertransformation der Streufunktion  $S$ . Diese Funktion nennt sich die *Intermediäre Streufunktion*

$$(4.4) \quad S(q, t) \equiv \int \cos(t_{SE} \cdot \hbar\omega_S) \cdot S(q, \omega_S) d\omega_S$$

$$S(q, t_{SE}) = \frac{\langle \hat{s}_x \rangle_{\text{Streuprobe}}(q, t_{SE})}{\int \sin^8 \left( \frac{\omega_R \cdot l \cdot \lambda}{2 \cdot h / m} \right) \cdot e^{-\frac{-(\lambda - \bar{\lambda})^2}{2(\sigma\lambda)^2}} d\lambda}.$$

In der Praxis gesellen sich zu der Depolarisations-Funktion im Nenner dieser Beziehung noch weitere Faktoren. Auf die Bestimmung der gesamten instrumentenabhängigen Polarisationsfaktoren kommen wir in Abschnitt 4.2. zu sprechen.

##### 4.1.2 Die Probendynamik

Die im Spinecho direkt über die Polarisation ermittelte Größe, die intermediäre Streufunktion, gewinnt ihre Interpretation und Bedeutung aus der Streutheorie. Die Theorie ist z.B. in [Lov86] ausführlich dargelegt. Hier soll nur in groben Zügen auf das Notwendige hingewiesen werden.

Aus der Bornschen Näherung folgt die Lösung der Schrödingergleichung mit dem Streupotential  $V(\mathbf{r})$  als kleine Störung

#### 4.1 Die Spinechomethode und die intermediäre Streufunktion

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(\mathbf{r})\psi = E\psi \quad \text{zu} \quad \psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}}}{r}$$

mit der Streuamplitude  $f = \text{const} \cdot \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle$ . Die fettgedruckten Buchstaben verweisen auf vektorielle Größen. Damit wird der differentielle Streuquerschnitt, d.h. das Amplitudenbetragsquadrat der auslaufenden Welle pro Raumwinkel zu:

$$(4.5) \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 \propto \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle^2.$$

Dieser allgemeine Ausdruck beinhaltet das Potential des Streuers. Dieses läßt sich wegen der kleinen Wirkungsquerschnitte der für die Streuung relevanten Atomkerne gegenüber der Wellenlänge der Neutronen als Summe von Deltafunktion schreiben:

$$V(\mathbf{r}) = \sum b_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$$

mit der konstanten Streulänge des  $i$ . Kerns  $b_i$ . Hier kommen in diesem Fall keine Formfaktoren vor. Die Neutronenwellen stellen wir aus demselben Grund analog zur Fraunhofer-Näherung als ebene Wellen dar. Allgemein gilt in diesem Fall (b reell, semiklassische Näherung: Orts-Operatoren=Faktoren):

$$(4.6) \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} \propto \langle e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} | \sum b_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) | e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \rangle^2 = \sum_{i,j} b_i b_j e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)}$$

mit dem Impulsübertrag  $\hbar\mathbf{q}$ .

Bei Neutronenstreuung, in unserem Fall z.B. an Polymeren in deuterierten Lösungsmitteln treten unterschiedliche Streulängen je nach Streuzentrum auf. Im folgenden wird die Mittelung über verschiedene Streulängen durch einen Querbalken gekennzeichnet. Falls die Streulängen nicht mit festen (Gitter-) Plätzen der Targetteilchen korreliert sind, läßt sich der gemittelte Ausdruck für den differentiellen Streuquerschnitt folgendermaßen umformen:

$$(4.7) \quad \overline{\sum_{i,j} b_i b_j e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)}} = \sum \overline{b_i b_j} \cdot e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)}$$

Die „Streulängenfaktoren“  $\overline{b_i b_j}$  sind nicht für alle Summenglieder gleich. Beim Beitrag zweier verschiedener Teilchen müssen alle Streulängen-Kombinationen berücksichtigt und gemittelt werden, bei gleichen Teilchen können sich die Streulängen nicht unterscheiden. Es ergibt sich mit  $\overline{b_i b_j} = \overline{b_i} \cdot \overline{b_j} = \overline{b}^2$  für  $i \neq j$  und  $\overline{b_i b_j} = \overline{b^2}$  für  $i = j$ :

$$(4.8) \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = \overline{b}^2 \sum e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)} + (\overline{b^2} - \overline{b}^2) \cdot N \equiv \frac{d\sigma_k}{d\Omega} + \frac{d\sigma_i}{d\Omega},$$

das ist die Definition von *kohärentem* und *inkohärentem* Wirkungsquerschnitt. Der kohärente Teil berücksichtigt den Mittelwert der Streulängen und trägt Information über die Targetstruktur. Im inkohärenten Anteil machen sich Abweichungen vom Mittelwert bemerkbar. Die Struktur des Streuers geht in ihn nicht ein.

Bei Berücksichtigung von Dynamik, d.h. Bewegungen der Targetteilchen durch z.B. Diffusion, ergibt sich statt (4.7) die Streufunktion:

$$(4.9) \quad \frac{d\sigma}{d\Omega dE} = \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{k'}{k} \sum \overline{b_i b_j} \int dt \cdot e^{-i\omega t} \cdot e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_i(t)} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_j}$$

Hierbei bezeichnet  $\mathbf{R}(t)$  quantenmechanisch den Heisenberg-Ortsoperator, klassisch wie üblich den zeitabhängigen Ort des Teilchens.

Zunächst zerlegen wir die voranstehende Summe analog zu (4.8):

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \frac{k'}{k} \overline{b}^2 \int dt \cdot e^{-i\omega t} \sum e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_i(t)} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_j}$$

## 4.2 Die Instrumentenfunktion des Spektrometers

stellt den kohärenten Anteil dar, den wir bei ungeordneten Streuproben nicht berücksichtigen müssen. Der zweite, inkohärente Anteil der oben zerlegten Summe läßt sich schreiben als:

$$\frac{d\sigma_{\text{ink}}}{d\Omega dE} = \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{k'}{k} (\overline{b^2} - \overline{b}^2) \int dt \cdot e^{-i\omega t} \sum_{i=j} e^{-iq\mathbf{R}_i(t)} e^{iq\mathbf{R}_j} = \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{k'}{k} \frac{1}{N} (\overline{b^2} - \overline{b}^2) \int dt \cdot e^{-i\omega t} \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} G_s(\mathbf{r}, t)$$

mit der Ein-Teilchen-Korrelationsfunktion

$$G_s(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}' \sum \delta(\mathbf{r} - (\mathbf{R}_i(t) - \mathbf{r}')) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i).$$

Sie gibt die Wahrscheinlichkeit dafür an, daß unter der Annahme eines Teilchens am Ort  $\mathbf{R}_i$  zur Zeit  $t=0$  das gleiche Teilchen sich zur Zeit  $t$  am Ort  $\mathbf{R}_i(t)$  befindet.

In Anknüpfung an den letzten Abschnitt und unter der Annahme, daß der kohärente Teil verschwindet, ergibt sich:

$$(4.10) \quad S(q, t) \propto \int dt \cdot e^{i\omega t} \quad S(q, \omega) \propto \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} G_s(\mathbf{r}, t).$$

Die Intermediäre Streufunktion ist bis auf konstante Faktoren die Fouriertransformierte der Ein-Teilchen-Korrelationsfunktion. Sie gibt den zeitlichen Verlauf der Korrelationen in der Probe wieder. Je nach der Fortbewegung der Teilchen von ihren Plätzen ist ein mehr oder weniger steiler Abfall dieser Funktion zu erwarten. Sie ist damit z.B ein Maß für Diffusion in der Probe und das Ziel unserer Messungen.

### 4.2 Die Instrumentenfunktion des Spektrometers

Wie die Beziehung (4.4) verrät, genügt es im Prinzip zur Feststellung der Intermediären Streufunktion, die Ergebnisse von Probenmessungen mit dem spektrumsbedingten Depolarisationsfaktor zu korrigieren. In der Praxis wirken sich weitere Faktoren auf die Polarisation aus. Um die instrumentell bedingten Faktoren von denjenigen Effekten, die auf Probendynamik schließen lassen, zu trennen, bietet es sich an, unter identischen Bedingungen zuvor Messungen an einer elastischen Probe durchzuführen. Ein großer Vorteil der Spinechomethode liegt darin, daß sich die instrumentellen Einflüsse durch eine einfache Division von der Meßgröße trennen lassen. Als Referenzprobe mit elastischer Streuung fand pyrolytischer Graphit Verwendung. Die Ergebnisse der Messungen mit dieser Probe bilden in drei Schritten den Inhalt des folgenden Abschnittes.

Zunächst beschreiben wir die Inbetriebnahme der Komponenten des zweiten Strahlarms, die zur Untersuchung der gestreuten Neutronen dienen. Der statistische Fehler unserer Messungen hängt sowohl von der Strahlintensität, als auch von der Polarisation ab. Aus diesem Grund ist die bestmögliche Optimierung beider Parameter vonnöten. Anschließend stellen wir die Ergebnisse der Polarisationsmessungen bei verschiedenen Spinechozeiten nach erfolgter Optimierung vor.

Über die Ursachen hinaus, die die erreichbare Polarisation im direkten Strahl beschränken, zeigten sich bei den erstmals durchgeführten Streuexperimenten an unserer Multidetektoranlage zusätzliche, durch die Geometrie bedingte Depolarisationseffekte. Vor der Durchführung der Streuexperimente an Proben mit dynamischen Effekten, die sich über die Polarisation als Meßgröße bemerkbar machen, sind alle weiteren Depolarisationseffekte zu bestimmen und zu verstehen. Im letzten Abschnitt findet sich hierzu die Erläuterung des Einflusses der Strahldivergenz und der senkrechten Verdrehung von Spulen.

#### 4.2.1 Die Inbetriebnahme der Spulen für Streuexperimente

Der Name der elastischen Streuprobe, pyrolytischer Graphit, verweist auf deren Herstellungsverfahren. Um dünne Schichten von Graphit zu erzeugen, erfolgt zunächst die Erhitzung von Kohlenstoff im Vakuum auf Temperaturen über 2200 Grad. Der atomare Kohlenstoff lagert sich sodann in einigen zehn bis hundert nm dicken Schichten ab und bildet Graphit-Kristallite. Durch diese Herstellungsmethode gelingt es, die Kristallite vorwiegend parallel zur Oberfläche auszurichten. Abbildung 4.1 zeigt schematisch den Aufbau der Graphitschichten durch weitgehend gleich ausgerichtete Kristallite.

Im Gegensatz zu der Verwendung von pyrolytischem Graphit als Monochromator ist für die Entstehung von Kleinwinkelstreuung nicht die Graphitstruktur verantwortlich. Die Wellenlängen der von uns genutzten Neutronen

## 4.2 Die Instrumentenfunktion des Spektrometers

liegen über der atomaren Gitterkonstante von Graphit, so daß keine Bragg-Reflexe auftreten können. Durch die Anisotropie in Verbindung mit kleinen Abweichungen in der Richtung und Abstände der einzelner Kristallite stellt somit pyrolytischer Graphit in dem für uns interessanten  $k$ -Bereich einen elastischen Kleinwinkelstreuer dar.

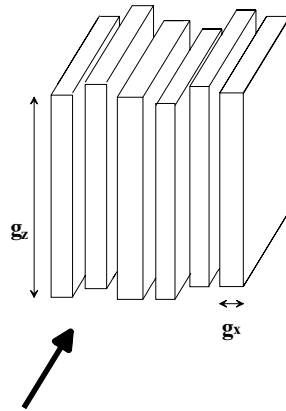


Abbildung 4.1: Eine schematische Darstellung der Struktur von pyrolytischem Graphit. Die Quader deuten die Graphitkristallite an, die eine gemeinsame Vorzugsrichtung, jedoch unterschiedliche Dimensionen besitzen.

Der Winkelbereich, der für unsere Messungen in Frage kommt, ist durch die Dimensionen der konischen Mumetallabschirmung gegeben. Die Öffnung für die Resonanzflipspulen bietet im hinteren Bereich bis zu vier Spulenpaaren Raum. Insgesamt standen zwölf neu konstruierte Spulen zur Verfügung. Ein Bootstrap-Aufbau erfordert in der ersten Flugstrecke vier und zu Beginn der zweiten Flugstrecke zwei weitere Spulen. Somit war die Anzahl der Spulenpaare, die den Abschluß der zweiten Flugstrecke bildeten, auf drei begrenzt. Da die Bootstrap-Anordnung Vorteile in der Feldrückführung und erreichbaren Spinechozeit bietet, zogen wir sie einer NRSE-Anordnung vor, obwohl diese die Nutzung der gesamten Breite der konischen Abschirmung zugelassen hätte.

Die drei nebeneinander stehenden Spulenpaare schließen einen Winkelbereich von ca. 5 Grad ein, gerechnet von den Mittelpunkten der beiden äußeren Spulen. Auf den Fenstern, d.h. den abgefrästen Bereichen der Spulen, sind Blenden angebracht, die den Strahl auf einen Winkelbereich von ca. 1.2 Grad pro Spule einschränken. Wir bezeichnen im folgenden die Spulenpaare, die den abgelenkten Neutronen dienen, als Spule b und c. Hinter den Spulen b und c befinden sich jeweils zwei Detektoren.

Die Impulsüberträge, bei denen Messungen stattfanden, sind durch die Positionen der Detektoren bestimmt. Ihre transversale Position läßt sich geeignet wählen, so daß sie gleiche Zählraten aufweisen. Da die Zählrate mit zunehmendem Streuwinkel abnimmt, befinden sich die Detektoren bei dieser Justierung nicht mehr symmetrisch zur Spulenmitte.

In Abbildung 4.2 ist das Ergebnis eines Zählrohrscans durch den Bereich hinter den Spulen zu sehen, in den die am pyrolytischen Graphit gestreuten Neutronen durch die Spulen b und c gelangen. Durch Fits an die Maxima bzw. Minima erhält man die genaue Lage des aktiven Bereichs der Detektoren.

Alle Streuexperimente ließen sich unter simultaner Detektion von Streuung in vier unterschiedliche Richtungen, d.h. mit vier verschiedenen Impulsüberträgen durchführen. Die Gesamtbreite der hinter den Spulen b und c befindlichen je zwei 1-Zoll-Zählrohre (1 Zoll=2.54cm) entspricht in etwa der gesamten Strahlbreite, die durch Blenden an der entsprechende Spule und am Analysator begrenzt wird.

## 4.2 Die Instrumentenfunktion des Spektrometers

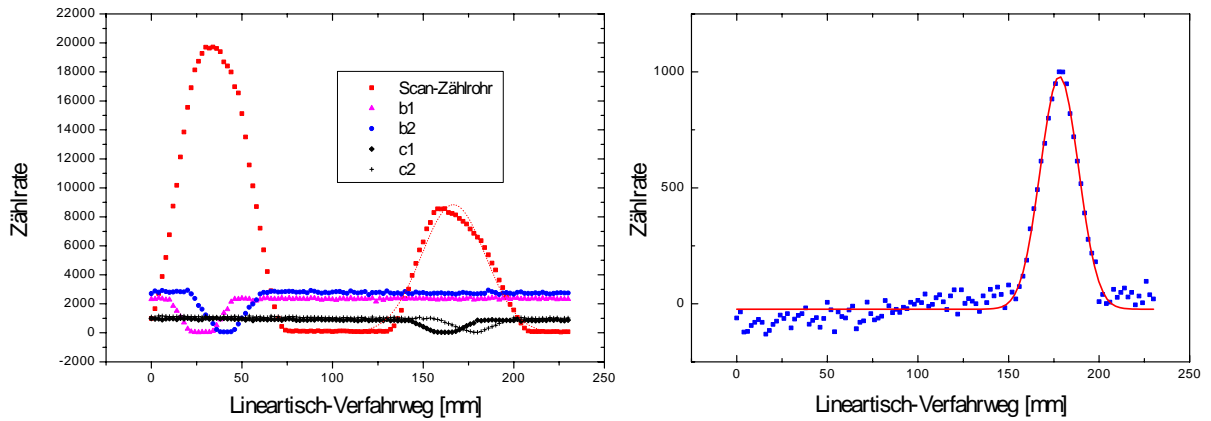


Abbildung 4.2: Links sind die gemessenen Raten in den Zählrohren hinter Spule b und c zusammen mit der Rate eines Zählrohrs aufgetragen, das vor den anderen Zählrohren von kleinen Winkeln zu großen durch den Strahl gescannt wurde. Sobald eines der hinteren Zählrohre verdeckt wird, nimmt die Intensität ab. Dadurch lässt sich die Lage aller Zählrohre relativ zum direkten Strahl, der ebenso vermessen wurde, bestimmen. Rechts ist exemplarisch eine Anpassung mit einer Gauß-Funktion dargestellt (Untergrund abgezogen).

Zusammen mit einer mittleren Wellenlänge im einlaufenden Strahl von  $5.15 \text{ \AA}$  bzw.  $7.73 \text{ \AA}$ , auf die der Geschwindigkeitsselektor bei den Messungen an den Proben justiert war, ergeben sich Impulsüberträge von  $(0.034 \pm 0.004) \text{ \AA}^{-1}$  bzw.  $(0.051 \pm 0.005) \text{ \AA}^{-1}$  für den ersten Detektor hinter Spule b,  $(0.037 \pm 0.004) \text{ \AA}^{-1}$  bzw.  $(0.056 \pm 0.006) \text{ \AA}^{-1}$  für den zweiten,  $(0.067 \pm 0.007) \text{ \AA}^{-1}$  bzw.  $(0.100 \pm 0.01) \text{ \AA}^{-1}$  für den ersten Detektor hinter Spule c und  $(0.071 \pm 0.007) \text{ \AA}^{-1}$  bzw.  $(0.106 \pm 0.01) \text{ \AA}^{-1}$  für den äußersten Detektor. Die Fehler sind durch die Breite des verwendeten Spektrums bedingt.

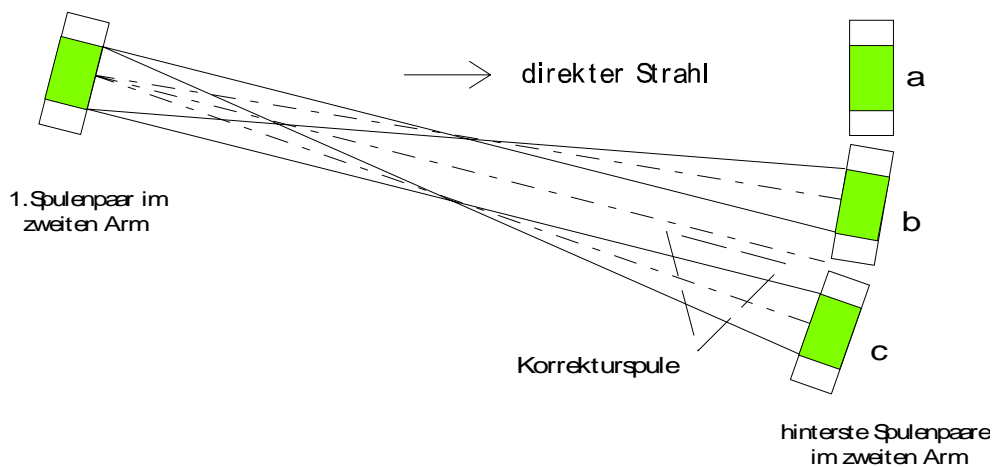


Abbildung 4.3: Die Geometrie des zweiten, konisch abgeschirmten Spektrometerarms. Die Position der Spulen b und c stimmt mit der bei den Messungen gewählten überein. Die präzise Einstellung, wie auch die Positionierung von Spule a erfolgte über die Optimierung der gemessenen Polarisation.

Die Einstellungen der Resonanzflipspulen hinsichtlich der Stromstärken und Frequenzen sind aus den Messungen im direkten Strahl bekannt. Lediglich die genauen Sollwerte für den HF-Regelkreis erfordern die Durchführung der im letzten Kapitel beschriebenen HF-Scans, da die Pick-up-Spulen in den Resonanzflipspulen leicht unterschiedliche Positionen besitzen. Abbildung 4.3 verdeutlicht die Geometrie des zweiten Spektrometerarms.

Ein Beispiel einer Spinechokurve in demjenigen gestreuten Strahl, der durch Spule c zu einem Detektor gelangt, zeigt Abbildung 4.4. Prinzipiell sind die derart aufgenommenen Spinechokurven identisch zu den Messungen im direkten Strahl.

## 4.2 Die Instrumentenfunktion des Spektrometers

Da die Graphitprobe bevorzugt langwellige Neutronen in größere Winkel streut, ist die Periodenlänge geringfügig um 2% verringert. Bei den vorliegenden Zählraten erfordert die Aufnahme einer gesamten Kurve einige Minuten.

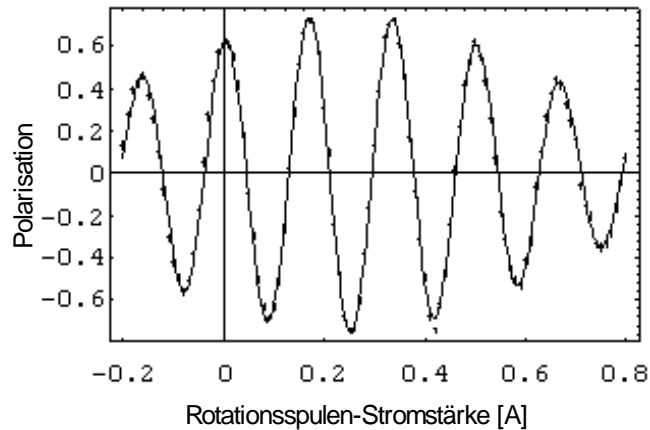


Abbildung 4.4: Eine typische Spinechokurve unter dem Streuwinkel 5 Grad mit elastischer Streuprobe. Aufgrund der gegenüber dem direkten Strahl erheblich geringeren Zählrate sind die Fehlerbalken größer als die Datenpunkte. Der Fit ergibt eine um ca. 2% größere Wellenlänge für diesen Streuwinkel.

Zur Optimierung der Polarisation ist die exakte Positionierung der Spulen unerlässlich. Bereits ohne Streuung bei Messungen im direkten Strahl findet sich ein Maximum der Polarisation dadurch, daß die Spulen in eine zueinander parallele Stellung gebracht werden. Diese Notwendigkeit besteht, da ansonsten einzelne Neutronen je nach ihrer Position im Strahl unterschiedliche Zeiten in den Flugstrecken verbringen. Dies führt zwangsläufig zu unterschiedlichen Spinphasen und bildet eine Ursache für Depolarisation. Allerdings heben sich bei Messungen im direkten Strahl geringfügige Verdrehungen unter der Bedingung auf, daß sie in beiden Spektrometerarmen symmetrisch sind, da diejenigen Neutronen, die im ersten Arm mehr Phase sammeln, danach auch weiter zurückgedreht werden und umgekehrt.

Bei Messungen mit Probenstreuung sind die Verhältnisse anders. Da die Wege in den Spektrometerarmen für die Neutronen nun unkorreliert sind, gibt es nur noch ein deutliches Maximum der Polarisation für den Fall, daß alle Spulen genau parallel stehen und zwar so, daß die Ein- und Austrittsfläche senkrecht auf der Strahlrichtung steht. Dieses Maximum läßt sich durch schrittweises Verdrehen der Spulen und Vergleich der Polarisation erhalten. Abbildung 4.5 zeigt den Verlauf der Polarisation in Abhängigkeit vom Drehwinkel einer Spule.

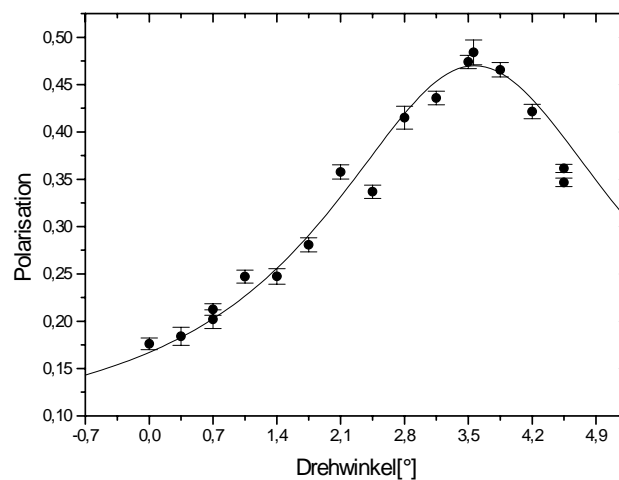


Abbildung 4.5: Die Polarisation in Abhängigkeit vom Drehwinkel einer Spule. Der Fit an die Meßpunkte ergibt die Position des Maximums, die sodann eingestellt wurde.

Bei der Polarisationsoptimierung für mehrere Spulen am Ende des zweiten Spektrometerarmes treten Schwierigkeiten auf, deren Behandlung den Inhalt des übernächsten Abschnittes bildet. Sie bedeuten keine

## 4.2 Die Instrumentenfunktion des Spektrometers

prinzipielle Einschränkung der Funktion der Apparatur. Die Polarisationswerte mit elastisch streuender Probe stellen jedoch den Normierungsfaktor für die Messungen an quasielastischen Streuern dar. Sie definieren den „Kontrast“, der zu niedrigeren Werten hin bleibt. Die Bedeutung der Polarisationsoptimierung liegt demnach im Ziel möglichst geringer Meßzeiten.

### 4.2.2 Die Instrumentenfunktion

Die Vorgehensweise bei Messungen an Proben folgt aus einer Erweiterung von Beziehung (4.4) auf weitere Depolarisationsfaktoren.

$$(4.11) \quad \langle \hat{s}_x \rangle \equiv \int \cos(t_{SE} \cdot \hbar \omega_S) \cdot S(q, \omega_S) \cdot P_1(\sigma \lambda) \cdot P_2(t_{SE}) d\omega_S$$

Bei den Messungen an einem rein elastischen Streuer macht dessen Streufunktion, annähernd eine Deltafunktion in der Spinechozeit, die Integration einfach. Der Pi-Flip-Depolarisationsfaktor  $P_1$  ist unabhängig von der Spinechozeit. Es bleibt der beschriebene Polarisationsfaktor  $P_2$  für die Geometrie des Instruments. Bei mehreren Spinechozeiten gemessen, ergibt sich auf diese Weise die *Instrumentenfunktion*.

Bei anschließenden Messungen an quasielastisch streuenden Proben besitzt der Polarisationsfaktor die selbe Größe. Die normierte Intermediäre Streufunktion ergibt sich unter Einbezug der Instrumentenfunktion zu

$$(4.12) \quad \frac{S(q, t_{SE})}{S(q, 0)} = \frac{\langle \hat{s}_x \rangle_{\text{Streuprobe}}(q, t_{SE})}{P_1(\sigma \lambda) \cdot P_2(t_{SE})}$$

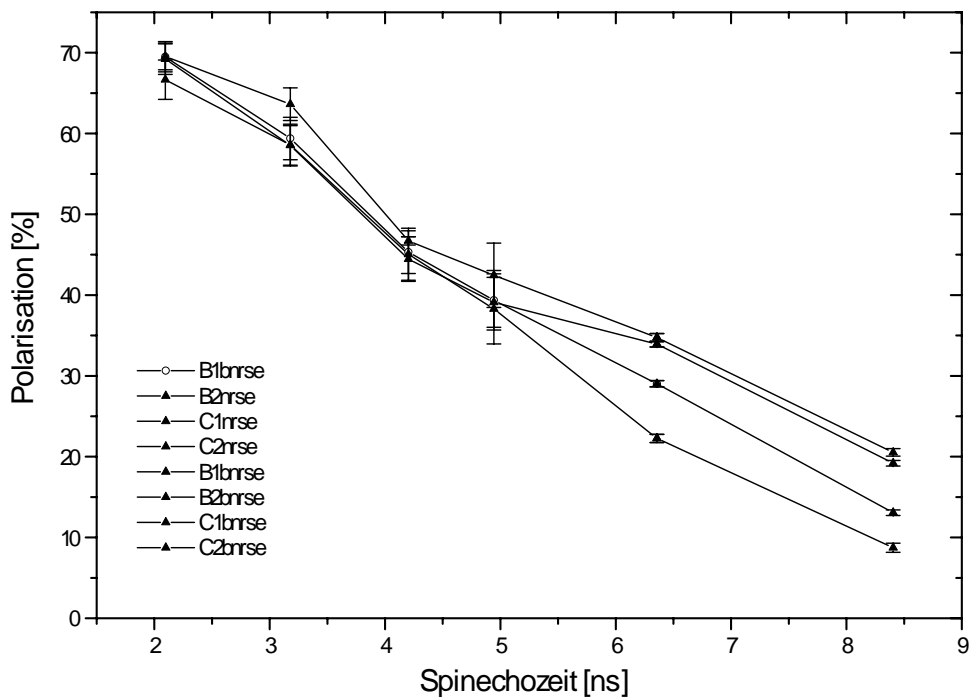


Abbildung 4.6: Die Instrumentenfunktion bei einer Wellenlänge von  $7.73 \text{ \AA}$ . Die Werte bis zu einer Spinechozeit von  $5 \text{ ns}$  sind mit einem NRSE-Aufbau gemessen, die Werte darüber mit Bootstrap-Technik. Die Funktionen aller vier Streuwinkel - je zwei Detektoren hinter den Spulen b und c verlaufen ähnlich. Dies läßt auf eine optimale Ausrichtung des ersten Spulenpaars im zweiten Spektrometerarm und der Spulen b und c schließen.

Die Abbildungen 4.6 und 4.7 zeigen die Instrumentenfunktionen für NRSE und BNRSE-Aufbau bei den mittleren Wellenlängen von  $7.73 \text{ \AA}$  bzw.  $5.15 \text{ \AA}$ . Der nicht unerhebliche Abfall der Kurven zu höheren Spinechozeiten hin ist in erster Linie eine Folge der Divergenzeffekte im zweiten Spektrometerarm, denen der nächste Abschnitt gewidmet ist. Nach Korrektur der Daten bezüglich dieses Depolarisationseffektes ergeben sich die flacher abfallenden Kurven, die lediglich noch diejenigen Depolarisationseffekte beinhalten, die Gegenstand des letzten Kapitels waren.

## 4.2 Die Instrumentenfunktion des Spektrometers

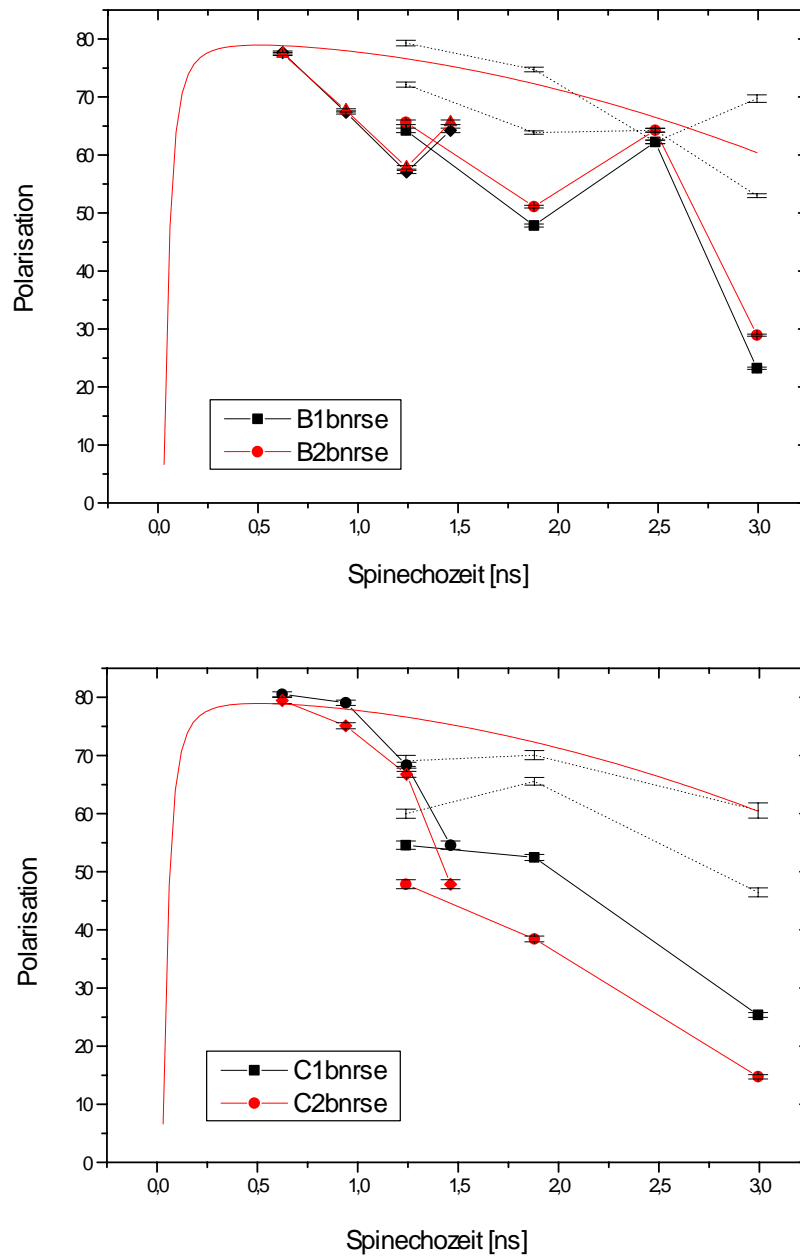


Abbildung 4.7: Die Instrumentenfunktionen für die Messungen bei  $5.15 \text{ \AA}$ . Bis zu einer Spinechozeit von ca.  $1.5 \text{ ns}$  sind sie durch NRSE-Messungen ermittelt, darüber mit BNRSE-Aufbau. Die je zwei Zählrohre hinter Spule b und c sind mit 1 und 2 nummeriert. Bei den Messungen mit  $2.5 \text{ ns}$  erfolgte eine relativ gute Einstellung des Spektrometers nur für die beiden kleineren Streuwinkel (Spule b). Aus diesem Grund steigt die Kurve an dieser Stelle an, bevor sie weiter abfällt. Dies ist ein Anzeichen dafür, daß der dominante Effekt für die Polarisation in der Stellung der Spulen besteht. Vor den NRSE-Messungen bei  $1.5 \text{ ns}$  wurde das erste Spulenpaar des zweiten Spektrometerarms gedreht, deshalb besitzen die hinter Spule c detektierten Neutronen bei dieser Messung eine geringere Polarisation. Die gepunktete Linie gibt die auf Divergenz-Depolarisationseffekte korrigierten Werte wieder. Die Anpassung mit einer Funktion, die Feldinhomogenitäten und die „falsche“ HF-Komponente berücksichtigt, stimmt sehr gut mit diesen korrigierten Werten überein.



## 4.2 Die Instrumentenfunktion des Spektrometers

### 4.2.3 Die Divergenzeffekte

Für die Geometrie des zweiten Spektrometerarmes mit den Resonanzflipspulen verweisen wir nochmals auf Abbildung 4.3. Die möglichen Wege der Neutronen zwischen den Spulen sind vereinfacht dargestellt. Da sich die Probe vor dem ersten Spulenpaar des zweiten Armes befindet, ist der vom Strahl durchquerte Bereich bereits leicht winkelabhängig.

Zudem nehmen wir vereinfachend an, daß die Divergenz des Strahls gleichverteilt ist. Damit werden große Neutronenflugwinkel übergewichtet, da die Divergenz in Wirklichkeit ein gaußförmiges Profil besitzt. Beide Näherungen schränken jedoch die Bedeutung der folgenden Überlegungen nicht ein.

Aufgrund der unterschiedlich langen Flugstrecken für Neutronen, die unter verschiedenen Winkeln die Distanz zwischen den Resonanzflipspulen zurücklegen, ist die Phase der Neutronen nach dem Pi-Flip an der HF-Komponente der letzten Resonanzflipspule nicht mehr einheitlich. Die Divergenz des Strahls führt somit zu einer Depolarisation.

Dieser Effekt, der bereits bei einer einfachen Flugstrecke zwischen zwei parallelen Spulen auftaucht, erfährt eine Verstärkung bei der Berücksichtigung mehrerer Spulen am Ende der zweiten Nullfeldregion. Die Spulen sind so positioniert, daß ihre Mittelpunkte auf einem Kreisbogen stehen. Wie bei allen Spulen sorgt eine spezielle Konstruktion dafür, daß sie sich sehr genau auf beliebigen Winkel um die senkrechte Achse drehen lassen.

Für nur eine Spule als Abschluß der zweiten Flugstrecke bildet die parallele Ausrichtung der Spulen die optimale Stellung. Der Raum, den ein ca. 45mm-breiter Strahl einnimmt, erhält dadurch im Blick von oben eine Rechteckform. Im Vergleich zu anderen Geometrien garantiert diese die geringste Variation in den Streckenlängen. Dies verdeutlicht bereits die Betrachtung der Längen des direkten und des diagonal verlaufendem Strahl. In einem Parallelogramm beispielsweise ist die Differenz dieser Strecken größer.

Bei dem vorliegenden Multidetektoraufbau stellt sich die Aufgabe, die Geometrie für zwei Spulen (b und c in der Abbildung 4.3) zu finden. Wir berücksichtigen hierbei Spule a nicht, da die Intensität im direkten Strahl bei allen von uns gewählten Kleinwinkelstreuern die Intensität in den anderen Richtungen um ein Vielfaches übertrifft und da sich dank der ausreichenden Statistik die Polarisation genau ermitteln läßt, auch wenn diese sehr geringe Werte annimmt.

Die optimale Anordnung des vorderen Spulenpaars im konischen Arm ergibt sich aus den Symmetrieeigenschaften des Systems. Es ist naheliegend, dieses erste Spulenpaar so auszurichten, daß die Mittelsenkrechte auf der vom Strahl durchdrungenen Fläche zwischen den Spulen b und c verläuft. Die Positionierung dieser beiden Spulen folgt schließlich aus der Minimierung des Integrals über die Differenz aller Wegstrecken zur mittleren Strecke.

( 4.13 )

$$W = \int \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (l + (x_1 \cdot \varphi_1 + x_2 \cdot \varphi_2))^2} - \left( \int \sqrt{(\xi_1 - \xi_2)^2 + (l + (\xi_1 \cdot \varphi_1 + \xi_2 \cdot \varphi_2))^2} d\xi_1 d\xi_2 \right) dx_1 dx_2 .$$

Hierbei bezeichnen  $\varphi_1$  und  $\varphi_2$  die Winkel der Spulen bezüglich der Verbindungslinie  $l$  ihrer Stirnflächen-Mittelsenkrechten.  $x_1$  und  $x_2$  beziehen sich auf die Entfernung des betrachteten Strahls von dieser Linie an den jeweiligen Spulen. Für die Bestimmung der Integrationsgrenzen wurde die Strahlgeometrie in Betracht gezogen. Indem über diese Variablen integriert wird, kommen alle Strahlen in Betracht. Vernachlässigt wurde die Änderung der zulässigen Strahlbreite bei Verdrehung der Spule b bzw. c. Wir gehen davon aus, daß der Strahl nicht an den Spulen, sondern von zusätzlich angebrachten Blenden an der Probe und am Analysator begrenzt ist. Da die relevanten Winkel unter 30mrad liegen, bleiben die Unterschiede mit oder ohne Variation der Integrationsgrenzen mit den Winkeln ohnehin kleiner als 5%. Analoges gilt für die Näherung der Sinusfunktion durch die Entwicklung bis zur ersten Ordnung.

Das Integral wurde numerisch ausgewertet und minimiert. Das Ergebnis des Integrals zeigt der linke Plot in Abbildung 4.8. Deutlich ist zu erkennen, daß sich das Minimum bei Ausrichtung der Spulenpaare b und c in Strahlrichtung ergibt, auch wenn das vordere Spulenpaar schräg steht.

## 4.2 Die Instrumentenfunktion des Spektrometers

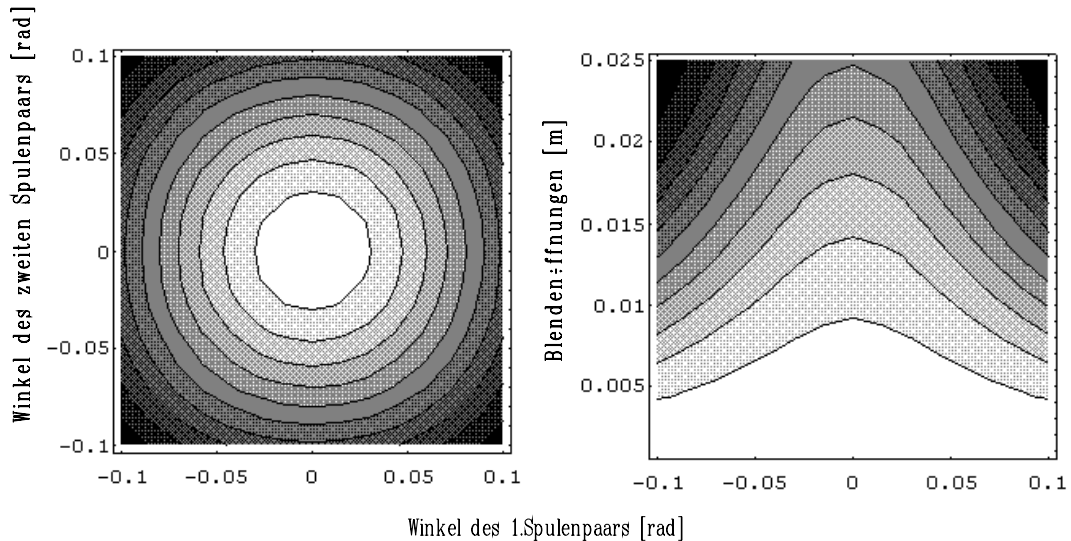


Abbildung 4.8: Das Integral über alle möglichen Flugstrecken (links) in Abhängigkeit vom Winkel der Spule  $b$  bzw.  $c$  gegenüber der direkten Verbindungslinie. Winkel „0“ bedeutet, daß die Mittelsenkrechte auf die Fensterfläche von Spule  $b$  bzw.  $c$  in die Mitte der ersten Spule deutet. Rechts ist die Abhängigkeit der Depolarisation von der Breite des Strahls zu sehen, die durch Blenden an den Spulen, der Probe und dem Analysator bedingt ist. Bei Verdrehung nur einer Spule macht sich ein starker Abfall mit zunehmender Strahlbreite bemerkbar. Die Depolarisation ist für 500 HF-Felddrehungen während des Flugs eines Neutrons durch die 2m-lange Flugstrecke berechnet. Durch diese HF-Phase kommt beim BNRSE die gleiche Spinechozeit zustande wie durch 2000 Umdrehungen des Spins im konventionellen Spinecho.

Der Zwischenraum zwischen diesen Spulenpaaren und dem ersten dieser Flugstrecke ist jedoch im zweiten Spektrometerarm zwangsläufig *trapezförmig*. Die vordere Spule kann nicht direkt auf nur eines der hinteren Spulenpaare gerichtet sein. Dies bedeutet, daß wirkungsvolle Flugstreckenunterschiede auftreten können. Um Aufschluß über die Beeinträchtigung der Polarisation durch die resultierende Streuung in den Spinphasen der Neutronen zu erlangen, ist ein nur geringfügig gegenüber (4.12) modifiziertes Integral zu berechnen, das der Wirkung der Streckenlänge auf die Spinphase und auf die Polarisation Rechnung trägt.

$$P = \int \cos(\sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (l + (x_1 \cdot \varphi_1 + x_2 \cdot \varphi_2))^2} - L_{\text{mittel}}) dx_1 dx_2,$$

mit der mittleren Länge aller Strecken  $L_{\text{mittel}}$ . Für die Bestimmung der Integrationsgrenzen wurde wieder die Strahlgeometrie in Betracht gezogen. Um die Berechnung zu vereinfachen, erfolgte die Näherung der Divergenz durch eine Rechteckverteilung, deren Breite der Halbwertsbreite der gaußverteilten Divergenz entspricht.

Abbildung 4.9 zeigt das Ergebnis dieses für verdrehte Spulen nur numerisch zu lösenden Integrals. Deutlich ist zu erkennen, daß bereits bei einer Einstellung des Spektrometers, die vergleichbar einem konventionellen Spinechoaufbau mit 3000 Präzessionsumdrehungen des Spins während dem Aufenthalt in der Flugstrecke ist, die Polarisation allein durch die Wegstreckenunterschiede für einzelne Neutronen beträchtlich sinkt. Noch gar nicht berücksichtigt ist die Breite des Neutronenspektrums, die das Auftreten verschiedener Phasen verstärkt.

Die Komponenten des Spektrometers, insbesondere die Resonanzflipspulen und die Dimensionen der Abschirmung, sind für kalte Neutronen bis ca. 1nm und Frequenzen bis ca. 700kHz geeignet. Dies bedeutet, daß mehr als 12000 Spindrehungen realisierbar sind (als Analogie zum konventionellen Spinecho). Die Divergenz stellt somit den begrenzenden Faktor im Auflösungsvermögen dar. Anhand der berechneten divergenzbedingten Depolarisation erfolgte eine Korrektur der Instrumentenfunktion auf andere Effekte, die nicht von der Divergenz abhängen. In Abbildung 4.7 ist der korrigierte Verlauf zusammen mit einem Fit aufgetragen, der die Inhomogenitäten und die „verkehrt“ rotierende HF-Komponente berücksichtigt. Der größere Anteil am Abfall der Instrumentenfunktion zu größeren Spinechozeiten hin ist jedoch den Divergenzeffekten zuzuschreiben.

## 4.2 Die Instrumentenfunktion des Spektrometers

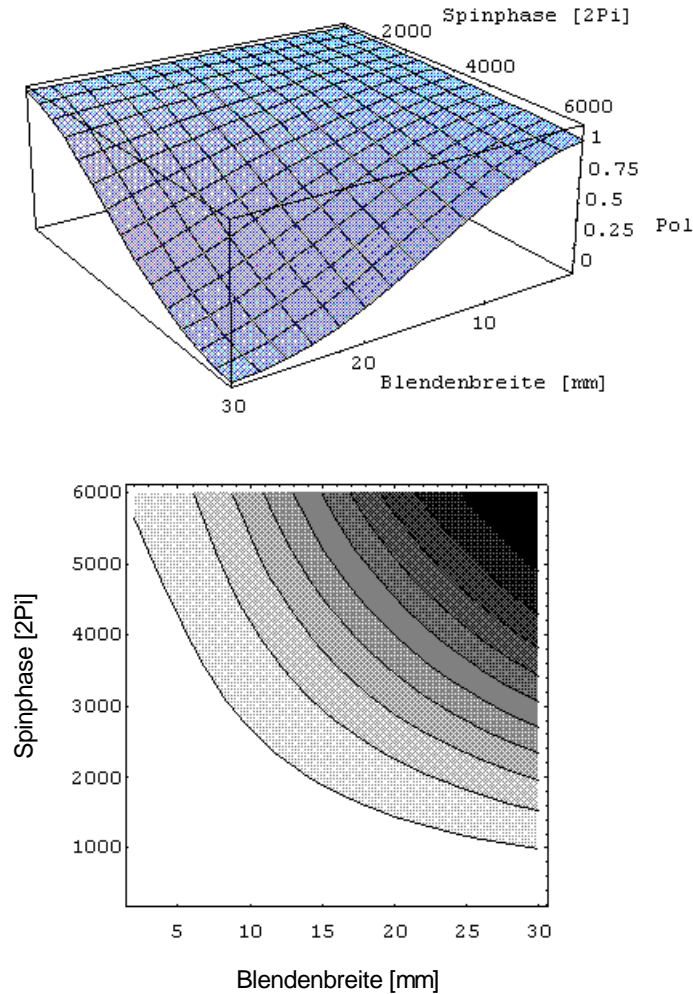


Abbildung 4.9: Der Verlauf der Polarisation in Abhängigkeit von der mittleren Spinphase der Neutronen im zweiten Spektrometerarm und von der Blendenbreite an der Probe. Die Berechnung wurde für eine Spule durchgeführt, die um 25 mrad gedreht ist. Die andere Spule steht optimal. Der Konturplot (eine Konturfarbe bezeichnet die Polarisationsstufen im Abstand von 10%) zeigt, daß bereits bei ca. 3000 Umdrehungen des Spins (in Analogie zum klassischen Spinecho) die Polarisation allein durch die Geometrie trotz optimaler Einstellung auf ca. 50% sinkt.

### 4.2.4 Der Test einer Divergenzkorrektur

Zur Korrektur der Phasenunterschiede sind prinzipiell Spulen mit orts- und richtungsabhängigen Magnetfeldintegralen geeignet. Im Verlauf der Strahlzeit konnten aus Zeitgründen lediglich Tests an einer „Dreieckspule“ durchgeführt werden. Diese korrigiert die Spinphase vorwiegend ortsabhängig. Bei der Justage leicht trapezförmiger Spulenzwischenräume verlaufen der längste und kürzeste Weg für die Neutronen jedoch nicht überall räumlich getrennt: In Abbildung 4.3 ist leicht zu sehen, daß der weiteste Weg zwischen der linken Spule und Spule c durch die längere Diagonale, der kürzeste Weg durch die direkte Verbindung zwischen den unteren Punkten gegeben ist. Die Wege laufen vor der hinteren Spule zusammen und sind dort nur noch an der Richtung zu unterscheiden. Die Dreieckspule korrigiert einen solchen Effekt nur in zweiter Ordnung. Für die Tests mit der Spule war es jedoch nicht möglich, sie in einem Bereich anzubringen, in dem die verschiedenen langen Wege räumlich getrennt sind.

Zum einen gibt es hierfür prinzipielle Gründe. Denn bei Betrachtung des längsten und kürzesten Weges ergibt sich, daß hierfür die Korrekturspule möglichst weit entfernt von der hinteren Spule, und zwar direkt hinter der vorderen Spule in der Abschirmung platziert werden müßte. Im diesem Bereich, in dem die Wege räumlich getrennt sind und eine Dreieckspule Sinn machen würde, sind jedoch die Neutronen noch nicht getrennt bezüglich der Wege zu Spule b und c. Eine Platzierung der Spule an dieser Stelle stellt deshalb keine Lösung dar, da eine Korrektur, die zur Verbesserung der Lage für den Strahl zu c führt, die entgegengesetzte Wirkung für b besitzt.

### 4.3 Die Ergebnisse von quasielastischer Streuung

Während der Strahlzeit gab es zudem keine Möglichkeit, die Korrekturspule in den vorderen Bereich der Flugstrecke zu stellen, da er nicht ohne Demontage der Spulen und anderer Komponenten zugänglich ist. Auch die Möglichkeit, sie in die Mitte zwischen die Spulen zu bringen, schied aus denselben Gründen aus.

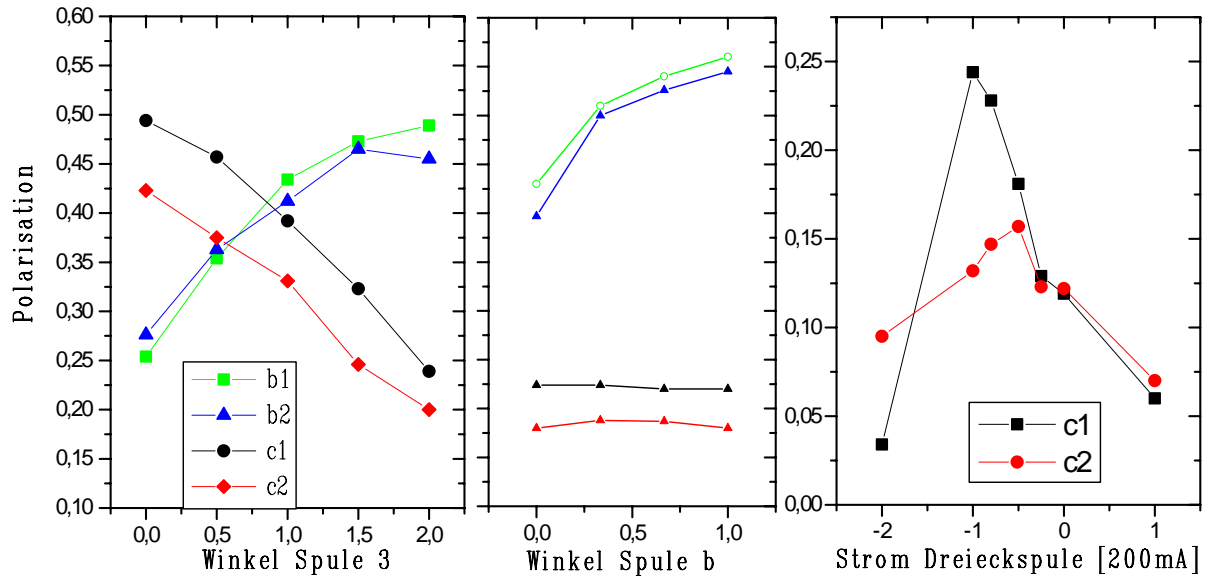


Abbildung 4.10: Der Test der Dreieck-Divergenzkorrektur-Spule in drei Schritten. Die Einstellung zu Beginn sorgte für eine bessere Polarisation hinter Spule c. Durch Verdrehen von Spule 3 zu kleineren Winkeln verbesserte sich die Polarisation hinter Spule b auf Kosten der Polarisation von b. Im zweiten Schritt wurde Spule b selbst auf optimale Polarisation eingestellt. Dies war infolge des Verdrehens von Spule 3 notwendig. Im letzten Schritt kam die Korrekturspule zum Einsatz, um die auf ein Minimum gefallene Polarisation hinter Spule c zu verbessern.

Um die Funktion der Dreiecks-Korrektur zu testen, änderten wir die Stellung des Spulenpaars c. Im Bereich direkt vor den Spulen b und c kann, wie oben gezeigt, bei leicht trapezförmigem Zwischenraum eine Dreiecksspule nichts bewirken, da verschieden lange Neutronenwege nicht räumlich getrennt sind. Aus diesem Grund erhielt der Zwischenraum für den Test eine solcherart verstärkte Trapezform, daß nun die direkten Verbindungen die Wege mit kleinster und größter Länge bildeten, nicht mehr die Diagonalen. Abbildung 4.10 zeigt das Ergebnis der Testmessungen. Zunächst erfolgte eine Drehung des ersten Spulenpaars im zweiten Arm, so daß es optimal für Spulenpaar b ausgerichtet war. Die Polarisation der Neutronen, die Spule c passieren, nimmt dabei wie erwartet ab. Anschließend wurde Spule c so gedreht, daß der Zwischenraum zum ersten Spulenpaar ein symmetrisches Trapez bildete. Die Aktivierung der Korrekturspule erbrachte schließlich einen zwar geringen, aber merklichen Polarisationsgewinn. Um die Korrektur zu verbessern, ist die Kombination mit einer Spule erforderlich, die Wege von unterschiedlicher Richtung mit differenzierten Phasen versieht.

### 4.3 Die Ergebnisse von quasielastischer Streuung

Die Messungen mit quasielastischen Streuern unterscheiden sich einerseits nicht prinzipiell von den Messungen an pyrolytischem Graphit. Alle instrumentellen Parameter bleiben identisch, lediglich die Probe wird durch die dafür vorgesehenen Öffnungen der Mumetallabschirmung in den Strahl gebracht.

Dennoch gibt es einen wesentlichen Unterschied: Die Zählraten in den Detektoren hinter Spule b und c sind um den Faktor 100-1000 geringer als bei pyrolytischem Graphit als Streuer. Im Vergleich zum direkten Strahl fehlen ungefähr fünf bis sechs Größenordnungen. Dies entspricht etwa dem Raumwinkel, der einem Detektor der Fläche  $10 \text{ cm}^2$ , der sich in über  $2 \text{ m}$  Entfernung vom Streuzentrum befindet, zugänglich ist. Die geringe Zählrate ist zum einen diesem geometrischen Effekt, zum anderen der Tatsache zuzuschreiben, daß es sich bei den Proben um starke Vorwärtsstreuer und nicht um isotrope Streuer handelt.

Zunächst wird im folgenden dargestellt, welche Überlegungen bezüglich der „Meßstrategie“ die geringe Zählrate erfordert. Im Anschluß daran gehen wir auf die Vorkehrungen ein, um den Spinechopunkt trotz der beträchtlichen Temperaturschwankungen und den Dimensionen des Experiments über die zwangsläufig langen Meßzeiten stabil zu halten.

### 4.3 Die Ergebnisse von quasielastischer Streuung

Die geringe Zählrate stellte zudem im Zusammenhang mit Untergrundproblemen die Anforderung an die Auswertung, die relevanten Daten von Zählraten zu unterscheiden, die in der gleichen Größenordnung liegen, jedoch mit quasielastischer Streuung an der Probe nichts zu tun haben.

Die Ergebnisse, die wir auf diesem Weg gewannen, schließen diesen Abschnitt in 4.3.3 ab. Die uns zur Verfügung stehenden Proben wiesen klassische Diffusion auf: Durch die Masse der diffundierenden Polymere kann der Streuprozess im Bild von Teilchen verstanden werden, die beim Stoß Energie und Impuls austauschen. Das leichtere Neutron wird dabei ebenso oft beschleunigt wie abgebremst, so daß integral über den gesamten Strahl kein Energieübertrag stattfindet. Für einzelne Neutronen beschreibt eine einfache Lorentzfunktion die Wahrscheinlichkeit eines Energieübertrages. Die intermediäre Streufunktion als deren Fouriertransformierte ließ einen exponentiellen Abfall mit wachsender Spinechozeit erwarten.

#### 4.3.1 Die Ermittlung der Polarisation

Über die Messungen der Zählrate wird auf den Erwartungswert der Polarisation geschlossen. Bei Zählraten von ein bis zwei Counts pro Sekunde ist es von Wichtigkeit, daß nicht aufgrund von überflüssigen Messungen Statistik „verschenkt“ wird. Ein Aspekt, der hierbei Betrachtung verdient, ist die Genauigkeit, mit der nach einer vorgegebenen Meßzeit die Polarisation feststeht.

Die Polarisation  $pol$  ergibt sich auf folgende Weise aus den up- und down-Raten (pro Zeiteinheit):

$$pol = \frac{up - down}{up + down}.$$

Mit der Definition der mittleren Zählrate  $mr$ :

$$mr = \frac{up + down}{2}.$$

ergibt sich:

$$pol = \frac{mr - down}{mr} = 1 - \frac{down}{mr}.$$

Nach der Zeit  $t_{Mess}$  sind  $t_{Mess} \cdot down$  Counts gezählt. Wir nehmen an, daß die mittlere Zählrate über eine gleich lange Zeit ermittelt wird. Nach dem Fehlerfortpflanzungsgesetz folgt je nach Meßzeit ein Fehler von:

$$\Delta pol = \sqrt{1 + \frac{down}{mr}} \cdot \frac{\sqrt{down}}{\sqrt{t_{Mess} \cdot mr}}.$$

Analog folgt der entsprechende Ausdruck

$$(4.14) \quad \Delta pol = \sqrt{1 + \frac{down}{mr}} \cdot \frac{\sqrt{down}}{\sqrt{t_{Mess} \cdot mr}}$$

falls die Up-Zählrate  $up$  gemessen wird.

Da die Up-Zählrate im Maximum der Spinechokurve größer als die Down-Zählrate ist, bietet die Messung der down-Zählrate im Spinechopunkt einen Zeitvorteil, z.B. bei einer Polarisation von 60% um den Faktor 2!

Für die optimale Verteilung der Gesamtmeßzeit  $T$  auf die down- und mr-Messung erhält man:

$$(4.15) \quad t_{down} = T \cdot \frac{1 - \sqrt{down / mr}}{1 - down / mr}, \quad t_{mr} = T - t_{down}.$$

Die Messung der mittleren Zählrate erfordert entweder einen völlig depolarisierten Strahl oder alternativ, sowohl die up- als auch down-Komponente zu messen. Letzteres konnte sehr rationell im Zusammenhang mit den im nächsten Abschnitt beschriebenen Messungen zur Stabilisierung des Spinechopunktes erreicht werden.

### 4.3 Die Ergebnisse von quasielastischer Streuung

#### 4.3.2 Die Messungen unter Kontrolle des Spinechopunkts

Der Gesamtaufbau besitzt eine Länge von mehr als 6m und befindet sich auf einem Aluminiumgestell. Bei Schwankungen der Temperatur im 10K-Bereich, wie sie im Verlauf einer Messung von Mittag bis Mitternacht auftreten können, sind typische Wärmeausdehnungen von mehreren zehntel Millimetern möglich. Auf relative Längenänderungen des ersten gegenüber dem zweiten Arm in dieser Größenordnung durch ungleichmäßige Erwärmung ist unser Aufbau durchaus sensitiv, wie die Abbildung 4.11 beweist. Falls über längere Zeit mit unveränderten Einstellungen gemessen wird, schwankt die Polarisation in einem Halbtagesrhythmus, da sich der Spinechopunkt durch die Wärmeausdehnung verschiebt, d.h. ein anderer Stromwert in der Rotationsspule für die Einstellung des Spinechopunktes erforderlich ist.

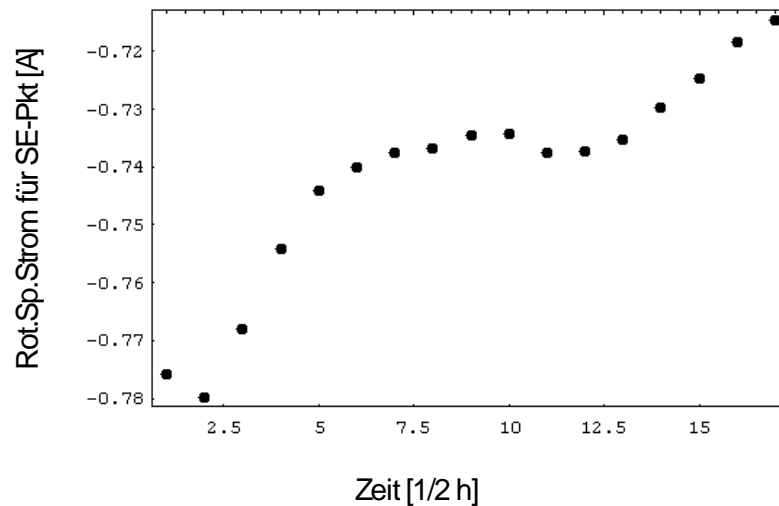


Abbildung 4.11: Der Rotationsspulenstrom für die Einstellung des Spinechopunktes bei ansonsten unveränderten Einstellungen über der Zeit. Deutlich sind die Schwankungen durch thermische Ausdehnung und relative Längenänderung der Spektrometerarme zu erkennen.

Um die Konsistenz der langwierigen Messungen an quasielastischen Streuern mit den Daten von Graphitmessungen zu gewährleisten, ist eine etwa halbstündige Kontrolle des Spinechopunktes erforderlich. Die Kenntnis der Lage des Spinechopunktes ist zum einen unverzichtbar für die Korrektur der Meßdaten gemäß eventueller Abweichungen.

Ebenso wichtig wie die Korrektur der Daten ist die korrekte Einstellung des Spektrometers während der Messungen, da ansonsten durch geringere Polarisierungen mehr Meßzeit erforderlich wäre. Dies erfordert ein ständiges Nachregeln der Rotationsspule zur Einstellung des Spinechopunktes.

Wie in Kapitel 2 beschrieben, erfolgt die Einstellung der Sollwerte über einen Meßrechner (LSI). Mit der Ausführung von zwei umfangreichen Meßprogrammen ist der Rechner fast vollständig ausgelastet. Zudem findet die gesamte Auswertung der Daten mit geeigneten Programmen auf PCs, nicht auf dem Meßrechner statt.

Aus diesen Gründen erfolgte die Entwicklung eines auf unsere Erfordernisse angepaßten Terminalprogramms (in der Sprache C) für den PC, dessen Bedeutung insbesondere in der Möglichkeit zur Kontrolle des Spinechopunktes liegt und dessen Funktionsweise kurz beschrieben werden soll:

Zunächst gelangen sämtliche Ergebnisse der Messungen sofort über eine serielle Schnittstelle zum PC und können dort weiterverarbeitet werden. Auf diese Weise gespeicherte Spinechokurven-Daten lassen sich auf dem PC mit einer geeigneten Funktion anpassen. Für den weiteren Verlauf der Messungen ist insbesondere die Lage des Spinechopunktes als Ergebnis des Fits von Interesse. Durch geeignete Befehle erfährt der Meßrechner das Ergebnis der Anpassung und korrigiert die Einstellung der Rotationsspule gemäß vorliegenden Abweichungen vom Spinechopunkt.

Die Korrektur des Spinechopunktes kann auf diese Weise in zweifacher Art erfolgen. Außer der einzelnen Eingabe der zutreffenden Befehle ist ein Betriebsmodus der beiden Rechner möglich, in dem der Meßrechner selbst nach erfolgter Datenaufnahme den Befehl zum Fitten der Daten an den PC gibt. Nach der Ausführung des Befehls überreicht umgekehrt der PC das Ergebnis der Anpassung an den Meßrechner, der diesen Zeitpunkt abwartet und erst mit den optimalen Daten die nächste Messung startet. Nur auf diese Weise ist eine halbstündige Korrektur des Spinechopunktes unter vollständiger Nutzung des Strahls möglich.

### 4.3 Die Ergebnisse von quasielastischer Streuung

#### 4.3.3 Die Auswertung der Daten

Das Ziel der Messungen ist die Feststellung der von allen Depolarisationseffekten befreiten Daten. Die bei verschiedenen Spinechozeiten gemessenen korrigierten Werte ermöglichen Aussagen über den Verlauf der intermediären Streufunktion.

Die Vorgehensweise bei der Auswertung knüpft zunächst an die im vorigen Abschnitt erwähnte Tatsache an, daß der Spinechopunkt regelmäßiger Überprüfung und Nachregelung bedurfte. Dies geschah, indem in etwa halbstündigem Abstand die Aufnahme einer Spinechokurve im direkten Strahl erfolgte. Jede Änderung der Einstellungen wurde während der Messungen protokolliert. Bei der Auswertung bestand nun der erste Schritt darin, sämtliche Daten bei identischer Spinechozeit mit typischen Gesamtmeßzeiten von drei bis acht Stunden zusammenzufassen. Um das Wandern des Spinechopunktes zu korrigieren, wurden die protokollierten Werte für den Spinechopunkt linear interpoliert und für jede Einzelmessung der betreffende Wert ermittelt. Hierbei ging die Annahme ein, daß die Wanderung des Spinechopunktes im gestreuten Strahl identisch zum direkten Strahl ist. Diese Annahme ist dadurch gerechtfertigt, daß der Aufbau weitgehend symmetrisch bezüglich der Längsachse ist und sich Längenänderungen hauptsächlich in der Distanz zwischen den Spulen bemerkbar machen sollten.

Nach dieser Korrektur können die zusammengehörigen Daten gemeinsam aufgetragen und angepaßt werden. Abbildung 4.12 zeigt zum Vergleich die korrigierten neben den unkorrigierten Daten. Aus den oben genannten Gründen ermittelten wir nur die down-Zählraten an einigen Punkten in der Nähe des Minimums dieser Zählrate, d.h. im Maximum der Polarisation. Die Größe der Umgebung des Spinechopunktes, in der die Meßpunkte liegen, ist festgelegt durch die Übereinstimmung der Flugstrecken im zweiten Arm zu Spule b und c. Da sich durch das Verdrehen der Spulen bei der Suche nach dem Polarisationsmaximum auch die mittleren Abstände geringfügig ändern, wiesen die Flugstreckenlängen Unterschiede von ein paar hundertstel Millimeter auf. In der gleichen Größenordnung liegt die Differenz der mittleren Flugstrecken für die beiden Detektoren pro Spule - eine weitere Auswirkung der Tatsache, daß das dritte Spulenpaar nicht auf nur eine Spule gerichtet werden konnte.

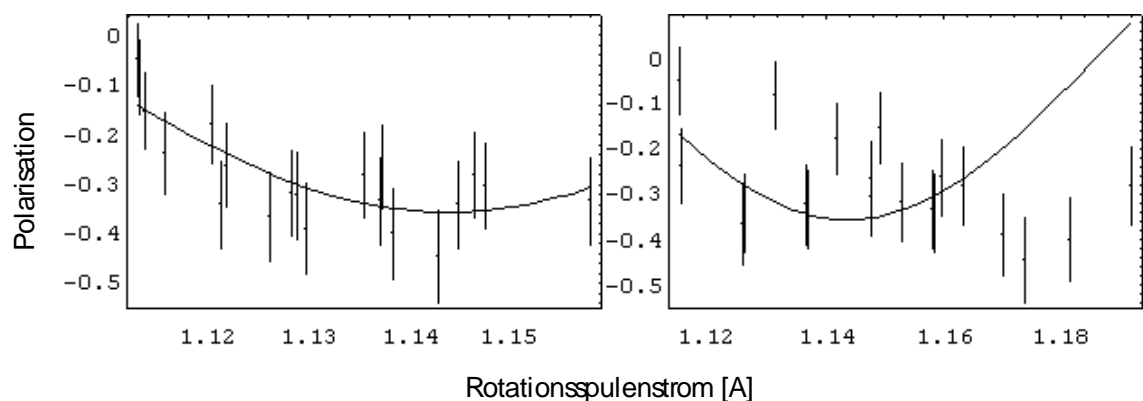


Abbildung 4.12: Die korrigierten Zählraten von vier verschiedenen Einzelmessungen. Zum Vergleich daneben rechts die unkorrigierten Daten, deutlich ist zu sehen, daß die Korrektur der Werte für den Rotationsspulenstrom zu einer „sinnvollen“ Verschiebung der Daten führt.

Im nächsten Schritt erfolgte die Berechnung der Polarisation nach der oben beschriebenen Art durch die down- und die mittlere Zählrate. Der letztere Wert läßt sich durch einfaches Aufsummieren der Zählraten für die entsprechenden Streuwinkel ermitteln, die während der halbstündigen Korrektur-Spinechos gemessen wurden.

Eine besondere Behandlung verlangt das Auftreten von Untergrund. Bei Zählraten von ein bis zwei pro Sekunde macht sich der Untergrund, auch nachdem wir ihn mit dem für eine Strahlzeit vertretbaren Aufwand zu vermeiden suchten, in der Größenordnung von 0.5 Counts bemerkbar. Deshalb ist die genaue Analyse des Untergrundes entscheidend für die Aussagekraft der Ergebnisse.

Der verbliebene Untergrund besitzt zwei Quellen. Zum einen macht sich der Neutronen-Untergrund in der Experimentierhalle durch restliche Öffnungen der Detektorabschirmung bemerkbar. Zum anderen sind zum Untergrund auch diejenigen Neutronen zu zählen, die zwar den ordnungsgemäßen Weg durch die Mumetallabschirmung und die Resonanzflipspulen zurücklegen, jedoch nicht durch Streuung an der Probe in die Detektoren hinter Spule b bzw. c gelangen, sondern z.B. durch Streuung an Luftmolekülen. Der Anteil der Neutronen, der durch elastische Streuung auf diese Art detektiert wird, bildet den polarisierten Untergrund, der in unserem Fall bis über 60% des gesamten Untergrundes ausmachen kann. Abbildung 4.13 zeigt eine

### 4.3 Die Ergebnisse von quasielastischer Streuung

Spinrotationskurve ohne Probe, die die resultierende Polarisation des Untergrunds hinter Spule b darstellt. Die Analyse des Untergrundes aller Detektoren zeigt, daß die Polarisation des Untergrundes wie erwartet mit wachsendem Streuwinkel abfällt. Bei den Auswertungen ist die Kenntnis des polarisierten Untergrundes zur Korrektur der down-Zählrate und die Kenntnis des unpolarisierten Untergrundes zur Korrektur der mittleren Zählrate vonnöten.

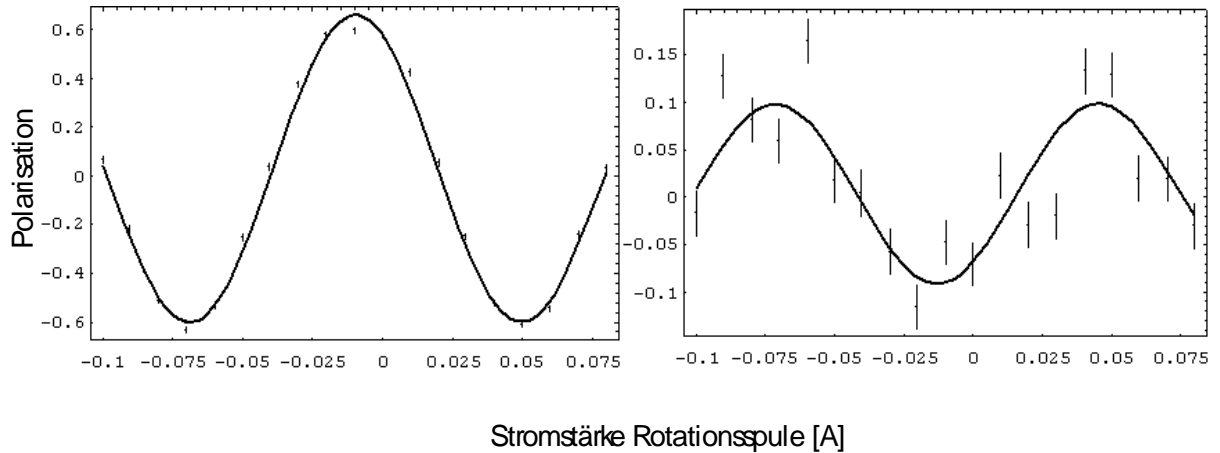


Abbildung 4.13: Die Polarisation des Untergrunds, d.h. es wurde ohne Probe gemessen. Links das Ergebnis für Detektor b1 (erster abgelenkter Strahl). Hier ist mit 64% die höchste Polarisation des Untergrundes festzustellen. Zu größeren Winkeln nimmt die Polarisation des Untergrundes ab, wie der rechte Plot der Zählrate hinter Spule c zeigt.

An dieser Stelle muß betont werden, daß das Aluminium der Resonanzflipspulen keinerlei meßbaren Untergrund beiträgt. Den Nachweis dieses Verhaltens erbringt der Vergleich zwischen den Zählraten mit und ohne der doppelten Menge an Aluminium im Strahl. Unter keinem Streuwinkel erhöhte sich die Zählrate merklich durch Kleinwinkelstreuung.

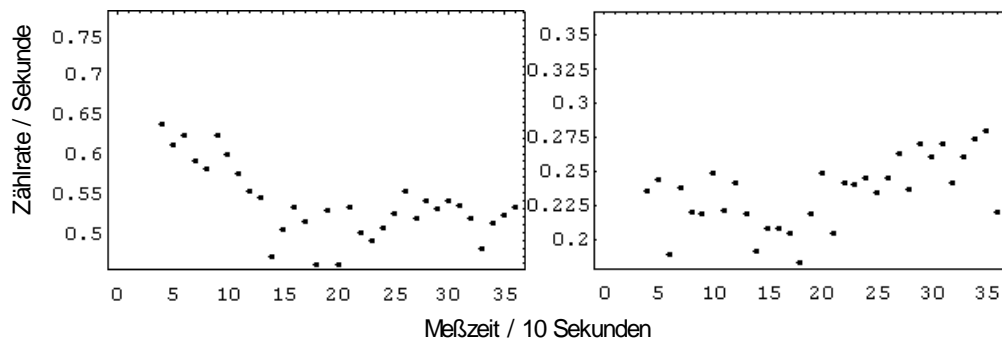


Abbildung 4.14: Die Zählrate über drei Stunden ohne Probe, links bei kleinstem Streuwinkel, rechts beim zweitgrößten Winkel. Im Vergleich dazu ergab die analoge Messung mit doppelten Aluminiumwänden die Zählraten  $0.587 \pm 0.027$  bzw.  $0.220 \pm 0.0168$  pro Sekunde.

Neben der Tatsache, daß der Untergrund eine Polarisation besitzt, erschwert seine Herkunft die Feststellung der Untergrundrate bei eingebauter Probe. Denn die Untergrundzählrate bei ausgebaute Probe übertrifft die Rate bei eingebauter Probe. Dies liegt daran, daß in ähnlichem Maße, wie der Strahl durch die Probe geschwächt wird, auch die Zahl der Untergrund-Neutronen abnimmt, die aus dieser Richtung stammen. Ein einfaches Abziehen der Untergrundrate, die ohne Probe ermittelt wird, von der mit Probe gemessenen Zählrate führt zu falschen Ergebnissen.



### 4.3 Die Ergebnisse von quasielastischer Streuung

Die Lösung dieses Problems besteht in der Kombination dreier unabhängiger Messungen, deren eine die oben gezeigte Untergrund-Spinrotationsmessung darstellt. Des weiteren erfolgten analoge Messungen mit identischen Einstellungen des Spektrometers an der Graphitprobe und schließlich an der in Frage stehenden quasielastischen Probe. Auf die Zählrate des Untergrundes mit quasielastischer Probe läßt sich hieraus wie folgt schließen:

$$(4.16) \quad \frac{mr_{Unt}}{mr_{quasiel}} = \frac{pol_{Graphit} \cdot pol_{quasiel}}{pol_{Graphit} - pol_{Unt}}$$

mit dem Kürzel  $pol$  für die durch einen Fit ermittelten jeweiligen Polarisationswerte und den Werten  $pol_{quasiel}$ ,  $mr_{quasiel}$  für die Polarisation und die gemessene Gesamtzählrate mit quasielastischem Streuer. Die Herleitung der Beziehung 4.16 beschreibt Anhang B.

Nach der Ermittlung von polarisiertem und unpolarisiertem Untergrund läßt sich schließlich die Intermediäre Streufunktion unter Einbezug der Instrumentenfunktion berechnen. Es ergibt sich

$$(4.17) \quad S(q, t_{SE}) = \frac{pol(t_{SE})_{quasiel} \cdot \frac{pol_{Graphit}}{pol(t_{SE})_{Graphit}} - pol_{Unt} \cdot \frac{pol_{Graphit} \cdot pol_{gemessent}}{pol_{Graphit} - pol_{Unt}}}{pol_{quasiel} - pol_{Unt} \cdot \frac{pol_{Graphit} \cdot pol_{gemessen}}{pol_{Graphit} - pol_{Unt}}}$$

In diesem Ausdruck tauchen nur bekannte Größen aus den beschriebenen Messungen auf. Die Ergebnisse von Spinrotationen sind dadurch gekennzeichnet, daß sie keine Abhängigkeit von der Spinechozeit besitzen - bzw. diese Null ist. Die Herleitung dieses Ausdrucks findet sich ebenfalls in Anhang B.

#### 4.3.4 Die Meßergebnisse für eine Latexpolymer-Lösung

Die verwendete Probe stellte eine 5%-Lösung von Latexpolymeren in Cyclohexan dar. Latexpolymere entstehen bei der Polymerisation von 2-Methyl-1-3-Butadien.

Da es sich um lange Ketten handelt, die weder Quanteneffekten noch topologischen Beschränkungen unterliegen, erwarten wir klassische Diffusion. Die entsprechende Streufunktion  $S(q, \omega)$  wird durch eine Lorenzkurve beschrieben

$$(4.18) \quad S(q, \omega) = S(q) \cdot \frac{D \cdot q^2}{(D \cdot q^2)^2 + \omega^2}$$

mit der Diffusionskonstante  $D$ . Die entsprechend intermediäre Streufunktion ergibt sich durch Fouriertransformation von 4.19 zu

$$(4.19) \quad S(q, t) = S(q) \cdot e^{-D \cdot q^2 \cdot t}$$

### 4.3 Die Ergebnisse von quasielastischer Streuung

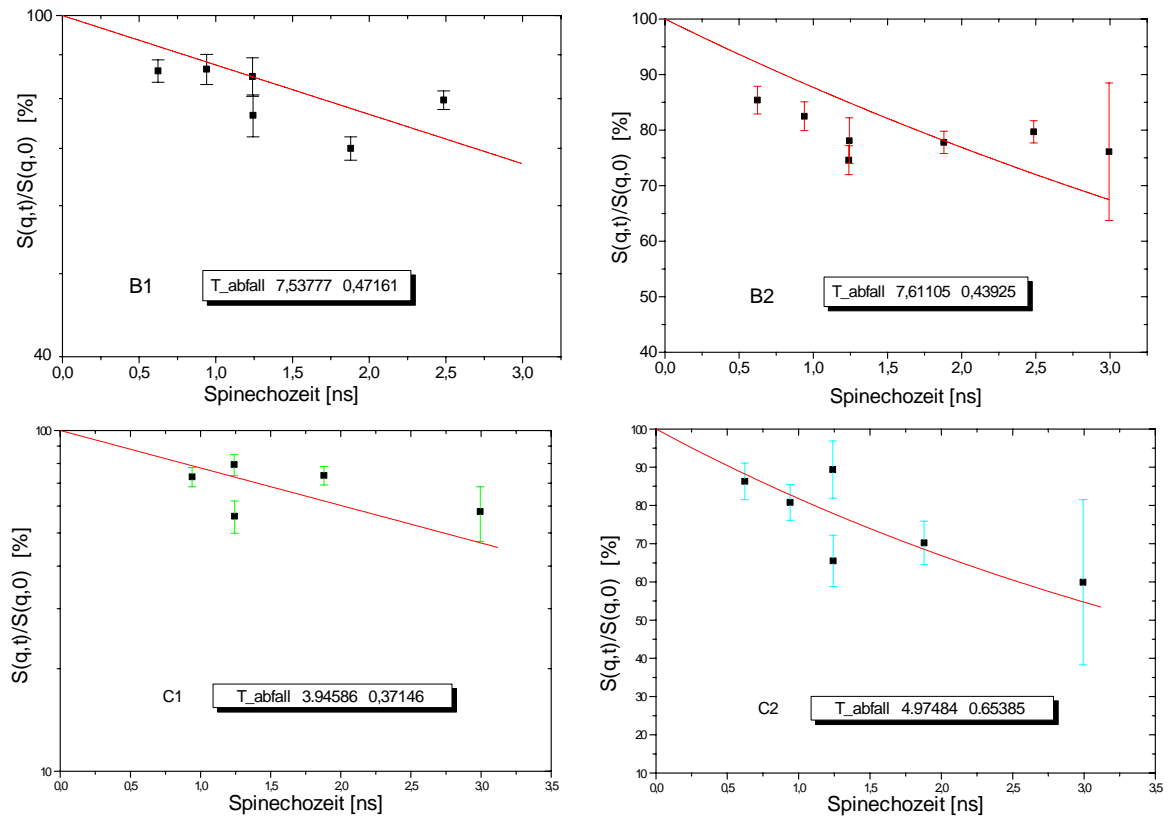


Abbildung 4.15: Die gemessenen normierten intermediären Streufunktionen bei einer Wellenlänge von  $5.15\text{\AA}$ . Die linken Kurven sind auf logarithmischer Skala, die rechten linear dargestellt. Mit steigendem Streuwinkel verläuft der angepasste exponentielle Abfall erwartungsgemäß schneller.

Abbildung 4.15 zeigt die gemessenen normierten intermediären Streufunktionen bei einer Selektordrehzahl von  $3300\text{U}/\text{min}$ , d.h. einer Wellenlänge von  $5.15\text{\AA}$ . Die Daten ließen sich mit einer abfallenden Exponentialfunktion der Form

$$S(q,t) = S(q) \cdot e^{-t/T}$$

anpassen. Es ergibt sich die folgende mittlere Diffusionskonstante:

$$D = \frac{1}{q^2 \cdot T} = (3.5 \pm 0.8) \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2 / \text{sec.}$$

Die starke Abweichung zwischen den Werten für kleine (Spule b) und große (Spule c) Winkel etwa um den Faktor zwei macht sich in der Unsicherheit dieses Wertes bemerkbar - angegeben wurde der mit dem Fehler gewichtete Mittelwert der Ergebnisse für die vier unterschiedlichen Winkel. Dabei wurde die Unsicherheit des Impulsübertrags durch das Wellenlängenspektrum ebenfalls berücksichtigt. Da die Temperatur der Lösung nicht bekannt ist, entzieht sich der Wert für die Diffusionskonstante einer eingehenden Diskussion.

Abbildung 4.16 zeigt analog die gemessenen intermediären Streufunktionen bei einer Selektordrehzahl von  $2200\text{U}/\text{min}$ , d.h. einer Wellenlänge von  $7.73\text{\AA}$ . Die Anpassungen ergeben hier:

$$D = \frac{1}{q^2 \cdot T} = (5.8 \pm 1.4) \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2 / \text{sec.}$$

Die Werte differieren für verschiedene Winkel noch stärker. Dabei gibt es zwei hauptsächliche Fehlerquellen: zum einen ist die Statistik bei größeren Winkeln sehr schlecht. Diese Werte wurden nicht mehr berücksichtigt. Zum anderen sind die Werte bei dem kleinsten Winkel durch den polarisierten Untergrund beeinträchtigt.

### 4.3 Die Ergebnisse von quasielastischer Streuung

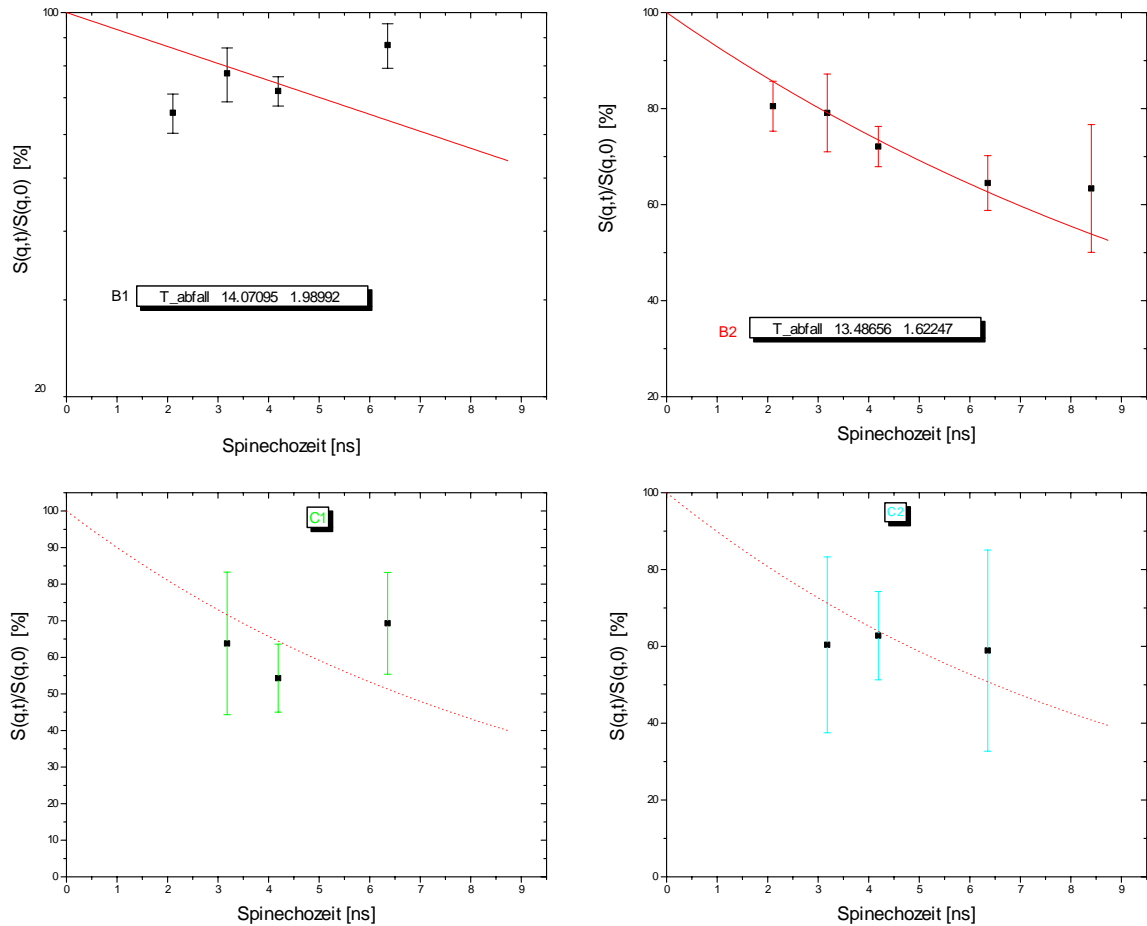


Abbildung 4.16: Die gemessenen normierten intermediären Streufunktionen bei einer Wellenlänge von 7.73Å (Polymerlösung). Die Kurve links oben ist auf logarithmischer Skala, die rechte linear dargestellt. Die beiden Anpassungen für größere Streuwinkel sind mit großen Unsicherheiten behaftet.

#### 4.3.5 Die Dynamik eines Diamantkugelmischs

Neben der Dynamik der Polymerlösung gingen wir der Frage nach, ob es in einer Probe, die aus Diamantkugeln der Größe 50-250nm, die sich in Fomblin, einem inerten Perfluoroether befanden, dynamische Prozesse gibt. Das Gemisch verursacht aufgrund der im Verhältnis zur Neutronenwellenlänge größeren Dimensionen der Kugeln Kleinwinkelstreuung. Da keine Fernordnung der Kugeln besteht, verweist die intermediäre Streufunktion wiederum über inkohärente Streuung auf die Einteilchen-Korrelationsfunktion.

Wieder besitzen die Daten bei größeren Streuwinkeln erhebliche Unsicherheiten aufgrund der geringen Zählraten. Ein Abfall der Intermediären Streufunktion ist zu erkennen, er entspricht einer Diffusionskonstante von

$$D = \frac{1}{q^2 \cdot T} = (3.2 \pm 1) \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2 / \text{sec}.$$

Dieser Wert ergibt sich auf analoge Weise wie oben gezeigt durch Anpassung der Daten mit einer geeigneten, exponentiell abfallenden Funktion. Abbildung 4.17 zeigt die Daten nebst den Anpassungen.

### 4.3 Die Ergebnisse von quasielastischer Streuung

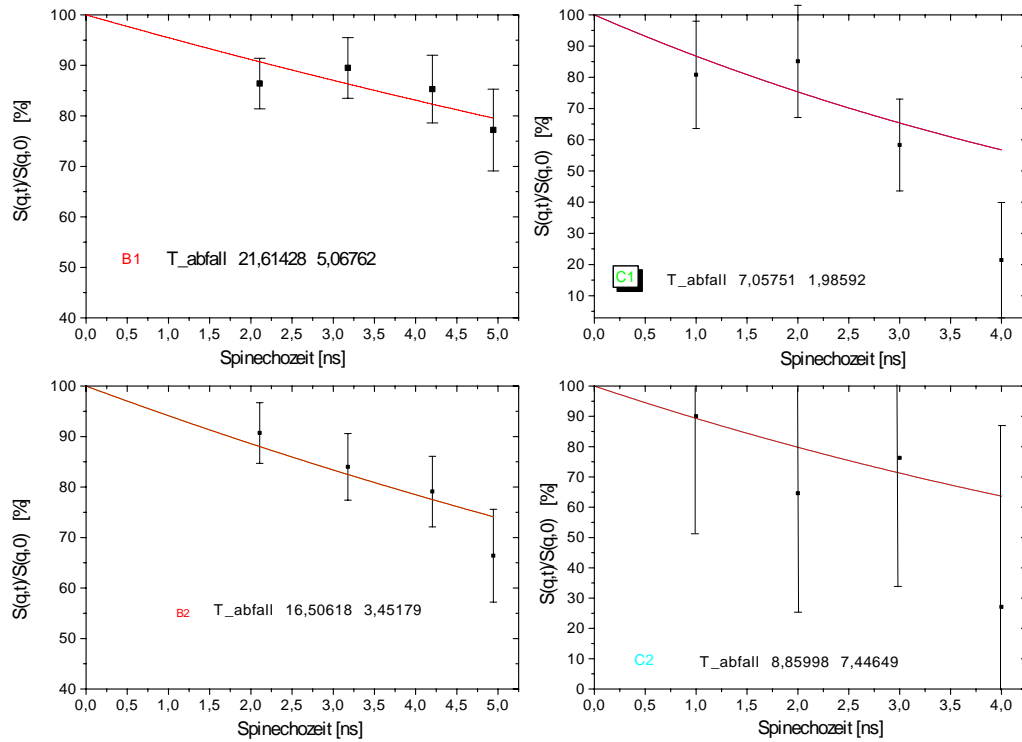


Abbildung 4.17: Die gemessenen normierten intermediären Streufunktionen an einem Diamantgemisch in Formblin bei einer Wellenlänge von  $7.73 \text{ \AA}$ . Die beiden Anpassungen auf der rechten Seite für größere Streuwinkel sind mit großen Unsicherheiten behaftet.

#### 4.3.6 Die Probenmessung während der ersten Strahlzeit

Zum Vergleich der Ergebnisse und der Instrumentenfunktion mit dem experimentellen Aufbau der ersten Strahlzeit erwähnen wir die Messungen vom vorhergehenden Jahr. Die Divergenzprobleme durch Multidetektoreinsatz waren dadurch nicht gegeben, daß nur neun Resonanzflipsulen zur Verfügung standen, deren acht in einem einfachen Bootstrap-Aufbau zum Einsatz kamen.

Damit hängt andererseits zusammen, daß die Ergebnisse aufgrund der geringeren Zählrate mit größeren statistischen Fehlern behaftet sind. Ihre Aussagekraft ist dadurch sehr beschränkt. Hinzu kommt, daß die aktive Nachregelung des Spinechopunktes noch nicht existierte.

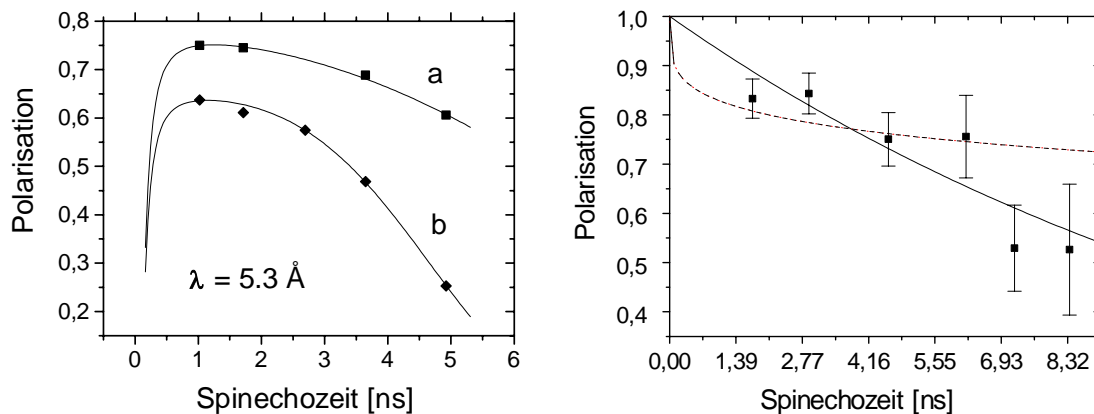


Abbildung 4.18: Die Ergebnisse der ersten Strahlzeit. Links ist die Polarisation im direkten Strahl (a) zusammen mit der Instrumentenfunktion (b) aufgetragen. Die Abbildung rechts zeigt die normierte intermediäre Streufunktion des living polymer bei einer Wellenlänge von  $6.4 \text{ \AA}$  und einem Impulsübertrag von  $0.06 \text{ \AA}^{-1}$ . Die Linien entsprechen dem theoretischen Verlauf, durchgezogen für klassische Diffusion, gestrichelt für das Reptation-Modell.

### 4.3 Die Ergebnisse von quasielastischer Streuung

Die Probe bestand aus einer Lösung von Kupfer(II)-Tetracarboxylat in Methylcyclohexan. Die einzelnen Moleküle ( $Cu_2S_8$ ) bilden über elektrostatische Anziehungskräfte Polymere. Bekannt geworden sind diese geleeartigen Lösungen durch ihr besonderes Verhalten als „living polymers“: bereits bei Raumtemperatur liegt die thermische Energie in der Größenordnung der Bindungsenergie, so daß sich die Polymerketten trennen und, eventuell an einer anderen Stelle, wieder zusammenlagern können [Ter92]. Dies führt zu anderer Dynamik als bei langen, starren Polymerketten. Während dort durch topologische Einschränkungen die Exponentialfunktion im Ausdruck für die intermediäre Streufunktion eine andere Zeitabhängigkeit erhält [Gen67], ist für auseinandergebrochene Kettenteile wiederum klassische Diffusion zu erwarten.

In Abbildung 4.17 ist neben der Instrumentenfunktion anhand der Meßdaten zu erkennen, daß die Genauigkeit der Messung keine Unterscheidung zwischen zwei verschiedenen Modellen erlaubt.

## 5 Zusammenfassung und Ausblick

Unser Ziel war es, durch Einsatz der Resonanzspinechomethode und Weiterentwicklung der wesentlichen Komponenten ein Multidetektor-Spinecho-Spektrometer zu realisieren, das die Vorzüge der Spinechomethode mit den Vorteilen von simultaner Detektion unter mehreren Streuwinkeln vereint.

Dieses Ziel wurde erreicht, so daß während der letzten Strahlzeit nach den Tests der Apparatur innerhalb weniger Tage noch brauchbare Messungen an Proben durchgeführt werden konnten, die die Funktion des Spektrometers erwiesen. Die Minimierung der Meßzeiten wird auch in Zukunft einen entscheidenden Vorteil derartiger Spektrometer ausmachen. Ermöglicht wird diese Zeitersparnis durch die Kombination von Intensitätsvorteilen der Spinechomethode - infolge der Nutzung eines relativ breiten Wellenlängenbandes - mit dem Vorteil der Detektion von gestreuten Neutronen unter verschiedenen Winkeln - mittels mehrerer Detektoren.

Die Durchführung unseres Konzepts bedurfte der sorgfältigen Planung aller Komponenten, vor allem jedoch der Resonanzflipspulen. Die Ausführung von Pi-Flips unter möglichst geringer Depolarisation stellt hohe Anforderungen an die Homogenität der Innenfelder und die Begrenzung von Streufeldern. Um ihnen mit den neuen Spulen gerecht zu werden, erfolgte zunächst die Berechnung und Simulation der Magnetfelder, insbesondere der Hochfrequenzfelder.

Auf diese Weise konnten insgesamt 21 Spulen fertiggestellt werden, die den gestellten Anforderungen genügen. Dies erwiesen zunächst die Tests während der ersten Strahlzeit in einer bewährten Bootstrap-Anordnung. Zudem ergab diese Strahlzeit wichtige Ergebnisse hinsichtlich der Funktion der ebenfalls fertiggestellten konischen Magnetfeld-Abschirmung.

Für den Einsatz einer kompletten Multidetektorapparatur bei der zweiten Strahlzeit wurden die Resonanzflipspulen und die Mumetallabschirmung aufgrund der Erfahrungen nochmals verbessert. Zudem erfolgte die Konstruktion der mechanischen und elektronischen Komponenten des Detektorarrays. Schließlich mußte auch die Ein- und Auskoppelvorrichtung den Bedürfnissen angepaßt werden.

Die Messungen bestätigten die Berechnungen und Simulationen bei der Konstruktion der Apparatur. Im direkten Strahl ließen sich die Depolarisationseffekte bestimmen, die im Einklang mit den Erwartungen waren. Von entscheidender Bedeutung für Probenmessungen ist neben der erreichbaren Polarisation auch deren Stabilität über längere Zeiträume. Mit den Neuerungen beim Design der Koppelspulen in Verbindung mit einer eigens entwickelten aktiven Regelung des Spinechopunkts wurde auch dieses Ziel erreicht.

Die Messungen an Streuproben erbrachten zunächst wichtige Ergebnisse hinsichtlich der Anordnung der Komponenten des konischen Spektrometerarms. Schließlich ließ die übrige Zeit noch Streuexperimente an zwei quasielastischen Streuern zu.

Für die zukünftige Optimierung des Spektrometers bietet der Einsatz von Divergenz-Korrekturspulen das größte Feld. Während der Strahlzeit und der anschließenden Auswertung der Ergebnisse ließen sich die ersten Schritte für zukünftige Verbesserungen gehen. Erst der Einsatz von Korrekturen in Form von Dreieckspulen oder Spulen mit Feldern in anderer geeigneter Form wird größere  $B_0$ -Feldstärken zulassen und damit das Potential der übrigen Komponenten zur Entfaltung bringen können. Spinechozeiten von mehreren zehn Nanosekunden erscheinen als kein unmögliches Ziel. Den begrenzenden Faktor stellten jedoch bei der vergangenen Strahlzeit die Flugstreckenunterschiede für verschiedene Neutronen dar.

Eine einfachere Lösung gibt es für den anderen begrenzenden Faktor, den polarisierten Untergrund. Aus Gründen der einfachen Handhabbarkeit verzichteten wir in der Vergangenheit auf das Evakuieren der Volumina, in denen die Neutronenflugstrecken verlaufen. Doch spätestens dann, wenn die Montage und Demontage des gesamten Experiments nicht mehr innerhalb weniger Wochen stattfindet, überwiegen die Vorteile. Denn vom vorderen Ende des experimentellen Aufbaus bis zu den Detektoren sind es immerhin über 7m, in denen die Neutronen von Luftmolekülen gestreut werden können. Trotz der geringen Wirkungsquerschnitte macht sich diese Tatsache durch Kleinwinkelstreuung und Dämpfung der Intensität des direkten Strahls bemerkbar. Bei der Auswertung der

Streuungsergebnisse konnte die Luftstreuung von der Probenstreuung getrennt werden. Die Genauigkeit der Messergebnisse wird jedoch beeinträchtigt.

Das Konzept unseres Resonanzspinechos ist sehr vielseitig und kann in der Zukunft auch noch weiteren Aufgaben dienen, wie zum Beispiel der Messung von Phononenlinienbreiten. Für die Detektion größerer Streuwinkel ließen sich auch mehrere Mumetall-Abschirmungen nebeneinander positionieren. Die Stärke der Resonanzspinechomethode bewirkt hier, daß lediglich ein entsprechender Bereich mit „Nullfeld“ bereitgestellt werden muß. Die Flipspulen bedürfen keiner Änderung, sie lassen sich leicht und vielseitig handhaben. Die Konzepte des Multidetektor-Resonanzspinecho-Spektrometers haben sich damit in der Praxis bewährt. Gerade für die Untersuchung von quasielastischer Streuung durch Kleinwinkelstreuung dürfte der Aufbau dem Stadium eines Prototypen entwachsen sein.

## 6 Literaturverzeichnis

- [*Bic97*] Biche, S., „Erprobung und Weiterentwicklung eines Multidetektor-Neutronen-Resonanz-Spin-Echo-Spektrometers“, Diplomarbeit an der Universität Heidelberg (1997).
- [*Blo40*] Bloch F, Siegert A., Magnetic Resonance for Nonrotating Fields, *Phys. Rev.* **57** (1940), 522.
- [*Bol75*] Boll, R., Borek, R., „Weichmagnetische Werkstoffe“, Firmenschrift Vakuumschmelze Hanau (1975).
- [*Bol80*] Boll, R., Borek, R., „Elektromagnetische Schirmung“, Technische Informationsblätter Vakuumschmelze Hanau (1980).
- [*Bro61*] Brockhouse, B.N., „Inelastic scattering of neutrons in solids and liquids“, IAEA, Wien (1961), 147.
- [*Dub89*] Dubbers, D., El-Muzeini, P., Kessler, M., Last, J., „Prototype of a Zero-Field Neutron Spin-Echo-Spektrometer“, *Nucl. Instr Meth.* **A 275** (1989), 294-300.
- [*Dub94*] Dubbers, D., *Nuclear Instr. Meth.* **A 349** (1994), 302.
- [*Dub96*] Dubbers, D., Schmidt, U., Raum, K., Joeres, O., Schärpf, O., „Supermirror beam bender and concentrator for slow neutrons“, *J. Neutron Research*, Vol. 5 (1996), 81-88.
- [*Fri89*] Friedrich, H., Wagner, V., Wille P., A High-Performance Neutron Velocity Selector, *Physica* **B 156 & 157** (1989), 547ff.
- [*Gäh87*] Gähler, R., Golub, R., A High Resolution Neutron Spektrometer for Quasielastic Scattering on the Basis of Spin Echo and Magnetic Resonanz, *Z.Phys.B, Condensed Matter* **65** (1987), 269.
- [*Gäh89*] Gähler, R., Golub, R., Keller, T., *Physica* **B 156** (1989), 653.
- [*Gäh96*] Gähler, R., Golub, R., Habicht, K., Keller, T., Felber, J., „Space-time description of neutron spin echo spectrometry“, *Physica* **B 229** (1996), 1-17.
- [*Gäh97*] Gähler, R., „Neutronenstreuung, -interferometrie und -optik auf Basis von Hochfrequenzspinflippern, Habilitation TU München (1997).
- [*Gen67*] Gennes, P. G. de, *Physics* (NY) **3** (1967), 37.
- [*Gün92*] Günter, H., „Weiterentwicklung eines Resonanzspinechos“, Diplomarbeit an der Ruprecht- Karls-Universität Heidelberg (1992).
- [*Hab50*] Hahn, E. L., *Phys. Rev.*, **80** (1950), 850.
- [*Hau94*] Hauser, A., „Weiterentwicklung des Prototyps eines Bootstrap-Neutronen-Resonanz-Spin-Echo-Spektrometers“, Diplomarbeit an der Technischen Universität München (1994).
- [*Kel93*] Keller, T., „Höchstauflösende Neutronenspektrometer auf der Basis von Spinflippern - neue Varianten des Spinecho-Prinzips“, Dissertation an der Technischen Universität München (1993).
- [*Lov86*] Lovesey, Stephen, „Theory of Neutron Scattering from Condensed Matter“, Oxford Science Publications (1986).
- [*Mag67*] Mager, A. , Das Eindringen von Magnetfeldern in offene Abschirmzylinder, *Z. Angew. Phys.* **23** (1967), S. 381ff.
- [*Mez72*] Mezei, F., *Z. Phys.*, **255** (1972), 146.
- [*Mol96*] Moll, P., „Spinecho mit Neutronen: Weiterentwicklung eines Resonanzspinecho-Spektrometers und Experimente mit ultrakalten Neutronen“, Diplomarbeit an der Universität Heidelberg (1996).
- [*Rab54*] Rabi, I. I., Ramsey, N. F., Schwinger, J., *Rev. Mod. Phys.* **26** (1954), 167.
- [*Sch91*] Schmidt, U., „Weiterentwicklung eines Prototyps eines Resonanz-Spinechospektrometers“, Diplomarbeit an der Universität Heidelberg (1990).



- [Sch92] Schwabl, „Quantenmechanik“, Springer (1992), S.167.
- [Sch95] Schmidt, U., „Experimente mit polarisierten Neutronen zu Fragen der höchstauflösenden Spektrometrie und Quantenoptik“, Dissertation an der Technischen Universität München (1995).
- [Schä91] Schärpf, O., Physica **B 174** (1991), 514.
- [Ter92] Terech, P.

# Anhang A : Die quantenmechanische Behandlung des Spins in einer Resonanzflipspule

## Die Lösung für Rotierende Felder

Wir gehen vom Hamiltonoperator von (1.30) aus, der zusätzlich zum konstanten Feld  $B_0 = B_z$  ein in der x-y-Ebene mit der Frequenz  $\omega$  rotierendes Feld der Amplitude  $B_1$  erhält:

$$(A.1) \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2 \cdot m} + \frac{\hbar}{2} \cdot \gamma \cdot \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_x \\ \hat{\sigma}_y \\ \hat{\sigma}_z \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} B_1 \cdot \cos(\omega \cdot t) \\ B_1 \cdot \sin(\omega \cdot t) \\ B_0 \end{pmatrix}.$$

Zur Transformation in die jeweils geeignete Basis verwenden wir die Wechselwirkungsdarstellung (z.B. [Sch92]). Wir zerlegen den Hamiltonian in einen zeitlich konstanten und einen zeitabhängigen Wechselwirkungsanteil. Den Wechselwirkungsanteil könnten wir zum Beispiel mit allen Magnetfeldern zu

$$(A.2) \quad \hat{H}_1 = \frac{\hbar \cdot \gamma}{2} \begin{pmatrix} B_0 & B_1 \cdot e^{-i\omega t} \\ B_1 \cdot e^{i\omega t} & -B_0 \end{pmatrix}$$

wählen, was jedoch aus folgendem Grund keine vorteilhafte Wahl darstellt: Die Lösung der Schrödingergleichung erfordert zunächst die Diagonalisierung und Transformation in das Eigensystem des Hamiltonian. Bei der erwähnten Wahl des Hamiltonoperators ist jedoch die Transformation ins Eigensystem selbst zeitabhängig, da sich die Achsen des Eigensystems an der Magnetfeldrichtung orientieren. Die Lösung erhält dadurch unnötige Komplikationen. Ähnliche Probleme ergeben sich, wenn im zeitabhängigen Teil des Hamiltonian nur das oszillierende Feld erscheint und das konstante  $B_0$ -Feld im zeitunabhängigen Teil zum Tragen kommt. Diese Wahl entspräche einem sich mit dem Spin mitbewegenden und mit der Larmorfrequenz  $\gamma \cdot B_0$  rotierenden Koordinatensystems. Auch in diesem Fall ist die Transformation ins Eigensystem des Hamiltonian zeitabhängig: das HF-Feld bewegt sich immer noch mit einer im allgemeinen nicht verschwindenden Relativfrequenz  $\omega - \gamma \cdot B_0$ .

Anders und einfacher stellt sich die Sache dar, wenn die Wahl auf die folgende Zerlegung des Hamiltonoperators fällt:

$$(A.3) \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)$$

$$\hat{H}_0 = \frac{p^2}{2 \cdot m} + \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} \omega & 0 \\ 0 & -\omega \end{pmatrix}$$

$$\hat{H}_1(t) = \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} \gamma \cdot B_0 - \omega & \gamma \cdot B_1 \cdot e^{-i(\omega t - \varphi_1)} \\ \gamma \cdot B_1 \cdot e^{i(\omega t - \varphi_1)} & -(\gamma \cdot B_0 - \omega) \end{pmatrix}.$$

Hier haben wir die Phase  $\varphi_1$  ergänzt, welche die Phase der Hochfrequenz zum Zerlegungszeitpunkt  $t=0$  bestimmt. Die Zustände in dieser Darstellung

$$(A.4) \quad \psi_W = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \cdot \psi$$

genügen der Bewegungsgleichung

$$(A.5) \quad i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} \psi_W = (e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \cdot \hat{H}_1 \cdot e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}) \psi_W,$$

und für die zeitabhängige Schrödingergleichung des Zeitentwicklungsoperators  $\hat{U}_W(t)$  ergibt sich

$$(A.6) \quad \psi_W(t) = \hat{U}_W(t) \cdot \psi_W(t=0)$$

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}_W(t) = \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} \gamma \cdot B_0 - \omega & \gamma \cdot B_1 \cdot e^{i\varphi_1} \\ \gamma \cdot B_1 \cdot e^{-i\varphi_1} & -(\gamma \cdot B_0 - \omega) \end{pmatrix} \cdot \hat{U}_W(t).$$

Da wir durch die Wahl der Darstellung eine Transformation in das mit der Hochfrequenz mitrotierende Koordinatensystem  $KS_1^{rot}$  durchgeführt haben, ist die Zeitabhängigkeit des Hamiltonoperators verschwunden. In diesem Koordinatensystem existiert die nun ruhende HF-Feldstärke, ohne Beschränkung der Allgemeinheit in x-Richtung angenommen, und ein Magnetfeld in z-Richtung, das aus der Differenz des konstanten Feldes im Laborsystem und einem mit der Rotationsfrequenz zunehmenden „virtuellen“ Feld besteht.

Diese Matrix erlaubt es, sie mit einfachen Mitteln zu diagonalisieren und die Zeitabhängigkeit zu erhalten. Die Energieeigenwerte betragen

$$(A.7) \quad e\omega_{1/2} = \pm \frac{\hbar}{2} \cdot \sqrt{(\gamma \cdot B_0 - \omega)^2 + (\gamma \cdot B_1)^2}$$

und geben Aufschluß über die zeitliche Entwicklung im Eigensystem  $KS_2^{rot}$  mit der z-Koordinatenachse parallel zum nun konstanten Magnetfeld

$$(A.8) \quad \hat{U}_R(t) = \begin{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar} e\omega_1 t} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i}{\hbar} e\omega_2 t} \end{pmatrix}.$$

Der Index „R“ verweist auf den Namen der Kreisfrequenz  $\omega_R = e\omega_{1/2} / (\hbar / 2) = \sqrt{(\gamma \cdot B_0 - \omega)^2 + (\gamma \cdot B_1)^2}$  die die beschriebene Rotation um das konstante Magnetfeld im rotierenden Koordinatensystem besitzt, als *Rabifrequenz*. Zusammen mit der Transformationsmatrix aus den normierten Eigenvektoren

$$(A.9) \quad T = \frac{1}{|e\mathbf{v}_{1/2}|} \cdot \begin{pmatrix} e\mathbf{v}_1 & e\mathbf{v}_2 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{2 \cdot |e\mathbf{v}_{1/2}|} \cdot \begin{pmatrix} \frac{2}{\hbar} e\omega_1 + (\gamma \cdot B_0 - \omega) & \gamma \cdot B_1 \cdot e^{i\varphi_1} \\ \gamma \cdot B_1 \cdot e^{-i\varphi_1} & \frac{2}{\hbar} e\omega_2 - (\gamma \cdot B_0 - \omega) \end{pmatrix}$$

und deren adjungierter Matrix  $T^*$  ergibt sich die zeitliche Entwicklung im rotierenden Koordinatensystem  $KS_1^{rot}$  zu

$$(A.10) \quad \hat{U}_W(t) = T \cdot \hat{U}_R(t) \cdot T^*.$$

Die zeitliche Entwicklung im Laborsystem folgt, indem wir (A.4) für die Beziehung zwischen den Zuständen im Laborsystem und in der Wechselwirkungsdarstellung verwenden.

$$(A.11) \quad \hat{U}_{Labor}(t) = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \cdot T \cdot \hat{U}_R(t) \cdot T^*$$

$$\hat{U}_{Labor}(t) = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \cdot \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{e\omega_1}{\hbar}t\right) - \frac{i \cdot (\gamma \cdot \mathbf{B}_0 - \omega)}{e\omega_1 / (\hbar/2)} \sin\left(\frac{e\omega_1}{\hbar}t\right) & \frac{-i \cdot \gamma \cdot \mathbf{B}_1}{e\omega_1 / (\hbar/2)} \sin\left(\frac{e\omega_1}{\hbar}t\right) e^{i\varphi_1} \\ \frac{-i \cdot \gamma \cdot \mathbf{B}_1}{e\omega_1 / (\hbar/2)} \sin\left(\frac{e\omega_1}{\hbar}t\right) e^{-i\varphi_1} & \cos\left(\frac{e\omega_1}{\hbar}t\right) + \frac{i \cdot (\gamma \cdot \mathbf{B}_0 - \omega)}{e\omega_1 / (\hbar/2)} \sin\left(\frac{e\omega_1}{\hbar}t\right) \end{pmatrix}$$

Für einen Pi-Flip sind zwei Bedingungen zu erfüllen. Die *Resonanzbedingung*  $\gamma \cdot \mathbf{B}_0 - \omega \equiv 0$  ist gleichbedeutend damit, daß die Hochfrequenz auf die Larmorfrequenz abgestimmt und im mit der Hochfrequenz rotierenden Koordinatensystem somit keine  $\mathbf{B}_0$ -Komponente vorhanden ist. Zudem ist die Aufenthaltszeit im HF-Feld durch  $e\omega_{1/2} \cdot t / (\hbar/2) \equiv \pi$  festgelegt, so daß die Rabioszillation zu einem Pi-Flip führt.

### Die Näherungen für linear polarisierte HF-Felder

Der mathematische Formalismus, um die Lösung in einer besseren Näherung als diejenige von Bloch und Siegert zu berechnen, wurde erst vor wenigen Jahren in unserer Arbeitsgruppe entwickelt [Sch95]. Hier folgt eine Zusammenfassung der Vorgehensweise in einer Darstellung, die die Vorteile des Wechselwirkungs-Bildes benützt. Zunächst beschränken wir uns auf die „verkehrt“ rotierende Komponente  $\mathbf{B}_2$ , zusammen mit dem  $\mathbf{B}_0$ -Feld.

$$(A.12) \quad \hat{H} = \frac{p^2}{2 \cdot m} + \frac{\hbar \cdot \gamma}{2} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{B}_0 & \mathbf{B}_2 \cdot e^{i\omega t} \\ \mathbf{B}_2 \cdot e^{-i\omega t} & -\mathbf{B}_0 \end{pmatrix}$$

Um die Zeitentwicklung in diesem „gestörten“  $\mathbf{B}_0$ -Feld zu erhalten, verwenden wir wieder die Methode der Transformation ins bewegte Koordinatensystem des Wechselwirkungs-Bildes. Da nun die entgegengesetzt rotierende Komponente ruhen soll, wechselt die Rotationsrichtung und damit  $\omega$  in den Gleichungen (1.43) bis (A.9) das Vorzeichen. Im rotierenden und auf die Hauptachsen transformierten System ergibt sich die Zeitentwicklung

$$(A.13) \quad \hat{U}_{-\omega}(t) = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}e\omega_{B_0B_2}t} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i}{\hbar}e\omega_{B_0B_2}t} \end{pmatrix}$$

mit

$$(A.14) \quad \pm e\omega_{B_0B_2} = \pm \frac{\hbar}{2} \cdot \sqrt{(\gamma \cdot \mathbf{B}_0 + \omega)^2 + (\gamma \cdot \mathbf{B}_2)^2}.$$

Durch die Transformation ins rotierende Koordinatensystem hat sich demnach das Feld in z-Richtung nicht verringert, sondern ist zum „virtuellen“ Feld  $\mathbf{B}_0 + \omega/\gamma$  angewachsen. Mit der wesentlich kleineren HF-Komponente  $\mathbf{B}_2$  vektoriell addiert ergibt sich ein Gesamtfeld, das für diese Zeitentwicklung verantwortlich ist und immer noch weitgehend in z-Richtung liegt, wie im folgenden begründet wird: Die Transformationsmatrix entspricht zwar derjenigen von (A.9), allerdings übertreffen nun die Einträge in der Hauptdiagonalen die Nebendiagonalen um eine Vielfaches, d.h. die Zeitentwicklung findet auch aus der Sicht des Laborsystems weitgehend in z-Richtung statt.

Deshalb nähern wir die Transformation ins Eigensystem zunächst als identische Abbildung. Wir gehen demzufolge vom Zeitentwicklungsoperator (A.13) aus, berücksichtigen lediglich noch die Transformation vom Laborsystem ins rotierende Koordinatensystem und finden schließlich den zugehörigen Hamiltonian  $\hat{H}_{B_0B_2}^{eff}$ .

$$(A.15) \quad \hat{U}_{B_0B_2}^{eff}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{-\omega}t} \cdot \hat{U}_{-\omega} = \begin{pmatrix} e^{\left(-\frac{i}{\hbar}e\omega_{B_0B_2} + \frac{\omega}{2}\right)t} & 0 \\ 0 & e^{\left(\frac{i}{\hbar}e\omega_{B_0B_2} - \frac{\omega}{2}\right)t} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \hat{H}_{B_0B_2}^{eff} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{(\gamma \cdot \mathbf{B}_0 + \omega)^2 + (\gamma \cdot \mathbf{B}_2)^2} - \omega & 0 \\ 0 & -\sqrt{(\gamma \cdot \mathbf{B}_0 + \omega)^2 + (\gamma \cdot \mathbf{B}_2)^2} + \omega \end{pmatrix}$$

Durch Entwicklung der Wurzeln in der Hauptdiagonalen ergibt sich als Wert für das effektive Magnetfeld die erwähnte Bloch-Siegert-Näherung.

Im nächsten Schritt ergänzen wir die „richtig“ rotierende Komponente  $B_1$ . Es stellt sich die Frage, inwiefern die „verkehrt“ rotierende Komponente  $B_2$  die Rabi-Oszillation um  $B_1$  beeinflusst, analog der Verstimmung von  $B_0$  durch  $B_2$ .

Wir gehen nochmals von der oben gewählten Wechselwirkungsdarstellung aus, die bereits die Transformation in das mit  $-\omega$  rotierende Koordinatensystem voraussetzt.

$$(A.16) \quad \hat{H}_{-\omega} = \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{i\omega t/2} \end{pmatrix} \cdot \hat{H}_0 \cdot \begin{pmatrix} e^{i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega t/2} \end{pmatrix}$$

$$\hat{H}_{-\omega} = \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} \gamma \cdot B_0 + \omega & \gamma \cdot B_2 \cdot e^{i\varphi_2} + \gamma \cdot B_1 \cdot e^{-i2\omega t + \varphi} \\ \gamma \cdot B_2 \cdot e^{i\varphi_2} + \gamma \cdot B_1 \cdot e^{-i2\omega t + \varphi} & -(\gamma \cdot B_0 + \omega) \end{pmatrix}$$

Hier haben wir die Phasen  $\varphi_1$  und  $\varphi_2$  der entsprechenden Hochfrequenzkomponenten ergänzt.

Analog zu (1.43) schreiben wir diesen Hamiltonian als Summe des bereits oben betrachteten  $B_0 - B_2$ -Anteils und des  $B_1$ -Anteils.

$$(A.17) \quad \hat{H}_{-\omega} = \hat{H}_{B_0 B_2} + \hat{H}_{B_1}(t).$$

Die auf dem ersten Summanden beruhende Zeitentwicklung haben wir oben näherungsweise hergeleitet. Die nochmalige Transformation des zweiten Summanden in die durch  $\hat{H}_{B_0 B_2}$  definierte Wechselwirkungsdarstellung, d.h. in das oben erwähnte rotierende und nutierende Koordinatensystem, ergibt nun einen Hamiltonoperator, dessen komplizierte Struktur die Bewegung des Spins um die nutierende  $B_1$ -Komponente beschreibt.

$$(A.18) \quad \hat{H}_{B_1\text{-nutierend}} = e^{-i\hat{H}_{B_0 B_2} t/\hbar} \cdot \hat{H}_{B_1}(t) \cdot e^{i\hat{H}_{B_0 B_2} t/\hbar}$$

Da der Nutationswinkel sehr klein und die Nutationsfrequenz gegenüber der Rabi-Frequenz sehr groß sind, nähern wir für diese Transformation den Hamiltonian im Exponenten der e-Funktion durch  $\hat{H}_{B_0 B_2}^{\text{eff}}$  aus (A.15) an. Wie sich im folgenden zeigt, muß im Hamiltonian jedoch das  $B_1$ -Feld durch ein  $B_1^{\text{eff}}$ -Feld ersetzt werden, dessen Berechnung das Ziel der ganzen Überlegung darstellt. Für den gesuchten Hamiltonoperator ergibt sich insgesamt nach der zweiten beschriebenen Wechselwirkungs-Transformation:

$$(A.19) \quad \hat{H}_{B_1\text{-genähert}} = e^{-i\hat{H}_{B_0 B_2}^{\text{eff}} t/\hbar} \cdot \hat{H}_{B_1}^{\text{eff}}(t) \cdot e^{i\hat{H}_{B_0 B_2}^{\text{eff}} t/\hbar}$$

$$= \begin{pmatrix} e^{\left(\frac{i}{\hbar} e^{w_{B_0 B_2}} - \frac{\omega}{2}\right)t} & 0 \\ 0 & e^{\left(-\frac{i}{\hbar} e^{w_{B_0 B_2}} + \frac{\omega}{2}\right)t} \end{pmatrix} \cdot \frac{\hbar \cdot \gamma \cdot B_1^{\text{eff}}}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i(\omega t + \varphi_1)} \\ e^{i(\omega t + \varphi_1)} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} e^{\left(-\frac{i}{\hbar} e^{w_{B_0 B_2}} + \frac{\omega}{2}\right)t} & 0 \\ 0 & e^{\left(\frac{i}{\hbar} e^{w_{B_0 B_2}} - \frac{\omega}{2}\right)t} \end{pmatrix}$$

$$\hat{H}_{B_1\text{-genähert}} = \frac{\hbar \cdot \gamma}{2} \begin{pmatrix} 0 & B_1^{\text{eff}} \cdot e^{i(\sqrt{(\gamma B_0 + \omega)^2 + (\gamma B_2)^2} - 2\omega)t + \varphi_1} \\ B_1^{\text{eff}} \cdot e^{-i(\sqrt{(\gamma B_0 + \omega)^2 + (\gamma B_2)^2} - 2\omega)t - \varphi_1} & 0 \end{pmatrix}.$$

Wir wählen eine Abkürzung für den Ausdruck im Exponenten der e-Funktion

$$(A.20) \quad d = \sqrt{(\gamma B_0 + \omega)^2 + (\gamma B_2)^2} - 2\omega$$

und erhalten als Ergebnis einer einfachen Rechnung die Zeitentwicklung

(A.21)

$$\hat{U}_{B_1}^{eff}(t) = \begin{pmatrix} e^{-i \cdot d \cdot t / 2} & 0 \\ 0 & e^{i \cdot d \cdot t / 2} \end{pmatrix} \cdot T \cdot \begin{pmatrix} e^{-i \cdot \sqrt{d^2 + (\gamma \cdot B_1^{eff})^2} \cdot t / 2} & 0 \\ 0 & e^{i \cdot \sqrt{d^2 + (\gamma \cdot B_1^{eff})^2} \cdot t / 2} \end{pmatrix} \cdot T^*.$$

Der Ausdruck im Exponenten der e-Funktion wurde mit  $d(\text{etuning})$  abgekürzt, da er in Resonanz verschwinden muß.

Schließlich ergibt sich damit die gesuchte zeitliche Entwicklung im Laborsystem

$$(A.22) \quad \hat{U}_{ges}(t) = e^{-i \begin{pmatrix} -\omega & 0 \\ 0 & \omega \end{pmatrix} t} \cdot e^{-i \hat{H}_{B_0 B_2} t / \hbar} \cdot \hat{U}_{B_1}^{eff}(t).$$

Falls wir nun für den Hamiltonian im Exponenten der e-Funktion wieder die Näherung aus (A.15) verwenden würden, so ergäbe sich für  $B_1^{eff}$  offensichtlich keine Abweichung von  $B_1$ .

Aber an dieser Stelle berücksichtigen wir nun die oben bereits erwähnte Tatsache, daß das durch  $B_0$  und  $B_2$  erzeugte Feld gegenüber der z-Achse geneigt ist. Das zeitabhängige Eigensystem dieses Feldes führt deshalb relativ zur  $B_1$ -Komponente, die sich in der x-y-Ebene bewegt, Nutationsbewegungen aus. Umgekehrt nutiert das  $B_1$ -Feld im Eigensystem des effektiven  $B_0$ - $B_2$ -Feldes. Die Verkipfung des Nutationssystems wird durch die bereits erwähnte Transformationsmatrix der Form (A.9) dargestellt. Die Nutationsbewegung läßt sich folgendermaßen als Zeitentwicklung darstellen: Wir schreiben nun anstelle von (A.15)

$$(A.23) \quad e^{-i \hat{H}_{B_0 B_2} t / \hbar} = T_{Nut} \cdot \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar} e w_{B_0 B_2} t} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i}{\hbar} e w_{B_0 B_2} t} \end{pmatrix} \cdot T_{Nut}^*$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{e w_{B_0 B_2}}{\hbar} t\right) - \frac{i \cdot (\gamma \cdot B_0 + \omega)}{e w_{B_0 B_2} / (\hbar / 2)} \sin\left(\frac{e w_{B_0 B_2}}{\hbar} t\right) & \frac{-i \cdot \gamma \cdot B_2}{e w_{B_0 B_2} / (\hbar / 2)} \sin\left(\frac{e w_{B_0 B_2}}{\hbar} t\right) e^{-i \cdot \varphi_2} \\ \frac{-i \cdot \gamma \cdot B_2}{e w_{B_0 B_2} / (\hbar / 2)} \sin\left(\frac{e w_{B_0 B_2}}{\hbar} t\right) e^{i \cdot \varphi_2} & \cos\left(\frac{e w_{B_0 B_2}}{\hbar} t\right) + \frac{i \cdot (\gamma \cdot B_0 + \omega)}{e w_{B_0 B_2} / (\hbar / 2)} \sin\left(\frac{e w_{B_0 B_2}}{\hbar} t\right) \end{pmatrix}$$

Berechnen wir die Labor-Zeitentwicklung der Wechselwirkungszustände (A.22) nun exakt aus (A.21) und (A.23), also für ein rotierendes und nutierendes Wechselwirkungssystem, so ergibt sich nach aufwendiger Rechnung und unter Vernachlässigung von Rotationen mit Frequenzen, die ein Vielfaches von  $\omega$  betragen, für  $\hat{U}_{ges}(t)$  der gleiche Ausdruck – bis auf einen konstanten Faktor – wie für das Problem mit rotierendem Feld (A.11). Für  $B_0$  und  $B_1$  sind nun allerdings die Effektivwerte zu verwenden.

Der zugehörige Hamiltonoperator ergibt sich mit der folgenden Umformung der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$(A.24) \quad \hat{H}_{ges}^{eff}(t) = i \cdot \hbar \cdot \hat{U}_{ges}(t) \cdot (\hat{U}_{ges}(t))^*$$

zu

$$(A.25) \quad \hat{H}_{ges}^{eff}(t) =$$

$$\frac{\gamma \cdot \hbar}{2} \cdot \left( \begin{array}{cc} B_0 & \frac{(\gamma B_0 + \omega)^2 + \frac{(\gamma B_2)^2}{2}}{(\gamma B_0 + \omega)^2 + (\gamma B_2)^2} \cdot B_1^{eff} \cdot e^{-i\omega t + \varphi_1} + B_2 \cdot e^{i\omega t \varphi_2} \\ \frac{(\gamma B_0 + \omega)^2 + \frac{(\gamma B_2)^2}{2}}{(\gamma B_0 + \omega)^2 + (\gamma B_2)^2} \cdot B_1^{eff} \cdot e^{-i\omega t + \varphi_1} + B_2 \cdot e^{i\omega t \varphi_2} & -B_0 \end{array} \right)$$

Für das  $B_1^{eff}$ -Feld folgt das Ergebnis unmittelbar aus dem obenstehenden.

$$(0.26) \quad B_1^{eff} = \frac{(\gamma B_0 + \omega)^2 + (\gamma B_2)^2}{(\gamma B_0 + \omega)^2 + (\gamma B_2)^2 / 2} \cdot B_1$$

# Anhang B : Die Effekte bei einer Polarisationskorrektur durch eine Streuspule

Im folgenden wird in Mathematica-Notation die Berechnung der Polarisation unter Drehung der Ebene berechnet, in der die Spins nach der ersten Flugstrecke verteilt sind. In unserem Aufbau kann die Korrektur eines Streuwinkels durch einfaches Nachregeln des Spinechopunktes vorgenommen werden. Bei Experimenten, deren konstantes Magnetfeld in Strahlrichtung verläuft, muß eine Streuspule für das Nachdrehen der Ebene, in der die Spins verteilt sind, sorgen. Dabei kann der Effekt auftreten, daß bei unvollständigem Nachdrehen eine Spinechokurve auch für die „falsche“ Feldrichtung im zweiten Spektrometerarm auftritt. Ebenso ist dies der Fall, wenn Streuung dermaßen erfolgt, daß die Neutronen eine Richtungsänderung um 90 Grad vornehmen, jedoch die Ebene nicht durch eine Streuspule korrigiert wird. In diesem Fall erhält man zwei Spinechos, das „richtige“ und ein ebensolches bei umgekehrter Feldrichtung, beide mit 50% Polarisation!

```

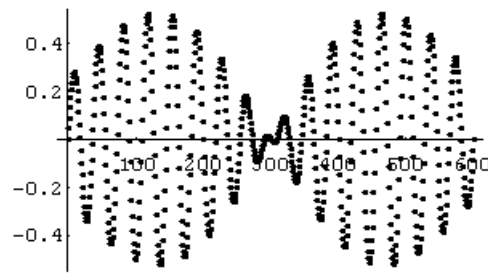
einheitsm={{1,0},{0,1}};
sup={1,0};sdo={0,1};
xpauli={{0,1},{1,0}};ypaul={{0,1},{-1,0}};zpau={{1,0},{0,-1}};
polvek={xpauli,ypaul,zpau};
Eigenvectors[xpauli];
Eigenvalues[xpauli];
hamilton1=zpau/2*hquergammab01;(*=polvek.{0,0,b01}*hquergamma/2*)
hamilton2=zpau/2*hquergammab02;(* gerader Strahl *)
hamilt2phi=ypaul/2*hquergammab02*Sin[phi]+zpau/2*hquergammab02*Cos[phi];
ham2eigen=Eigensystem[hamilton2];
drehbasis=ham2eigen[[2]]
(* normieren *)
drehbasis=Table[drehbasis[[i]]/Sqrt[Apply[Plus,Abs[drehbasis[[i]]^2]],{i,Length[drehbasis]}];
drehbkonjug=Transpose[drehbasis];
drehbkonjug=Table[drehbkonjug[[i]]/Sqrt[Apply[Plus,Abs[drehbkonjug[[i]]^2]],{i,Length[drehbkonjug]}];
(* zugehörige Eigenwerte suchen *)
drehhamilton2=DiagonalMatrix[ham2eigen[[1]]]
ham2phieigen=Eigensystem[hamilt2phi];
drehbphi=ham2phieigen[[2]]//Simplify
(* normieren *)
drehbphi={drehbphi[[1]]*Sqrt[Apply[Plus,Abs[drehbphi[[2]]^2]],drehbphi[[2]]*Sqrt[Apply[Plus,Abs[drehbphi[[1]]^2]]]}
drehbkonjphi=Transpose[drehbphi];
drehbkonjphi=Table[drehbkonjphi[[i]]/Sqrt[Apply[Plus,Abs[drehbkonjphi[[i]]^2]],{i,Length[drehbkonjphi]}];
(* zugehörige Eigenwerte suchen *)
drehhamilt2phi=DiagonalMatrix[ham2phieigen[[1]]]//Simplify;(* das sollte aber gleichbleiben wie oben!!!*)
u1=E^(-I*hamilton1*time)-xpauli;
u2=E^(-I*drehhamilton2*time)-xpauli;
u2phi=E^(-I*drehhamilt2phi*time)-xpauli;

zeitentw=Function[{hquergammab01,hquergammab02,time,phi},
Evaluate[If[Sin[phi]==0,Evaluate[drehbasis.u2.drehbkonjug.u1],
Evaluate[drehbphi.u2phi.drehbkonjphi.u1]]]]//N;
{drehbphi,u2phi,drehbkonjphi,u1}/.{hquergammab01->1,hquergammab02->-1,time->Pi,phi->Pi/2}//N
psifinal=Function[{psiinit,hquergammab01,hquergammab02,time,phi},
Evaluate[zeitentw[hquergammab01,hquergammab02,time,phi]].psiinit]//N;
(* Polar. von verschiedenen schnellen Spins in x-Richtg bei ursprüngl. x-Pol., deltaB von -2.5 bis .5 *)
sepolxlist=Table[erg=psifinal[(sup+sdo)/Sqrt[2],1,-1-x,5*2*Pi+zeitdif,Pi/2]]//N;
NIntegrate[Re[Conjugate[erg].xpauli.erg],{zeitdif,0,2*Pi}]/2/Pi//N,{x,-2.5,.5,.005}];
ListPlot[sepolxlist,

```



PlotStyle->PointSize[.03],PlotRange->All];



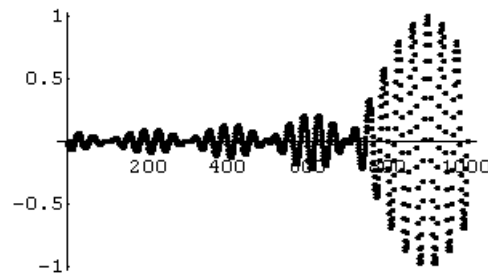
(\* Polar. von verschiedenen schnellen Spins in y-Richtg bei ursprüngl. y-Pol., Streuw. 0, deltaB varr. \*)

sepolylist=Table[erg=psifinal[{1,1}/Sqrt[2],2,-2-x,5\*2\*Pi+zeitdif,0]/N;

NIntegrate[Re[Conjugate[erg].ypaul.erg],{zeitdif,0,2\*Pi}]/2/Pi//N,{x,-4.5,.5,.005}];

ListPlot[sepolylist,

PlotStyle->PointSize[.03],PlotRange->All];



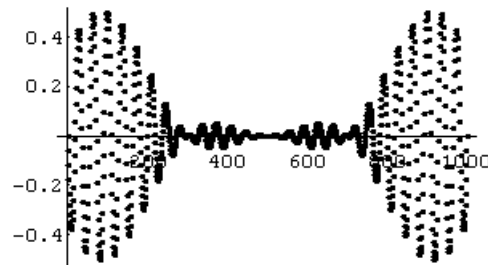
(\* Polar. von verschiedenen schnellen Spins in y-Richtg bei ursprüngl. y-Pol., Streuw. Pi/2, deltaB varr. \*)

sepolypihalb=Table[erg=psifinal[{1,1}/Sqrt[2],2,-2-x,5\*2\*Pi+zeitdif,Pi/2]/N;

NIntegrate[Re[Conjugate[erg].ypaul.erg],{zeitdif,0,2\*Pi}]/2/Pi//N,{x,-4.5,.5,.005}];

ListPlot[sepolypihalb,

PlotStyle->PointSize[.03],PlotRange->All];



# Anhang C : Die Intermediäre Streufunktion unter der Berücksichtigung von Untergrund und depolarisierenden Effekten

## a. Intermediäre Streufunktion und Polarisation

Die Intermediäre Streufunktion  $S(q, \tau)$  beschreibt zeitliche Veränderungen, Dynamische Prozesse in Streuproben:

$$S(q, \tau) = \frac{\text{pol}(\tau)}{\text{pol}(\tau = 0)}$$

mit  $\text{pol}(\tau)$ : gemessene Polarisation bei Spinechozeit-Einstellung von  $\tau$ .  
 $\text{pol}(\tau = 0)$ : gemessene Polarisation bei Spinechozeit 0. Im Experiment weicht dieser Wert von 100 % ab, da die Polarisation durch die Effizienz der Polarisatoren, des Spinflippers und die Ein- und Auskoppelung beeinträchtigt wird. Zur Korrektur erscheint dieser Wert im Nenner.

Eine einfache Betrachtung zeigt, daß es dem ökonomischen Umgang mit der zur Verfügung stehenden Strahlzeit dient, wenn zur Ermittlung der Polarisation nur die Down-Zählrate  $\text{down}$  und die mittlere Zählrate  $\text{mr}$  gemessen werden:

Die Polarisation  $\text{pol}$  ist definiert als:

$$\text{pol} = \frac{\text{up} - \text{down}}{\text{up} + \text{down}}.$$

Definition der mittleren Zählrate  $\text{mr}$ :

$$\text{mr} = \frac{\text{up} + \text{down}}{2}.$$

Hieraus ergibt sich:

$$\text{pol} = \frac{\text{mr} - \text{down}}{\text{mr}} = 1 - \frac{\text{down}}{\text{mr}} \quad \text{beziehungsweise} \quad \text{pol} = \frac{\text{up} - \text{mr}}{\text{mr}}.$$

Nach dem Fehlerfortpflanzungsgesetz folgt je nach Meßzeit ein Fehler von:

$$\Delta \text{pol} = \sqrt{\frac{1}{\text{down} \cdot \text{Meßzeit}} + \frac{1}{\text{mr} \cdot \text{Meßzeit}}} \cdot \frac{\text{down}}{\text{mr}} \quad \text{und} \quad \Delta \text{pol} = \sqrt{1 + \frac{\text{down}}{\text{mr}}} \cdot \frac{\sqrt{\text{down}}}{\sqrt{\text{Meßzeit} \cdot \text{mr}}}.$$

Analog folgt der entsprechende Ausdruck, falls die Up-Zählrate  $\text{up}$  gemessen wird.

Da die Up-Zählrate im Maximum der Spinechokurve größer als die Down-Zählrate ist, folgt die Behauptung:

Damit erhält der Ausdruck für die intermediäre Streufunktion folgende Form:

$$S(q, \tau) = \frac{1 - \text{down}(\tau)/\text{mr}(\tau)}{1 - \text{down}(\tau = 0)/\text{mr}(\tau = 0)}$$

und da sich an der mittleren Zählrate  $\text{mr}$  bei Änderung der Spinechozeit nichts ändern sollte:

$$S(q, \tau) = \frac{\text{mr} - \text{down}(\tau)}{\text{mr} - \text{down}(\tau = 0)}.$$

## b. Korrektur der Down- und mittleren Zählraten

Die down Zählrate in dem obenstehenden Ausdruck sollte lediglich diejenigen Neutronen berücksichtigen, die tatsächlich an der Probe gestreut wurden. Im Experiment gesellen sich jedoch noch zwei weitere Komponenten zu der gewünschten hinzu: Neutronen aus der Experimentier-Halle, die durch die Abschirmung der Zählrohre gelangen, sowie Neutronen, die im Bereich vor und hinter der Probe an Luftmolekülen gestreut werden und zufällig danach den gleichen Weg durch das Spektrometer zum Zählrohr zurücklegen wie „ordnungsgemäß“ an der Probe gestreute Neutronen.

Für die Down-Zählrate erhält man demnach:  $\text{down}_{\text{Probe}} = \text{down}_{\text{gemessen}} - \text{down}_{\text{Unt}}$   
mit der Untergrund-Zählrate  $\text{down}_{\text{Unt}}$ .

Analog gilt für die mittlere Zählrate:  $\text{mr}_{\text{Probe}} = \text{mr}_{\text{gemessen}} - \text{mr}_{\text{Unt}}$ .

Der Untergrund selbst setzt sich nun aus einem unpolarisierten und einem polarisierten Anteil zusammen, da die Streuung im Spektrometer an Luftmolekülen elastisch stattfindet und keine Spinflipstreuung darstellt (jedenfalls zu einem beträchtlichen Anteil). Die Polarisation des Untergrundes  $\text{pol}_{\text{Unt}}$  läßt sich in einer unabhängigen Messung ermitteln, indem die Zählrate in den Detektoren der abgelenkten Arme ohne Streuprobe registriert wird. Aus der Polarisation und der mittleren Zählrate des Untergrundes ergibt sich die Down-Rate des polarisierten Untergrundes zu:  $\text{down}_{\text{Unt}} = (1 - \text{pol}_{\text{Unt}}) \cdot \text{mr}_{\text{Unt}}$ .

Die Intermediäre Streufunktion erhält somit folgende Gestalt:

$$S(q, \tau) = \frac{\text{mr}_{\text{gemessen}} - \text{mr}_{\text{Unt}} - (\text{down}(\tau)_{\text{gemessen}} - \text{down}_{\text{Unt}})}{\text{mr}_{\text{gemessen}} - \text{mr}_{\text{Unt}} - (\text{down}(\tau=0)_{\text{gemessen}} - \text{down}_{\text{Unt}})}$$

$$S(q, \tau) = \frac{\text{mr}_{\text{gemessen}} - \text{down}(\tau)_{\text{gemessen}} - \text{pol}_{\text{Unt}} \cdot \text{mr}_{\text{Unt}}}{\text{mr}_{\text{gemessen}} - \text{down}(\tau=0)_{\text{gemessen}} - \text{pol}_{\text{Unt}} \cdot \text{mr}_{\text{Unt}}}$$

Und nachdem Zähler und Nenner durch die gemessene mittlere Rate dividiert sind:

$$S(q, \tau) = \frac{\text{pol}(\tau)_{\text{gemessen}} - \text{pol}_{\text{Unt}} \cdot \text{mr}_{\text{Unt}} / \text{mr}_{\text{gemessen}}}{\text{pol}(\tau=0)_{\text{gemessen}} - \text{pol}_{\text{Unt}} \cdot \text{mr}_{\text{Unt}} / \text{mr}_{\text{gemessen}}}$$

## c. Das Verhältnis aus Untergrundrate und Gesamtzählrate

Bis auf das Verhältnis zwischen der Rate der Neutronen, die nicht von der Probe stammen, und der gemessenen Gesamtzählrate sind alle Größen durch unabhängige Messungen festzustellen. Für die Rate des Untergrundes ist es nicht zulässig, die gemessene Rate ohne Probe einzusetzen, da mit Probe auch der Untergrund durch die nicht vollständige Transmission der Probe geschwächt wird. Daß sich jedoch auch die bei einer Probenmessung tatsächlich vorhandene Untergrundrate durch die Kombination mehrerer Messungen ermitteln läßt, zeigt die folgende Überlegung:

$$\text{pol}_{\text{gemessen}} = 1 - \frac{\text{down}_{\text{gemessen}}}{\text{mr}_{\text{gemessen}}} = 1 - \frac{\text{down}_{\text{Probe}} + \text{down}_{\text{Unt}}}{\text{mr}_{\text{Probe}} + \text{mr}_{\text{Unt}}} = 1 - \frac{\text{down}_{\text{Probe}} + (1 - \text{pol}_{\text{Unt}}) \cdot \text{mr}_{\text{Unt}}}{\text{mr}_{\text{Probe}} + \text{mr}_{\text{Unt}}}$$

$$\text{pol}_{\text{gemessen}} = \frac{\text{mr}_{\text{Probe}} - \text{down}_{\text{Probe}} + \text{pol}_{\text{Unt}} \cdot \text{mr}_{\text{Unt}}}{\text{mr}_{\text{gemessen}}}$$

Im Zähler tauchen zwei Proben-Raten auf, die nicht direkt ermittelt werden können. Doch als sehr gute Näherung gilt, daß bei einer Spinrotations-Messung (Spinechozeit 0) mit pyrolithischem Graphit, einem elastischen Streuer, die gemessene Polarisation gleich derjenigen ist, die man bei einer Spinrotation erhalten würde, wenn man sich nur auf die wirklich an der Probe gestreuten Neutronen beschränken könnte. Mit anderen Worten: Durch eine Spinrotationsmessung mit Streuung an Graphit und Zählraten von einigen hundert Neutronen pro Sekunde läßt sich eine Spinrotationsmessung mit Probe, aber ohne jeden Untergrund (Zählraten kleiner als ein Neutron pro Sekunde) sehr gut simulieren. Im folgenden können die erwähnten Proben-Raten demnach durch geeignete Graphit-Werte ersetzt werden.

$$\text{pol}_{\text{gemessen}} = \frac{\text{pol}_{\text{Probe}} \cdot \text{mr}_{\text{Probe}} + \text{pol}_{\text{Unt}} \cdot \text{mr}_{\text{Unt}}}{\text{mr}_{\text{gemessen}}} = \frac{\text{pol}_{\text{Graphit}} \cdot \text{mr}_{\text{Probe}} + \text{pol}_{\text{Unt}} \cdot \text{mr}_{\text{Unt}}}{\text{mr}_{\text{gemessen}}}$$

Die Proben-Zählrate ergibt sich aus der Differenz von gemessener Gesamtzählrate und Untergrundrate:

$$\text{pol}_{\text{gemessen}} = \frac{\text{pol}_{\text{Graphit}} \bullet (\text{mr}_{\text{gemessen}} - \text{mr}_{\text{Unt}}) + \text{pol}_{\text{Unt}} \bullet \text{mr}_{\text{Unt}}}{\text{mr}_{\text{gemessen}}}.$$

Durch elementare Umformungen erhält man schließlich:

$$\text{pol}_{\text{gemessen}} \bullet \text{mr}_{\text{gemessen}} = \text{pol}_{\text{Graphit}} \bullet (\text{mr}_{\text{gemessen}} - \text{mr}_{\text{Unt}}) + \text{pol}_{\text{Unt}} \bullet \text{mr}_{\text{Unt}},$$

$$\text{pol}_{\text{gemessen}} \bullet \text{mr}_{\text{gemessen}} - \text{pol}_{\text{Graphit}} \bullet \text{mr}_{\text{gemessen}} = -\text{pol}_{\text{Graphit}} \bullet \text{mr}_{\text{Unt}} + \text{pol}_{\text{Unt}} \bullet \text{mr}_{\text{Unt}}$$

und schließlich

$$(\text{pol}_{\text{Graphit}} - \text{pol}_{\text{gemessen}}) \bullet \text{mr}_{\text{gemessen}} = (\text{pol}_{\text{Graphit}} - \text{pol}_{\text{Unt}}) \bullet \text{mr}_{\text{Unt}},$$

$$\frac{\text{pol}_{\text{Graphit}} - \text{pol}_{\text{gemessen}}}{\text{pol}_{\text{Graphit}} - \text{pol}_{\text{Unt}}} = \frac{\text{mr}_{\text{Unt}}}{\text{mr}_{\text{gemessen}}}.$$

#### d. Die Instrumentenfunktion

Zuletzt führt die Berücksichtigung von Polarisationsverlusten durch die Inhomogenität der Magnetfelder und die unterschiedlichen Weglängen, die für Neutronen mit endlichem Strahlquerschnitt und ebensolcher Divergenz auftreten, zu der endgültigen Form für die Intermediäre Streufunktion:

$$S(q, \tau) = \frac{\text{pol}(\tau)_{\text{gemessen}} \bullet \text{pol}_{\text{Graphit}} / \text{pol}(\tau)_{\text{Graphit}} - \text{pol}_{\text{Unt}} \bullet \text{mr}_{\text{Unt}} / \text{mr}_{\text{gemessen}}}{\text{pol}(\tau = 0)_{\text{gemessen}} - \text{pol}_{\text{Unt}} \bullet \text{mr}_{\text{Unt}} / \text{mr}_{\text{gemessen}}}$$

$$S(q, \tau) = \frac{\text{pol}(\tau)_{\text{gemessen}} \bullet \text{pol}_{\text{Graphit}} / \text{pol}(\tau)_{\text{Graphit}} - \text{pol}_{\text{Unt}} \bullet \frac{\text{pol}_{\text{Graphit}} - \text{pol}_{\text{gemessen}}}{\text{pol}_{\text{Graphit}} - \text{pol}_{\text{Unt}}}}{\text{pol}_{\text{gemessen}} - \text{pol}_{\text{Unt}} \bullet \frac{\text{pol}_{\text{Graphit}} - \text{pol}_{\text{gemessen}}}{\text{pol}_{\text{Graphit}} - \text{pol}_{\text{Unt}}}}.$$